1996 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 30, N 3

ДЫРОЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В УЛЬТРАТОНКИХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

© *А.Ю.Добин, И.Н.Яссиевич*

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе Российской академи наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 12 июля 1995 г. Принята к печати 17 июля 1995 г.)

Найдены дисперсионное уравнение и волновые функции дырочных подзон в ультратонких квантовых ямах и полупроводниках типа GaAs в приближении потенциала нулевого радиуса. Представлен расчет энергетического спектра для GaAs/GaAlAs-ультратонкой квантовой ямы в приближении потенциала нулевого радиуса, который сравнивается с расчетом традиционным методом огибающей функции. Хорошее согласие между двумя методами дистигается для квантовых ям с шириной менее 20 Å.

1. Введение

Ультратонкие квантовые ямы (из одного-двух монослоев) активно изучались в последнее время во многих экспериментальных работах [1–3]. Интерес к ним стимулируется не только возможностью создания гетероструктур для оптических и быстродействующих приборов, но и тем фактом, что в этом случае могут быть использованы материалы даже с большим несоответствием решетки.

Традиционный метод расчета электронных и дырочных состояний в полупроводниковых гетероструктурах [4], использующий сшивку на гетерогранице решений, найденных в яме и в барьере (приближение плавных огибающих функций), не может быть применен для ультратонких квантовых ям, поскольку их ширина L сравнима с постоянной решетки.

Хорошо известно [5], что одномерный прямоугольный потенциал имеет по крайней мере одно (симметричное) связанное состояние. Для потенциала с заданной высотой барьера U_0 (см. рис. 1) с уменьшением ширины ямы L можно достичь ситуации, при которой энергия размерного квантования нижнего связанного (основного) осостояния окажется близкой к нулю, т.е. это состояние будет слабо связано потенциалом ямы. Если длина локализации L_{loc} этого состояния велика по сравнению с размером потенциала L, то его волновая функция определяется существенным образом барьерным гамильтонианом. Поэтому мы

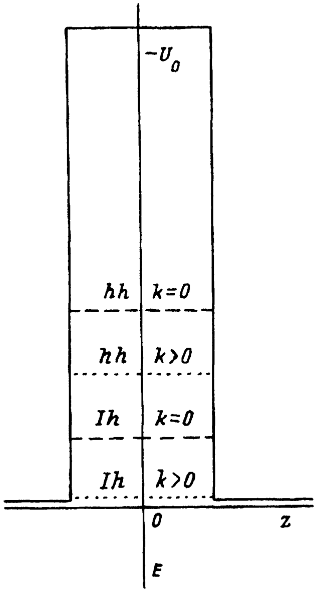

Рис. 1. Энергетическая схема дырочных уровней в ультратонкой квантовой яме. U_0 — разрыв зон на гетерогранице (т.е. высота барьера); линия, обозначенная hh, $k = 0$ соответствует $\epsilon_{hh} \equiv \varepsilon_{hh}(0)$; линия hh, $k > 0$ — $\varepsilon_{hh}(\mathbf{k})$; линия lh, $k = 0$ — $\epsilon_{lh} \equiv \varepsilon_{lh}(0)$; линия lh, $k > 0$ — $\varepsilon_{lh}(\mathbf{k})$.

можем составить волновую функцию этого состояния из отвечающих отрицательной энергии размерного квантования собственных функций свободного гамильтониана эффективной массы в барьере, а влияние квантовой ямы учесть только как граничное условие при $z = 0$.

Аналогичная ситуация в атомной физике рассматривалась в рамках приближения трехмерного потенциала нулевого радиуса [6,7]. Эта модель была впервые введена Бете и Пайерлсом в квантовой теории дейтрона [8]. В физике полупроводников приближение потенциала нулевого радиуса применялось для описания глубоких дефектов в контексте фотоионизации и многофононных процессов. В [9] было предложено использовать модель одномерного потенциала нулевого радиуса для рассмотрения электронных состояний в ультратонких квантовых ямах. Там были рассмотрены также состояния, локализованные на мелком доноре в ультратонкой квантовой яме. Однако при развитии методики для дырочных состояний была допущена ошибка при написании граничных условий, что привело к неправильному дисперсионному уравнению.

Настоящая работа посвящена рассмотрению дырочных состояний в ультратонких квантовых ямах в модели одномерного потенциала нулевого радиуса. В разд. 2 мы обсудим пределы применимости приближения потенциала нулевого радиуса для описания энергетического спектра дырок в ультратонких квантовых ямах. В разд. 3 — получим дисперсионное уравнение (для определения энергетического спектра) и волновые функции дырок в ультратонкой квантовой яме. В разд. 4 — представим пример расчета дырочных спектров для ультратонкой квантовой ямы на границе GaAs/GaAlAs в приближении потенциала нулевого радиуса. Чтобы продемонстрировать возможность метода потенциала нулевого радиуса мы сравним эти результаты с полученными традиционным методом огибающей функции. Хорошее согласие между этими двумя приближениями достигается для квантовых ям GaAs/GaAlAs с шириной менее 20 Å.

2. Пределы применимости приближения потенциала нулевого радиуса

Для простой параболической зоны (например, зоны проводимости в полупроводниках типа GaAs) можно легко получить спектр электронов, связанных ультратонкой квантовой ямой в форме

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_c + \varepsilon_c^{\mathrm{kin}}(\mathbf{k}), \tag{1}$$

где $\hbar\mathbf{k}$ — квазиимпульс в плоскости квантовой ямы, $\varepsilon_c^{\mathrm{kin}}(\mathbf{k}) \equiv \hbar^2 k^2/2m_c$ — кинетическая энергия электрона (m_c — объемная эффективная масса в барьере), $\epsilon_c \equiv -\hbar^2\kappa_c^2/2m_c$ — энергия размерного квантования, которая является феноменологическим параметром в концепции потенциала нулевого радиуса, волновой вектор κ_c связан с длиной локализации $L_{\mathrm{loc}} = 2\pi/\kappa_c$ [6].

Для вырожденной зоны (например, валентной зоны в полупроводниках типа GaAs) энергетический спектр становится более сложным благодаря перемешиванию подзон валентной зоны. Существует, однако, большая разница между параметрами, контролирующими перемешивание, в яме (η_w) и в барьере (η_b) для тонкой квантовой ямы:

$$\eta_w \sim \varepsilon_v^{\mathrm{kin}}/U_0, \quad \eta_b \sim \varepsilon_v^{\mathrm{kin}}/|\epsilon_v|, \tag{2}$$

где $\varepsilon_v^{\mathrm{kin}}$ — кинетическая энергия дырки, ϵ_v — энергия размерного квантования дырки. Для связанных дырок $\eta_b \lesssim 1$, а $\eta_w \ll 1$ в случае тонкой квантовой ямы, в которой $|\eta_v| \ll U_0$. Поэтому спектр дырок (при $\varepsilon_v^{\mathrm{kin}} \ll U_0$) в ультратонкой квантовой яме определяется только перемешиванием подзон валентной зоны в барьере, а влияние квантовой ямы может рассматриваться как граничное условие, не зависящее от латерального квазиимпульса.

Таким образом, кроме стандартного условия применимости приближения потенциала нулевого радиуса $L_{\mathrm{loc}} \ll L$, в случае вырожденной зоны необходимо еще $\varepsilon_v^{\mathrm{kin}} \ll U_0$. Однако если мы интересуемся связанными состояниями, то обычно $\varepsilon_v^{\mathrm{kin}} \lesssim |\epsilon_v|$, а условия $L_{\mathrm{loc}} \ll L$ и $\epsilon_v \ll U_0$ в большинстве случаев эквивалентны.

3. Дисперсионное уравнение и волновые функции дырок в ультратонкой квантовой яме

Уравнение Шредингера в ультратонкой квантовой яме для четырехкомпонентной дырочной волновой функции $\exp(i\mathbf{kr})\Psi(\mathbf{k},z)$ с фиксированным латеральным квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_v(\mathbf{k})$ можно записать в виде

$$\left[\hat{H}_0(\mathbf{k}) + \hat{V}\right]\Psi(\mathbf{k},z) = \varepsilon_v(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k},z). \tag{3}$$

Здесь $\hat{H}_0$ — стандартный матричный гамильтониан Латтинжера в барьере, квадратичный по $\mathbf{k}$, $\hat{k}_z \equiv -i\partial/\partial z$:

$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\begin{pmatrix} a_+ & b & c & 0 \\ b^* & a_- & 0 & c \\ c^* & 0 & a_- & -b \\ 0 & c^* & -b^* & a_+ \end{pmatrix}, \tag{4}$$

где

$$a_{\pm} = (\gamma_1 \pm \gamma_2)k^2 + (\gamma_1 \mp 2\gamma_2)\hat{k}_z^2,$$

$$b = -2\sqrt{3}(k_x - ik_y)\hat{k}_z\gamma_3,$$

$$b^* = -2\sqrt{3}(k_x + ik_y)\hat{k}_z\gamma_3,$$

$$c = -\sqrt{3}\left[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y\right],$$

$$c^* = -\sqrt{3}\left[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y\right];$$

γ_1, γ_2, γ_3 — параметры Латтинжера в барьере;

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\delta(z)\begin{pmatrix} \kappa_h(\gamma_1 - 2\gamma_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_l(\gamma_1 + 2\gamma_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_l(\gamma_1 + 2\gamma_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \kappa_h(\gamma_1 - 2\gamma_2) \end{pmatrix} \tag{5}$$

— потенциальная матрица ультратонкой квантовой ямы, κ_h и κ_l — два феноменологических параметра в нашей задаче, характеризующие свойства ямы (высоту барьера, эффективные массы в яме, напряжения решетки в яме) и свойства гетерограницы. Эти параметры связаны с энергиями размерного квантования тяжелых и легких дырок соотношениями $\epsilon_{hh} = -\hbar^2(\gamma_1 - 2\gamma_2)\kappa_h^2/2m_0$, $\epsilon_{lh} = -\hbar^2(\gamma_1 + 2\gamma_2)\kappa_l^2/2m_0$ и должны определяться из эксперимента.

Мы будем искать $\Psi(\mathbf{k}, z)$ в виде линейной комбинации

$$\Psi(\mathbf{k}, z) = \sum_{n=1}^{4} A_n(\mathbf{k})\chi_n(\mathbf{k}, z) \tag{6}$$

собственных функций $\chi_n(\mathbf{k}, z)$ свободного барьерного гамильтониана $\hat{H}_0(\mathbf{k})$, затухающего при $z \to \pm\infty$:

$$\chi_1(\mathbf{k}, z) = \exp(iq_h|z|)\begin{pmatrix} a_-^h \\ -b_h \mathrm{sign}(z) \\ -c^* \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2(\mathbf{k}, z) = \exp(iq_l|z|)\begin{pmatrix} a_-^l \\ -b_l \mathrm{sign}(z) \\ -c^* \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\chi_3(\mathbf{k}, z) = \exp(iq_h|z|)\begin{pmatrix} -c \\ 0 \\ a_-^h \\ -b_h \mathrm{sign}(z) \end{pmatrix}, \quad \chi_4(\mathbf{k}, z) = \exp(iq_l|z|)\begin{pmatrix} -c \\ 0 \\ a_+^l \\ -b_l \mathrm{sign}(z) \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Здесь

$$a_{\pm}^{h,l} = (\gamma_1 \pm \gamma_2)k^2 + (\gamma_1 \mp 2\gamma_2)q_{h,l}^2 - 2m_0\varepsilon_v(\mathbf{k})/\hbar^2,$$

$$b_{h,l} = -2\sqrt{3}(k_x + ik_y)q_{h,l}\gamma_3,$$

$q_{h,l}$ — два решения объемного дисперсионного уравнения ($\operatorname{Im} q_{h,l} > 0$):

$$\varepsilon^2 - 2\gamma_1\varepsilon(q^2+k^2) + (\gamma_1^2 - 4\gamma_2^2)(q^2+k^2)^2 - 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2k_y^2 + q^2k^2) = 0. \quad (8)$$

Выбранные таким образом $\chi_n(\mathbf{k}, z)$ являются симметричными по отношению к отражению в плоскости $z = 0$ (с учетом спина), поэтому $\Psi(\mathbf{k}, z)$ также будет симметричной. Чтобы получить второе крамерсово вырожденное (антисимметричное) состояние, необходимо применить к $\Psi(\mathbf{k}, z)$ операторы инверсии времени $\hat{K} = -i\hat{\sigma}_y\hat{K}_0$ (где $\hat{K}_0$ — оператор комплексного сопряжения) и инверсии пространства $\hat{J}$:

$$\Psi_A(\mathbf{k}, z) = \hat{J}\hat{K}\Psi(\mathbf{k}, z) \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi^*(\mathbf{k}, -z). \quad (9)$$

Волновая функция $\Psi(\mathbf{k}, z)$ должна удовлетворять граничным условиям при $z = 0$, которые можно получить интегрированием уравнения Шредингера (3) по z на малом отрезке $(-\delta, \delta)$, $\delta \to 0$, содержащем границу $z = 0$ (такой же способ получения граничных условий используется в традиционном методе огибающей функции). Эти граничные условия состоят в непрерывности при переходе через границу (в точке $z = 0$) векторов:

$$\Psi(\mathbf{k}, z); \quad \begin{pmatrix} A_h & B & 0 & 0 \\ B^* & A_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_l & -B \\ 0 & 0 & -B^* & A_h \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{k}, z), \quad (10)$$

где

$$A_h = -(\gamma_1 - 2\gamma_2)\left(\frac{\partial}{\partial z} + \kappa_h\right),$$

$$A_l = -(\gamma_1 - 2\gamma_2)\left(\frac{\partial}{\partial z} + \kappa_l\right),$$

$$B = i2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y),$$

$$B^* = i2\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y).$$

Применение граничных условий (10) к волновой функции (6) дает четыре линейных однородных уравнения для определения коэффициентов $\chi_n(\mathbf{k}, z)$. Условие разрешимости этой системы, состоящее в равенстве нулю ее определителя, приводит к дисперсионному уравнению

$$N_+N_- - |c|^2\kappa_h\kappa_l(q_l - q_h)^2 = 0, \quad (11)$$

где

$$N_+ = a_+^h(\kappa_l + iq_h)q_l - a_+^l(\kappa_l + iq_l)q_h,$$

$$N_- = a_-^h(\kappa_h + iq_l)q_l - a_-^l(\kappa_h + iq_l)q_h.$$

Соответствующая волновая функция может быть записана в виде

$$\Psi(\mathbf{k}, z) = \mathcal{N}(\mathbf{k}) \left\{ \exp(iq_h|z|) \begin{pmatrix} a_-^h - N_-/[\kappa_h(q_l - q_h)] \\ -b_h \mathrm{sign}(z) \\ -c^* + a_+^h N_-/[c\kappa_h(q_l - q_h)] \\ b_h N_-/[c\kappa_h(q_l - q_h)]\mathrm{sign}(z) \end{pmatrix} - \right.$$

$$\left. - \frac{q_h}{q_l} \exp(iq_l|z|) \begin{pmatrix} a_-^l - N_-/[\kappa_h(q_l - q_h)] \\ -b_l \mathrm{sign}(z) \\ -c^* + a_+^l N_-/[c\kappa_h(q_l - q_h)] \\ b_l N_-/[c\kappa_h(q_l - q_h)]\mathrm{sign}(z) \end{pmatrix} \right\},$$

где $\mathcal{N}(\mathbf{k})$ — нормировочная константа.

4. Результаты расчета и обсуждение

На рис. 2 представлен энергетический спектр дырок в квантовой яме $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ шириной 15 Å, рассчитанный с помощью метода потенциала нулевого радиуса и традиционного метода огибающей

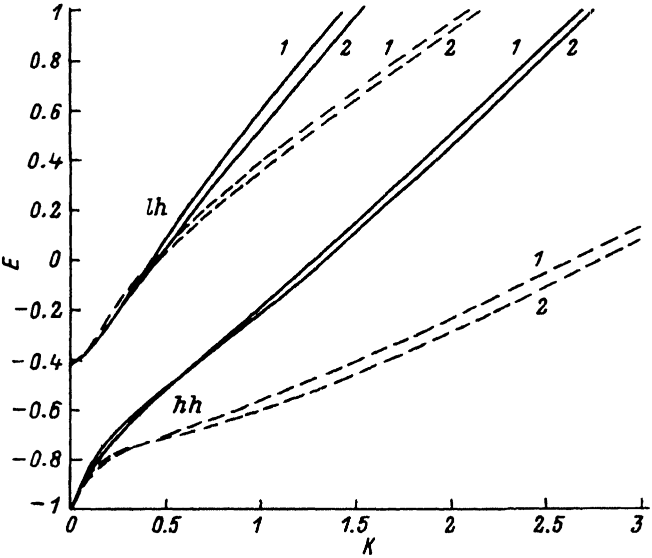

Рис. 2. Энергетический спектр ($E \equiv \varepsilon(\mathbf{k})/|\epsilon_{hh}|$, $K \equiv (k/\kappa_h)^2$) состояний тяжелой (hh) и легкой (lh) дырок в квантовой яме $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ шириной 15 Å для двух направлений латерального квазиимпульса $\mathbf{k}$ (направление [100] — сплошные линии, [110] — штриховые линии), *1* — приближение огибающей функции, *2* — приближение потенциала нулевого радиуса.

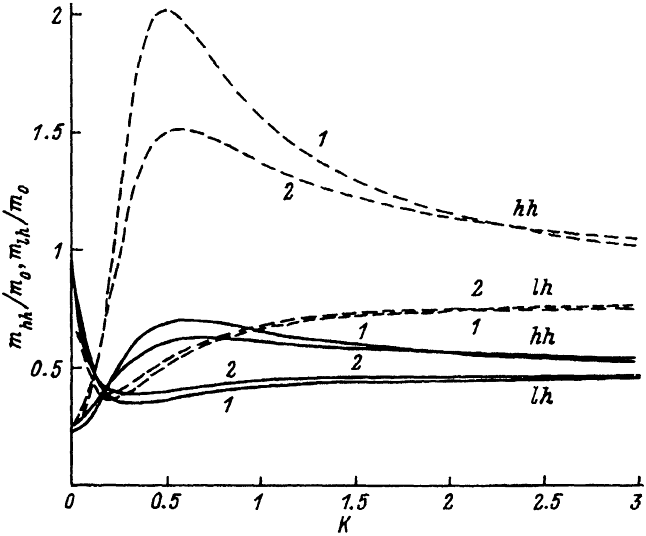

Рис. 3. Эффективная латеральная масса дырок, связанных в квантовой яме $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ шириной 15 Å. Обозначения те же, что и на рис. 2.

функции. Феноменологические параметры κ_h, κ_l для расчета с потенциалом нулевого радиуса взяты из расчета с огибающей функцией (в котором они могут быть определены через параметры ямы U_0, L и массы дырок в яме). Для метода огибающей функции мы использовали стандартные граничные условия [2], параметры Латтинжера: $\gamma_1 = 6.85(5.83)$, $\gamma_2 = 2.90(2.42)$ для GaAs ($Ga_{0.7}Al_{0.3}As$), $U_0 = 0.143$ эВ. Мы видим, что имеется хорошее согласие между методами потенциала нулевого радиуса и огибающей функции во всем диапазоне интересующих нас энергий дырки $[\varepsilon_v(\mathbf{k}) < 0]$ для всех направлений латерального квазиимпульса для подзон легкой и тяжелой дырки.

На рис. 3 представлена зависимость от латерального квазиимпульса эффективной латеральной массы дырок

$$m_v^{-1}(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{|\mathbf{k}|}\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}{\partial|\mathbf{k}|}. \tag{12}$$

Для $|\mathbf{k}| \to 0$ можно в методе потенциала нулевого радиуса рассчитать эту массу:

$$m_{hh}(0) = \left[\frac{3}{2}(1+\gamma)(\gamma_1 - 2\gamma_2)\left(\sqrt{\frac{(\gamma_1+2\gamma_2)}{(\gamma_1-2\gamma_2)}} - 1\right) + \gamma_1 - \gamma_2(2+3\gamma)\right]^{-1},$$

$$m_{lh}(0) = \left[-\frac{3}{2}(1+\gamma)(\gamma_1 + 2\gamma_2)\left(1 - \sqrt{\frac{(\gamma_1-2\gamma_2)}{(\gamma_1+2\gamma_2)}}\right) + \gamma_1 + \gamma_2(2+3\gamma)\right]^{-1}.$$

Здесь $\gamma = \gamma_3^2/\gamma_2^2 - 1$. Заметим, что в рамках приближения поетнциала нулевого радиуса эффективная латеральная масса при $|\mathbf{k}| \to 0$ зависит только от парамет])в Латтинжера в барьере, и для $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ имеем $m_{hh}(0)/m_0 = 0.24$, $m_{lh}(0)/m_0 = 1.17$.

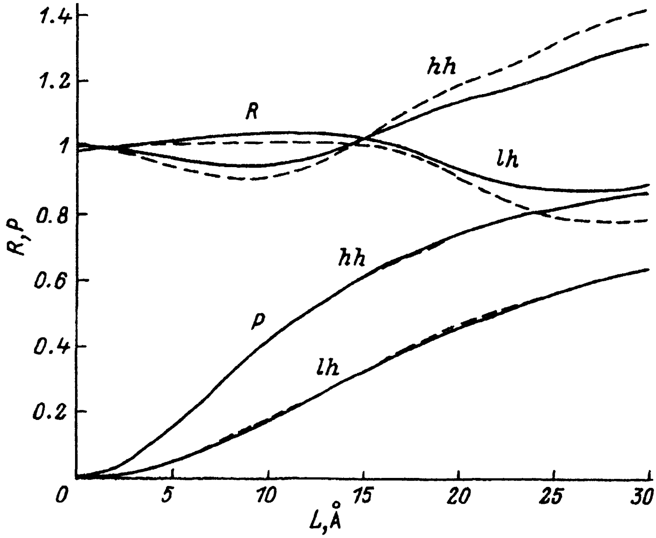

Рис. 4. Отношение R эффективных латеральных масс при $K = 3$ (см. рис. 2, 3), рассчитанных в приближении огибающей функции и в приближении потенциала нулевого радиуса (верхнее семейство кривых). Вероятность P найти дырку внутри квантовой ямы в зависимости от ее ширины (нижнее семейство кривых).

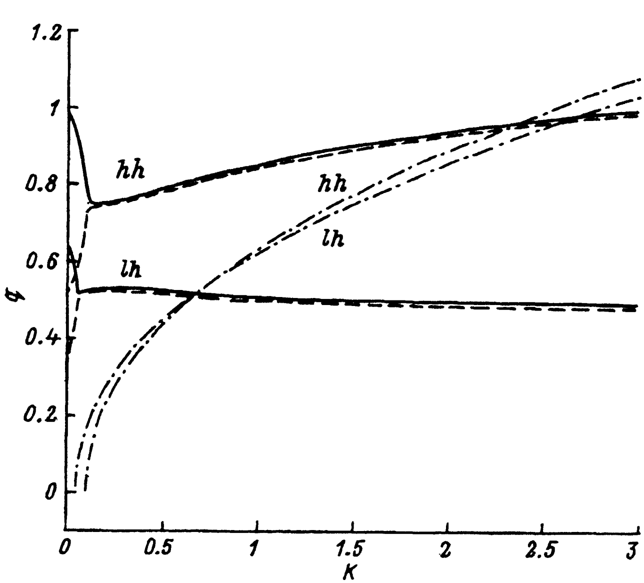

Рис. 5. Зависимость волновых векторов q_h (сплошные линии) и q_l (штриховые линии) от $|\mathbf{k}|$ при $\mathbf{k} \parallel [100]$ для подзон тяжелой (hh) и легкой (lh) дырок в ультратонкой квантовой яме $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ с $\epsilon_l/\epsilon_h = 0.42$.

На рис. 4 представлена ошибка расчета в приближении потенциала нулевого радиуса по отношению к расчету методом огибающей функции в зависимости от ширины ямы для $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. В качестве величины ошибки выбрано отношение эффективной латеральной массы в двух методах расчета при максимальной интересующей нас энергии. Мы видим, что ошибка достаточно мала для ям с шириной менее 20 Å, хотя (см. рис. 4) уже для квантовых ям с шириной более 10 Å вероятность P найти дырку в яме больше, чем в барьере.

Отметим интересную особенность в поведении волновой функции дырки с ростом k, которая может играть существенную роль в задачах туннелирования (см. рис. 5). При малых k имеем для волновых векторов q_h, q_l дырочного состояния

$$\operatorname{Im} q_h > \operatorname{Im} q_l > 0, \tag{13}$$

что соответствует меньшему затуханию легкодырочной компоненты волновой функции,

$$\operatorname{Re} q_h = \operatorname{Re} q_l = 0. \tag{14}$$

С увеличением k $\operatorname{Im} q_h$ уменьшается, а $\operatorname{Im} q_l$ увеличивается, и при некотором k возникает ситуация

$$\operatorname{Im} q_h = \operatorname{Im} q_l > 0, \quad \operatorname{Re} q_h = \operatorname{Re} q_l = 0. \tag{15}$$

При дальнейшем увеличении k сохраняется равенство

$$\operatorname{Im} q_h = \operatorname{Im} q_l, \tag{16}$$

однако

$$\operatorname{Re} q_h = -\operatorname{Re} q_l \neq 0, \tag{17}$$

т.е. волновая функция дырки в барьере затухает и осциллирует.

5. Заключение

Мы ввели приближение потенциала нулевого радиуса для описания энергетического спектра и волновых функций связанных дырочных состояний в ультратонких квантовых ямах. Расчеты в модели потенциала нулевого радиуса и в методе огибающей функции сравнивались на примере квантовых ям GaAs/GaAlAs, и хорошее согласие между ними было обнаружено для тонких ям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 94-02-04415а.

Список литературы

[1] M. Ilg, K.H. Ploog. Appl. Phys. Lett., **62**, 997 (1993).
[2] J. Melendez, A. Mazuelas, P.S. Dominguez, M. Carriga, M.I. Alenso, G. Armelles, L. Tapfer, F. Briones. Appl. Phys. Lett., **62**, 1000 (1993).
[3] W. Siefert, D. Hessman, X. Liu, L. Samuelsen. J. Appl. Phys., **75**, 1501 (1994).
[4] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures.* (Paris, Les Ulis: Ed. de Physiques, 1988) p. 15.
[5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989) с. 87.
[6] Ю.Н. Демков, В.И. Островский. *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике* (Л., Изд-во ЛГУ, 1975) с. 240.
[7] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. *Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М., Наука, 1971) с. 54.
[8] H.A. Bethe, R.E. Peierls. Proc. Roy. Soc. A, **148**, 146 (1935).
[9] I. Yassievich, U. Rössler. J. Phys. C, **6**, 7927 (1994).

Редактор Т.А. Полянская

Hole states in ultrathin quantum wells

A. Yu. Dobin, I. N. Yassievich

A.F.Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,
194021 St.Petersburg, Russian

The dispersion equation and wave functions of holes in ultrathin quantum wells in GaAs-like semiconductors have been found in the framework of zero-size potential. The calculation of energy spectrum for GaAs/GaAlAs ultrathin quantum wells in zero-size potential approach is presented. The results are compared with that obtained within traditional envelope function approach. We have found that there is a good agreement between these two approaches for quantum wells with the width less than 20 Å.