

# Смешивание электронных состояний $X_x$ и $X_y$ -долин в гетероструктурах AlAs / GaAs(001)

© Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов<sup>¶</sup>

Сибирский физико-технический институт,  
634050 Томск, Россия

(Получена 15 января 2001 г. Принята к печати 21 января 2001 г.)

Рассмотрено  $X_x$ - $X_y$ -смешивание состояний электронов  $X$ -долин в гетероструктурах AlAs / GaAs(001). Получены связанные с симметрией структуры общие условия на параметры матрицы сшивания огибающих функций и предложена модель для описания процессов  $X_x$ - $X_y$ -смешивания. Найденная нами структура матрицы сшивания существенно отличается от используемых ранее. Параметры модели определены на основе псевдопотенциальных расчетов. Проведены как модельные, так и псевдопотенциальные расчеты дисперсии уровней в квантовых  $X$ -ямах AlAs, электронных спектров сверхрешеток (AlAs)<sub>*M*</sub>(GaAs)<sub>*N*</sub>(001), коэффициентов прохождения  $X$ -электронов в структурах с одной  $X$ -ямой и двумя  $X$ -барьерами. Хорошее совпадение результатов обоих расчетов показывает эффективность предложенной модели для огибающих функций с определенными нами параметрами.

## Введение

Известно, что при определенных условиях (высокие давления, малые толщины слоев GaAs [1–5]) электронные свойства структур AlAs / GaAs(001) в основном определяются электронами из  $X$ -долин зон проводимости AlAs и GaAs. Вопросу поведения  $X$ -электронов в таких структурах посвящено несколько работ. Впервые  $X_x$ - $X_y$ -смешивание электронов изучено при расчетах методом сильной связи электронных спектров сверхрешеток (AlAs)<sub>*M*</sub>(GaAs)<sub>*N*</sub> в направлении (001) при различных значениях числа слоев  $M$  и  $N$  [6]. В этой работе показано, что характер минизонного спектра существенно зависит от значений  $M$  и  $N$ , в частности он двукратно вырожден при нечетных  $M$  и  $N$ . В работе [7] в рамках формализма огибающих функций предложена простая модель смешивания  $X_x$ - и  $X_y$ -состояний на гетерограницах. Проведенные на ее основе исследования минизонных спектров тех же сверхрешеток качественно согласуются с результатами [6]. Кроме того, в [7] рассмотрена дисперсия минизон в направлениях, перпендикулярных оси сверхрешетки (001). Эта простая модель с небольшими исправлениями была использована в [5] при анализе экспериментальных наблюдений магнетотуннелирования в двухбарьерных гетероструктурах AlAs / GaAs(001). Авторы [5] сделали вывод о том, что  $X_x$ - $X_y$ -смешивание состояний на гетерограницах приводит к повороту эллипсоидов постоянной энергии так, что дисперсии вдоль направлений (110) и (1 $\bar{1}$ 0) существенно различаются.

Насколько нам известно, не существует прямых теоретических расчетов, обосновывающих условия сшивания при  $X_x$ - $X_y$ -смешивании. Этот пробел мы попытались восполнить настоящей статьей, имея в виду большой интерес к данной проблеме и получаемые на основе предложенной ранее модели существенные выводы.

## 1. Свойства матриц сшивания огибающих функций

В нашей работе используется модель с разрывным на границе потенциалом. В этой модели общее решение уравнения Шредингера  $\Psi^n$  в среде  $n$  ( $n = 1, 2$ ) при фиксированных значениях энергии  $E$  и параллельной гетерогранице компоненты волнового вектора  $\mathbf{k}_{\parallel}$  можно представить в виде (например, [8–10])

$$\Psi^n = \sum_{\nu} C_{\nu}^n \Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^n, \quad (1)$$

где  $\mathbf{k}_{\nu} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp\nu}$  — волновые векторы для подсистемы  $n$ ;  $\mathbf{k}_{\perp\nu}$  — векторы, перпендикулярные границе;  $\Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^n$  — частные решения уравнения Шредингера для среды  $n$ , нумеруемые волновым вектором  $\mathbf{k}_{\nu}$  при фиксированных значениях  $E$  и  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . Коэффициенты  $C_{\nu}^n$  в общем решении (1) находятся из условий сшивания на гетерогранице и условий на бесконечности. Условия сшивания на границе можно представить в виде [8–10]

$$\mathbf{C}^{(1)} = \mathbf{I}(z_0)\mathbf{C}^{(2)}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{C}$  — вектор-столбец с компонентами  $C_{\nu}$ ,  $\mathbf{I}(z_0)$  — матрица сшивания на гетерогранице  $z = z_0$ , среда 1 расположена слева от 2.

При описании электронных процессов в гетероструктурах широкое распространение получил метод огибающих функций. В рамках этого метода общее решение (1) можно представить в виде

$$\Psi^n = \exp[i(q_x x + q_y y)] \sum_m F_m^n(z) |\mathbf{K}_{\nu 0 m}^n\rangle, \quad (3)$$

где  $\mathbf{q}_{\nu} = \mathbf{k}_{\nu} - \mathbf{k}_{\nu 0}$ , ось  $z$  направлена перпендикулярно гетероструктуре,  $|\mathbf{K}_{\nu 0 m}^n\rangle$  — блоховские волновые функции в точках  $\mathbf{k}_{\nu 0}$ . Функции  $F_m^n(z)$  имеют смысл огибающих функций и удовлетворяют для данных значений  $E$ ,  $\mathbf{k}_{\parallel}$  и

<sup>¶</sup> E-mail: vnchern@elefot.tsu.ru  
Fax:(382-2)233015

$\mathbf{k}_{\nu 0}$  системе уравнений:

$$\sum_m \{ [E_m(\mathbf{k}_{\nu 0}) - E + \mathbf{p}^2] \delta_{ml} + 2\mathbf{p}_{lm}\mathbf{p} \} \times F_m(z) \exp[i(q_x x + q_y y)] = 0, \quad (4)$$

где  $\mathbf{p}$  — оператор импульса,  $\mathbf{p}_{lm} = \langle \mathbf{K}_{\nu 0l} | \mathbf{p} | \mathbf{K}_{\nu 0m} \rangle$  — матричные элементы оператора импульса,  $E_m(\mathbf{k}_0)$  — энергии  $|\mathbf{K}_{\nu 0m}^n\rangle$ -состояний. Мы используем атомную систему единиц, в которой масса свободного электрона равна 1/2. Опорные точки  $\mathbf{k}_{\nu 0}$  могут быть произвольными, но удобнее их выбирать равными значениями волнового вектора на дне различных долин. Таким образом, всю совокупность  $\mathbf{k}_{\perp \nu}$  можно разделить на несколько групп, каждая из которых характеризуется своим значением  $\mathbf{k}_{\nu 0}$ . Например, для гетерограницы по плоскости (001) при  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$  можно считать, что  $\mathbf{k}_{\nu 0}$  принимает два значения, соответствующие  $\Gamma$ - и  $X_z$ -долинам. Функции  $F_m^n(z)$  можно представить в виде

$$F_m^n(z) = \sum_{\nu} C_{\nu}^n D_m^n(\mathbf{k}_{\nu}) \exp(iq_{z\nu} z), \quad (5)$$

где коэффициенты разложения  $D_m^n(\mathbf{k}_{\nu})$  находятся из системы алгебраических уравнений, полученной при подстановке в систему (4) для данного  $\mathbf{k}_{\nu 0}$  частных решений  $\propto \exp(iq_z z)$ . Отметим, что при точной постановке задачи возможные значения  $k_{\perp}$ , полученные при решении системы (4), должны совпадать с найденными при расчете комплексной зонной структуры значениями  $\mathbf{k}_{\perp \nu}$  и  $D_m(\mathbf{k}_{\nu}) = \langle \mathbf{K}_{\nu 0m} | \Psi_{\mathbf{k}_{\nu}} \rangle$ .

Производные от огибающих по  $z$  имеют вид

$$(F_m^n)' = \frac{\partial F_m^n(z)}{\partial z} = i \sum_{\nu} q_{z\nu} C_{\nu}^n D_m^n(\mathbf{k}_{\nu}) \exp(q_{z\nu} z). \quad (6)$$

Соотношения (5) и (6) при  $z = z_0$  можно представить в матричном виде

$$\mathbf{F}^n = \Phi^n \mathbf{C}^n, \quad (7)$$

где  $\mathbf{F}$  — вектор-столбец размерностью  $2m_{\max}$  с компонентами  $F_m$  и  $F_m'$ ;  $\Phi$  — матрица размерности  $(2m_{\max} \times 2\nu_{\max})$ , элементы которой определяются из (5) и (6). Здесь  $m_{\max}$  — число учтенных долин в разложении (3),  $2\nu_{\max}$  — число частных решений в (1).

Ясно, что из условий сшивания для волновых функций (2) однозначные условия сшивания для огибающих можно получить только для квадратных матриц  $\Phi$ , т.е. в (7) необходимо выбирать только  $\nu_{\max}$  разных  $F_m^n$ . В этом случае очевидно, что

$$\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{T}(z_0) \mathbf{F}^{(2)}, \quad (8)$$

где матрица сшивания для огибающих  $\mathbf{T}$  имеет вид

$$\mathbf{T}(z_0) = \Phi^1 \mathbf{I}(z_0) (\Phi^2)^{-1}. \quad (9)$$

Обычно при проведении численных расчетов, например методом псевдопотенциала,  $\nu_{\max} < m_{\max}$ , так как  $m_{\max}$  зависит от числа плоских волн, учитываемых в разложении волновых функций, а  $\nu_{\max}$  равняется числу их различных проекций на плоскость границы. Адекватность условий сшивания для огибающих (8) решаемой задаче может быть определена из анализа соотношений (1)–(3) в каждом конкретном случае.

Обратим внимание на одно обстоятельство, которое используется нами [9,10], в частности для контроля численных расчетов, но упущено из виду в ряде работ [6,7,11,12]. Условия сшивания (8) должны иметь неизменный вид независимо от порядка следования слоев АВ или ВА. Для пояснения сделанного утверждения рассмотрим структуру с двумя гетерограницами по плоскостям  $z_1$  и  $z_2$ , например АВА. Условия сшивания для огибающих (8) при  $z = z_1$  имеют вид

$$\mathbf{F}^A(z_1) = \mathbf{T}^{AB}(z_1) \mathbf{F}^B(z_1), \quad (10)$$

где 1 = А, 2 = В. Условия сшивания на второй гетерогранице  $z = z_2$  (здесь 2 = А, 1 = В) могут быть записаны в виде

$$\mathbf{F}^A(z_2) = (\mathbf{T}^{BA}(z_2))^{-1} \mathbf{F}^B(z_2) = \mathbf{T}'^{AB}(z_2) \mathbf{F}^B(z_2). \quad (11)$$

Используя условия сшивания (10) и (11) и матрицу переноса  $L(z_1, z_2)$  по слою В, получим

$$\mathbf{F}^A(z_1) = \mathbf{T}^{AB}(z_1) L(z_1, z_2) (\mathbf{T}'^{AB}(z_2))^{-1} \mathbf{F}^A(z_2). \quad (12)$$

Устремим толщину слоя В к нулю, т.е.  $z_2 \rightarrow z_1$ . Так как  $L(z_1, z_2)$  при этом стремится к единичной матрице, при согласованном выборе фаз волновых функций в слоях А получим, что  $\mathbf{T}(\mathbf{T}')^{-1} = \mathbf{E}$ , т.е.  $\mathbf{T} = \mathbf{T}'$ . Заметим, что в работе [11] отмечено, что равенство  $\mathbf{T} = \mathbf{T}'$  иногда оказывается справедливым. Мы полагаем, что оно справедливо всегда.

Перейдем к рассмотрению гетероструктур AlAs/GaAs(001) с гетерограницами, проходящими по общим для обоих материалов плоскостям из атомов As, при  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  ( $a$  — постоянная решетки). Данное значение  $\mathbf{k}_{\parallel}$  соответствует углу квадратной поверхностной зоны Бриллюэна. Для такого  $\mathbf{k}_{\parallel}$  существуют две  $X$ -долины с  $\mathbf{k}_{\perp} = (2\pi/a)(000)$  ( $\mathbf{k} = (2\pi/a)(100)$ ,  $X_x$ -долина) и  $\mathbf{k}_{\perp} = (2\pi/a)(001)$  ( $\mathbf{k} = (2\pi/a)(101)$ ; это состояние с точностью до вектора обратной решетки  $\mathbf{b} = (2\pi/a)(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$  эквивалентно  $X_y$ -долине). В таких структурах в AlAs существуют две  $X$ -яммы ( $X_x$  и  $X_y$ ), в GaAs — два  $X$ -барьера и возможно  $X_x$ - $X_y$ -смешивание состояний на гетерограницах.

Наши численные расчеты (детали которых будут приведены далее) матрицы сшивания  $\mathbf{I}(z_0)$  для энергий в окрестности  $X_1$ -состояний AlAs и GaAs показали, что в матрице сшивания с хорошей точностью выделяется блок ( $8 \times 8$ ), причем при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ , вследствие симметрии,

этот блок распадается на два блока ( $4 \times 4$ ), соответствующих состояниям, связанным соответственно с  $X_1$ - и  $X_3$ -состояниями обеих ( $X_x$  и  $X_y$ ) долин. Таким образом, для данной ситуации  $\nu_{\max} = 4$ ; и для построения модели огибающих, адекватной точной задаче, необходимо выполнение условия  $m_{\max} = 4$ . Как показали наши расчеты, в разложении (3) действительно можно ограничиться состояниями  $X_{1x}$ ,  $X_{1y}$ ,  $X_{3x}$ ,  $X_{3y}$ , и мы приходим к четырехдолинной модели.

Проанализируем некоторые свойства матрицы сшивания для огибающих  $\mathbf{T}$  в (8), обусловленные симметрией задачи. Рассмотрим структуру АВ с одной гетерограницей, начало отсчета координат выберем в одном из атомов As на гетерогранице. Ясно, что данная структура совпадает сама с собой при преобразованиях из группы симметрии  $D_{2d}$ , не изменяющих направление оси  $z$ , и переходит от порядка расположения АВ к ВА при преобразованиях, изменяющих направление оси  $z$  на обратное. Но, поскольку матрица  $\mathbf{T}$  не зависит от порядка следования слоев, она должна быть инвариантной относительно любых преобразований из группы симметрии  $D_{2d}$ . Мы рассматриваем здесь случай  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . Для получения всех необходимых соотношений достаточно выбрать только образующие элементы группы и проанализировать условия инвариантности матрицы  $\mathbf{T}$  относительно них. Сразу можно отметить, что, как и для матриц сшивания  $\mathbf{I}(z_0)$ , огибающие функций и их производные, соответствующие  $X_1$ -состояниям на гетерогранице, никак не смешиваются с огибающими и их производными для  $X_3$ -состояний. Это обусловлено различной симметрией функций  $X_{1x}$ ,  $X_{1y}$  и функций  $X_{3x}$ ,  $X_{3y}$  на плоскости гетерограницы. Первые две функции не изменяют знак при повороте на  $180^\circ$  вокруг оси  $z$ , а две вторых при этом изменяют знак. Таким образом, матрица  $\mathbf{T}$  может быть представлена в виде прямой суммы двух ( $4 \times 4$ ) матриц  $\mathbf{T}(X_1)$  и  $\mathbf{T}(X_3)$ :

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}(X_1) \oplus \mathbf{T}(X_3), \quad (13)$$

а условия сшивания для огибающих  $X_1$ - и  $X_3$ -состояний — в виде двух соотношений:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^A(X_1) &= \mathbf{T}(X_1)\mathbf{F}^B(X_1), \\ \mathbf{F}^A(X_3) &= \mathbf{T}(X_3)\mathbf{F}^B(X_3), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\mathbf{F}^A(X_1)$ ,  $\mathbf{F}^B(X_1)$  — векторы-столбцы с компонентами  $(F_{X_{1x}}, F_{X_{1y}}, F'_{X_{1x}}, F'_{X_{1y}})$  и  $\mathbf{F}^A(X_3)$ ,  $\mathbf{F}^B(X_3)$  — векторы-столбцы с компонентами  $(F_{X_{3x}}, F_{X_{3y}}, F'_{X_{3x}}, F'_{X_{3y}})$ .

Выберем в качестве первого образующего элемента зеркальный поворот  $S_{4z}^{(1)}$  на  $90^\circ$  вокруг оси  $z$  и в качестве второго — поворот  $S_{4x}^{(2)}$  вокруг оси  $x$  на  $180^\circ$ . Можно показать, что матрицы  $R_1(S_{4z}^{(1)})$ ,  $R_1(S_{4x}^{(2)})$  и матрицы  $R_3(S_{4z}^{(1)})$ ,  $R_3(S_{4x}^{(2)})$ , с которыми должны коммутировать матрицы  $\mathbf{T}(X_1)$  и  $\mathbf{T}(X_3)$  соответственно, должны

иметь блочный вид:

$$\begin{aligned} R_1(S_{4z}^{(1)}) &= \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad R_1(S_{4x}^{(2)}) = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix}, \\ R_3(S_{4z}^{(1)}) &= \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix}, \quad R_3(S_{4x}^{(2)}) = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  — матрицы Паули,  $E$  — единичная матрица размерности  $(2 \times 2)$ .

Следовательно, матрицы  $\mathbf{T}(X_1)$  и  $\mathbf{T}(X_3)$  тоже имеют блочный вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(X_1) &= \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & 0 & 0 \\ t_2 & t_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_3 & t_4 \\ 0 & 0 & t_4 & t_3 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T}(X_3) &= \begin{pmatrix} \tau_1 & 0 & 0 & \tau_2 \\ 0 & \tau_1 & \tau_2 & 0 \\ 0 & \tau_4 & \tau_3 & 0 \\ \tau_4 & 0 & 0 & t_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (15)$$

Матричные элементы  $\mathbf{T}$  должны удовлетворять также определенным требованиям, обусловленным свойствами периодичности функций  $|X_x\rangle$  и  $|X_y\rangle$  [5,7,10,13,14]. Те элементы  $\mathbf{T}$ , которые описывают смешивание  $X_x$ - $X_y$ -состояний (это параметры с четными номерами  $t_2, t_4, \tau_2$  и  $\tau_4$ ), должны изменять знак при переходе от одной гетерограницы к другой в случае нечетного числа монослоев, разделяющих эти гетерограницы. Остальные элементы  $\mathbf{T}$ , описывающие внутрислоевые рассеяния, при таком сдвиге должны оставаться неизменными. Из наших матриц сшивания  $\mathbf{T}(X_1)$  и  $\mathbf{T}(X_3)$  видно, что для  $X_1$ -состояний функции сшиваются с функциями, производные — с производными, а для  $X_3$ -состояний: функции сшиваются с производными и производные — с функциями. Этот результат качественно отличается от предложенного в [5,7].

Перейдем к рассмотрению процедуры приближенного определения огибающих. В соответствии с формулой (3) представим общее решение уравнения Шредингера для любой из сред при фиксированных значениях  $E$  и  $\mathbf{k}_{\parallel}$  в окрестности  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  в виде  $(\mathbf{k}_{\perp,0}$  здесь принимает два значения, соответствующие  $X_x$ - и  $X_y$ -долинам):

$$\begin{aligned} \Psi &= (F_{X_{1x}}|X_{1x}\rangle + F_{X_{1y}}|X_{1y}\rangle + F_{X_{3x}}|X_{3x}\rangle \\ &+ F_{X_{3y}}|X_{3y}\rangle) + \chi \exp[i(q_x x + q_y y)]. \end{aligned} \quad (16)$$

Функция  $\chi$  имеет вид

$$\chi = F_{X_{5xz}}|X_{5xz}\rangle + F_{X_{5xy}}|X_{5xy}\rangle + F_{X_{5yz}}|X_{5yz}\rangle + F_{X_{5yx}}|X_{5yx}\rangle \quad (17)$$

и представляет собой вклад от состояний  $X_5$  валентной зоны. Вклады от остальных зон учитывать не будем. Численные расчеты для энергий в окрестности

$X_1$ -состояний AlAs и GaAs оправдывают данные предположения. Здесь  $X_{5\alpha\beta}$  означает, что для вырожденного  $X_5$ -состояния в  $\alpha$ -долине ( $\alpha = x, y$ ) используются волновые функции с симметрией  $\beta$  ( $\beta = z, y$  для  $\alpha = x$ ;  $\beta = z, x$  для  $\alpha = y$ ).

Для любой из долин ( $X_x$  или  $X_y$ ) уравнения (4) представляют собой систему из 4 уравнений. Запишем уравнения для определения огибающих в окрестности  $X_x$ -долины:

$$\begin{pmatrix} E_{X_3} - E + \mathbf{p}^2 & 2ip_1p_x & 2ip_2p_y & 2ip_2p_z \\ -2ip_1p_x & E_{X_1} - E + \mathbf{p}^2 & 2ip_3p_z & 2ip_3p_y \\ -2ip_2p_y & -2ip_3p_z & E_{X_5} - E + \mathbf{p}^2 & 0 \\ -2ip_2p_z & -2ip_3p_y & 0 & E_{X_5} - E + \mathbf{p}^2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} F_{X_{3x}} \\ F_{X_{1x}} \\ F_{X_{5xz}} \\ F_{X_{5xy}} \end{pmatrix} \exp[i(q_x x + q_y y)] = 0. \quad (18)$$

Здесь введены следующие обозначения для матричных элементов оператора импульса:

$$ip_1 = \langle X_{3x} | p_x | X_{1x} \rangle, \quad ip_2 = \langle X_{3x} | p_y | X_{5xz} \rangle = \langle X_{3x} | p_z | X_{5xy} \rangle, \\ ip_3 = \langle X_{1x} | p_y | X_{5xz} \rangle = \langle X_{1x} | p_z | X_{5xy} \rangle.$$

При выборе всех функций  $|X_1\rangle, |X_3\rangle, |X_5\rangle$  вещественными, величины  $p_1, p_2, p_3$  также вещественны, как, впрочем, и элементы матриц сшивания. Уравнения для огибающих  $F_{X_{1y}}, F_{X_{3y}}, F_{X_{5yz}}, F_{X_{5yx}}$  отличаются от (18) заменой  $x \leftrightarrow y$ .

Полагая в системе (18) огибающие функции пропорциональными  $\exp(iq_z z)$ , получим систему уравнений, из условия разрешимости которой определяются  $q_z$ . Из найденных 8 попарно различающихся знаками корней четыре не удовлетворяют условиям применимости системы (18) и не должны приниматься во внимание. Каждый из четырех оставшихся корней отвечает одному частному решению системы (18).

Перейдем к рассмотрению более простого случая  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$ , т.е.  $q_x = q_y = 0$ . Тогда система (18) распадается на две несвязанных подсистемы для  $F_{X_{1x}}, F_{X_{5xz}}$  и  $F_{X_{3x}}, F_{X_{5xy}}$ . Обсудим далее именно этот случай. Для огибающих  $F_{X_{1x}}, F_{X_{5xz}}$  получаем

$$F_{X_{1x}} = A_{1x} \exp(iq_1 z) + B_{1x} \exp(-iq_1 z); \\ F_{X_{5xz}} = 2ip_3 q_1 \left[ \frac{A_{1x} \exp(iq_1 z) - B_{1x} \exp(-iq_1 z)}{E_{X_5} + q_1^2 - E} \right], \quad (19)$$

где  $q_1$  находится из уравнения для  $q_z$ :

$$(E_{X_1} + q_z^2 - E)(E_{X_5} + q_z^2 - E) - 4p_3^2 q_z^2 = 0. \quad (20)$$

Если пренебречь в (20) величиной  $q_z^2$  по сравнению с  $E_{X_5} - E$ , то  $q_1$  имеет вид

$$q_1 \approx \sqrt{2m_{1z}(E)(E - E_{X_1})}; \\ [m_{1z}(E)]^{-1} = 2 + \frac{8p_3^2}{E - E_{X_5}}, \quad (21)$$

где  $m_{1z}(E)$  — зависящая от энергии поперечная эффективная масса  $X_1$ -долины.

Общее решение для огибающих  $F_{X_{3x}}, F_{X_{5xy}}$  можно получить из (19) заменой  $A_{1x} \rightarrow A_{2x}, B_{1x} \rightarrow B_{2x}, q_1 \rightarrow q_2, p_3 \rightarrow p_2$ . Волновое число  $q_2$  определяется из (20) после соответствующих замен и для него справедливо приближение

$$q_2 \approx \sqrt{2m_{3z}(E)(E - E_{X_3})}; \\ [m_{3z}(E)]^{-1} = 2 + \frac{8p_2^2}{E - E_{X_5}}, \quad (22)$$

$m_{3z}(E)$  — зависящая от энергии поперечная эффективная масса  $X_3$ -долины.

Обратим внимание на то, что огибающие  $F_{X_{1x}}, F_{X_{3x}}$  нельзя считать похожими (или равными, как в [5]), поскольку в интервале энергий  $E_{X_1} < E < E_{X_3}$  волновые числа  $q_1$  — вещественные, а  $q_2$  — мнимые.

Таким образом, мы нашли огибающие в окрестности  $X_x$ -долины. Чтобы получить соответствующие огибающие в окрестности  $X_y$ -долины, достаточно, как уже отмечалось, просто произвести во всех соотношениях замену  $x \leftrightarrow y$ .

Наши расчеты показывают, что огибающие  $F_{X_5}$  дают малый вклад в общее решение и выражаются через  $F_{X_{1x}}, F_{X_{3x}}$  и их производные, но для корректного определения зависимостей  $q(E)$  учет состояний  $X_5$  валентной зоны необходим. Следовательно, мы приходим к рассмотренной ранее четырехдолинной модели для огибающих.

Рассмотрим вопрос о непрерывности потока плотности вероятности и возникающих при этом ограничениях на значения матричных элементов в матрицах сшивания для огибающих (13)–(15). Усредненная по элементарной ячейке  $z$ -компонента плотности потока для  $X_1$ -состояний приблизительно пропорциональна величине

$$I_z \propto \frac{i}{m_{1z}} \left( F_{X_{1x}}^* \frac{\partial}{\partial z} F_{X_{1x}} + F_{X_{1y}}^* \frac{\partial}{\partial z} F_{X_{1y}} - F_{X_{1x}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_{1x}}^* - F_{X_{1y}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_{1y}}^* \right), \quad (23)$$

$m_{1z}$  в (23) учитывает вклад  $X_5$ -состояний в плотность потока. Плотность потока на гетерогранице должна быть непрерывной, поэтому полагаем  $I_z^A = I_z^B$ . Используя в последнем выражении условия сшивания (15), получаем, что непрерывность потока имеет место, если выполняются следующие соотношения:

$$t_1 t_4 + t_3 t_2 = 0; \quad (m_{1z}^A)^{-1} (t_1 t_3 + t_2 t_4) = (m_{1z}^B)^{-1}. \quad (24)$$

Аналогичные выкладки для  $X_3$ -потока приводят к условиям

$$(m_{3z}^A)^{-1} (\tau_1 \tau_3 - \tau_2 \tau_4) = (m_{3z}^B)^{-1}. \quad (25)$$

Разумеется, условия (24) и (25) являются приближенными, поскольку приближенными являются исходные выражения для плотности потока (23). Естественно, возникает вопрос о том, какие ограничения на элементы матрицы сшивания накладывают условия непрерывности электронной плотности на гетерогранице. Мы полагаем, что использовать для формулировки этих требований усредненные по элементарной ячейке волновые функции

не вполне правомерно, поскольку, в отличие от усредненной по  $x$ ,  $y$ -плоскости  $z$ -компоненты плотности потока, усредненная по плоскости электронная плотность существенно зависит от  $z$ . Поэтому следует анализировать непрерывность электронной плотности на гетерограницах, опираясь на полные выражения для волновых функций.

## 2. Электронные состояния в квантовой $X$ -яме AlAs при учете $X_x$ – $X_y$ -смешивания

После определения параметров матрицы сшивания для огибающих  $X_x$ - и  $X_y$ -долин (13)–(15) можно перейти к изучению электронного спектра и распределения электронной плотности в различных гетероструктурах. Рассмотрим сначала одиночную квантовую  $X$ -яму AlAs — тонкий слой AlAs, ограниченный с обеих сторон GaAs, и будем интересоваться только  $X_x$ - и  $X_y$ -состояниями. Как уже было отмечено, для этого надо рассматривать состояния в окрестности  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  ( $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ ). Очевидно, что компоненты волнового вектора  $q_x$  и  $q_y$  будут квантовыми числами для этой задачи. Рассматриваемая структура имеет точечную группу симметрии  $D_{2d}$  относительно начала координат, выбранного на одном из атомов плоскости, расположенной в середине слоя AlAs. (Это будет плоскость из атомов As, если число монослоев в AlAs четное, и плоскость из атомов Ga, если это число нечетное.) В любом случае спектр в яме  $\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel})$  должен отражать симметрию задачи и удовлетворять условию  $\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel}) = \varepsilon_i(g\mathbf{q}_{\parallel})$ , где  $g$  — элемент из группы  $D_{2d}$ . Отсюда следует, что энергетические зоны в квантовой  $X$ -яме имеют одинаковую дисперсию вдоль направлений (110) и  $(\bar{1}10)$ , что явно противоречит выводам работы [5].

Выполним анализ спектра при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . В этом случае, как видно из (18),  $X_1$ – $X_3$ -взаимодействие отсутствует и спектр находится для каждой пары долин  $X_{1x}$  и  $X_{1y}$ ;  $X_{3x}$  и  $X_{3y}$  независимо. Рассмотрим сначала спектр, связанный с  $X_{1x}$ - и  $X_{1y}$ -долинами. Пусть волновое число  $q_1^A$  соответствует AlAs,  $q_1^B$  — GaAs. Как следует из (20)–(21), для энергий внутри ямы  $q_1^B$  имеет чисто мнимые значения,  $q_1^A$  — вещественные. Введем симметризованные  $(F_{X_{1x}} + F_{X_{1y}})$  и антисимметризованные  $(F_{X_{1x}} - F_{X_{1y}})$  комбинации решений для  $X_{1x}$ - и  $X_{1y}$ -долин. Используя соотношения (14)–(15), в которых индекс A относится к AlAs, а B — к GaAs, легко показать, что спектр находится из уравнений

$$[S_1^{(+)} \pm (-1)^M S_2^{(+)}][S_1^{(+)} \pm S_2^{(+)}] \exp(-iq_1^B d) - [S_1^{(-)} \pm (-1)^M S_2^{(-)}][S_1^{(-)} \pm S_2^{(-)}] \exp(iq_1^B d) = 0, \quad (26)$$

где знак “+” относится к симметризованным решениям, знак “–” — к антисимметризованным решениям;

$$S_1^{(\pm)} = t_1 \pm t_3 \frac{q_1^A}{q_1^B}, \quad S_2^{(\pm)} = t_2 \pm t_4 \frac{q_1^A}{q_1^B},$$

$d$  — толщина слоя AlAs;  $M$  — число монослоев в AlAs. Из (26) видно, что эти два уравнения различны для

четных  $M$  и одинаковы для нечетных. Таким образом, при нечетных  $M$  уровни  $\varepsilon_i(0)$  двукратно вырождены, а при четном  $M$  вырождение снимается. Этот факт отмечен и в симметричном анализе, выполненном в работе [6].

Если подобным образом проанализировать спектр, связанный с  $X_{3x}$ - и  $X_{3y}$ -долинами в тонком слое GaAs, ограниченном с обеих сторон AlAs (в наших расчетах  $X_3$ -долина в GaAs ниже  $X_3$ -долины AlAs), то результат оказывается противоположным случаю  $X_1$ -долины. При четном числе монослоев в GaAs уровни двукратно вырождены, а при нечетном — вырождение снимается.

При  $q_x \neq 0$ ,  $q_y \neq 0$  в обоих полупроводниках включается  $X_1$ – $X_3$ -взаимодействие и анализ спектра существенно усложняется. В общем случае  $q_x \neq q_y$  для каждой из  $X_x$ - и  $X_y$ -долин необходимо учитывать по 4 различных частных решения, соответствующих различным  $q_z(q_x, q_y, E)$ . В двух направлениях волнового вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$ , соответствующих  $q_x = q_y$  и  $q_x = -q_y$  (вдоль границ поверхностной зоны Бриллюэна), величины  $q_z(q_x, q_y, E)$  для обеих долин одинаковы и, если условия сшивания для огибающих принять в виде (13)–(15), можно получить 2 уравнения для отыскания спектра симметризованных и антисимметризованных решений соответственно. Последние, как и в (26), будут отличаться от первых знаком перед  $t_2, t_4, \tau_2, \tau_4$ . Обоснованность выбора условий сшивания в не зависящем от  $q_x, q_y$  виде (13)–(15) показана нами при проведении численных расчетов. Изза  $X_1$ – $X_3$ -взаимодействия и разных условий сшивания для  $X_1$ - и  $X_3$ -состояний при любом  $M$  для  $q_x \neq 0$ ,  $q_y \neq 0$  нет вырожденных уровней.

## 3. Псевдопотенциальные расчеты

Как уже отмечалось, мы провели исследование процессов  $X_x$ – $X_y$ -смешивания электронных состояний в структурах AlAs/GaAs(001) в модели с разрывным на гетерограницах псевдопотенциалом. Расчет проводился методом матрицы рассеяния [8–10], комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Детальное изложение метода расчета приведено в работах [8–10]. Для вычислений использовались псевдопотенциалы [15], параметры которых определялись из условий наилучшего совпадения рассчитанных и экспериментально найденных энергетических зазоров. Векторы обратной решетки  $\mathbf{b}_l$ , удовлетворяющие условию  $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{b}_l)^2 a^2 \leq 10(2\pi)^2$ , учитывались в разложении волновой функции точно; кроме того, около 250 плоских волн учитывалось с помощью теории возмущений Левдина. Как показали наши исследования, учет такого большого числа плоских волн необходим для выполнения условий унитарности матриц рассеяния. Расчет проводился при  $\mathbf{k}_{\parallel}$  в окрестности  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  для энергий  $E$  в интервале  $0.21 \text{ эВ} \leq E \leq 0.6 \text{ эВ}$ , включающем в себя энергии  $X_1$ -уровней AlAs и GaAs. Отсчет энергии нами выбран от дна зоны проводимости GaAs.

Вначале мы провели расчеты матриц сшивания  $\mathbf{I}(z_0)$  в (2) на гетерогранице AlAs/GaAs (слева AlAs), проходящей по общей плоскости из атомов As. Как уже упоминалось, численные расчеты при  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  показали, что в матрице сшивания с хорошей точностью выделяются два блока ( $4 \times 4$ ), соответствующие  $X_1$ - и  $X_3$ -состояниям обеих долин ( $X_x$  и  $X_y$ ). Вклад всех остальных ветвей комплексной зонной структуры для данного интервала энергий незначителен. Далее мы рассчитали матричные элементы импульса  $\mathbf{p}_{lm} = \langle \mathbf{K}_{\nu 0l} | \mathbf{p} | \mathbf{K}_{\nu 0m} \rangle$  и энергии  $E_m(\mathbf{k}_0)$  и нашли, что эти параметры имеют следующие значения:

$$p_1 = -0.11399(-0.10793),$$

$$p_2 = 0.52863(0.52922),$$

$$p_3 = 0.49235(0.49409);$$

$$E_{X_1} = 0.46877(0.20823),$$

$$E_{X_3} = 0.90684(1.18303),$$

$$E_{X_5} = -3.84209(-4.24294).$$

Значения энергий даны в эВ, матричных элементов импульса — в атомной системе единиц; первые числа соответствуют GaAs, вторые (в скобках) — AlAs. Численные расчеты коэффициентов разложения  $D_m^n(\mathbf{k}_\nu)$  показали, что в (3) для выбранного интервала энергий можно ограничиться  $X_1$ -,  $X_3$ -,  $X_5$ -состояниями, причем вклад последних незначителен. Рассчитанные значения  $\mathbf{p}_{lm}$  и  $E_m(\mathbf{k}_0)$  затем использовались в (18) для определения с помощью соотношения (20) зависимостей  $q_1(E)$  и  $q_2(E)$  и огибающих (19). Нами установлено, что результаты, полученные из приближенных формул (18)–(20), хорошо воспроизводят данные псевдопотенциального расчета. Таким образом, мы приходим к обоснованию сформулированной ранее четырехдолинной модели.

На следующем этапе, используя (8), мы нашли матрицу сшивания для огибающих  $\mathbf{T}$ . Расчет матричных элементов  $\mathbf{T}$  показал их достаточно слабую энергетическую зависимость, которой можно пренебречь и использовать их средние по энергии значения. Последнее приближение было проверено с помощью вычисления матриц сшивания  $\mathbf{I}(z_0)$  для различных энергий из найденных  $\mathbf{T}$ , используя соотношение, обратное (8). Мы получили, что рассчитанные таким образом матрицы сшивания  $\mathbf{I}(z_0)$  практически точно совпадают с исходными  $\mathbf{I}(z_0)$ , что свидетельствует о справедливости сделанного приближения. Отметим, что фазы в волновых функциях выбирались таким образом, чтобы функции  $|X_1\rangle$ ,  $|X_3\rangle$ ,  $|X_5\rangle$  были вещественными и чтобы все вытекающие из свойств симметрии соотношения для функций при  $q \neq 0$  выполнялись точно (без отличных от 1 фазовых множителей). Именно при таком выборе фаз матричные элементы  $\mathbf{T}$  оказываются вещественными. Мы определили, что ненулевые матричные элементы  $\mathbf{T}$  в атомной системе

единиц имеют следующие значения:

$$t_1 = 0.99318, t_2 = -0.02421, t_3 = 1.04120, t_4 = 0.02430;$$

$$\tau_1 = 1.00476, \tau_2 = 0.06564, \tau_3 = 1.08057, \tau_4 = 0.01660.$$

Отметим, что в отличие от остальных параметры  $\tau_2$  и  $\tau_4$  зависят от выбора системы единиц. Данные значения параметров с хорошей точностью удовлетворяют соотношениям (24) и (25) при подстановке в них полученных в псевдопотенциальном расчете средних по энергии поперечных эффективных масс:

$$m_{1z}^{\text{GaAs}} \approx 0.25, m_{1z}^{\text{AlAs}} \approx 0.26, m_{3z}^{\text{GaAs}} \approx 0.24, m_{1z}^{\text{AlAs}} \approx 0.26$$

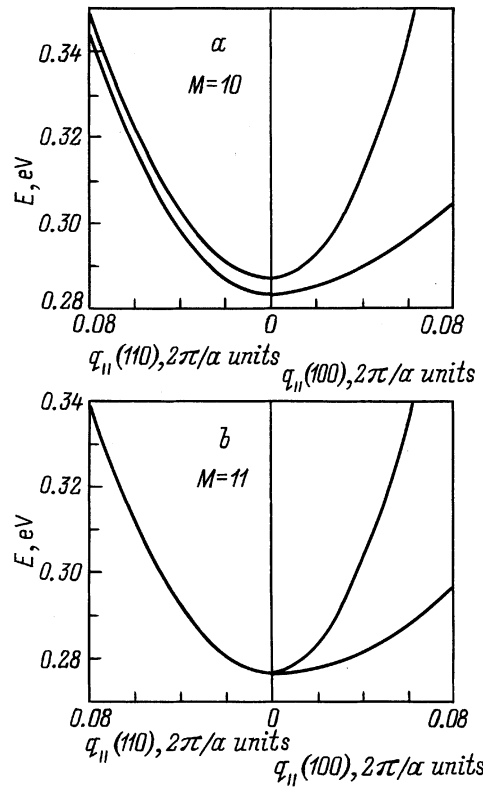
(в единицах массы свободного электрона). Подчеркнем, что приведенные значения элементов матриц сшивания  $T(X_1)$  и  $T(X_3)$  относятся к случаю, когда в формуле (14) индекс A отвечает AlAs, а индекс B — GaAs.

Перейдем к обсуждению результатов расчетов для некоторых гетероструктур AlAs/GaAs(001), полученных как при использовании "точного" псевдопотенциального подхода, так и в рамках модели огибающих функций. Мы полагаем, что условия сшивания для огибающих и при  $q_x \neq 0$ ,  $q_y \neq 0$  могут быть записаны, как для  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$  в виде (13)–(15) с не зависящими от  $\mathbf{q}_{\parallel}$  параметрами. Обоснованность этого приближения проверяется сравнением результатов точного и приближенного расчетов.

Рассмотрим дискретный спектр  $\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel})$  квантовой  $X$ -ямы AlAs для  $\mathbf{k}_{\parallel}$  в окрестности  $\mathbf{k}_{\parallel} = (2\pi/a)(100)$  ( $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ ). Эта зависимость может быть найдена из соотношения

$$\det(S^{-1}(2)) = 0, \quad (27)$$

где  $S(2)$  — матрица рассеяния для системы с двумя гетерограницами при фиксированных значениях  $E$  и  $q_{\parallel}$  [16]. Результаты расчета для направлений (110) и (100) вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$  при двух значениях толщин квантовых ям ( $M = 10$  и  $M = 11$ ) приведены на рис. 1. На этом рисунке изображены дисперсии двух низших энергетических уровней. Отметим, что результаты псевдопотенциального и модельного расчетов (в рамках сформулированной выше четырехдолинной модели) практически совпадают. Как и следует из приведенного выше анализа (см. формулу (26)), при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$  для  $M = 11$  уровни  $\varepsilon_i(0)$  двукратно вырождены, а для  $M = 10$  имеется расщепление порядка 0.004 эВ, связанное с взаимодействием на гетерограницах  $X_x$ - и  $X_y$ -состояний. Заметим, что при увеличении  $M$  ( $M$  — четное) величина расщепления уменьшается. Для направления (100) волнового вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$  при обоих значениях толщины квантовой ямы мы имеем две кривые с существенно различными дисперсиями. Качественное объяснение этому обстоятельству следующее. При таких  $\mathbf{q}_{\parallel}$   $X_x$ - и  $X_y$ -ямы становятся различными, края  $X_x$ -ямы изменяются в соответствии с направлением вдоль большой главной оси эллипсоида постоянной энергии для  $X_x$ -долины (с большой продольной эффективной массой); для  $X_y$ -ямы движение осуществляется вдоль малой главной оси эллипсоида для  $X_y$ -долины (с существенно



**Рис. 1.** Электронный энергетический спектр  $\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel})$  в квантовой  $X$ -яме  $AlAs(001)$  для направлений  $(110)$  и  $(100)$  вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$  при значениях толщин квантовых ям:  $a - M = 10$ ,  $b - M = 11$ .

меньшей поперечной эффективной массой). Поэтому есть основания полагать, что нижняя кривая с малой дисперсией в основном связана с состояниями  $X_x$ -долины, верхняя — с состояниями  $X_y$ -долины. Для направления  $(110)$  волнового вектора  $\mathbf{q}_{\parallel}$  симметрия между долинами сохраняется, и  $X_x$ -,  $X_y$ -ямы одинаковы. Дисперсии для обеих кривых для каждого  $M$  практически одинаковы, за исключением величины расщепления (большого для  $M = 10$  и меньшего, практически не заметного на рис. 1, для  $M = 11$ ). Отметим, что такая зависимость имеет место только для достаточно малых  $q_{\parallel}$ ; при увеличении  $q_{\parallel}$  в направлении  $(110)$  картина существенно меняется и представление о  $X_x$ - $X_y$ -взаимодействии становится некорректным, в частности при  $q_x = q_y = 0.5$  более уместно говорить о  $LL$ -взаимодействии.

Перейдем к рассмотрению спектров сверхрешеток  $(AlAs)_M(GaAs)_N(001)$ . Мы провели расчеты для тех же 4 сверхрешеток, что и в работе [6], с  $M = 10, 11$  и  $N = 7, 8$  в различных сочетаниях. Можно показать, используя теорему Блоха для сверхрешеток, что их электронный энергетический спектр находится из уравнения [16]

$$\det(S^{-1}(2) - Q) = 0, \quad (28)$$

где, как и в (27),  $S(2)$  — матрица рассеяния для системы с двумя гетерограницами, расстояние между которыми —  $M$  слоев  $AlAs$ , при фиксированных значениях  $E$

и  $\mathbf{q}_{\parallel}$ . Как и в [6], мы рассматриваем случай  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . Матрица  $Q$  имеет вид

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{11} & 0 \\ 0 & Q_{22} \end{pmatrix},$$

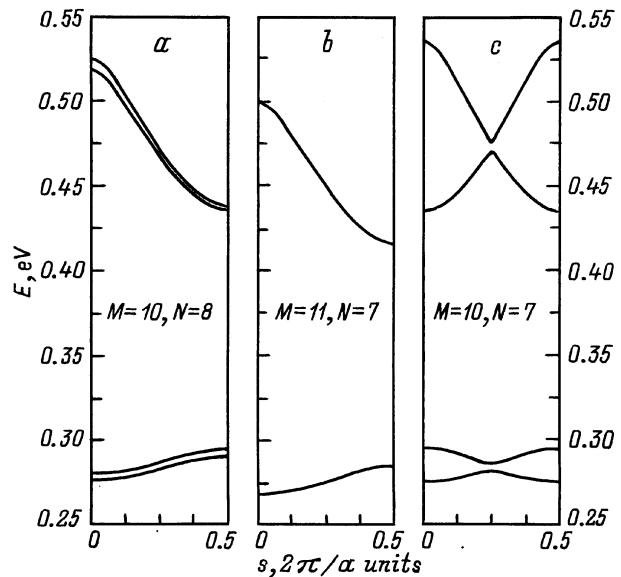
$$(Q_{11})_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \exp \left[ i(k_{z\nu}^{(1)} - s) \frac{2(M+N)}{a} \right],$$

$$(Q_{22})_{\mu\mu'} = \delta_{\mu\mu'} \exp \left[ i(k_{z\mu}^{(1)} - s) \frac{2(M+N)}{a} \right],$$

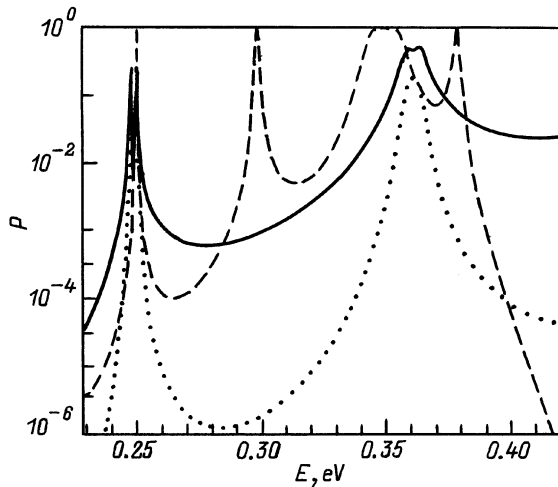
где  $s$  —  $(001)$ -компонента волнового вектора сверхрешетки; индексы  $\nu$  и  $\mu$  нумеруют падающие и отраженные волны соответственно; разбиение блоховских волн на падающие и отраженные производится так же, как и в [8–10]; индекс “1” соответствует  $GaAs$ .

Мы проводили как точные псевдопотенциальные расчеты, так и приближенные в рамках четырехдолинной модели для огибающих. Как и ранее, результаты получались практически одинаковыми. Рассчитанные электронные спектры сверхрешеток  $(AlAs)_M(GaAs)_N(001)$ , связанные с  $X_1$ -состояниями зоны проводимости, приведены на рис. 2. Наши результаты качественно совпадают с полученными в работе [6]. (Не приведенные на рис. 2 результаты для  $M = 11$  и  $N = 8$  также качественно совпадают с [6]). Численные отличия связаны с различным выбором параметров для объемных зонных структур обоих материалов и разными моделями области гетерограницы. Мы используем модель с разрывным на гетерограницах потенциалом; в работе [6] в окрестности гетерограницы, в качестве параметров метода сильной связи, берутся их средние для обоих веществ значения.

Кроме того, мы провели как псевдопотенциальные, так и модельные расчеты коэффициентов прохождения



**Рис. 2.** Электронные энергетические спектры сверхрешеток  $(AlAs)_M(GaAs)_N(001)$ :  $a - M = 10, N = 8$ ;  $b - M = 11, N = 7$ ;  $c - M = 10, N = 7$ .



**Рис. 3.** Энергетическая зависимость коэффициентов прохождения для гетероструктуры AlAs/GaAs(7)/AlAs(16)/GaAs(7)/AlAs при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . Сплошной линией обозначена зависимость  $P_{X_{1x}X_{1x}} = P_{X_{1y}X_{1y}}$ ; пунктирной линией — зависимость  $P_{X_{1x}X_{1y}} = P_{X_{1y}X_{1x}}$ ; штриховой линией изображены коэффициенты прохождения при  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ .

для различных структур AlAs/GaAs(001) при различных значениях  $\mathbf{q}_{\parallel}$  в окрестности  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$  и во всех случаях получали хорошее совпадение результатов расчета. Это еще раз показывает эффективность предложенной модели для огибающих функций с определенными нами параметрами. В качестве примера на рис. 3 приведены энергетические зависимости коэффициентов прохождения для структуры AlAs/GaAs(7)/AlAs(16)/GaAs(7)/AlAs (в скобках указано число монослоев) при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . Для указанного выше интервала энергий существуют четыре коэффициента прохождения

$$P_{X_{1x}X_{1x}}, P_{X_{1y}X_{1y}}, P_{X_{1x}X_{1y}}, P_{X_{1y}X_{1x}};$$

первый индекс указывает на тип падающей волны, второй — прошедшей. Из-за симметрии задачи при  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$  равны между собой первые 2 коэффициента, описывающие внутримолекулярное рассеяние. Энергетическая зависимость этих коэффициентов прохождения на рис. 3 изображена сплошной линией. Пунктирной линией на этом рисунке представлена зависимость  $P_{X_{1x}X_{1y}} = P_{X_{1y}X_{1x}}$ , соответствующая межмолекулярному  $X_x-X_y$ -рассеянию. Из рисунка видно, что резонансы для обеих кривых достигаются при близких энергиях. Отметим, что если мы возьмем слой AlAs, состоящий из нечетного числа мономолекулярных слоев, то  $X_x-X_y$ -прохождение отсутствует, что, конечно, согласуется с приведенными выше результатами для одиночной квантовой ямы AlAs. При  $\mathbf{q}_{\parallel} \neq 0$  резонансные пики в коэффициентах прохождения сдвигаются и расщепляются аналогично рассмотренной ранее дисперсии  $\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel})$  в квантовой  $X$ -яме AlAs.

На рис. 3 штриховой линией изображена энергетическая зависимость коэффициентов прохождения для той же структуры при  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ , т.е. при нормальном к гетерогранице падении электронов. Видно, что для энергий

вблизи 0.25 и 0.35 эВ имеются резонансы, связанные с  $X$ -ямами AlAs, как для  $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ , так и для  $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ . Это обстоятельство указывает на важность учета не только нормально падающих электронов (как это обычно делают), но и движущихся под углом к нормали. Таким образом, существует возможность создания структур, которые могут обладать интересными вольт-амперными характеристиками, обусловленными наложением различных резонансов.

## Заключение

В настоящей работе рассмотрены условия сшивания огибающих функций  $X_x$ - и  $X_y$ -состояний в гетероструктурах GaAs/AlAs(001). Эти состояния при определенных условиях обеспечивают главный вклад в электронные свойства указанных гетероструктур и сверхрешеток на их основе, они привлекаются для обсуждения ряда экспериментальных результатов. Параметры модели определены на основе симметрии структуры и из псевдопотенциальных расчетов. Эффективность предложенной нами модели для огибающих функций подтверждается хорошим совпадением результатов модельных и псевдопотенциальных расчетов дисперсии уровней в квантовых  $X$ -ямах AlAs, электронных спектров сверхрешеток  $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(001)$  и коэффициентов прохождения  $X$ -электронов в структурах с одной  $X$ -ямой и двумя  $X$ -барьерами. Мы показали, что используемые в некоторых работах [5,7] условия сшивания должны быть исправлены в соответствии с полученными нами соотношениями. Вывод авторов работы [5] о повороте эллипсоидов постоянной энергии только за счет  $X_x-X_y$ -смешивания состояний противоречит следствиям из симметрии задачи. Наши прямые расчеты дисперсии энергетических зон в направлениях (110) и  $(\bar{1}\bar{1}0)$  также не обнаруживают никакого различия между этими двумя направлениями. По-видимому, обнаруженная в [5] анизотропия связана с более низкой симметрией ответственных за наблюдаемый эффект состояний по сравнению с теми, которые привлекаются авторами [5].

Авторы признательны Е.Л. Ивченко, обратившему их внимание на работу [5].

Работа выполнена при поддержке программы Министерства науки "Поверхностные атомные структуры", проект № 5.12.99, и гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 00-02-17996.

## Список литературы

- [1] J.M. Smith, A.C. Klipstein, R. Grey, G. Hill. Phys. Rev. B, **57**, 1746 (1998).
- [2] J.M. Smith, A.C. Klipstein, R. Grey, G. Hill. Phys. Rev. B, **57**, 1740 (1998).
- [3] J.M. Smith, A.C. Klipstein, R. Grey, G. Hill. Phys. Rev. B, **58**, 4708 (1998).
- [4] J.J. Finley, M.S. Skolnick, J.W. Cockburn, R. Teisler, R. Gray, G. Hill, M.A. Pafe. Superlat. Microstruct., **23**, 513 (1998).



- [5] H. Im, A.C. Klipstein, R. Grey, G. Hill. Phys. Rev. Lett., **83**, 3693 (1999).
- [6] Y. Lu, L.J. Sham. Phys. Rev. B, **40**, 5567 (1989).
- [7] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. Phys. Rev. B, **47**, 13 498 (1993).
- [8] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9946 (1988).
- [9] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992).
- [10] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 9,64 (1992).
- [11] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11 609 (1989).
- [12] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11 619 (1989).
- [13] G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov, S.N. Grunyaev. *Abstracts of invited lectures and contributed papers Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology* (St. Petersburg, 1994) p. 62.
- [14] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, А.А. Воронков. Изв. вузов. Физика, № 1, 63 (1997).
- [15] В.А. Чалдышев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 3, 38 (1983).
- [16] G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov. *Abstracts of invited lectures and contributed papers. Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology* (St. Petersburg, 1995) p. 126.

Редактор Т.А. Полянская

## The electron states mixing of $X_x$ and $X_y$ valleys in AlAs / GaAs(001) heterostructures

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov

Siberian Physical and Technical Institute,  
634050 Tomsk, Russia

**Abstract** The  $X_x$ – $X_y$  electron state mixing of  $X$ -valley electrons in AlAs/GaAs(001) heterostructures have been considered. The general conditions for the envelope matching matrices, connected with the structural symmetry, are obtained, and the model for the description of the  $X_x$ – $X_y$ -mixing processes are suggested. The matching matrices obtained differ essentially from those used before. The model and pseudopotential calculations of the level dispersion in AlAs quantum wells, of the electron subbands in  $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(001)$  superlattices, of the transmission coefficients in systems with one  $X$ -well and two  $X$ -barriers. Have been performed agreement results of both calculations is an evidence in favour of effectiveness of the envelope function model with the parameters found by the authors.