ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ МОДЕЛИ КЕЙНА

М. В. Кисин

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук, 410720, Саратов, Россия
(Получена 11.09.1992. Принята к печати 28.09.1992)

Соображения симметрии дают возможность построить матрицу феноменологических граничных условий, связывающих многокомпонентные волновые функции кейновской модели на резкой гетерогранице. В простейшем случае сферически-симметричного объемного спектра носителей заряда число независимых феноменологических параметров граничных условий оказывается равным числу явно рассматриваемых в модели зон. Показано также, что недиагональные элементы матрицы граничных условий, описывающей смешивание состояний легких, тяжелых и спин-отщепленных дырок на гетерогранице, существенно зависят от условий сшивки волновых функций зоны проводимости, а также от величины скачка кейновской скорости на гетерогранице. Показано, что традиционно используемое в методе эффективной массы требование покомпонентной непрерывности огибающих волновых функций на гетеропереходе в общем случае несправедливо.

Введение. В рамках метода эффективной массы состояние квазичастицы—носителя заряда может быть представлено столбцом плавно меняющихся функций, число которых равно числу зон, явно рассматриваемых в данной зонной модели. В объеме полупроводника такая многокомпонентная волновая функция должна удовлетворять уравнению Шредингера с матричным гамильтонианом, общий вид которого однозначно диктуется условиями симметрии [1]. При этом феноменологические параметры эффективного гамильтониана определяются в основном микроскопической структурой кристалла. Подобная схема должна, по-видимому, удовлетворительно работать и при наличии в системе резких гетерограниц, поскольку сама по себе плоскость раздела не вносит каких-либо дополнительных пространственных масштабов и, следовательно, остается возможным разделение задачи на микроскопическую (с масштабом постоянной решетки) и макроскопическую (с масштабом внешних воздействий). В этом случае на границе раздела волновые функции—столбцы ψ_A и ψ_B должны быть однозначно связаны некоторой матрицей граничных условий (ГУ)

$$\psi_A = \Gamma_{AB}\psi_B, \tag{1}$$

элементы которой определяются микроскопической структурой гетерограницы, а также симметрией зонного спектра полупроводников A и B.

В литературе сейчас наиболее часто используется условие покомпонентной непрерывности волновых функций $\psi_{A,\ B}$ на гетерогранице, что соответствует единичной матрице граничных условий Γ_{AB}. При этом, как правило, апеллируют к возможности введения в полупроводниках гетеропары общей системы базисных блоховских функций [2]. Такой подход, однако, применим лишь к полупроводникам одного кристаллического класса и представляется сомнительным в случае полупроводников с сильно отличающимися параметрами зонной структуры (ширина запрещенной зоны E_g, межзонный матричный элемент скорости P, величина спин-орбитального расщепления валентной зоны Δ). Между тем матричную структуру ГУ и минимальное число входящих в них независимых параметров оказывается возможным установить уже из соображений симметрии. При этом допустима аналогия с задачей нахождения линейно независимых компонент материальных тензоров в полупроводниках [1], поскольку сшиваемые на границе волновые функции характеризуются лишь макроскопической зависимостью от координат, и, следовательно, матрица Γ_{AB} определяется только группой направлений кристалла или, точнее, гетероструктуры в целом. Более того, симметрия энергетического спектра квазичастиц в полупроводниках, как правило, выше симметрии группы направлений, в результате для большого числа интересных в практическом плане задач матрица граничных условий может оказаться достаточно простой. Цель настоящей работы состоит в том, чтобы получить и проанализировать общий вид матрицы ГУ для волновых функций модели Кейна [3], наиболее широко используемой при описании гетероструктур на основе прямозонных полупроводников $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$. Будет показано, что даже в простейшем случае, когда введение гетерограницы приводит к понижению симметрии спектра от сферической до аксиальной, вид матрицы Γ_{AB} может быть полностью определен, причем общее количество независимых феноменологических параметров матрицы ГУ не превышает числа рассматриваемых в модели зон. Использованная методика может быть также распространена на прямозонные и многодолинные полупроводники.

1. Основные соотношения

Рассмотрим гетеропереход, создаваемый двумя полупроводниками, электронный энергетический спектр каждого из которых в объеме материала описывается матричным гамильтонианом кейновского типа, учитывающим kp-взаимодействие лишь ближайших зон,

$$H = E_g\hat{b} + P(\hat{\mathbf{a}}\mathbf{k}) + \Delta_{so}\hat{c};\ \mathbf{k} = -i\hbar\nabla. \tag{2}$$

Здесь $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{b}$ и $\hat{c}$ — эрмитовы матрицы, формирующие в соответствии с выбором базисных функций матричную структуру эффективного гамильтониана. Для наглядности изложения мы ограничиваемся сферически симметричным спектром квазичастиц, поскольку именно этот случай представляет наибольший интерес для анализа модельных задач. Наличие гетерограницы должно приводить к понижению сферической симметрии спектра системы до аксиальной, причем матричное представление группы симметрии гетероструктуры (и спектра квазичастиц) в базисе, определяющем данный вид гамильтониана (2), будет приводимым. Наиболее простой (канонический) вид матрицы ГУ будет иметь место в базисе, соответствующем представлению группы симметрии гетероструктуры в виде прямой суммы неприводимых представлений. Как и в случае элементов матрицы материальных тензоров [1], матрица ГУ будет при этом разбиваться на блоки, связывающие только наборы компонент волновых функций, осуществляющих эквивалентные представления. Блоки, связывающие базисные функции неэквивалентных представлений, будут тождественно равны нулю. При этом полное число независимых элементов матрицы ГУ должно быть равно числу единичных представлений, содержащихся в прямом произведении представлений, по которым преобразуются сшиваемые волновые функции. На внутреннюю структуру ненулевых блоков матрицы Γ_{AB} достаточно сильные ограничения накладывают сами операции симметрии, входящие в группу симметрии системы. Так, если некоторое пространственное преобразование R, описывающее, например, переход от базисных функций U_n к базисным функциям $U_n = RU_n$, входит в группу симметрии гетероструктуры, то инвариантность вида ГУ относительно преобразования R будет заключаться в том, что соотношение типа (1) с той же матрицей Γ_{AB} должно будет иметь место также и для волновых функций $\tilde{\psi}_{A,\ B} = R^{-1}\psi_{A,\ B}$, преобразованных в соответствии с рассматриваемой операцией симметрии [1]:

$$\tilde{\psi}_A = R^{-1}\psi_A = R^{-1}\Gamma_{AB}\psi_B = R^{-1}\Gamma_{AB}RR^{-1}\psi_B = \Gamma_{AB}\tilde{\psi}_B,$$

т. е.

$$\Gamma_{AB} = R^{-1}\Gamma_{AB}R. \tag{3}$$

Аналогичное соотношение должно также выполняться и для оператора обращения времени T:

$$\Gamma_{AB} = T^{-1}\Gamma_{AB}T. \tag{4}$$

Условия (3)—(4) в простейшем случае могут полностью определить вид матрицы ГУ. Рассмотрим в качестве наиболее наглядного примера бесспиновую модель Кейна с базисом

$$\{U_n\}_{A,\ B} = \left\{S;\ Z;\ \frac{X+iY}{\sqrt{2}};\ \frac{X-iY}{\sqrt{2}}\right\}_{A,\ B}. \tag{5}$$

В материалах гетеропары эти базисные функции, имея одинаковую симметрию, должны тем не менее отличаться в меру различия параметров эффективного гамильтониана (2) для полупроводников A и B. Волновые функции $\psi_{A,\ B}$ в модели (5) будут представлять собой четырехкомпонентные столбцы, связанные матрицей Γ_{AB} размерности 4×4. Ось z системы координат направим по оси симметрии гетероструктуры перпендикулярно гетерогранице. Группу симметрии гетероструктуры составят элементы симметрии группы $C_{\infty v}$, которые мы будем брать в качестве операций R, а именно поворот системы координат $R_{z\varphi}$ на угол φ вокруг оси z, включая тождественный элемент $E = R_{z,\ \varphi=0}$, и отражение $R_{\sigma\varphi}$ в плоскости σ_φ, перпендикулярной гетерогранице и составляющей угол φ с осью x. В базисе (5) компоненты волновой функции (огибающие), соответствующие первым двум базисным функциям (S и Z), преобразуются по эквивалентным единичным представлениям, а последняя пара функций составляет базис двумерного представления $R^{(s)}$, в котором операции R представляются матрицами

$$R^{(s)}_{z\varphi} = \begin{bmatrix} e^{is\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-is\varphi} \end{bmatrix};\quad R^{(s)}_{\sigma\varphi} = \begin{bmatrix} 0 & e^{-2is\varphi} \\ (-1)^{2s}e^{2is\varphi} & 0 \end{bmatrix}, \tag{6}$$

причем в данном случае $s = 1$, что эквивалентно преобразованиям спина 1 в плоскости гетерограницы xy. «Спин» квазичастицы, очевидно, носит здесь чисто орбитальный характер. Каноническая матрица ГУ при этом имеет квазидиагональный вид и равна прямой сумме двух блоков

$$\Gamma_{AB} = \begin{bmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Gamma_3 & \Gamma_{34} \\ \Gamma_{43} & \Gamma_4 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Индексы матричных элементов соответствуют индексам n базисных функций в (5), так что недиагональные элементы Γ_{12} и Γ_{21} описывают смешивание на гетерогранице эквивалентных (относительно операций группы $C_{\infty v}$) S- и Z-состояний. Смешивание S- и Z-компонент волновой функции с огибающими базисных состояний двумерного представления отсутствует. В силу инвариантности базисных функций одномерных представлений относительно операций группы $C_{\infty v}$ дальнейшая детализация структуры верхнего (левого) блока матрицы граничных условий Γ_{AB} в (7) невозможна. Напротив, для нижнего (правого) блока матричных элементов, описывающего смешивание двух последних огибающих в базисе (5), подставив (6) в (3), нетрудно дополнительно получить

$$\Gamma_{34} = \Gamma_{43} = 0; \; \Gamma_3 = \Gamma_4.$$

Соотношение (4) в бесспиновой задаче сводится к требованию действительности всех оставшихся элементов матрицы Γ_{AB}, что довершает анализ граничных условий данной простой модели с точки зрения теории симметрии.

Полученное, однако, можно дополнить некоторыми соображениями. В первую очередь отметим, что принцип локальности, заложенный уже в определении матрицы Γ_{AB}, (т. е. независимость ГУ от производных) накладывает сильные ограничения на величину смешивания s- и p-состояний, имеющих разную инверсионную четность. Действительно, в этом случае естественно считать, что одна и та же матрица ГУ будет описывать взаимно обратные гетеропереходы:

$$\psi_A^{(-)} = \Gamma_{AB}\psi_B^{(+)}; \; \psi_A^{(+)} = \Gamma_{AB}\psi_B^{(-)}, \tag{8}$$

где символы + и — соответствуют расположению полупроводника данного типа в области $z > 0$ ($z < 0$) относительно гетерограницы. Но поскольку значения волновой функции при $z = 0$, $\psi_A^{(+)}$ и $\psi_A^{(-)}$ можно связать оператором Σ зеркального отражения в плоскости гетерограницы xy

$$\psi_A^{(+)} = \Sigma\psi_A^{(-)} = \Sigma\Gamma_{AB}\Sigma^{-1}\Sigma\psi_B^{(+)} = \Sigma\Gamma_{AB}\Sigma^{-1}\psi_B^{(-)},$$

то в результате должна иметь место также инвариантность матрицы Γ_{AB} относительно оператора Σ, т. е. должно выполняться соотношение

$$\Gamma_{AB} = \Sigma^{-1}\Gamma_{AB}\Sigma. \tag{9}$$

Поскольку в бесспиновой модели (5) действие оператора Σ сводится просто к изменению знака Z-компоненты волновой функции (координатная зависимость огибающих при этом не рассматривается), то условие (9) приводит к занулению всех недиагональных элементов матрицы ГУ типа Γ_{n2} и Γ_{2n}, в частности,

$$\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = 0. \tag{10}$$

На оставшиеся матричные элементы матрицы Γ_{AB} можно наложить еще одно дополнительное условие, если потребовать, чтобы искомые ГУ поддерживали непрерывность потока волновой функции, выраженного через огибающие. В рассматриваемых кейновских моделях, учитывающих лишь kp-взаимодействие ближайших зон, выражение для потока

$$\mathrm{J} = i\psi^{+}\mathbf{P}\psi \tag{11}$$

определяется лишь межзонной частью кейновского гамильтониана (2)

$$H_{\mathbf{kp}} = (\mathbf{kP}) = P\,(\hat{\mathbf{a}}\mathbf{k}); \; P_{A,\,B} = -\frac{\hbar}{m}\langle S\,|\nabla|\,Z\rangle_{A,\,B},$$

в полной аналогии, например, с уравнением Дирака. Действительно, квадрат модуля волновой функции квазичастицы должен удовлетворять уравнению непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^{+}\psi = i\,[(H\psi)^{+}\psi - \psi^{+}H\psi\,] = -\nabla\mathbf{J}, \tag{12}$$

откуда в модели (2) и следует выражение для потока (11). Матрицы межзонного кейновского оператора скорости **P**, связывающие состояния разной инверсионной четности в силу общей симметрии спектра квазичастиц, имеют в полупроводниках A и B одинаковую матричную структуру $\hat{\mathbf{a}}$: $\mathbf{P}_{A\,(B)} = P_{A\,(B)}\hat{\mathbf{a}}$. Непрерывность z-компоненты потока дает тогда

$$P_B\psi_B^+\hat{a}_z\psi_B = P_A\psi_A^+\hat{a}_z\psi_A = P_A\psi_B^+(\Gamma_{AB}^+\hat{a}_z\Gamma_{AB})\,\psi_B,$$

откуда в силу произвольности функции ψ_B следует условие

$$\Gamma_{AB}^+\hat{a}_z\Gamma_{AB} = \gamma\hat{a}_z \quad (\gamma = P_B/P_A). \tag{13}$$

Применительно к рассмотренной выше простой модели (5), в которой матрица $\hat{a}_z$ имеет лишь два ненулевых матричных элемента $(a_z)_{12} = (a_z)_{21}^* = i$, последнее соотношение приводит к требованию

$$\Gamma_1\Gamma_2 - \Gamma_{12}\Gamma_{21} = \Gamma_1\Gamma_2 = \gamma. \tag{14}$$

Таким образом, с учетом (10) матрица ГУ в бесспиновой модели Кейна является чисто диагональной и может быть выражена через два независимых феноменологических параметра, например, Γ_1 и Γ_3. Условия сшивки волновых функций дырочных состояний при этом через значение параметра $\Gamma_2 = \gamma/\Gamma_1$ оказываются сильно связанными с условиями сшивки S-компонент волновой функции и с величиной скачка кейновской скорости P на гетерогранице. Интересно отметить также, что условие покомпонентной непрерывности волновой функции квазичастицы на гетерогранице выполняется, лишь если $\gamma = 1$. Последнее равенство в применении к материалам группы $\mathrm{A^{III}B^{V}}$ часто используется в литературе для обоснования идентичности базисных функций в полупроводниках гетеропары.

Рассмотренная выше бесспиновая модель является, очевидно, чисто иллюстративной. Чтобы получить результаты, имеющие отношение к реальным полупроводниковым материалам, необходимо ввести в рассмотрение спиновую структуру базисных состояний.

2. Модель Кейна со спином

Учет спина несколько усложняет феноменологический анализ матрицы граничных условий Γ_{AB}, что в первую очередь связано с удвоением общего числа базисных состояний. Мы покажем, однако, что при должном выборе базиса операции группы симметрии гетероструктуры полностью определяют характер смешивания компонент волновой функции, соответствующих спиновым дублетам базисных состояний. Действительно, аксиальная симметрия системы поддерживает только двукратное вырождение состояний, имеющих противоположные по знаку проекции полного момента на ось z [4]. Естественно поэтому использовать базис, допускающий разбиение на пары крамерсово-сопряженных («спиновых») состояний, например,

$$\begin{Bmatrix} U_n^{(1)} \\ U_n^{(-1)} \end{Bmatrix}_{A,\,B} = \begin{Bmatrix} S\alpha; & Z\alpha; & \dfrac{(X+iY)\,\beta}{\sqrt{2}}; & \dfrac{(X+iY)\,\alpha}{\sqrt{2}} \\ S\beta; & Z\beta; & -\dfrac{(X-iY)\,\alpha}{\sqrt{2}}; & \dfrac{(X-iY)\,\beta}{\sqrt{2}} \end{Bmatrix}_{A,\,B}. \tag{15}$$

Волновые функции имеют вид 8-компонентных столбцов, а граничные условия и операторы симметрии представляются матрицами размерности 8×8, вид которых, однако, при нашем выборе базиса может быть существенно упрощен.

Действительно, поскольку базис разбит на «спиновые» дублеты, то, например, матрица оператора T является диагональной по нижним индексам n. На ее главной диагонали будут стоять стандартные матрицы размерности 2×2 обычного оператора обращения времени T_0, действующие в пространстве верхних («спиновых») индексов $\mu = \pm 1$:

$$T_0 U_n^{(\mu)} = \mu U_n^{(-\mu)}. \tag{16}$$

Матрицы операторов R пространственных преобразований симметрии, входящих в двойную группу $C'_{\infty v}$, также будут диагональными по нижним индексам, при этом для $n = 1$, 2 и 3 на главной диагонали матриц $R_{z\varphi}$ или $R_{\sigma\varphi}$ будут стоять одинаковые блоки (6) размерности 2×2 $R_{z\varphi}^{(1/2)}$ или $R_{\sigma\varphi}^{(1/2)}$, что соответствует просто эквивалентности данных субматриц группе преобразований спина 1/2 в плоскости гетерограницы. Для $n = 4$ в матрицах R будут стоять субматрицы $R^{(3/2)}$, соответствующие преобразованиям спина 3/2. В результате в выбранном спиновом базисе из-за квазидиагонального характера матриц T и R условия (3)—(4) могут накладывать ограничения только на внутреннюю структуру спиновых субматриц Γ_{nm} $(n, m = 1 \ldots 4)$. Таким образом, (3) и (4) сводятся к условиям инвариантности

$$\Gamma_{nm} = R_{(s)}^{-1} \Gamma_{nm} R_{(s)} = T_0^{-1} \Gamma_{nm} T_0. \tag{17}$$

Эти ограничения, однако, достаточно жесткие и позволяют полностью установить внутреннюю структуру субматриц Γ_{nm}. Действительно, подставив в (17) соответственно выражения (16) и (6) при $s = 1/2$, 3/2, нетрудно убедиться, что все субматрицы Γ_{nm} действительны, диагональны и описываются единственным параметром

$$\Gamma_{nm}^{(\mu\nu)} = \delta_{\mu\nu} \Gamma_{nm}^{(11)}. \tag{18}$$

На рассматриваемой гетерогранице, таким образом, отсутствует смешивание огибающих, соответствующих крамерсово-сопряженным состояниям с противоположными значениями μ. Последний факт, впрочем, может быть получен при наличии в системе оси симметрии z всего лишь второго порядка. Аналогично действительность элементов субматриц Γ_{nm} достигается уже в присутствии единственной плоскости симметрии σ_v. Таким образом, для установления тривиальной спиновой структуры субматриц Γ_{nm} (18) наличие полной группы аксиальной симметрии $C'_{\infty v}$ является, вообще говоря, избыточным и используется в данной работе в основном для наглядности изложения. В дальнейшем верхние индексы элементов матрицы Γ_{AB} будем опускать.

Выбранный нами базис (15) обеспечивает представление всех операций группы $C'_{\infty v}$ в виде прямой суммы неприводимых представлений, поэтому, как было указано выше, матрица Γ_{AB} имеет канонический вид, т. е. недиагональные матричные элементы (субматрицы) Γ_{n4} и Γ_{4n}, связывающие неэквивалентные представления $R_{1/2}$ и $R_{3/2}$, зануляются. Условие (9) также накладывает ограничения на характер межзонного смешивания, зануляя элементы, связывающие состояния различной четности относительно отражения Σ в плоскости гетерограницы. Здесь, однако, ситуация не сводится только к тривиальному изменению знака Z-огибающей, как в бесспиновой модели. Действительно, оператор отражения Σ в плоскости xy можно представить в виде произведения операторов инверсии I и поворота $R_{z\pi}$. Поскольку для спинов 1/2 и 3/2 матрицы $R_{z\pi}$ имеют противоположные знаки, то нетрудно убедиться, что при нашем выборе базисных функций пары состояний с $n = 1$ и 4 одинаково преобразуются при отражениях Σ, т. е. имеют одинаковую Σ-четность, которая соответственно противоположна четности состояний с $n=2$ и 3. Это означает, что в базисе (15) матрица оператора Σ имеет вид прямого произведения двух диагональных матриц

$$\Sigma = i \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix}, \tag{19}$$

где на диагонали первого сомножителя стоят относительные Σ-четности соответствующих базисных пар состояний, а второй сомножитель представляет собой Σ-четность компонентов пары. Поскольку, как и должно быть для фермионов, $\Sigma^{-1} = -\Sigma$, то все субматрицы ГУ, связывающие пары состояний разной относительной Σ-четности, зануляются. Таким образом, условие (9) приводит к тому, что наряду с недиагональными по нижним индексам элементами Γ_{4n} и Γ_{n4} зануляются также недиагональные матричные элементы (субматрицы) Γ_{1n} и Γ_{n1}. Отметим, что последний результат отличается от соответствующего результата в бесспиновой задаче, где инвариантность ГУ относительно отражений Σ приводила к выделению Z-, а не S-огибающих.

Два оставшихся ненулевых недиагональных элемента Γ_{23} и Γ_{32} должны еще обеспечить непрерывность потока волновой функции (11). В базисе (15) матрица $\hat{a}_z$ имеет только две ненулевые субматрицы $a_{12} = a_{21}^* = i$, при этом структура субматриц по верхним индексам, очевидно, аналогична (18), поскольку кейновский оператор скорости не смешивает спиновые состояния. В результате условие (12) с учетом уже полученных ограничений дает

$$\Gamma_1 \Gamma_2 = \gamma; \ \Gamma_{23} = 0, \tag{20}$$

чем и завершается задача определения канонической матрицы ГУ в модели Кейна с базисом (15):

$$\Gamma_{AB} = \begin{bmatrix} \Gamma_1 & & & \\ & \gamma/\Gamma_1 & & \\ & \Gamma_{32} & \Gamma_3 & \\ & & & \Gamma_4 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \{S\alpha;\ S\beta\}, \\ \{Z\beta;\ -Z\alpha\}, \\ \{(X-iY)\,\alpha/\sqrt{2};\ (X+iY)\,\beta/\sqrt{2}\}, \\ \{(X+iY)\,\alpha/\sqrt{2};\ (X-iY)\,\beta/\sqrt{2}\}. \end{matrix} \tag{21}$$

Независимыми феноменологическими параметрами модели, подлежащими микроскопической трактовке, являются, таким образом, диагональные элементы Γ_1, Γ_3, Γ_4 и параметр межзонного смешивания Γ_{32}. Полное число независимых параметров ГУ равно при этом числу рассматриваемых в модели Кейна зон.

В ряде случаев бывает удобно поменять местами компоненты двух средних спиновых дублетов базиса (15), как это показано в формуле (21). Матрица ГУ в силу диагональности своих субматриц (18) сохраняет при этом свой канонический вид, но относительная Σ-четность всех базисных пар становится одинаковой, т. е. первый сомножитель в (19) представляется единичной матрицей. Квантовое число μ теперь может интерпретироваться как собственное значение оператора Σ, т. е. как Σ-четность состояния [5], а граничные условия в силу соотношения (18) поддерживают разделение решений по Σ-четности. Диагональность ГУ по верхним индексам (18) в этом случае может оказаться полезной, поскольку при $k_z = 0$ сам кейновский гамильтониан в базисе (21) распадается на две независимые субматрицы, описывающие решения с противоположной Σ-четностью μ. Поскольку ГУ сохраняют Σ-четность, размерность всех матричных уравнений задачи понижается вдвое. Такое представление волновой функции оказывается особенно удобным, если ось квантования спина z расположить в плоскости гетерограницы перпендикулярно двумерному импульсу носителя заряда

$k_\parallel$. В этом случае спин-орбитальное взаимодействие $H_{so} \sim \mathbf{s}\,[\mathbf{k}_\parallel \times \nabla\phi]$, обусловленное градиентом кристаллического потенциала $\nabla\phi$ на гетерогранице, будет, очевидно, разделять состояния со спином s по и против оси z. Как следствие, выбор такого представления оказывается наиболее естественным при анализе невырожденных ветвей электронного спектра резких гетеропереходов [5]. Квантовое число μ при этом коррелирует со знаком спиновой поляризации получаемых невырожденных решений [6]. Необходимо отметить, однако, что такой поворот оси квантования спина неизбежно приводит к потере канонического вида матрицы ГУ (21) по нижним индексам.

На практике для анализа энергетического спектра гетероструктур используется, как правило, не канонический базис (15), а базис связанных моментов, диагонализующий спин-орбитальное взаимодействие и позволяющий разделить при $k = 0$ состояния легких и спин-отщепленных дырок. Базис связанных моментов $\tilde{U}$ может быть получен из канонического базиса унитарным преобразованием, приводящим два средних спиновых дублета из (15) к виду

$$\{\tilde{U}_2\} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{Bmatrix}(X + iY)\beta - 2Z\alpha \\ -(X - iY)\alpha - 2Z\beta\end{Bmatrix}; \quad \{\tilde{U}_3\} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{Bmatrix}(X + iY)\beta + Z\alpha \\ -(X - iY)\alpha + Z\beta\end{Bmatrix}. \tag{22}$$

Базисные функции с $n = 1$ и 4 при этом можно оставить без изменений. В результате преобразованная матрица граничных условий $\tilde{\Gamma}_{AB}$ будет отличаться от (21) только видом внутреннего блока размерности 2×2 (без учета «спиновой» структуры), описывающего смешивание состояний легких ($\tilde{U}_2$) и спин-отщепленных ($\tilde{U}_3$) дырок на гетерогранице:

$$\tilde{\Gamma}_{AB} = \begin{bmatrix}\Gamma_1 & & & \\ & \tilde{\Gamma}_2 & \tilde{\Gamma}_{23} & \\ & \tilde{\Gamma}_{32} & \tilde{\Gamma}_3 & \\ & & & \Gamma_4\end{bmatrix} \qquad \begin{aligned}\tilde{\Gamma}_2 &= (2\Gamma_2 + \Gamma_3 - \sqrt{2}\Gamma_{32})/3,\\ \tilde{\Gamma}_3 &= (2\Gamma_3 + \Gamma_2 + \sqrt{2}\Gamma_{32})/3,\\ \tilde{\Gamma}_{23} &= [\sqrt{2}\,(\Gamma_3 - \Gamma_2) + \Gamma_{32}]/3,\\ \tilde{\Gamma}_{32} &= [\sqrt{2}\,(\Gamma_3 - \Gamma_2) - 2\Gamma_{32}]/3.\end{aligned} \tag{23}$$

Итак, несмотря на совпадение оси квантования спина и оси симметрии гетероструктуры, матрица ГУ в базисе связанных моментов (21) уже не имеет канонического вида, хотя все ее элементы по-прежнему могут быть выражены через четыре независимых параметра.

Наиболее важный и неожиданный физический вывод, следующий из полученного вида матриц Γ_{AB}, состоит в том, что на резкой гетерогранице независимо от значений энергетических зазоров E_g и Δ в контактирующих полупроводниках условия смешивания компонент волновой функции для базисных состояний валентной зоны и условия сшивки огибающих зоны проводимости оказываются взаимосвязаны. Исключение составляют лишь состояния тяжелых дырок в случае, когда волновой вектор квазичастицы перпендикулярен гетерогранице. При этом волновая функция тяжелой дырки не содержит базисных Z-компонент. В остальных случаях ГУ для дырочных и электронных состояний будут связаны в силу соотношений (20) и (23). Видно также, что независимо от величины γ условие покомпонентной непрерывности огибающих в валентной зоне выполняется, лишь если $\Gamma_{32} = 0$. По-видимому, нет никаких оснований считать, что последнее условие определяется лишь идентичностью базисных функций в объеме контактирующих полупроводников. В частности, величина Γ_{32} может оказаться отличной от нуля исключительно из-за нарушения ближнего порядка в области гетерограницы [7].

Важно подчеркнуть, что в случае, если недиагональный матричный элемент Γ_{32} окажется несвязанным с величиной спин-орбитального расщепления валентной зоны Δ, он может оказать существенное влияние, например, на формулировку ГУ отдельно для состояний потолка валентной зоны (модель Латинжера). Интересно также отметить, что полученные ГУ в общем случае не поддерживают непрерывность плотности волновой функции $\psi^+\psi$ на гетерогранице. Действительно, из условия такой непрерывности

$$\psi_A^+\psi_A = \psi_B^+\Gamma_{AB}^+\Gamma_{AB}\psi_B = \psi_B^+\psi_B$$

непосредственно следовала бы унитарность матрицы Γ_{AB}, что возможно лишь в случае, если $\gamma = 1$. Однако величины $P_{A,\ B}$ являются внешними параметрами модели, и мы должны иметь возможность строить матрицу ГУ при их произвольных значениях. Очевидно, что, рассматривая модель первого порядка (2), мы можем удовлетворить лишь одному требованию непрерывности, а именно условию непрерывности потока волновой функции **J** (11). В результате полученные нами ГУ предопределяют существование на гетерогранице скачка электронной плотности и, как следствие, формирование граничного диполя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, 584. М. (1972).
[2] C. Mailhiot, D. L. Smith. Rev. Mod. Phys., 62, 173 (1990).
[3] E. O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1957).
[4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, 752. М. (1974).
[5] М. В. Кисин. ФТП, 23, 292 (1989); 24, 1983 (1990); 26, 785 (1992).
[6] М. В. Кисин. Письма ЖЭТФ, 53, 294 (1991).
[7] A. A. Grinberg, S. Luryi. Phys. Rev. B., 39, 7466 (1989).

Редактор Л. В. Шаронова