ТЯЖЕЛЫЕ ДЫРКИ И ПРОБЛЕМА ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ В МОДЕЛИ КЕЙНА

© *М.В.Кисин*

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук
410019 Саратов, Россия
(Получена 3 апреля 1995 г. Принята к печати 14 ноября 1995 г.)

Для волновой функции полной модели Кейна получены граничные условия, справедливые во всем диапазоне энергий, включая валентную зону. Найденные полные граничные условия бездисперсны, т.е. параметры граничных условий не зависят явно от энергии рассматриваемого состояния. Показано, что граничные условия для производных с необходимостью являются смешанными $\psi'_A = \hat{G}\psi'_B + \hat{R}\psi'_B$. Элементы матрицы $\hat{R}$ определяются градиентом нецентросимметричного кристаллического потенциала гетерограницы. Найдены бездисперсные частичные граничные условия для предельных случаев, соответствующих модели Латтинжера в трехзонной модели Кейна.

1. Введение

В широком классе гетероструктур корректное описание физических процесов возможно на основе многозонной феноменологической модели Кейна [1]. Уравнение Шредингера с кейновским гамильтонианом на гетерогранице следует дополнить соответствующими феноменологическими граничными условиями (ГУ). В используемых обычно ГУ микроструктура границы как правило не отражается, между тем именно свойства границы раздела могут оказаться решающими при формировании спектра двумерных систем [2]. В работах [3,4] была проанализирована простейшая кейновская модель, учитывающая kp-взаимодействие лишь ближайших зон. Зона тяжелых дырок при этом считалась плоской (бездисперсной), поэтому полученные ГУ применимы в основном для описания состояний зоны проводимости. Цель настоящей работы состоит в нахождении корректных ГУ для всего диапазона состояний, описываемых моделью Кейна, с учетом вклада удаленных зон в формирование спектра квазичастиц.

Интересно отметить, что результатом анализа более сложной модели явится существенное упрощение ГУ. В частности, параметры сшивки полной волновой функции $\psi = \psi_l + \psi_h$, содержащей как «легкую», так и «тяжелую» составляющие, оказываются не зависящими явно от энергии состояния ψ, т, е. полные ГУ являются бездисперсными. Наоборот, частичные ГУ, полученные в [4] для волновой функции «легкого» состояния ψ_l, характеризуются существенной дисперсией, что в какой то степени противоречит интуитивным представлениям о микроскопическом механизме формирования параметров ГУ [3]. Последнее, однако, становится понятным, если учесть, что выделение «легкой» составляющей возможно лишь при локализации «тяжелых» состояний на гетерогранице. Тем самым связанная с ними дисперсия переносится в частичные ГУ.

Учет дисперсии тяжелых дырок требует введения в гамильтониан модели Кейна членов, квадратичных по оператору импульса. ГУ модели второго порядка в общем случае должны иметь вид

$$\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi'_A \end{pmatrix}_{z=-0} = \hat{T}_{AB} \begin{pmatrix} \psi_B \\ \psi'_B \end{pmatrix}_{z=+0}, \qquad \hat{T}_{AB} = \begin{pmatrix} \hat{\Gamma} & \hat{S} \\ \hat{R} & \hat{G} \end{pmatrix}, \qquad \psi' = \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad (1)$$

где направление оси z выбрано вдоль нормали к гетерогранице между полупроводниками A и B. Кажущееся усложнение полных ГУ (1) по сравнению с частичными ГУ модели 1 порядка [4] $\psi_A^{(l)} = \hat{\Gamma}_{AB}^{(l)} \psi_B^{(l)}$ компенсируется значительным упрощением внутренней структуры субматриц ГУ, особенно в случае, когда симметрия базисных орбиталей не испытывает на гетерогранице существенных искажений. Далее будет показано, что в этом случае все субматрицы диагональны, а смешивание компонент ψ_l, осуществляемое в [4] недиагональными элементами матрицы $\hat{\Gamma}^{(l)}$, теперь обеспечивается элементами субматрицы $\hat{R}$, формируемой градиентом нецентросиметричной части потенциала гетерограницы.

2. Бесспиновая модель Кейна

Для наглядности изложения начнем наш анализ с бесспиновой кейновской модели, описывающей сферически симметричный спектр квазичастиц. Волновая функция носителя заряда ψ имеет скалярную U и векторную $\mathbf{V}$ части, т. е. представима четырехкомпонентным столбцом огибающих

$$\psi = \begin{pmatrix} U \\ \mathbf{V} \end{pmatrix}, \qquad \left\{ S, \quad Z, \quad \frac{X+iY}{\sqrt{2}}, \quad \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \right\}. \quad (2)$$

Векторные величины, формирующие векторную часть волновой функции квазичастицы, будут далее рассматриваться как трехкомпонентные столбцы, при этом конкретный вид компонент столбца зависит от выбора векторной части базиса. В (2) приведен канонический базис блоховских амплитуд, в котором матрица ГУ должна иметь наиболее простой вид [3]. В качестве базиса векторного подпространства здесь взяты собственные функции оператора J_z углового момента единица, реализующие различные одномерные представления группы вращений вокруг оси гетероструктуры z. Трансформационные свойства этих функций в группе вращений различны, поэтому на гетерогранице оказывается возможным смешивание лишь первой и второй (U и V_z)

компонент ψ, преобразующихся по эквивалентным одномерным представлениям [3]. Таким образом, все блоки ГУ (1) должны иметь одинаковую матричную структуру следующего вида:

$$\hat{\Gamma} = \begin{vmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_{12} & & \\ \Gamma_{21} & \Gamma_2 & & \\ & & \Gamma_3 & \\ & & & \Gamma_4 \end{vmatrix}, \qquad \hat{G} = \begin{vmatrix} G_1 & G_{12} & & \\ G_{21} & G_2 & & \\ & & G_3 & \\ & & & G_4 \end{vmatrix} \tag{3}$$

и т. д.

Гамильтониан полной модели должен учитывать члены 2 порядка по оператору импульса $\mathbf{p} = -i\nabla$. В наиболее общей форме он имеет вид

$$\hat{H} = E_g\hat{B}_1 + P(\mathbf{p}\hat{\mathbf{A}}) + \gamma_1 p^2\hat{B}_1 - \gamma_3 p^2\hat{B}_3 - \gamma_2(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}})^2\hat{B}_3. \tag{4}$$

Отмеченные значками ($\hat{}$) величины представляются в выбранном базисе квадратными матрицами. Так, $\hat{B}_1$ и $\hat{B}_3$ — диагональные единичные матрицы скалярного и векторного подпространств, указывающие на внутризонный характер соответствующего оператора, а $\hat{\mathbf{A}}$ — матричная структура межзонного kp-взаимодействия, определяющего кейновскую скорость P. Квадратичные поправки в спектр учтены по методу Латтинжера [5], причем последний член, содержащий матрицы $\hat{\mathbf{J}}$ момента единица, вносит вклад только в дисперсию тяжелых дырок. Классификацию собственных функций модели (4) на легкие и тяжелые состояния можно провести, исходя из следующих соображений. В сферическом приближении в объеме полупроводника выделенным направлением является только направление импульса $\mathbf{k}$ свободной квазичастицы. При поворотах системы координат вокруг этого направления компоненты волновой функции должны трансформироваться одинаковым образом, в частности должны набирать одинаковую фазу. Если волновая функция представляет собой kp-смесь скалярной U и векторной $\mathbf{V}$ частей, то векторная компонента при таких поворотах должна вести себя как скаляр, т.е. должно быть $\mathbf{V}_l \parallel \mathbf{k}$. Частицы с такой матричной структурой волновой функции будем называть легкими независимо от их эффективной массы. Ясно, что в модели (4) кроме легких должны существовать еще два тяжелых решения с $U = 0$, векторные части которых ортогональны $\mathbf{k}$ и друг другу. Поскольку матрицы $\hat{\mathbf{J}}$ момента единица управляют структурой векторного произведения $(\mathbf{k}\hat{\mathbf{J}})\mathbf{V} \equiv i[\mathbf{k}\times\mathbf{V}]$, для произвольного вектора-столбца $\mathbf{V}$ имеет место

$$(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}})^2\mathbf{V} = -\Big[\mathbf{n}\times[\mathbf{n}\times\mathbf{V}]\Big] = \mathbf{V} - \mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{V}) = \mathbf{V}_h \perp \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{V}_h \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Таким образом, оператор $\hat{\Lambda}_h = (\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}})^2\hat{B}_3$ можно считать проекционным оператором на двумерное ($\mathrm{Sp}\hat{\Lambda}_h = 2$) пространство состояний тяжелых дырок. Легко понять, что приведенная классификация решений на легкие и тяжелые фактически соответствует их разделению по абсолютной величине «спиральности» $(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}})$. Оператор $\hat{\mathbf{J}}$ при этом играет в модели (4) роль спина (квазиспин), компенсируя коммутатор гамильтониана с оператором углового момента $\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}](\hat{B}_1 + \hat{B}_3)$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}] = -[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = iP[\hat{\mathbf{A}} \times \mathbf{p}]. \tag{6}$$

Тем самым обеспечивается сохранение полного момента квазичастицы $\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{J}}$. Квазиспин $\hat{\mathbf{J}}$ носителя заряда связан в данном случае с орбитальным микроскопическим движением электрона. Вырожденные тяжелые состояния с различной квазиспиральностью $\mu = \pm 1$ могут быть разделены с помощью проекционного оператора

$$\hat{\Lambda}_{h\mu} = \frac{1}{2}(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}} + \mu)\hat{\Lambda}_h. \tag{7}$$

Закон дисперсии тяжелых состояний при этом параболичен

$$E_h = \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}(\hat{\Lambda}_h \hat{H}) = -(\gamma_2 + \gamma_3)\,k^2. \tag{8}$$

Для легких частиц из уравнения Шредингера с гамильтонианом (4) следует дисперсионное уравнение

$$E_g - E + \gamma_1 k^2 + \frac{P^2 k^2}{\tilde{E}} = 0; \qquad \tilde{E} = E + \gamma_3 k^2, \tag{9}$$

которое при каждом значении энергии E дает два «легких» решения с одинаковой матричной структурой

$$\psi_l = \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ P\mathbf{k} \end{pmatrix} U_l, \qquad k_1^2 \sim \frac{(E - E_g)E}{P^2}, \quad k_2^2 \sim -\frac{P^2}{\gamma_1\gamma_3}. \tag{10}$$

При малых γ_1 и γ_3 одно из этих решений (ψ_{l2}) должно быть сильно локализовано.

Существование в модели четырех независимых решений принципиально важно для анализа ГУ, поскольку позволяет считать все четыре компоненты полной волновой функции независимыми и тем самым освобождает ГУ от необходимости поддерживать кейновскую матричную структуру сшиваемых функций. Именно последнее требование навязывало элементам матрицы $\hat{\Gamma}^{(l)}_{AB}$ в [4] значительную дисперсию. В рассматриваемом случае, то есть при анализе полной модели 2 порядка, единственным требованием к ГУ остается непрерывность потока волновой функции через границу. Оператор потока в модели (4) имеет вид

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{p}} = P\hat{\mathbf{A}} + 2\mathbf{p}(\gamma_1 \hat{B}_1 - \gamma_3 \hat{B}_3) - \gamma_2\Big(\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}}) + (\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}})\hat{\mathbf{J}}\Big)\hat{B}_3. \tag{11}$$

В каноническом базисе (2) получим

$$\hat{j}_z = \begin{vmatrix} 2\gamma_1 p_z & P & & \\ P & -2\gamma_3 p_z & -\gamma_2 p_+ & -\gamma_2 p_- \\ & -\gamma_2 p_- & -2(\gamma_2+\gamma_3)p_z & \\ & -\gamma_2 p_+ & & -2(\gamma_2+\gamma_3)p_z \end{vmatrix}; \quad p_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x \pm i p_y), \tag{12}$$

где использовано следующее представление матриц J в пространстве $\hat{B}_3$:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} & -1 & 1 \\ -1 & & \\ 1 & & \end{vmatrix}, \qquad \hat{J}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} & -1 & -1 \\ 1 & & \\ 1 & & \end{vmatrix}, \qquad \hat{J}_z = \begin{vmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \end{vmatrix}.$$

Среднее значение z-компоненты потока должно быть непрерывно

$$\langle j_z \rangle_A = \Big[P(\psi_1^+ \psi_2 + \text{э.с.}) - \gamma_2(\psi_2^+ p_+ \psi_3 + \text{э.с.}) - \gamma_2(\psi_2^+ p_- \psi_4 + \text{э.с.}) -$$

$$-i\gamma_1(\psi_1^+ \psi_1' - \text{э.с.}) + i\gamma_3(\psi_2^+ \psi_2' - \text{э.с.}) + i(\gamma_2+\gamma_3)(\psi_3^+ \psi_3' + \psi_4^+ \psi_4' - \text{э.с.}) \Big]_A = \langle j_z \rangle_B. \tag{13}$$

Компоненты столбца ψ_B в полной модели Кейна независимы, поэтому, подставляя (1) и (3) в (13) и приравнивая коэффициенты при независимых комбинациях компонент ψ_B, находим канонические связи между ненулевыми матричными элементами ГУ

$$\Gamma_1 \Gamma_2 = \frac{P_B}{P_A}, \qquad \Gamma_2 \Gamma_4 = \frac{\gamma_{2B}}{\gamma_{2A}}, \qquad \Gamma_3 = \Gamma_4, \qquad G_3 = G_4\ ;$$

$$\Gamma_1 G_1 = \frac{\gamma_{1B}}{\gamma_{1A}}, \qquad \Gamma_2 G_2 = \frac{\gamma_{3B}}{\gamma_{3A}}, \qquad \Gamma_4 G_4 = \frac{(\gamma_2+\gamma_3)_B}{(\gamma_2+\gamma_3)_A}. \tag{14}$$

Все элементы субматрицы $\hat{S}$, а также все недиагональные элементы блоков $\hat{\Gamma}$, $\hat{G}$ и $\hat{R}$ в процессе такого анализа обращаются в нуль. Диагональные элементы $\hat{R}$ не принимают участия в формировании потока (13), поэтому для их определения необходимо воспользоваться соотношением взаимности ГУ

$$\hat{T}_{AB} \hat{T}_{BA} = 1. \tag{15}$$

Элементы матрицы $\hat{T}_{BA}(\tilde{\Gamma}_i, \tilde{G}_i$ и $\tilde{R}_i)$ связаны соотношениями, аналогичными (14), в чем нетрудно убедиться, применяя приведенный выше анализ к независимым компонентам столбца ψ_A. В результате из (15) получим

$$\Gamma_i \tilde{\Gamma}_i = 1, \qquad G_i \tilde{G}_i = 1, \qquad R_i \tilde{\Gamma}_i + G_i \tilde{R}_i = 0, \tag{16}$$

откуда следует общий вид диагональных элементов субматрицы $\hat{R}$

$$R_i = (\Gamma_i G_i)^{1/2} \chi_{AB}, \qquad \chi_{AB} = -\chi_{BA}. \tag{17}$$

Итак, в модели (4) гетерограница описывается граничными условиями (14), (17) с двумя независимыми феноменологическими параметрами, один из которых, например Γ_1, определяется условиями сшивки базисных волновых функций, а второй параметр - χ имеет размерность волнового вектора и аналогично введенному в [4] параметру межзонного смешивания Δ_{AB} , меняет знак при обращении гетероструктуры

($AB \to BA$), т.е. при изменении знака градиента кристаллического потенциала на гетерогранице.

Отметим, что полученными полными ГУ можно пользоваться только при учете всех членов 2 порядка, указанных в гамильтониане (4), и, соответственно, при наличии двух легких решений ψ_{l1} и ψ_{l2}. Произвольное отбрасывание какой-либо составляющей делает полную систему ГУ (1) переопределенной. Между тем в случае, когда эффективная масса электронов и легких дырок формируется в основном kp-взаимодействием ближайших зон, решение ψ_{l2} (10) может оказаться сильно затухающим даже по сравнению с решениями ψ_h. Явное рассмотрение сильно затухающих состояний находится за рамками kp-приближения и их следует исключить, выделяя частичные ГУ только для плавных решений. В пределе $\gamma_1, \gamma_3 \ll P^2/E_g$ несложный анализ условий сшивки производных показывает, что $U_{l2} \sim (k_1/k_2)U_{l1}$, поэтому нефизические амплитуды U_{l2} в базисе (2) исчезают из следующих ГУ:

$$\psi_A = \hat{\Gamma}\psi_B, \qquad \begin{pmatrix} \psi_3' \\ \psi_4' \end{pmatrix}_A = G_4 \begin{pmatrix} \psi_3' \\ \psi_4' \end{pmatrix}_B + R_4 \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}_B . \tag{18}$$

Здесь $\psi = \psi_{l1} + \psi_{h1} + \psi_{h2}$ содержит только плавные составляющие. В пределе $\gamma_1, \gamma_3 \ll P^2/E_g$ система частичных ГУ (18) является полной и корректной в рамках метода эффективной массы.

3. Модель Кейна со спином

При введении в модель оператора спина $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\sigma$ методика анализа ГУ в принципе не изменяется, поэтому далее мы ограничимся только описанием модели Кейна со спином и изложением результатов. Гамильтониан 1 порядка по оператору импульса $\mathbf{p}$ приведен в работе [4]. Напишем полный гамильтониан модели 2 порядка, считая по-прежнему спектр квазичастиц в объеме изотропным и сохраняя отсчет энергии от потолка валентной зоны, т. е. от энергии верхнего спин-отщепленного базисного V-состояния:

$$\hat{H} = E_g\hat{B}_1' + \frac{\Delta}{3}\left(2\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{J}} - 1\right)\hat{B}_3' + P\left(\mathbf{p}\hat{\mathbf{A}}\right) + \gamma_1 p^2\hat{B}_1' -$$
$$- \gamma_3 p^2\hat{B}_3' - \frac{1}{2}\gamma_2\left(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}}\right)\left(\mathbf{p}\left(\hat{\mathbf{J}} + 2\hat{\mathbf{s}}\right)\right)\hat{B}_3'. \tag{19}$$

Общая структура членов гамильтониана аналогична (4), но размерность скалярного и векторного подпространств теперь удвоена за счет спиновых базисных состояний $\{\alpha, \beta\}$, то есть матрицы B_1 и B_3 домножаются в таком базисе на единичную матрицу 2×2 спинового пространства B_2: $\hat{B}_{1,3}' = B_{1,3} \otimes B_2$. Матричный инвариант $\left(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}}\right)^2$ уже не имеет права на независимое присутствие в гамильтониане, поскольку трехкратное вырождение базисных функций векторного подпространства снято спин-орбитальным взаимодействием (второй член гамильтониана). Тем не менее, полный момент квазичастицы должен сохраняться. Отсюда, аналогично (6), следует существование матрицы квазиспина

$$\hat{\mathbf{\Sigma}} = \hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{J}}, \qquad \left[\hat{H}, \hat{\mathbf{\Sigma}} + \hat{\mathbf{L}}\right] = 0. \tag{20}$$

Из сохранения импульса и полного момента следует также, что квазиспиральность тоже является хорошим квантовым числом. Поэтому в гамильтониане законно появление скалярного инварианта $(\mathbf{p}\hat{\Sigma})^2$. В (19) использована структура

$$\hat{\Lambda}_h = \frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{n}\hat{\Sigma}\right)^2 - \frac{1}{4}\right] = \frac{1}{2}\left(\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}\right)\left(\mathbf{n}\left(\hat{\mathbf{J}} + 2\hat{\mathbf{s}}\right)\right)\hat{B}_3', \tag{21}$$

которая аналогично послнему члену (4) дает вклад только в дисперсию тяжелых дырок, имеющих теперь квазиспиральность 3/2. Вклад состояний с квазиспиральностью 1/2 этим оператором зануляется, так что его можно считать проекционным оператором [6], выделяющим из произвольного вектора-столбца $\mathbf{V}$ волновую функцию тяжелой дырки

$$\psi_h = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{V}_h \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V}_h = \hat{\Lambda}_h \mathbf{V} \sim \mathbf{V} - \mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{V}) + 2i(\mathbf{n}\mathbf{s})[\mathbf{n}\times\mathbf{V}]. \tag{22}$$

Двукратное вырождение состояния ψ_h по знаку квазиспиральности при этом сохраняется. Соответствующий проекционный оператор для невырожденных состояний может быть построен аналогично (7).

Во избежание путаницы отметим. что матрицы $\hat{\mathbf{s}}$ и $\hat{\mathbf{J}}$ имеют тривиальную матричную структуру только в базисе прямого произведения $\{S, X, Y, Z\} \otimes \{\alpha, \beta\}$. В этом базисе матрицы $\hat{s}_i$ диагональны по матричным индексам орбитального базиса и имеют вид матриц Паули σ_i в спиновом базисе, тогда как матричные элементы матриц $\hat{J}_i$ отличны от нуля только в векторном подпространстве $\{X, Y, Z\}$ и диагональны по спиновым индексам :

$$\hat{s}_i = (B_1 + B_3) \otimes \frac{1}{2}\sigma_i; \qquad \hat{J}_x = \begin{vmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & -i \\ & & i & \end{vmatrix} \otimes B_2;$$

$$\hat{J}_y = \begin{vmatrix} & & & \\ & & & i \\ & & & \\ & -i & & \end{vmatrix} \otimes B_2; \qquad \hat{J}_z = \begin{vmatrix} & & & \\ & & -i & \\ & i & & \\ & & & \end{vmatrix} \otimes B_2.$$

При смене базиса матрицы $\hat{s}_i$ и $\hat{J}_i$ должны трансформироваться соответствующим унитарным преобразованием. Это же касается конкретного представления всех векторных величин-столбцов модели, использующихся при записи векторной части волновой функции квазичастиц. Напомним также о необходимости различать матричную структуру операторов s_i и $\hat{s}_i$ (матрицы 2×2 и 8×8 соответственно).

Теперь рассмотрим легкие состояния. Поскольку при наличии спина в модели Кейна существует два векторных эрмитовых оператора с транформационными свойствами полярного вектора, а именно $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q} = \mathbf{s}\times\mathbf{p}$, то векторную часть волновой функции ψ_l следует искать в виде линейной комбинации[1]

$$\psi_l = \begin{pmatrix} U_l \\ \mathbf{V}_l \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{V}_l = P(a\mathbf{p} + ib\mathbf{q})U_l, \qquad \mathbf{q} \equiv -i(\mathbf{s}\hat{\mathbf{J}})\mathbf{p},$$

$$\hat{\Lambda}_h \mathbf{p} U_l = \hat{\Lambda}_h \mathbf{q} U_l = \hat{\Lambda}_h \mathbf{V}_l = 0. \tag{23}$$

Подставляя (23) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (19), находим вид коэффициентов $a(E)$ и $b(E)$ для волновых функций свободных квазичастиц

$$a = \frac{\tilde{E} + \frac{2}{3}\Delta}{\tilde{E}(\tilde{E} + \Delta)}, \qquad b = \frac{\frac{2}{3}\Delta}{\tilde{E}(\tilde{E} + \Delta)}, \qquad \tilde{E} = E + \gamma_3 k^2, \tag{24}$$

а также получаем дисперсионное уравнение для соответствующих «легких» зон

$$\left(E_g + \gamma_1 k^2 - E\right) + P^2 k^2 \frac{\tilde{E} + \frac{2}{3}\Delta}{\tilde{E}(\tilde{E} + \Delta)} = 0. \tag{25}$$

Из (25) следует существование при данной энергии E трех легких решений, каждое из которых, аналогично ψ_h , двукратно вырождено по спиральности. Таким образом, все четыре спинорные компоненты, формирующие матричную структуру полной волновой функции $\psi = \psi_{l1} + \psi_{l2} + \psi_{l3} + \psi_h$, можно считать независимыми.

Дальнейшие рассуждения проводятся по аналогии с предыдущим разделом. Оператор потока в модели (19) имеет вид

$$\hat{\mathbf{j}} = P\hat{\mathbf{A}} + 2\mathbf{p}\left(\gamma_1 \hat{B}_1 - \gamma_3 \hat{B}_3\right) - \frac{\gamma_2}{2}\left[\hat{\mathbf{J}}\left(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}}\right) + \hat{\mathbf{s}}\left(\mathbf{p}\hat{\mathbf{J}}\right) + \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{s}}) + \text{э.с.}\right]. \tag{26}$$

Для z-компоненты потока в каноническом базисе получим ($\pi_z = \frac{1}{2}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)$):

$$\hat{j}_z = \begin{vmatrix} 2\gamma_1 p_z & P & & \\ P & -2\gamma_3 p_z & & -\sqrt{2}\gamma_2 \sigma_y \pi_z \\ & & -2\gamma_3 p_z & \gamma_2 \sigma_y \pi_z \\ & -\sqrt{2}\gamma_2 \pi_z \sigma_y & \gamma_2 \pi_z \sigma_y & -2(\gamma_2 + \gamma_3) p_z \end{vmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} S\alpha & S\beta \\ Z\alpha & Z\beta \\ \frac{X+iY}{\sqrt{2}}\beta & -\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\alpha \\ \frac{X+iY}{\sqrt{2}}\alpha & \frac{X-iY}{\sqrt{2}}\beta \end{Bmatrix}. \tag{27}$$

Три первых спиновых дублета канонического базиса (27) реализуют эквивалентные представления группы симметрии гетероструктуры, следовательно, соответствующие огибающие могут смешиваться

[1] Члены гамильтониана при этом не дублируются, поскольку при правильном учете всех дополнительных инвариантов типа $(\hat{\mathbf{A}}\mathbf{q})$ результат сводится к уже имеющейся структуре скалярного произведения $(\hat{\mathbf{A}}\mathbf{p})$. Аналогичным образом в гамильтониане бесспиновой модели не имеет смысла независимый учет членов типа $\left[\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{J}}\right]\mathbf{p}$ или $\left[\mathbf{p} \times \hat{\mathbf{J}}\right]^2$.

на гетерогранице и все субматрицы ГУ (1) следует искать в виде

$$\hat{\Gamma} = \begin{vmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_{12} & \Gamma_{13} & \\ \Gamma_{21} & \Gamma_2 & \Gamma_{23} & \\ \Gamma_{31} & \Gamma_{32} & \Gamma_3 & \\ & & & \Gamma_4 \end{vmatrix}, \qquad \hat{G} = \begin{vmatrix} G_1 & G_{12} & G_{13} & \\ G_{21} & G_2 & G_{23} & \\ G_{31} & G_{32} & G_3 & \\ & & & G_4 \end{vmatrix},$$

$$\hat{R} = \begin{vmatrix} R_1 & R_{12} & R_{13} & \\ R_{21} & R_2 & R_{23} & \\ R_{31} & R_{32} & R_3 & \\ & & & R_4 \end{vmatrix} \tag{28}$$

Каждый матричный элемент в (28) представляет собой действительное число, умноженное на единичную матрицу 2×2 [3]. Условие непрерывности потока обращает в нуль большинство недиагональных элементов, однако в отличие от бесспиновой задачи субматрица $\hat{\Gamma}$ может теперь иметь отличный от нуля недиагональный матричный элемент Γ_{32}. Его присутствие индуцирует появление ненулевых недиагональных элементов также в блоках $\hat{G}$ (элемент G_{23}) и $\hat{R}$ (элементы R_{23}, R_{32}). При этом между ненулевыми матричными элементами имеют место канонические связи:

$$\Gamma_1\Gamma_2 = \frac{P_B}{P_A}, \quad \Gamma_3\Gamma_4 = \frac{\gamma_{2B}}{\gamma_{2A}}, \quad \Gamma_{32} = \sqrt{2}(\Gamma_2 - \Gamma_3), \quad G_{23} = \sqrt{2}(G_2 - G_3);$$

$$\Gamma_1 G_1 = \frac{\gamma_{1B}}{\gamma_{1A}}, \quad \Gamma_2 G_2 = \Gamma_3 G_3 = \frac{\gamma_{3B}}{\gamma_{3A}}, \quad \Gamma_4 G_4 = \frac{(\gamma_2+\gamma_3)_B}{(\gamma_2+\gamma_3)_A}; \tag{29}$$

$$R_i = (\Gamma_i G_i)^{1/2}\chi_{AB}, \quad \chi_{AB} = -\chi_{BA}, \quad R_{23} = -\frac{\Gamma_{32}}{2\Gamma_2}R_3, \quad R_{32} = \frac{\Gamma_{32}}{2\Gamma_3}R_3.$$

Все элементы субматрицы $\hat{S}$ по-прежнему равны нулю.

Интересно отметить, что отсутствие смешивания огибающих U-типа с огибающими V–типа ($\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = \ldots = 0$), выступающее в модели Кейна 1 порядка по сути дела как независимая гипотеза, при анализе модели 2 порядка совершенно строго следует из непрерывности потока. Связь недиагонального элемента Γ_{32} с диагональными также получается только при учете в гамильтониане членов 2 порядка по оператору импульса. Между тем нетрудно показать, что именно эта связь, отсутствующая в моделях 1 порядка [3,4], обеспечивает инвариантность матричной структуры ГУ (28) при переходе к любому унитарно-эквивалентному базису, состоящему из крамерсово-сопряженных пар состояний. Важным примером такого базиса является базис связанных моментов, диагонализующий оператор спин-орбитального взаимодействия [7]:

$$\left\{ \begin{matrix} S\alpha \\ S\beta \end{matrix}, \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 2Z\alpha - (X+iY)\beta \\ 2Z\beta + (X-iY)\alpha \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} Z\alpha + (X+iY)\beta \\ Z\beta - (X-iY)\alpha \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} (X+iY)\alpha \\ (X-iY)\beta \end{pmatrix} \right\}. \tag{30}$$

Недиагональный матричный элемент Γ_{32}, играющий роль третьего независимого параметра ГУ, соответствует отличиям в условиях сшивки огибающих для векторных базисных орбиталей X, Y, лежащих в плоскости гетерограницы, от условий сшивки для огибающих базисной Z-орбитали, нормальной к этой плоскости. Такие различия могут быть индуцированы микроструктурой границы и не проявляются в сферически симметричном объемном спектре квазичастиц. Далее будем полагать $\Gamma_{32} = 0$. ГУ в этом случае радикально упрощаются. Все субматрицы становятся диагональными, более того, имеют место равенства: $\Gamma_3 = \Gamma_2$, $G_3 = G_2$, $R_3 = R_2$. При переходе к базису (31) значения матричных элементов ГУ не меняются и канонические связи (30) остаются в силе. Таким образом в диагональном приближении $\Gamma_{32} = 0$ базис (31) также является для ГУ каноническим. Последнее очень удобно, так как базис связанных моментов широко используется в приложениях [8].

Рассмотрим в заключение проблему частичных ГУ для наиболее широко используемых предельных ситуаций. При решении модельных задач часто рассматривают случай большого спин-орбитального расщепления базисных V-состояний: $\Delta \gg E_g$. В базисе (31) волновые функции (22), (23) для свободных квазичастиц имеют вид столбцов (нормирующий множитель для простоты опущен)

$$\psi_l = \left[\frac{\tilde{E}}{P} U_l, \quad \sqrt{\frac{2}{3}}(p_z + i\pi_z) U_l, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\tilde{E}}{\tilde{E} + \Delta}(p_z - 2i\pi_z) U_l, \quad -\sqrt{2}\pi_z \sigma_y U_l \right];$$

$$\psi_h = \left[0, \quad \frac{\sqrt{3}}{2} k_\| U_h, \quad 0, \quad \frac{2\pi_z \sigma_y}{k_\|}(p_z - i\pi_z) U_h \right], \qquad k_\| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (31)$$

При $\Delta \to \infty$ третья строка ГУ и одно из легких решений (25) из рассмотрения выпадают. Второе легкое состояние, а также условия сшивки производных первых двух компонент волновой функции исключаются как и в бесспиновом случае по параметру $\sqrt{\gamma_1\gamma_3}E_g/P^2$. В результате получаем частичные ГУ для так называемой трехзонной модели Кейна в базисе связанных моментов (31)

$$\psi_{1A} = \Gamma_1 \psi_{1B}, \;\; \psi_{2A} = \Gamma_2 \psi_{2B}, \;\; \psi_{4A} = \Gamma_4 \psi_{4B}, \;\; \psi'_{4A} = G_4 \psi'_{4B} + R_4 \psi_{4B}. \quad (32)$$

Здесь полная волновая функция $\psi = \psi_{l1} + \psi_h$ представляет собой суперпозицию волновых пакетов из легкого и тяжелого состояний с достаточно малыми волновыми векторами, а параметры частичных ГУ бездисперсны и удовлетворяют соотношениям (30).

И, наконец, получим частичные ГУ для модели Латтинжера [5], широко используемой при описании валентной зоны в диапазоне энергий $E \ll E_g, \Delta$. В этом пределе дисперсионное уравнение (25) дает только одну легкую частицу $E_l \simeq -(\gamma_3 + 2P^2/3E_g)k^2$, волновая функция (31) которой не содержит первой и третьей компонент. Эти компоненты малы, соответственно, по параметрам E/E_g и E/Δ. Таким образом, модели Латтинжера в базисе (30) соответствуют бездисперсные частичные ГУ вида

$$\psi_{2A} = \Gamma_2 \psi_{2B}, \psi'_{2A} = G_2 \psi'_{2B} + R_2 \psi_{2B}, \psi_{4A} = \Gamma_4 \psi_{4B}, \psi'_{4A} = G_4 \psi'_{4B} + R_4 \psi_{4B}. \quad (33)$$

При этом, однако, величины γ_3 в (29) должны быть перенормированы с учетом вклада базисных S-состояний. Удобнее пользоваться параметрами ГУ, выраженными через эффективные массы латтинжеровских квазичастиц m_{lh} и m_{hh}:

$$\Gamma_2\Gamma_4 = \frac{(1/m_{lh} - 1/m_{hh})_B}{(1/m_{lh} - 1/m_{hh})_A};\quad \Gamma_2 G_2 = \frac{m_{lhA}}{m_{lhB}};\qquad \Gamma_4 G_4 = \frac{m_{hhA}}{m_{hhB}}. \tag{34}$$

Итак, мы показали, что в приближении изотропного спектра квазичастиц волновая функция модели Кейна (19) на резкой гетерогранице должна подчиняться ГУ (1) с ненулевыми элементами (29), которые могут быть выражены через три независимых феноменологических параметра. Один из параметров (Γ_1) описывает сшивку базисных орбиталей, второй (Γ_{32}) — искажение их симметрии на гетерогранице, а третий (X) определяется градиентом нецентросимметричного потенциала гетерограницы.

Автор искренне признателен участникам семинара проф. С.А. Смолянского за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (93-02-15480).

Список литературы

[1] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1**, 249 (1957).
[2] С.Г. Тиходеев. ЖЭТФ, **99**, 1871 (1991).
[3] М.В. Кисин. ФТП, **27**, 488 (1993).
[4] М.В. Кисин. ФТП, **28**, 2076 (1994).
[5] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
[6] Б.Л. Гельмонт. ЖЭТФ, **75**, 536 (1978); Б.Л. Гельмонт, М.В. Кисин. ФТП, **17**, 1493 (1983).
[7] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
[8] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).

Редактор В.В. Чалдышев

Heavy-holes and the wave-function-matching problem in Kane model

M.V. Kisin

Wave-function-matching conditions at an abrupt heterointerface are derived from the second order Kane model. These boundary conditions (BC) are correct in the whole energy range including valence band. BC are dispertionless, i.e. the BC parameters do not depend explicitly on the quasiparticle energy. The complex nature of wave-function-derivative BC is demonstrated by $\psi'_A = \hat{G}\psi'_B + \hat{R}\psi_B$. The $\hat{R}$-matrix elements are determined by the gradient of the effective crystalline boundary potential. The partial BC are derived for the special cases of Luttinger and three-band Kane model and are shown to be dispertionless as well.