

УДК В 379 (Д)

ИНВАРИАНТЫ СПЕКТРА КИНЕМАТИЧЕСКИ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ПЛАНАРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

СВИРИДОВ Владимир Владимирович,доктор физ.-мат.наук, профессор кафедры общей физики
Воронежский государственный педагогический университет**МИТРОХИН Виктор Иванович,**доктор физ.-мат.наук, профессор кафедры полупроводниковой электроники и микроэлектроники
Воронежский государственный технический университет

АННОТАЦИЯ. Рассмотрено влияние выбора условий сшивки волновой функции на границах раздела планарной гетероструктуры на спектр состояний носителя, кинематически локализованных в слое с большей эффективной массой (KL-состояний) в силу сохранения энергии и латерального квазиимпульса носителя. Показано, что спектр KL-состояний зависит от условий сшивки. Однако его ключевые особенности – сам факт существования KL-мод, их число и точки их начала в зоне Бриллюэна, – к выбору условий сшивки не чувствительны.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: полупроводники, гетероструктура, электронные состояния, эффективная масса.

INVARIANTS OF KINEMATICALLY LOCALIZED ELECTRONIC STATE SPECTRUM IN PLANAR HETEROSTRUCTURES

SVIRIDOV V.V.,Doc. Physic. & Math. Sci., Professor of the Department of General Physics
Voronezh State Pedagogical University**MITROKHIN V.I.**Dr. Phys. & Math. Sci., Prof. of Semiconductor Electronics and Nanoelectronics
Department
Voronezh State Technical University

SPECTRE INVARIANTS OF KINEMATICALLY LOCALIZED ELECTRONIC STATES IN PLANAR HETEROSTRUCTURES

ABSTRACT. The article looks at the influence of the choice of matching wave function conditions on the border of the planar heterostructure on the spectrum of the carrier states, kinematically localized in the layer with greater effective mass (KL states) due to the conservation laws for carrier energy and lateral quasi-momentum. The KL state spectrum is shown to depend on the matching conditions, yet its key features such as the very existence of KL modes, their number and the points in the Brillouine zone where KL modes begin are not sensitive to the choice of the matching conditions.

KEY WORDS: semiconductors, heterostructure, electronic states, effective mass.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Проект № 13-02-97520 р_центра_a)

В рамках широко используемого в теории полупроводниковых гетероструктур метода эффективной массы [1] приходится рассматривать задачи, в которых не только потенциальная энергия, но и масса носителя явным образом зависит от координат.² Пространственная модуляция массы приводит к нетривиальному эффекту локализации носителей с достаточно большой латеральной (вдоль слоев гетероструктуры) составляющей квазиимпульса, когда даже в отсутствие энергетических барьеров возникает размерное квантование [2; 3].

Как будет показано ниже, качественное объяснение данного эффекта довольно просто: он, подобно эффекту полного внутреннего отражения, является чисто кинематическим и обусловлен законами сохранения импульса и энергии. Однако в деталях имеются неясности: так, в работах [2; 3] для простейшей модели гетероструктуры, составленной из полупроводников с одинаковыми энергетическими щелями и работами выхода, но разными эффективными массами, получены разные дисперсионные уравнения локализованных мод. Мы полагаем, что это и подобные ему расхождения являются следствием произвола в выборе условий сшивки огибающих волновых функций на гетерогранице. По-видимому, этот произвол не может быть устранен в рамках метода эффективной массы [1; 4–6]. Целью настоящей работы является исследование

² Здесь имеется в виду затравочная масса, определяющая вид оператора кинетической энергии в гамильтониане, а не эффективная масса в соответствующем законе дисперсии.

вопроса об условиях существования и основных закономерностях эффекта кинематической локализации в общем случае, когда пространственно модулирована не только масса, но и энергия носителей, а также выяснение того, насколько они чувствительны к выбору тех или иных условий сшивки.

1. Выбор эффективного гамильтониана и условий сшивки

Рассмотрим планарную гетероструктуру, отсчитывая координату z вдоль оси ее роста. Спектр энергий носителя в однозонном приближении определяется решением уравнения Шрёдингера для огибающей его

$$\hat{T}\psi + U(z)\psi = E\psi, \tag{1}$$

волновой функции ψ :

где \hat{T} – оператор кинетической энергии, $U(z)$ – энергия края соответствующей зоны. Обычные условия сшивки на гетерограницах

$$\psi_0 = \psi_1; \quad m_0^{-1} \frac{\partial \psi_0}{\partial z} = m_1^{-1} \frac{\partial \psi_1}{\partial z}, \tag{2}$$

где $\psi_{0(1)}$ и $m_{0(1)}$ — значения огибающей и массы носителя по разные стороны гетерограницы, обосновываются тем, что непрерывность ψ считают естественной; тогда условие для ее градиента вытекает из требования непрерывности плотности потока вероятности [1].

Зависимость затравочной массы носителя от координаты приводит к необходимости переопределить оператор кинетической энергии в (1) с тем, чтобы обеспечить его самосопряженность. В [7; 8] рассмотрена общая форма эрмитова оператора, квадратичного по импульсу и переходящего при $m = \text{const}$ в

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \hat{\pi}^+ m^{-1} \hat{\pi}, \tag{3}$$

обычное выражение $-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2$. Мы представим его в виде

где $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, α – константа, значение которой должно определяться дополнительными соображениями. С условиями сшивки (2) совместимо только $\alpha = 0$, поскольку в противном случае член $\hat{T}\psi$ в уравнении (1), с учетом разрывности $m(z)$, содержал бы слагаемые, пропорциональные дельта-

функции $\delta(z)$ и ее производной, которые не могут компенсироваться членами $U\psi$ и $E\psi$ ввиду предполагаемой в (2) непрерывности огибающей. Однако условия сшивки (2) не являются единственно возможными [3–5]. Условия вида [4; 7; 8].

При любом α также обеспечивают непрерывность потока вероятности и совместимы с общей формой (3), (4) оператора кинетической энергии.

$$m_0^{-\alpha} \psi_0 = m_1^{-\alpha} \psi_1; \quad m_0^{\alpha-1} \frac{\partial \psi_0}{\partial z} = m_1^{\alpha-1} \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \tag{5}$$

Вопрос о том, какое значение α «правильно», существует, ибо из (3), (4) видно, что α определяет преобразование гамильтониана задачи с генератором $\hat{S} = m^{-\alpha}$. Поскольку такой генератор \hat{S} не унитарен, это преобразование изменяет спектр гамильтониана; в какую сторону и насколько – зависит от α .

Оставаясь в рамках метода эффективной массы, однозначно выбрать значение α , по-видимому, нельзя [1; 5; 6], поскольку задача (1), (5) поставлена для огибающей. Полная же волновая функция носителя (естественно, непрерывная везде вместе со своим градиентом) включает блоховскую амплитуду, которая также резко меняется при переходе через гетерограницу, влияя на условия сшивки огибающих. Поэтому разумно считать α подгоночным параметром теории [4], отдавая себе отчет в том, что априорный выбор гамильтониана и совместимых с ним условий сшивки содержит произвол, отражающийся, вообще говоря, на конечных результатах. Так, авторы [3] объясняют отличие своих результатов от [2] использованием «правильных» условий сшивки, однако условия эти выводятся из вида гамильтониана, принимаемого в [3], как и в [2], априорно. Заметим, что если из каких-то соображений ожидается слабая зависимость вычисляемых величин от параметра α , то для упрощения выкладок и симметризации математических выражений удобнее всего принять $\alpha = 1/2$.

2. Физическая природа и условия возникновения кинематической локализации

Для планарной гетероструктуры собственные функции уравнения (1) имеют вид

$$\psi(z, \rho) = f(z) e^{ik\rho}, \tag{6}$$

где ρ – радиус-вектор в латеральной плоскости гетероструктуры, k – латеральная составляющая квази-

$$-\frac{\hbar^2}{2} m^{-\alpha}(z) \frac{d}{dz} m^{2\alpha-1}(z) \frac{d}{dz} (m^{-\alpha}(z) f) + U(z) f = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m(z)} \right) f \tag{7}$$

импульса носителя. Подставляя (3), (4) и (6) в (1), для $f(z)$ получаем уравнение:

$$\varphi_0 = \varphi_1; \quad m_0^{2\alpha-1} \frac{d\varphi_0}{dz} = m_1^{2\alpha-1} \frac{d\varphi_1}{dz} \tag{8}$$

с граничными условиями вида (5).

Введем новую функцию $\varphi(z) = m^{-\alpha}\psi(z)$. Она будет удовлетворять условиям сшивки и уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2\varphi}{dz^2} + V(z)\varphi = \varepsilon\varphi, \quad (9)$$

где

$$V(z) = m(z)(U(z) - E), \quad \varepsilon = -\hbar^2 k^2 / 2, \quad (10)$$

Уравнение (9) имеет вид обычного одномерного уравнения Шрёдингера для частицы с эффективной энергией ε , движущейся в эффективном потенциале $V(z)$. Характер движения легко выяснить по форме $V(z)$ и величине ε . Например, для гетероструктуры типа одиночного потенциального барьера

$$U(z) = \begin{cases} \Delta > 0, & |z| < d \\ 0, & |z| \geq d \end{cases}; \quad m(z) = \begin{cases} m_0 > m_1, & |z| < d \\ m_1, & |z| \geq d \end{cases}, \quad (11)$$

и эффективный потенциал есть

$$V(z) = \begin{cases} V_0 = m_0(\Delta - E), & |z| < d \\ V_1 = -m_1 E, & |z| \geq d \end{cases}. \quad (12)$$

Если $E < E_t$, где

$$E_t = \frac{\Delta}{1 - m_1/m_0}, \quad (13)$$

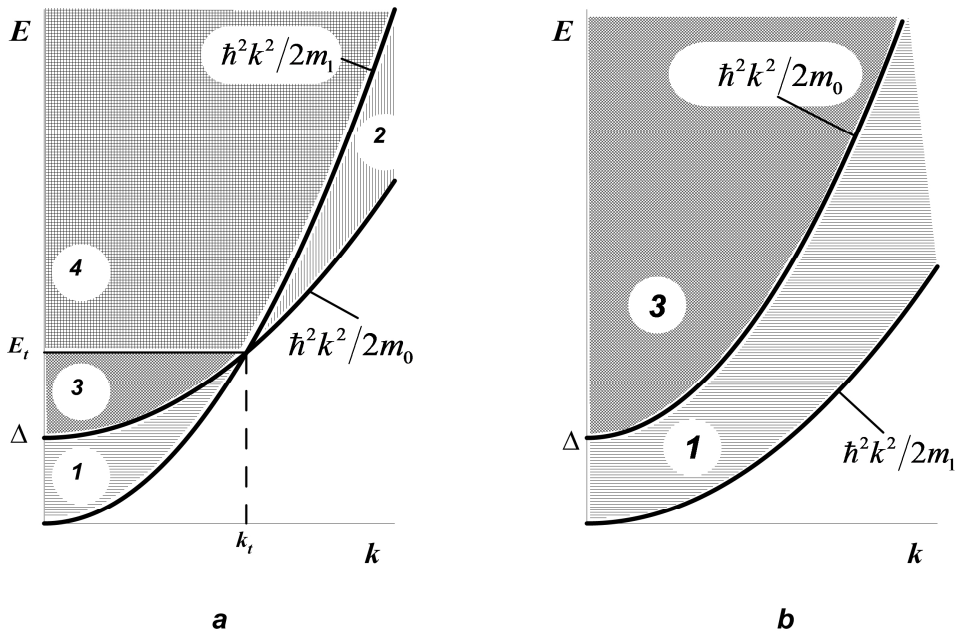


Рис. 1. Электронные состояния в гетероструктуре с барьерным слоем ($\Delta > 0$)

- a** – масса носителя в слое больше, чем в «обкладках»;
- b** – масса носителя в слое меньше, чем в «обкладках».
- 1 – подбарьерное туннелирование между обкладками;
- 2 – KL-состояния в слое;
- 3 – рассеяние над барьером;
- 4 – рассеяние над ямой

$$\hbar k_t = \sqrt{\frac{\Delta}{m_1^{-1} - m_0^{-1}}}. \quad (14)$$

то $V_0 > V_1$, то есть эффективный потенциал также имеет форму барьера. При этом если эффективная энергия $\varepsilon > V_0$, что эквивалентно ограничению $E > \Delta + \hbar^2 k^2 / 2m_0$, то носитель лишь рассеивается над барьером; в противном случае движение подбарьерное, и волновая функция φ локализована в основном в «обкладках» $|z| \geq d$.

Если же $E > E_t$, то $V_0 < V_1$, то есть эффективный потенциал имеет форму ямы глубиной $(m_0 - m_1)(E - E_t)$. При этом если эффективная энергия $\varepsilon > V_1$, что эквивалентно ограничению $E > \hbar^2 k^2 / 2m_1$, то имеет место лишь рассеяние над потенциальной ямой. В случае же $V_0 < \varepsilon < V_1$ могут возникать состояния, локализованные в слое $|z| < d$ (KL-состояния). Наконец, при $E = E_t$ эффективный потенциальный рельеф вообще отсутствует: $V_0 = V_1$.

Результаты проведенного анализа иллюстрируются рис. 1. Видно, что KL-состояния имеют латеральный квазиимпульс не меньший, чем

При $\Delta \rightarrow 0$ $k_i \rightarrow 0$, что согласуется с выводом о наличии в изоэнергетической гетероструктуре KL-состояния с нулевым квазиимпульсом [3].

Из рис. 1 становится очевидной общая причина кинематической локализации: полная энергия KL-состояния меньше кинетической энергии, соответствующей такому же латеральному квазиимпульсу в соседнем слое. Поэтому реальное пересечение носите-

3. Спектр KL-состояний: влияние выбора условий сшивки

Проведенное в п. 2 качественное рассмотрение можно безоговорочно принять, строго говоря, лишь при $\alpha = 1/2$, поскольку лишь в этом случае условия сшивки (8) сводятся к обычным требованиям непрерывности «волновой функции» φ и ее производной. В какой степени сделанные выводы справедливы для других значений параметра α ? Проанализируем электронный спектр рассмотренной выше модельной гетероструктуры (11) подробнее. Для этого приведем задачи (8) – (10) к безразмерному виду, положив

$$\xi = z/d; \quad \beta = m_1/m_0; \quad \eta = 2m_0Ed/\hbar^2; \quad \chi^2 = \hbar^2k^2/2m_0\Delta \quad (15).$$

Во введенных обозначениях законы дисперсии для барьерного слоя и обкладок гетероструктуры выглядят как

$$\eta_0 = \eta_0(\chi) = P(1 + \chi^2), \quad \eta_1 = \eta_1(\chi) = \beta^{-1}P\chi^2 \quad (16),$$

где, соответственно, $P = 2m_0\Delta d^2/\hbar^2$. Уравнение и условия сшивки для собственных функций φ тогда можно записать в виде

$$\varphi'' = \begin{cases} -(\eta - \eta_0)\varphi & , \quad |\xi| < 1 \\ \beta(\eta_1 - \eta)\varphi & , \quad |\xi| \geq 1 \end{cases} \quad (17)$$

лем гетерограницы запрещено законами сохранения импульса и энергии. Похожая ситуация возникает при эффекте полного внутреннего отражения, когда требование сохранения частоты электромагнитной волны при пересечении границы раздела сред оказывается несовместимым с требованием сохранения латеральной составляющей волнового вектора.

$$\varphi_0(1) = \varphi_1(1); \quad \varphi_0'(1) = \beta^{2\alpha-1}\varphi_1'(1); \quad (18)$$

штрихи означают дифференцирование по η .

Для области KL-состояний параметр η лежит в

$$\text{tg} \sqrt{\eta - \eta_0} = \sqrt{\frac{\eta_1 - \eta}{\eta - \eta_0}} \beta^{2\alpha-1/2}; \quad \text{ctg} \sqrt{\eta - \eta_0} = -\sqrt{\frac{\eta_1 - \eta}{\eta - \eta_0}} \beta^{2\alpha-1/2} \quad (19)$$

диапазоне $\eta_0 < \eta < \eta_1$, и из (17), (18) вытекают дисперсионные уравнения:

для четных и нечетных состояний соответственно. Их качественный анализ (рис. 2) показывает, что:

1. Значения корней η_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) уравнений (19) зависят от параметра α : с ростом α значения η_n монотонно уменьшаются, стремясь к корням уравнений

$\text{tg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$ и $\text{ctg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$ соответственно. Таким образом, как и следовало ожидать, точная форма спектра оказывается чувствительна к выбору условий сшивки и формы гамильтониана.

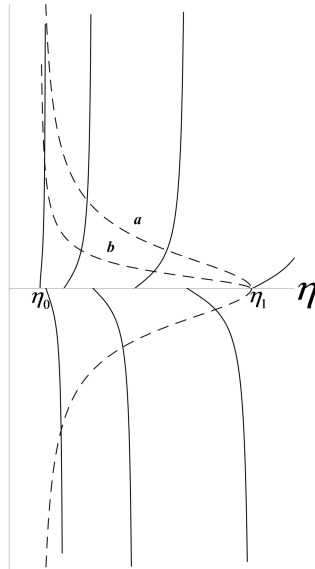


Рис. 2. Графическое решение дисперсионных уравнений (19): в верхней части для четных мод, в нижней — для нечетных. Сплошными линиями построены графики левых частей, пунктиром — правых частей.

Кривая **b** соответствует большему значению α , чем кривая **a**.

При значениях параметров, принятых для построения, существует 3 четных и 3 нечетных KL-состояния, и возникает четвертое четное (пересечение сплошной и пунктирных линий в точке η_1 на оси абсцисс)

2. Число корней дисперсионных уравнений не зависит от α и равно числу корней уравнений $\operatorname{tg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$ и $\operatorname{ctg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$ на интервале $\eta_0 \leq \eta \leq \eta_1$. Другими словами, число KL-состояний с данным латеральным квазиимпульсом k не зависит от выбора условий сшивки.

3. Дисперсионное уравнение для четных состояний всегда имеет решение. Другими словами, в гетероструктуре рассматриваемого типа всегда существует минимум одна ветвь кинематически локализованных электронных состояний. Будем называть ее основной (basic) KL-модой – BKLM.

4. При стягивании законов дисперсии $\eta_0(\chi)$ и $\eta_1(\chi)$ к точке пересечения $\eta_0 = \eta_1$ корень η , соответствующий BKLM, стремится к той же точке. Иначе говоря, основная KL-мода всегда начинается в вершине сектора KL-состояний (рис. 1а).

5. Вблизи начала ветви BKLM можно, воспользовавшись малостью аргумента тангенса в (19), получить, что $\eta_1 - \eta \sim (\eta - \eta_0)^2 \ll \eta - \eta_0$. Это означает, что закон дисперсии основной KL-моды вблизи ее начала совпадает с законом дисперсии обкладок гетероструктуры.

6. Из рис. 2 можно видеть, что с ростом η_0 и η_1 (то есть с ростом безразмерного импульса χ) новое решение возникает, когда $\eta = \eta_1$ и либо $\operatorname{tg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$, либо $\operatorname{ctg} \sqrt{\eta - \eta_0} = 0$. Отсюда следует, что ветви KL-состояний отщепляются от закона дисперсии обкладок при $\eta_1 - \eta_0 = (\pi n / 2)^2$. Следовательно, квазиимпульс, с которого начинается n -я ветвь, равен

$$k = k_r \sqrt{1 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_0 d^2 \Delta} n^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (20)$$

и не зависит от α .

Таким образом, на основании проведенного анализа можно полагать, что для возникновения эффекта динамической локализации носителей достаточно, чтобы в барьерном слое гетероструктуры масса носителя была больше, чем в прилегающих слоях («обкладках»). При этом наиболее существенные характеристики эффекта инвариантны относительно принимаемых условий сшивки огибающей и связанной с ним формы гамильтониана. Этот вывод хорошо согласуется с результатами, полученными другими методами, например суперсимметричной квантовой механики [9].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation / G. Bastard // Phys.Rev.B, 1981. – V. 24. – No. 10. – P. 5693–5697.
2. Milanovic V. Energy band calculation and zero energy gap conditions for semiconductors superlattices / V. Milanovic, D. Tjarkin // phys. stat. sol.(b), 1982. – V. 110. – P. 687–697.
3. Колесников А.В., А.П. Силин. Энергетический спектр узкощелевых полупроводниковых гетероструктур нового типа / А.В. Колесников, А.П. Силин // ЖЭТФ, 1996. – Т. 109. – В. 6. – С. 2125–2129.
4. Zhu Q.-G. Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors / Q.-G. Zhu, H. Kroemer. // Phys.Rev.B, 1983. – V. 37. – P. 3519–3527.
5. Брагинский Л.С. Структурный резонанс прохождения электроном межкристаллической границы / Л.С. Брагинский, Д.А. Романов. // ФТТ, 1995. – Т. 37. – № 7. – С. 2122–2126.
6. Кравченко К.О. Развитие метода эффективной массы для анализа электронных состояний в полупроводниковых гетероструктурах : дисс. ... канд. физ.-мат. наук.: 01.04.10. – СПб. : Спб. гос. электротехнич. ун-т (ЛЭТИ), 1999. – 147 с.
7. Roos O. von. Position-dependent effective masses in semiconductor theory / O. von. Roos // Phys. Rev. – B, 1983. – V. 27. – No. 12. – P. 7547–7552.
8. Morrow R.A. Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions / R.A. Morrow, K.R. Brownstein // Phys. Rev. – B, 1984. – V. 30. – No. 15. – P. 678–680.
9. Кос R., Tutunculer H. Exact solution of position dependent mass Schrödinger equation by supersymmetric quantum mechanics / R. Кос, H. Tutunculer // Annalen der Physik, 2003. – V. – 515. – No. 1112. – P. 684–691.