

ЭЛЕКТРОННЫЕ МИНИЗОНЫ В СВЕРХРЕШЕТКАХ $(\text{GaAs})_N(\text{AlAs})_M$ ПРИ ЧЕТНОМ И НЕЧЕТНОМ M

И. Л. Алейнер, Е. Л. Ивченко

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 28.09.1992. Принята к печати 1.10.1992)

Проанализированы граничные условия для огибающих метода эффективной массы, накладываемые на гетеропереходы сверхрешетки GaAs/AlAs. Указанные условия позволяют получить зависимость эффекта GX-смешивания от четности числа монослоев в слое AlAs. Найдена дисперсия электронов для двух нижних минизон в области перехода сверхрешетки от типа I к типу II.

Численные расчеты электронных минизон в сверхрешетке $(\text{GaAs})_N(\text{AlAs})_M$, проведенные методами псевдопотенциала или сильной связи, показали, что характер смешивания между электронными состояниями Γ и X_2 существенно различается для четных и нечетных M (см. [1, 2]). В [3, 4] минизонная структура сверхрешетки GaAs/AlAs рассчитывалась в рамках метода эффективной массы с использованием граничных условий для волновой функции электрона, предложенных в [3]. Однако при этом четность числа монослоев M не влияла на минизонный спектр в противоречии с результатами расчетов эмпирическими методами. В данной работе показано, что граничные условия [3] требуют уточнения. После введения в эти условия знакопеременного множителя, зависящего от номера монослоя сверхрешетки (CP) расчет в приближении эффективной массы также приводит к зависимости эффекта GX-смешивания от четности числа M .

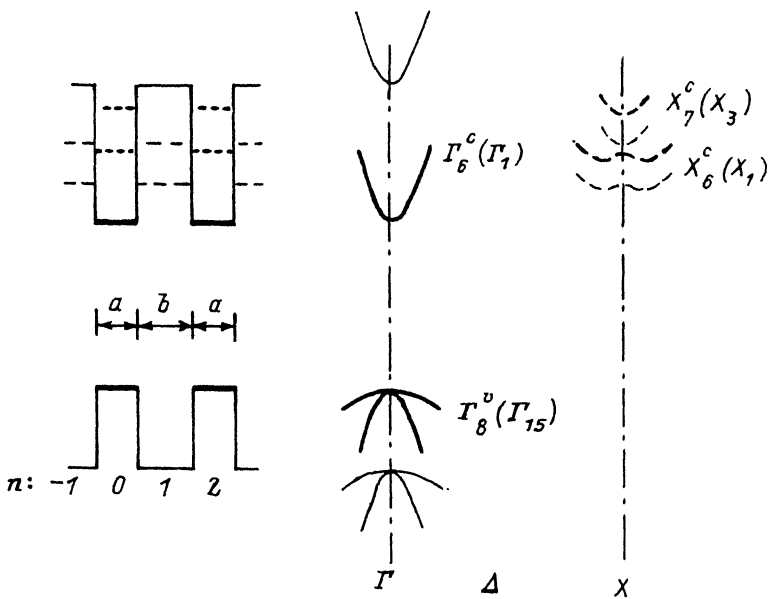
На рисунке схематически изображена дисперсия электронов вблизи точек Γ и X зоны Бриллюэна объемного GaAs или AlAs. Здесь же показана энергетическая диаграмма CP GaAs/AlAs с периодом $d = a + b$. В дальнейшем для краткого обозначения слоев GaAs и AlAs используются обозначения A и B соответственно. В рассматриваемой трехзонной модели волновая функция электрона имеет вид

$$\psi_c(\mathbf{r}) = w|\Gamma_1\rangle + v|X_3\rangle + u|X_1\rangle, \quad (1)$$

где $|\Gamma_1\rangle$, $|X_3\rangle$, $|X_1\rangle$ — блововские функции соответствующей симметрии в точках Γ и X . Эффективный гамильтониан, действующий на огибающие $w(\mathbf{r})$, $v(\mathbf{r})$, $u(\mathbf{r})$, удобно представить в виде матрицы 3×3 :

$$H = \begin{vmatrix} H_\Gamma & \hat{V}_{\Gamma X} \\ \hat{V}_{X\Gamma} & \hat{H}_X \end{vmatrix}. \quad (2)$$

Здесь H_Γ и \hat{H}_X — скалярный и матричный гамильтонианы, действующие соответственно на w и на двухкомпонентный столбец с компонентами v и u :



Энергетическая диаграмма CP GaAs/AlAs и дисперсия электронов в окрестности точек Γ и X в объемных кристаллах GaAs и AlAs. Сплошные и штриховые линии описывают соответственно состояния Γ и X , толстые и тонкие линии относятся соответственно к GaAs и AlAs.

$$H_{\Gamma} = E_{\Gamma}^0(z) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \hat{k}_{\alpha} \frac{1}{m_{\Gamma}(z)} \hat{k}_{\alpha}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_X = E_X^0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_X^1} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_X^2} + \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_z + Rk_z \hat{\sigma}_y, \quad (4)$$

где $k_{\alpha} = -i\partial/\partial r_{\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$); для краткости записи использованы матрицы Паули $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$; $E_{\Gamma}^0(z)$ и $E_X^0(z)$ — энергетические положения минимума Γ_1 и середины зазора между зонами X_1 и X_3 в X -точке, скачком меняющиеся при переходе через гетерограницу (см. рисунок); m_{Γ} — эффективная масса Γ -электрона, принимающая различные значения m_{Γ}^A и m_{Γ}^B соответственно в GaAs и AlAs; Δ — расщепление зон X_1 и X_3 ; константа R описывает кр-взаимодействие этих зон, ответственное за формирование двугорбой структуры зоны проводимости X_1 (см. рисунок). Для простоты мы пренебрегаем различием величин m_X^1 , m_X^2 , Δ и R в соседних слоях. Недиagonalный оператор $\hat{V}_{\Gamma X} = \hat{V}_{X\Gamma}^+$ описывает смешивание состояний Γ и X на гетерогранице. Его вид зависит от граничных условий, накладываемых на отгибающие функции. Пользуясь методом сильной связи, Андо и Акера [3] рассчитали коэффициенты в этих граничных условиях для CP GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Оказалось, что с достаточно высокой точностью граничные условия можно свести к требованию непрерывности функций w , v , u на гетерограницах, непрерывности $\partial u/\partial z$ (при равенстве m_X^1 в слоях A и B) и еще двум условиям:

$$\nabla_X v_A = \nabla_X v_B + \hat{\Gamma}_{\Gamma X}^{(1)} w_B, \quad (5a)$$

$$\nabla_{\Gamma}^A w_A = \nabla_{\Gamma}^B w_B + \hat{\Gamma}_{\Gamma X}^{(2)} v_B. \quad (5b)$$

$$\nabla_{\Gamma}^f = a_0 \frac{m_0}{m_{\Gamma}^f} \frac{\partial}{\partial z}, \quad \nabla_X = a_0 \frac{m_0}{m_X^f} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (6)$$

a_0 — постоянная решетки (в GaAs $a_0 = 5.6 \text{ \AA}$), m_0 — масса свободного электрона, $f = A$ или B . Использование безразмерных операторов дифференцирования (6) позволяет вводить для описания ГХ-смешивания безразмерные коэффициенты $t_{\Gamma X}^{(j)}$ ($j = 1, 2$). Согласно оценке [3], для CP GaAs/Al_xGa_{1-x}As $t_{\Gamma X}^{(1)} \approx x$. Из условия сохранения потока частиц на гетерогранице следует соотношение $t_{\Gamma X}^{(2)} = t_{\Gamma X}^{(1)*}$. Поэтому в [3], где для $t_{\Gamma X}^{(j)}$ приведены значения с противоположными знаками, знак одного из этих коэффициентов нужно изменить (на это обращено внимание в [4]).

В [3, 4] не учитывалась зависимость коэффициентов $t_{\Gamma X}^{(j)}$ от координаты z_{if} гетерограницы между слоями. В этом случае минизонный спектр, получаемый при использовании метода эффективной массы, определяется толщиной слоев a и b , а четность числа монослоев M не является параметром задачи. Мы обращаем внимание на то, что при сдвиге на вектор тривиальной трансляции кристалла $\mathbf{a}_2 = (a_0/2)(0, 1, 1)$ или $\mathbf{a}_3 = (a_0/2)(1, 0, 1)$, т. е. при сдвиге на один мономолекулярный слой, блоховская функция электрона $|\Gamma_1\rangle$ не меняется, тогда как блоховская функция в точке $\mathbf{k}_X = (2\pi/a_0)(0, 0, 1)$ меняет знак. Поэтому в (5) нужно положить

$$t_{\Gamma X}^{(1)}(z_{if}) = t_{\Gamma X}^{(2)}(z_{if}) = t_{\Gamma X} \eta(z_{if}), \quad (7)$$

где фазовый множитель $\eta(z_{if}) = \exp(2\pi i z_{if}/a_0) = \cos(2\pi z_{if}/a_0)$ принимает значения ± 1 . Заметим, что для одной гетерограницы знак η можно выбрать произвольно, внося соответствующее изменение в фазу огибающих w или v , u . Однако этот выбор однозначно фиксирует фазу $\Phi = 2\pi z_{if}/a_0$ на любой другой гетерогранице той же структуры.

Учет в граничных условиях (5) дополнительных слагаемых, пропорциональных $t_{\Gamma X}$, эквивалентен введению в эффективный гамильтониан (2) оператора

$$\hat{V}_{\Gamma X} = (V_{\Gamma_1 X_3}, V_{\Gamma_1 X_1}) \text{ с } V_{\Gamma_1 X_1} = 0 \text{ и } V_{\Gamma_1 X_3} = \sum_I a_0 U \eta(z_I) \zeta_I \delta(z - z_I), \quad (8)$$

где $U = \hbar^2 t_{\Gamma X} / (2a_0^2 m_0)$, z_I — координата гетерограницы, $\zeta_I = 1$ для границы AlAs/GaAs и $\zeta_I = -1$ для границы GaAs/AlAs. Дополнительный знакопеременный множитель ζ_I возникает в связи с изменением знака оператора $\partial/\partial z$ при замене z на $-z$. Теперь гамильтониан (2) полностью определен и может быть использован для расчета минизонного спектра. Чтобы продемонстрировать роль фазовых множителей $\eta(z_I)$ в (7) или (8), мы рассчитаем дисперсию двух нижних электронных минизон в CP GaAs/AlAs вблизи перехода от типа I к типу II. В этом случае трехзонный гамильтониан (2) можно преобразовать к эффективному двухзонному, точнее двухподзонному: вначале рассчитываются нижние минизоны $e1\Gamma$ и $e1X$ для Γ - и X_2 -минимумов в пренебрежении ГХ-смешиванием, т. е. при $t_{\Gamma X} = 0$, после чего учитывается взаимодействие (8) между состояниями в этих минизонах, а взаимодействие с верхними минизонами $e\nu\Gamma$ или $e\nu X$ ($\nu \neq 1$) пренебрегается. Волновую функцию удобно искать в представлении Ванье

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \sum_{n=2m} C_{\Gamma}^n(\mathbf{r}_{\perp}) \psi^0(z - md) |\Gamma_1\rangle +$$

$$+ \sum_{n=2m+1} C_X^n(\mathbf{r}_\perp) \left[u^0 \left(z - \frac{n}{2} d \right) |X_1\rangle + v^0 \left(z - \frac{n}{2} d \right) |X_3\rangle \right], \quad (9)$$

где четные значения n нумеруют слои GaAs, а нечетные — слои AlAs, $w^0(z)$ — огибающая волновой функции Γ -электрона в структуре с одиночной квантовой ямой AlAs/GaAs/AlAs шириной a , u^0 и v^0 — огибающие для X -электрона в структуре с одиночной квантовой ямой GaAs/AlAs/GaAs шириной b , \mathbf{r}_\perp — двумерный вектор с координатами x, y . Заметим, что

$$w^0(AB) = w^0(BA) \text{ (для состояния } e1\Gamma),$$

$$v^0(AB) = -v^0(BA) \text{ и } u^0(AB) = u^0(BA) \text{ (для состояния } e1X), \quad (10)$$

где символы AB и BA означают координату на гетерогранице GaAs/AlAs и AlAs/GaAs соответственно. Представление Ванье (9) оправдано, во-первых, тем, что из-за большой величины продольной массы X -электрона его туннелированием между слоями AlAs можно пренебречь, и, во-вторых, тем, что потенциальные барьеры для Γ -электрона в гетероструктуре GaAs/AlAs достаточно высоки, и его туннелирование между слоями GaAs можно учесть в приближении сильной связи. В этом приближении двухминизонный гамильтониан $H_{\mu\mu'}^{n,n'}$ ($\mu, \mu' = \Gamma, X$), действующий на функции $C_\mu^n(\mathbf{r}_\perp)$, имеет вид

$$H_{\Gamma\Gamma}^{n,n'} = \left(\bar{E}_\Gamma + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2M_\Gamma^\pm} \right) \delta_{nn'} + \frac{J}{4} (2\delta_{nn'} - \delta_{n,n'-2} - \delta_{n,n'+2}) \text{ (при } n = 2m, n' = 2m'); \quad (11a)$$

$$H_{\Gamma X}^{n,n'} = E_X(k) \delta_{nn'}, \quad E_X(k) = \bar{E}_X + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2M_X^\pm} \text{ (при } n, n' = 2m + 1); \quad (11b)$$

$$H_{X\Gamma}^{n,n'} = \bar{V} [\delta_{n,n'-1} \eta(z_n^+) + \delta_{n,n'-1} \eta(z_n^-)] \text{ (при } n = 2m + 1, n' = 2m'). \quad (11в)$$

Здесь m и m' — целые числа, z_n^+ и z_n^- — координаты правой и левой границ n -го слоя, E_μ — энергия электрона в структуре с одиночной ямой GaAs ($\mu = \Gamma$) или AlAs ($\mu = X$), M_μ^\pm — соответствующая эффективная масса при движении электрона в плоскости (x, y) , J — интеграл перекрытия, связанный с энергией Γ -электрона $E_\Gamma(k)$ соотношением

$$E_\Gamma(k) = \bar{E}_\Gamma + \frac{J}{2} (1 - \cos k_z d) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2M_\Gamma^\pm}, \quad (12)$$

\mathbf{k} — волновой вектор электрона в СР,

$$\bar{V} = a_0 U w^0(BA) v^0(BA).$$

Эффективная масса M_Γ^\pm на дне минизоны $e1\Gamma$ равна $2\hbar^2/Jd^2$. Для расчета M_Γ^\pm , а значит, и J можно использовать выражение для M^\pm , выведенное в [5] по методу Кронига—Пенни; массы M_Γ^\pm и M_X^\pm незначительно отличаются от m_Γ^\pm и m_X^\pm . Критерием применимости гамильтониана сильной связи (11) является малость

разности $E_{\Gamma}(\mathbf{k}) - E_X(\mathbf{k})$ и энергии ГХ-смешивания по сравнению с энергетическим расстоянием между состояниями $e1\mu$ и $e\nu\mu$ с $\nu \neq 1$.

Дисперсионные кривые $E_{\pm}(\mathbf{k})$ для двух нижних минизон получаются как собственные значения эквивалентной двухуровневой системы

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ E_{\Gamma}(\mathbf{k}) + E_X(\mathbf{k}) \pm \sqrt{[E_{\Gamma}(\mathbf{k}) - E_X(\mathbf{k})]^2 + 16\hat{V}^2\chi} \right\}, \quad (13)$$

где

$$\chi = \cos^2(k_z d/2 + \bar{\Phi}), \quad \bar{\Phi} = \pi(z_n^+ - z_n^-)/a_0 = M\pi/2.$$

При выводе учтено, что для состояния электрона в СР с волновым вектором \mathbf{k} функция $C_{\Gamma}^{2m}(\mathbf{r}_{\perp})$ в (9) пропорциональна $\exp(i\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{r}_{\perp}) \exp(ik_z dm)$, а функция $C_X^{2m+1}(\mathbf{r}_{\perp})$ пропорциональна $\exp(i\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{r}_{\perp}) \exp(ik_z dm) \cos(2\pi dm/a_0)$. Число монослоев АІАs вошло явно в выражение (13) для минизонной дисперсии. Если в слое B содержится четное число монослоев АІАs, то фаза Φ кратна π , $\chi = \cos^2(k_z d/2)$, состояния $e1\Gamma$, $e1X$ смешиваются при $k_z = 0$ и не смешиваются при $k_z = \pi/d$. Напротив, при нечетном числе M $\chi = \sin^2(k_z d/2)$, состояния $e1\Gamma$, $e1X$ смешиваются на границе сверхрешеточной зоны Бриллюэна, а при $k_z = 0$ смешивание между ними не происходит.

Поясним наличие или отсутствие ГХ-смешивания состояний $e1\Gamma$ и $e1X$ в точках $k_z = 0$ и π/d , пользуясь общими соображениями симметрии [6, 7]. При анализе мы учтем, что в объемном GaAs (или АІАs) состояние X_1 инвариантно относительно зеркального поворота S_{4z} (As) с центром на узле анионной подрешетки и меняет знак при операции S_{4z} (Ga) с центром на узле катионной подрешетки. По сравнению с X_1 состояние X_3 обладает противоположной четностью. Что касается блоховской функции $|1\Gamma_1\rangle$, то она инвариантна преобразованию S_{4z} независимо от выбора узла кристаллической решетки.

Пространственная структура СР $(\text{GaAs})_N(\text{AlAs})_M$ обладает симметрией D_{2ch} , которая включает точечное преобразование S_{4z} с центром, лежащим на атомарной плоскости посередине слоя АІАs (или GaAs). Для нижних минизон $e1\Gamma$ и $e1X$ четность состояний с $k_z = 0$ по отношению к этому преобразованию совпадает с четностью блоховских функций $|1\Gamma_1\rangle$ и $|X_1\rangle$. Это сразу следует из расчета в модели Кронига—Пенни для Γ - и X_z -электронов без учета ГХ-смешивания. При четном M центральная атомарная плоскость в слое АІАs заполнена атомами As, и, следовательно, при $k_z = 0$ состояния $e1\Gamma$, $e1X$ обладают одинаковой симметрией и могут смешиваться в идеальной СР в согласии с (13). При нечетном M центральная плоскость в слое АІАs заполнена атомами Al, поэтому симметрия состояний $e1\Gamma$, $e1X$ различается, и они могут смешиваться лишь при нарушении идеальности сверхструктуры $(\text{GaAs})_N(\text{AlAs})_M$. Аналогично проводится симметричный анализ для состояний $k_z = \pi/d$. Иной вид зависимости эффекта ГХ-смешивания от четности числа M получен в [8] при расчете в модели однозонных орбиталей Ванье. По-видимому, в [8] полагалось, что состояние X_1 в объемном материале инвариантно операции S_{4z} (Ga), а не операции S_{4z} (As) (см. также обсуждение в [9]).

В заключение обсудим возможную картину ГХ-смешивания для сверхрешетки ... $(\text{GaAs})_N(\text{Al}_{x_1}\text{Ga}_{1-x_1}\text{As})_1(\text{AlAs})_M(\text{Al}_{x_2}\text{Ga}_{1-x_2}\text{As})_1 \dots$, в которой слои $(\text{GaAs})_N$ и $(\text{AlAs})_M$ разделены монослоями со смешанным заполнением катионной плоскости.

При одинаковых составах x_1 и x_2 , например при $x_1 = x_2 = 0.5$, изложенные выше соображения симметрии также применимы, и вывод о наличии или отсутствии смешивания состояний $e1\Gamma$, $e1X$ с $k_z = 0$ или π/d для четных или нечетных M сохраняется. В связи с этим подчеркнем, что для сверхрешеток $(\text{GaAs})_N(\text{AlAs})_M$ и $(\text{GaAs})_{N-1}(\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As})_1(\text{AlAs})_{M-1}(\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As})_1$ эффект ГХ-смешивания должен коренным образом различаться, хотя период и средний состав у них совпадают.

При $x_1 \neq x_2$ симметрия СР понижается до C_{2v} . Так как преобразование S_{4z} не входит в точечную группу C_{2v} , то в этом случае ГХ-смешивание становится менее чувствительным к четности числа монослоев M . При описании электронных состояний в СР с нецелым x_1 или x_2 граничные условия для огибающих w , v , u требуют обобщения. Во-первых, становится возможным смешивание на границе не только функций w и v , но и функций w и u . Во-вторых, коэффициенты $t_{\Gamma X}^{(j)}$ в (5) становятся комплексными:

$$t_{\Gamma X}^{(1)} = t_{\Gamma X}^{(2)*} = t_{\Gamma X} e^{i\Phi(z_l)}.$$

При $x_1 = x_2$ разность $\Phi(z_n^+) - \Phi(z_n^-)$ на правой и левой границах n -го слоя V должна быть по-прежнему равна $M\pi/2$.

Мы благодарны А. Ю. Каминскому, В. П. Кочерешко, Ф. Лавалларду и Г. Е. Пикусу за полезные обсуждения данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] L. J. Sham, Y.-T. Lu. J. Lumin., **44**, 207 (1989).
- [2] Ю. И. Польшгалов, А. С. Поплавной. ФТП, **24**, 328 (1990).
- [3] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11619 (1989).
- [4] J. B. Xia. Phys. Rev. B, **41**, 3117 (1990).
- [5] E. L. Ivchenko, V. P. Kochereshko, P. S. Kop'ev, V. A. Kosobukin, I. N. Uraltsev, D. R. Yakovlev. Sol. St. Commun., **70**, 529 (1989).
- [6] M. A. Gell, D. Ninno, M. Jaroc, D. J. Wolford, T. F. Keuch, J. A. Bradley. Phys. Rev. B, **35**, 1196 (1987).
- [7] S.-H. Wei, A. Zunger. J. Appl. Phys., **63**, 5794 (1988).
- [8] D. Z.-Y. Ting, Y.-C. Chang. Phys. Rev. B, **36**, 4359 (1987).
- [9] Y.-T. Lu, L. J. Sham. Phys. Rev. B, **40**, 5567 (1989).

Редактор Л. В. Шаронова