Эффективные гамильтонианы для гетероструктур на основе прямозонных полупроводников $A^{III}B^{V}$. Kp-теория возмущения и метод инвариантов

© Г.Ф. Глинский¶, М.С. Миронова¶¶

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ" им. В.И. Ульянова (Ленина), 197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 17 июля 2013 г. Принята к печати 10 апреля 2014 г.)

Предлагается последовательная процедура получения эффективных kp-гамильтонианов для произвольных гетероструктур на основе прямозонных полупроводников с одинаковыми параметрами решеток. Потенциал гетероструктуры описывается с помощью характеристических функций $f_l(\mathbf{a})$, указывающих на замещение атомов опорного кристалла в подрешетке l в элементарной ячейке $\mathbf{a}$. Развивается kp-теория возмущения для гетероструктур, учитывающая эффекты рассеяния носителей заряда на дополнительном локальном потенциале, возникающем в результате замещения атомов. Предлагается способ построения соответствующих эффективных kp-гамильтонианов методом инвариантов, который учитывает микроскопическую симметрию интерфейсов. Полученные гамильтонианы наряду с зонными параметрами содержат дополнительные параметры, не имеющие аналогов в объемных материалах. В качестве примера дается вывод эффективных гамильтонианов зон Γ_1, Γ_6, Γ_{15} и Γ_8 в гетероструктурах на основе кубических полупроводников $A^{III}B^{V}$ с замещением атомов в одной подрешетке.

1. Введение

Несмотря на то что метод эффективной массы (метод огибающих волновых функций) является наиболее часто используемым методом расчета энергетических состояний носителей заряда в полупроводниковых квантово-размерных гетероструктурах, до сих пор отсутствует регулярная процедура построения эффективных гамильтонианов, учитывающая как kp-взаимодействие зон, так и процессы рассеяния электронов и дырок на гетероинтерфейсе. Обычно решение задачи в рамках метода эффективной массы сводят к решению дифференциального уравнения Шредингера с эффективным гамильтонианом, следующим из kp-теории возмущений для объемных материалов. Однако зависимость зонных параметров от координат не позволяет однозначно определить оператор кинетической энергии. Одного требования эрмитовости эффективного гамильтониана недостаточно для его однозначного определения. Так, в работе [1] предложен оператор кинетической энергии для простой невырожденной зоны вида

$$\hat{T} = \frac{1}{4}\left(m^{\alpha}\hat{\mathbf{p}}m^{\beta}\hat{\mathbf{p}}m^{\gamma} + m^{\gamma}\hat{\mathbf{p}}m^{\beta}\hat{\mathbf{p}}m^{\alpha}\right), \qquad (1)$$

где m — эффективная масса, зависящая от координат; $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса; $\alpha+\beta+\gamma=-1$. В этом случае энергетический спектр носителей заряда зависит от выбора параметров α, β и γ, которые фактически определяют граничные условия, накладываемые на огибающую волновую функцию на интерфейсе. В работе [2] показано, что наиболее общий вид оператора кинетической энергии в гетероструктуре представляет собой линейную комбинацию всех возможных операторов вида (1).

Часто при выводе граничных условий, накладываемых на огибающую волновую функцию на интерфейсе, используют условие непрерывности потока частиц, рассчитанного на этих функциях [3,4]. Однако непрерывностью должен обладать поток, рассчитанный на полных волновых функциях, как это рассматривается, например, в [5]. Полные волновые функции включают в себя, помимо огибающей, также блоховские волновые функции, которые, вообще говоря, изменяются при переходе через гетерограницу.

В настоящее время отсутствует общий симметрийный подход к определению поправок к методу эффективной массы, обусловленных быстроизменяющейся частью интерфейсного потенциала. Такие поправки, как известно, приводят к смешиванию дырочных состояний в зоне Γ_{15} [6], междолинному смешиванию электронных состояний в гетероструктурах на основе непрямозонных полупроводников [7–9] и к другим интерфейсным эффектам. В рамках феноменологического описания таких эффектов быстроизменяющаяся часть интерфейсного потенциала, как правило, представляется в виде δ-функции [6–8]. При этом возникает дополнительный феноменологический параметр, характеризующий рассеяние носителей заряда на гетероинтерфейсе.

Детальный анализ эффективных гамильтонианов для гетероструктур в той или иной форме проводится в работах [2,9–27]. В работе [12] волновая функция гетероструктуры ищется в виде разложения по блоховским волновым функциям опорного кристалла. Наличие резкой гетерограницы приводит к появлению нелокального слагаемого в уравнении эффективной массы и, следовательно, уравнение в координатном представлении является интегро-дифференциальным.

В работах [3,13–15,17,18,24–27] развивается kp-теория возмущения для гетероструктур на основе согласо-

¶ E-mail: genaglinskii@mail.ru
¶¶ E-mail: mironova.m.s@gmail.com

ванных по параметрам решетки полупроводников. Важным результатом теории, представленной в работах [13–15,18], является оценка интерфейсных и kp-поправок к уравнению эффективной массы. Показано, что поправки, обусловленные координатной зависимостью зонных параметров, имеют тот же порядок малости, что и kp-поправки вида $(kp)^4$, связанные с непараболичностью закона дисперсии. Строго говоря, все поправки одного порядка должны быть включены в эффективный гамильтониан. Однако в том случае, если основной интерес представляют эффекты, обусловленные рассеянием электронов и дырок на быстроизменяющейся части интерфейсного потенциала, поправками, обусловленными непараболичностью закона дисперсии, можно пренебречь [23–25]. Разработанная в [13–15,18] теория приводит к появлению в эффективном гамильтониане гетероструктуры дополнительных параметров, которые зависят от свойств гетероинтерфейса. Наличие таких параметров, отсутствующих в объемных материалах, продемонстрировано также в рамках симметрийного анализа в [16].

В работе [18] отмечается, что для гетероструктур, выращенных в направлении [001], эффективный гамильтониан наряду с поправками, следующими из kp-теории возмущений, содержит дополнительные слагаемые, пропорциональные различным степеням $(k_z - k'_z)$, что обусловлено резким характером гетероперехода. Наличие таких слагаемых отличает гамильтониан работы [18] от гамильтонианов, полученных в [10,11] для гетероструктур с плавным потенциалом. Учет таких слагаемых позволяет применять метод эффективной массы к описанию эффектов междолинного смешивания в гетероструктурах.

В работах [2,22,23] для описания гетероструктуры используется теория, предложенная в [28] для мелкого дефекта в полупроводниках. Потенциал гетероструктуры рассматривается как слабое возмущение потенциала опорного кристалла. При этом потенциал опорного кристалла и потенциал поправки представляются в виде суммы нелокальных ионных псевдопотенциалов отдельных атомов кристаллической решетки. Чтобы записать эффективный гамильтониан гетероструктуры, используется теория квадратичного отклика на возмущение, обусловленное замещением атомов, совместно с kp-теорией возмущения. В рассматриваемом в [2,22,23] порядке малости эффекты рассеяния носителей заряда на возмущающем потенциале обусловлены линейным откликом, а квадратичный отклик дает вклад только в разрыв зон на гетероинтерфейсе. В [23] данная теория используется совместно с методом инвариантов для анализа Г-X смешивания в гетероструктурах (001) GaAs/AlAs. Эрмитовы формы, инвариантные в группе C_{2v} (точечная группа симметрии интерфейса), содержат как δ-функцию, так и ее производную.

В данной работе развивается последовательная процедура построения эффективных kp-гамильтонианов для произвольных гетероструктур (квантовые ямы, проволоки, точки, сверхрешетки) на основе согласованных по параметрам решетки прямозонных полупроводников. Гетероструктура, состоящая из двух полупроводников I и II, представляется в виде объемного опорного кристалла I, часть атомов которого замещена атомами материала II. Для описания потенциала такой гетероструктуры вводятся характеристические функции $f_l(\mathbf{a})$, принимающие значения 0 или 1 и указывающие на замещение атомов в l-й подрешетке элементарной ячейки с номером $\mathbf{a}$. Принципиальным отличием предложенного подхода от известных является то, что функции $f_l(\mathbf{a})$ определены только в узлах решетки Браве и не являются функциями непрерывных координат x, y, z. Впервые данный подход был предложен в [25] для гетероструктур с замещением атомов в одной подрешетке. В данной работе этот метод обобщается на гетероструктуры с замещением произвольного числа атомов в элементарной ячейке. Необходимость учета каждой из подрешеток в отдельности становится принципиально важной при анализе эффектов междолинного смешивания в гетероструктурах с замещением нескольких атомов в элементарной ячейке [29,30].

В разд. 2 настоящей работы рассматривается полный многозонный kp-гамильтониан гетероструктуры на основе двух прямозонных полупроводников без учета спина и спин-орбитального взаимодействия. В разд. 3 метод теории возмущений используется для построения однозонного эффективного kp-гамильтониана гетероструктуры, учитывающего как kp-взаимодействие зон, так и эффекты рассеяния носителей заряда на дополнительном потенциале, обусловленном замещением атомов. Анализируются поправки, обусловленные наличием интерфейсов, с точностью до членов 3-го порядка теории возмущений. Полученные гамильтонианы содержат не только поправки, связанные с координатной зависимостью зонных параметров исходных материалов, но также и дополнительные члены, не имеющие аналогов в объемных материалах. В разд. 4 предлагается последовательная процедура построения эффективных гамильтонианов гетероструктур методом инвариантов. Предложенный метод учитывает микроскопическое строение гетероструктуры и основывается на анализе точечной симметрии узлов кристаллической решетки.

В конце раздела обсуждаются два унитарно эквивалентных представления уравнения эффективной массы: $\mathbf{k}$- и $\mathbf{a}$-представления. В $\mathbf{k}$-представлении это уравнение является интегральным уравнением для огибающей волновой функции $F(\mathbf{k})$, определенной в зоне Бриллюэна. В $\mathbf{a}$-представлении уравнение представляет собой систему линейных однородных алгебраических уравнений для волновой функции $F(\mathbf{a})$, определенной в узлах решетки Браве.

В *Приложении* представлены эффективные kp-гамильтонианы зон Γ_1, Γ_6, Γ_{15} и Γ_8 в гетероструктурах на основе кубических прямозонных полупроводников

$A^{III}B^{V}$ с замещением атомов в одной подрешетке, полученные методом инвариантов.

2. Многозонный kp-гамильтониан гетероструктуры на основе прямозонных полупроводников

Рассмотрим гетероструктуру на основе двух прямозонных полупроводников I и II, содержащих произвольное число атомов в элементарной ячейке. В качестве приближения будем считать, что параметры решеток этих материалов полностью совпадают.[1]

Гамильтониан, описывающий движение электрона без учета спина и спин-орбитального взаимодействия в объемном материале I, запишем в следующем виде:

$$\hat{H}_I = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \sum_l \sum_{\mathbf{a}} V_l^I(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_l). \qquad (2)$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса; m_0 — масса свободного электрона; $V_l^I(\mathbf{x})$ — локальный потенциал, создаваемый атомом l-й подрешетки объемного материала I; $\mathbf{a}$ — векторы прямой решетки, нумерующие элементарные ячейки; $\boldsymbol{\chi}_l$ — векторы, указывающие положение атомов в элементарной ячейке. Например, в полупроводниках $A^{III}B^{V}$ l пробегает два значения ($l = 1, 2$), что соответствует двум подрешеткам в этих материалах.

Для однозначного описания произвольной гетероструктуры (квантовая яма, проволока, точка, сверхрешетка) удобно ввести характеристические функции $f_l(\mathbf{a})$, указывающие на замену атомов в l-й подрешетке:

$$f_l(\mathbf{a}) = \begin{cases} 1, & \text{если в элементарной ячейке} \\ & \text{с номером } \mathbf{a} \text{ в } l\text{-й подрешетке} \\ & \text{расположен атом материала II.} \\ 0, & \text{если в элементарной ячейке} \\ & \text{с номером } \mathbf{a} \text{ в } l\text{-й подрешетке} \\ & \text{расположен атом материала I.} \end{cases}$$

Тогда гамильтониан гетероструктуры I/II можно записать следующим образом:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{I}} + \sum_l \sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) \Delta V_l(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_l), \qquad (3)$$

где $\Delta V_l(\mathbf{x}) = V_l^{\mathrm{II}}(\mathbf{x}) - V_l^{\mathrm{I}}(\mathbf{x})$ — разность локальных потенциалов, создаваемых атомами объемных материалов II и I в l-й подрешетке. В частности, в роли материалов I и II могут выступать любые полупроводниковые соединения $A^{III}B^{V}$, а также их твердые растворы.

[1] Различия в параметрах решеток и возникающие при этом деформации могут быть учтены в эффективном гамильтониане в рамках обычной теории деформационного потенциала и в данной работе рассматриваться не будут.

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (3) будем искать в виде разложения по базису Кона–Латтинжера $e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}|\alpha, n\rangle$, где n нумерует вырожденные состояния в точке Γ зоны Бриллюэна, преобразующиеся по неприводимому представлению $D^{(\alpha)}$ точечной группы кристалла, $\mathbf{k}$ — волновой вектор, отсчитываемый от центра зоны Бриллюэна. Блоховские состояния $|\alpha, n\rangle$, определяющие энергетический спектр электронов $E_{\mathrm{I}}^{(\alpha)}$ объемного полупроводника I в точке $\mathbf{k} = 0$, удовлетворяют уравнению Шредингера с гамильтонианом (2):

$$\hat{H}_{\mathrm{I}}|\alpha, n\rangle = E_{\mathrm{I}}^{(\alpha)}|\alpha, n\rangle.$$

С учетом коммутационного соотношения $\hat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}} = e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})$ гамильтониан (3) в выбранном базисе принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} H_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \langle \alpha, n|e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}'\hat{\mathbf{x}}}|\alpha', n'\rangle \\ &= \left\{ \left[E_{\mathrm{I}}^{(\alpha)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}\mathbf{p}_{nn'}^{\alpha\alpha'} \right\} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &+ \Delta U_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \end{aligned} \qquad (4)$$

Первый член в правой части выражения (4), диагональный по индексам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, совпадает с обычным многозонным kp-гамильтонианом объемного материала I, где $\mathbf{p}_{nn'}^{\alpha\alpha'} = \langle \alpha, n|\hat{\mathbf{p}}|\alpha', n'\rangle$. Второй член, $\Delta U_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, определяет процессы внутризонного ($\alpha = \alpha'$) и межзонного ($\alpha \neq \alpha'$) рассеяния носителей заряда на гетероинтерфейсе из состояния $\mathbf{k}'$ в состояние $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned} &\Delta U_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= \sum_l \sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) \langle \alpha, n|e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}} \Delta V_l(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \chi_l) e^{i\mathbf{k}'\hat{\mathbf{x}}}|\alpha', n'\rangle. \end{aligned} \qquad (5)$$

Учитывая, что

$$\langle \mathbf{x}|e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}|\alpha, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_n^{\alpha}(\mathbf{x}),$$

где $u_n^{\alpha}(\mathbf{x})$ — периодическая часть блоховской волновой функции в центре зоны Бриллюэна, удовлетворяющая условию периодичности $u_n^{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = u_n^{\alpha}(\mathbf{x})$ ($\mathbf{a}$ — произвольный вектор трансляции, V — объем структуры), выражение (5) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\Delta U_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= \sum_l \sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_n^{\alpha *}(\mathbf{x}) \Delta V_l(\mathbf{x} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_l) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} u_{n'}^{\alpha'}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \sum_l \frac{1}{\Omega} \int_\Omega u_n^{\alpha *}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\chi}_l) \Delta V_l(\mathbf{x}) u_{n'}^{\alpha'}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\chi}_l) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{x}} d\mathbf{x} \\ &\times \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{a} + \boldsymbol{\chi}_l)}, \end{aligned} \qquad (6)$$

где Ω — объем элементарной ячейки; N — число элементарных ячеек в кристалле. При выводе этой формулы предполагалось, что разность локальных потенциалов $\Delta V_l(\mathbf{x})$ отлична от нуля в основном в пределах элементарной ячейки, поэтому интегрирование по объему кристалла было заменено на интегрирование по элементарной ячейке.

В рамках метода эффективной массы (метода огибающих волновых функций) $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ можно считать малыми величинами по сравнению с характерными размерами зоны Бриллюэна, поэтому экспоненту в подынтегральном выражении в (6) можно разложить в ряд по степеням $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ [2]:

$$e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')x} \approx 1 - i(k-k')_i x_i - \frac{1}{2}(k-k')_i(k-k')_j x_i x_j + \ldots$$

С точностью до квадратичных по $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ членов выражение (6) можно переписать в следующем виде:

$$\Delta U^{\alpha\alpha'}_{nn'}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \sum_l \big[\Delta V^{\alpha\alpha'}_{l;nn'} - i(\Delta L^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})_i(k-k')_i - (\Delta Q^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})_{ij}(k-k')_i(k-k')_j\big] f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \quad (7)$$

где

$$f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{a}+\boldsymbol{\chi}_l)},$$

$$\Delta V^{\alpha\alpha'}_{l;nn'} = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega u^{\alpha*}_n(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)\Delta V_l(\mathbf{x}) u^{\alpha'}_{n'}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)d\mathbf{x},$$

$$(\Delta L^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})_i = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega x_i u^{\alpha*}_n(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)\Delta V_l(\mathbf{x}) u^{\alpha'}_{n'}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)d\mathbf{x},$$

$$(\Delta Q^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})_{ij} = \frac{1}{2\Omega}\int_\Omega x_i x_j u^{\alpha*}_n(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)\Delta V_l(\mathbf{x}) u^{\alpha'}_{n'}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)d\mathbf{x}.$$

Так как материалы I и II обладают одной пространственной группой симметрии, разность локальных потенциалов $\Delta V_l(\mathbf{x})$ является инвариантом в точечной группе l-го узла и преобразуется в этой группе по единичному представлению. Например, в полупроводниках со структурой алмаза или сфалерита $\Delta V_l(\mathbf{x})$ преобразуется по неприводимому представлению Γ_1 точечной группой симметрии узла T_d. Поэтому матричные элементы $\Delta V^{\alpha\alpha'}_{l;nn'}$ связывают зоны одной и той же симметрии и диагональны по индексам, нумерующим вырожденные состояния в этих зонах: $\Delta V^{\alpha\alpha'}_{l;nn'} = \Delta V^{\alpha\alpha'}_l \delta_{nn'}$. При этом разрыв зоны $E^{(\alpha)}$ на гетероинтерфейсе $\Delta E^{(\alpha)}$ в 1-м порядке теории возмущений определяется диагональными матричными элементами $\Delta V^{(\alpha)}_l = \Delta V^{\alpha\alpha}_l$:

$$\Delta E^{(\alpha)} \approx \frac{1}{\Omega}\sum_l \int_\Omega |u^\alpha_n(\mathbf{x}+\boldsymbol{\chi}_l)|^2 \Delta V_l(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \sum_l \Delta V^{(\alpha)}_l.$$

Члены, содержащие $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, в разложении (7), пропорциональные $(\Delta L^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})_i$ и $(\Delta Q^{\alpha\alpha'}_{l;nn'})$, определяют поправки, обусловленные быстроизменяющейся частью интерфейсного потенциала.

[2] Здесь и далее по повторяющимся индексам i и j производится суммирование от 1 до 3.

3. Однозонный эффективный гамильтониан гетероструктуры для точки Γ зоны Бриллюэна. Kp-теория возмущений

Если основной вклад в формирование электронных состояний в рассматриваемой гетероструктуре дают состояния изолированной зоны α, отделенной от всех остальных зон β большим энергетическим зазором, то от многозонного гамильтониана $H^{\alpha\alpha'}_{nn'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ можно перейти к однозонному эффективному kp-гамильтониану $H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$, в котором межзонные матричные элементы, описывающие „взаимодействие“ рассматриваемых состояний $|\alpha, m\rangle$ со всеми остальными состояниями $|\beta, s\rangle$, включая их kp-взаимодействие, учтены в нужных порядках теории возмущений. Во 2-м и 3-м порядках теории возмущений ограничимся членами вида $(kp)^2$, $(kp)\Delta V$, $(\Delta V)^2$, $(kp)(k-k')\Delta L$, $(kp)^2\Delta V$. Первые четыре из них возникают во 2-м, а пятый — в 3-м порядке теории возмущений. Первые два члена имеют порядки соответственно E_0, $E_0\sqrt{E_0/E_g}$, а третий, четвертый и пятый — $E_0(E_0/E_g)$, где E_0 — характерная энергия размерного квантования, E_g — величина порядка ширины запрещенной зоны. Остальные члены имеют более высокий порядок малости и могут быть опущены. В этом приближении однозонный эффективный kp-гамильтониан зоны α принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \Big[E^{(\alpha)}_I\delta_{mm'} + \frac{\hbar}{m_0}(p^{(\alpha)}_{mm'})_i k_i \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m_0}(D^{(\alpha)}_{mm'})_{ij}k_i k_j\Big]\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_l \Delta V^{(\alpha)}_l \delta_{mm'} f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\
&+ \sum_{l,l'}\sum_{\mathbf{k}''}\Delta W^{(\alpha)}_{ll'}\delta_{mm'} f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'') f_{l'}(\mathbf{k}''-\mathbf{k}') \\
&+ \sum_l \Big\{\frac{\hbar}{m_0}\Big[(\Delta P^{(\alpha)}_{l;mm'})_i k_i + (\Delta P^{(\alpha)^*}_{l;m'm})_i k'_i\Big] + \frac{\hbar^2}{2m_0} \\
&\times \Big[(\Delta R^{(\alpha)}_{l;mm'})_{ij}k_i k_j + (\Delta R^{(\alpha)^*}_{l;m'm})_{ij}k'_i k'_j + (\Delta M^{(\alpha)}_{l;mm'})_{ij}k_i k'_j\Big] \\
&- i(\Delta L^{(\alpha)}_{l;mm'})_i(k_i-k'_i) - (\Delta Q^{(\alpha)}_{l;mm'})_{ij}(k_i-k'_i)(k_j-k'_j) \\
&- \frac{i\hbar}{m_0}\Big[(\Delta S^{(\alpha)}_{l;mm'})_{ij}k_i(k_j-k'_j) + (\Delta S^{(\alpha)^*}_{l;m'm})_{ij}(k_j-k'_j)k'_i\Big]\Big\} \\
&\times f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \qquad (8)
\end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{p}^{(\alpha)}_{mm'} = \mathbf{p}^{\alpha\alpha}_{mm'}$, а остальные параметры D, ΔW, ΔP, ΔR, ΔM и ΔS приведены в *Приложении* I.

Таблица 1. Эрмитовы формы, составленные из векторов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы T_d

Представление	Четные относительно инверсии времени	Нечетные относительно инверсии времени
Γ_1	$1,\ (\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}'),\ (\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2$	$i(\mathbf{k}^2-\mathbf{k}'^2)$
Γ_{12}	$\begin{cases} 2k_zk'_z-k_xk'_x-k_yk'_y, \\ \sqrt{3}(k_xk'_x-k_yk'_y) \end{cases}$ $\begin{cases} 2(k_z-k'_z)^2-(k_x-k'_x)^2-(k_y^2-k'_y)^2, \\ \sqrt{3}[(k_x-k'_x)^2-(k_y-k'_y)^2] \end{cases}$	$\begin{cases} i[2(k_z^2-k'^2_z)-(k_x^2-k'^2_x)-(k_y^2-k'^2_y)], \\ \sqrt{3}i[(k_x^2-k'^2_x)-(k_y^2-k'^2_y)] \end{cases}$
Γ_{15}	$i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ $\begin{cases} \frac{1}{2}(k_yk'_z+k_zk'_y), \\ \frac{1}{2}(k_zk'_x+k_xk'_z), \\ \frac{1}{2}(k_xk'_y+k_yk'_x) \end{cases}$ $\begin{cases} (k_y-k'_y)(k_z-k'_z), \\ (k_z-k'_z)(k_x-k'_x), \\ (k_x-k'_x)(k_y-k'_y) \end{cases}$	$\frac{1}{2}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ $\begin{cases} i(k_yk_z-k'_yk'_z), \\ i(k_zk_x-k'_zk'_x), \\ i(k_xk_y-k'_xk'_y) \end{cases}$
Γ_{25}	–	$i[\mathbf{k}\times\mathbf{k}']$

Первое слагаемое в гамильтониане (8), пропорциональное $\delta_{\mathbf{kk}'}$, совпадает с эффективным kp-гамильтонианом объемного материала I. Остальные слагаемые, содержащие фурье-образы характеристических функций $f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, описывают процессы рассеяния носителей заряда на гетероинтерфейсе. Слагаемые, пропорциональные $\Delta V_l^{(\alpha)}$ и $\Delta W_{ll'}^{(\alpha)}$, определяют высоту потенциального барьера для электронов и дырок на гетерогранице с точностью до 2-го порядка теории возмущений. Так как для характеристических функций $f_l(\mathbf{a})$ справедливо равенство $f_l^2(\mathbf{a})=f_l(\mathbf{a})$ и, следовательно,

$$\sum_{\mathbf{k}''} f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')f_l(\mathbf{k}''-\mathbf{k}')=f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

то их сумму можно переписать в следующем виде:

$$\sum_l \Delta V_l^{(\alpha)}\delta_{mm'}f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \sum_{l,l'}\sum_{\mathbf{k}''}\Delta W_{ll'}^{(\alpha)}\delta_{mm'}f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')f_{l'}(\mathbf{k}''-\mathbf{k}')$$
$$=\sum_l(\Delta V_l^{(\alpha)}+\Delta W_{ll}^{(\alpha)})\delta_{mm'}f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \sum_{l\neq l'}\sum_{\mathbf{k}''}\Delta W_{ll'}^{(\alpha)}\delta_{mm'}f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')f_{l'}(\mathbf{k}''-\mathbf{k}').$$

Таким образом, разрыв зоны $E^{(\alpha)}$ на гетероинтерфейсе $\Delta E^{(\alpha)}$ во 2-м порядке теории возмущений определяется матричными элементами $\Delta V_l^{(\alpha)}$ и $\Delta W_{ll'}^{(\alpha)}$:

$$\Delta E^{(\alpha)}\approx\sum_l(\Delta V_l^{(\alpha)}+\Delta W_{ll}^{(\alpha)})+\sum_{l\neq l'}\Delta W_{ll'}^{(\alpha)}.$$

При этом сумма $\Delta V_l^{(\alpha)}+\Delta W_{ll}^{(\alpha)}$ определяет разрыв зоны $E^{(\alpha)}$, если замещение атомов происходит только в одной подрешетке с номером l.

В предельном случае, когда все атомы материала I замещены атомами материала II, все характеристические функции $f_l(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ переходят в $\delta_{\mathbf{kk}'}$. В этом случае в рассматриваемом нами порядке теории возмущений гамильтониан (8) должен приближенно переходить в эффективный kp-гамильтониан объемного материала II. При этом все слагаемые, содержащие $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, обращаются в нуль. Эти слагаемые, пропорциональные $(\Delta L_{l;mm'}^{(\alpha)})_i$ и $(\Delta Q_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$, $(\Delta S_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$, имеющие соответственно порядок $E_0\sqrt{E_0/E_g}$ и $E_0(E_0/E_g)$, обусловлены быстроизменяющейся частью интерфейсного потенциала и отсутствуют в объемных материалах. Остальные слагаемые, пропорциональные $(\Delta P_{l;mm'}^{(\alpha)})_i$, $(\Delta R_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$ и $(\Delta M_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$, связаны с различием параметров зонной структуры материалов I и II. Остановимся на них подробнее. Первый член, пропорциональный $(\Delta P_{l;mm'}^{(\alpha)})_i$, описывает изменение матричного элемента оператора импульса на гетерогранице, обусловленное скачком блоховских волновых функций на интерфейсе. Остальные два члена, пропорциональные $(\Delta R_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$ и $(\Delta M_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij}$, определяют изменение зонных параметров материала, в частности эффективной массы для невырожденных зон, при переходе через интерфейс. Три причины приводят к этому изменению. Первая из них связана с изменением межзонных матричных элементов оператора импульса (первая сумма в (П.I.1)). Другие две обусловлены изменением энергетических зазоров, что в свою очередь связано с изменением энергетического положения как рассматриваемой зоны $E^{(\alpha)}$ (второе слагаемое в (П.I.1)), так и всех остальных зон $E^{(\beta)}$ (член, пропорциональный $(\Delta M^{(\alpha)}_{l;mm'})_{ij}$).

Отметим, что поправки, возникающие в 3-м и 4-м порядках теории возмущений по kp-взаимодействию, имеют тот же порядок малости, что и рассмотренные выше. Это поправки вида $(kp)^3$ и $(kp)^4$, имеющие порядок $E_0\sqrt{E_0/E_g}$, $E_0(E_0/E_g)$ соответственно. Однако они не связаны с наличием гетероинтерфейса, а приводят лишь к непараболичности закона дисперсии носителей заряда в зонах и рассматриваться нами не будут.

Полученные выше результаты могут быть легко обобщены на случай учета спина и спин-орбитального взаимодействия. Однако наиболее просто эффективный kp-гамильтониан с точностью до квадратичных по $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ слагаемых независимо от их происхождения может быть получен методом инвариантов.

4. Построение эффективных гамильтонианов гетероструктур на основе прямозонных кубических полупроводников A$^{\mathrm{III}}$B$^{\mathrm{V}}$ методом инвариантов

Для простоты рассмотрим гетероструктуры с замещением атомов только в одной подрешетке. Матрица эффективного гамильтониана гетероструктуры $H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ зоны $E^{(\alpha)}$ зависит от двух независимых переменных $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ и одной характеристической функции $f(\mathbf{a})$. Она должна удовлетворять условию инвариантности относительно точечных преобразований $r \in F$, где F — точечная группа кристалла (для кубических полупроводников A$^{\mathrm{III}}$B$^{\mathrm{V}}$ это группа T_d):

$$\sum_{m'',m'''} D^{(\alpha)}_{mm''}(r)H^{(\alpha)}_{m''m'''}\big(r^{-1}\mathbf{k}, r^{-1}\mathbf{k}'; f(r\mathbf{a})\big)D^{(\alpha)\dagger}_{m'''m'}(r)$$

$$= H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}'; f(\mathbf{a})). \tag{9}$$

Здесь $D^{(\alpha)}(r)$ — матрица неприводимого представления $D^{(\alpha)}$ точечной группы F, соответствующая элементу r. Кроме того, гамильтониан должен быть эрмитов, т. е.

$$[H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')]^* = H^{(\alpha)}_{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k}), \tag{10}$$

и удовлетворять условию инвариантности относительно инверсии времени:

$$H^{(\alpha^*)}_{mm'}(-\mathbf{k},-\mathbf{k}') = [H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')]^*. \tag{11}$$

Здесь α^* — номер неприводимого представления $D^{(\alpha^*)} = D^{(\alpha)^*}$, комплексно-сопряженного с представлением $D^{(\alpha)}$, $|\alpha^*, m\rangle = \hat{T}|\alpha, m\rangle$, где $\hat{T}$ — оператор инверсии времени.

Как следует из предыдущего раздела, в рассматриваемом нами порядке теории возмущений матрицу гамильтониана $H^{(\alpha)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ можно записать в следующем виде:

$$H^{(\alpha)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = H^{(\alpha)}_I(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \Delta H^{(\alpha)}(\mathbf{k},\mathbf{k}'),$$

где $H^{(\alpha)}_I(\mathbf{k})$ — матрица эффективного kp-гамильтониана зоны $E^{(\alpha)}$ объемного материала I, содержащая зонные параметры γ^I_i; $\Delta H^{(\alpha)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ — поправки, пропорциональные $f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, обусловленные замещением атомов материала I атомами материала II. Вид матриц $H^{(\alpha)}_I(\mathbf{k})$ и $\Delta H^{(\alpha)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ может быть определен методом инвариантов [24, 25]. При этом они будут содержать параметры (константы метода инвариантов), которые могут быть определены экспериментально или из микроскопических расчетов.

Все поправки, обусловленные наличием гетероинтерфейса, можно разделить на две группы. К первой группе относятся поправки $\Delta H^{(\alpha)}_0(\mathbf{k},\mathbf{k}')$, не равные нулю при $\mathbf{k}=\mathbf{k}'$. Они содержат константы $\Delta\gamma_i$, которые в рассматриваемом порядке теории возмущений определяют изменение зонных параметров объемных материалов γ_i при переходе через интерфейс ($\Delta\gamma_i = \gamma^{II}_i - \gamma^I_i$). Их удобно объединить с гамильтонианом материала I и ввести обозначение

$$H^{(\alpha)}_0(\mathbf{k},\mathbf{k}') = H^{(\alpha)}_I(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \Delta H^{(\alpha)}_0(\mathbf{k},\mathbf{k}'),$$

при этом γ^I_i и $\Delta\gamma_i$ войдут в правую часть в виде $\gamma^I_i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \Delta\gamma_i f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$. Таким образом, $H^{(\alpha)}_0(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ в двух предельных случаях, $f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')=0$ и $f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')=\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, переходит в гамильтонианы материалов I и II соответственно. Ко второй группе относятся поправки $\Delta H^{(\alpha)}_i(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ $(i = 1, 2, \ldots)$, обращающиеся в нуль при $\mathbf{k}=\mathbf{k}'$. Они содержат дополнительные параметры $\Delta\beta_i$, не имеющие аналогов в объемных материалах.

При построении эффективных гамильтонианов на основе прямозонных кубических полупроводников A$^{\mathrm{III}}$B$^{\mathrm{V}}$ методом инвариантов сначала необходимо определить все возможные линейные и квадратичные эрмитовы формы, составленные из компонент векторов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, преобразующиеся по неприводимым представлениям Γ^*_α группы T_d, и их четность относительно инверсии времени. Затем с помощью коэффициентов Клебша–Гордана необходимо определить полный набор базисных матриц, преобразующихся по неприводимым представлениям Γ_α

в группе T_d [31,32]. Затем из этих эрмитовых форм и базисных матриц составить все возможные инвариантные формы, удовлетворяющие условиям (9)–(11).

В табл. 1 представлены с точностью до квадратичных членов все возможные эрмитовы формы, составленные из компонент $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы T_d. В соответствии с вышесказанным, эрмитовы формы, неравные нулю при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, входят в эффективный гамильтониан с параметрами γ_i^I и $\Delta\gamma_i$, а эрмитовы формы, обращающиеся в нуль при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, — с параметрами $\Delta\beta_i$.

Полученные методом инвариантов однозонные эффективные гамильтонианы для гетероструктур на основе кубических прямозонных полупроводников $\mathrm{A^{III}B^{V}}$ без учета спина (зоны Γ_1 и Γ_{15}) и с учетом спина (зоны Γ_6 и Γ_8) приведены в *Приложении*. В них отсутствуют слагаемые, описывающие эффект Дрессельхауза, так как они имеют более высокий порядок малости и возникают при учете кубических по $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ членов.

Приведенные в *Приложении* гамильтонианы записаны в $\mathbf{k}$-представлении, где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, изменяющийся в пределах зоны Бриллюэна. В этом представлении уравнение Шредингера для огибающих волновых функций $F_m(\mathbf{k})$ сводится либо к системе интегральных уравнений в случае бесконечного кристалла, когда $\mathbf{k}$ непрерывно, либо к системе из N алгебраических уравнений, если кристалл имеет конечный объем $V = N\Omega$ и $\mathbf{k}$ дискретно:

$$\sum_{m',\mathbf{k}'} H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')F_{m'}(\mathbf{k}') = EF_m(\mathbf{k}).$$

Альтернативой $\mathbf{k}$-представлению является узельное или $\mathbf{a}$-представление, в котором уравнение Шредингера сводится к системе из N линейных алгебраических уравнений для волновых функций $F_m(\mathbf{a})$, заданных в узлах решетки Браве:

$$\sum_{m',\mathbf{a}'} H^{(\alpha)}_{mm'}(\mathbf{a},\mathbf{a}')F_{m'}(\mathbf{a}') = EF_m(\mathbf{a}).$$

Узельное и $\mathbf{k}$-представление эквивалентны и связаны друг с другом унитарным преобразованием:

$$H_{mm'}(\mathbf{a},\mathbf{a}') = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{ka}}H_{mm'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{a}'},$$

$$F_m(\mathbf{a}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{ka}}F_m(\mathbf{k}).$$

Выбор конечного числа N и дискретных $\mathbf{k}$ эквивалентен выбору периодических граничных условий для функций $F_m(\mathbf{a})$. Такой подход является удобным при численном определении энергетического спектра и волновых функций носителей заряда как в сверхрешетках, так и в одиночных гетероструктурах при соответствующем выборе ширины барьеров [33].

Полная волновая функция электрона в координатном представлении определяется выражением:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{m,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kx}}u^{\alpha}_m(\mathbf{x})F_m(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{m} u^{\alpha}_m(\mathbf{x})F_m(\mathbf{x}),$$

где огибающие волновые функции $F_m(\mathbf{x})$ и $F_m(\mathbf{k})$ связаны преобразованием, которое не является унитарным:

$$F_m(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kx}}F_m(\mathbf{k}). \tag{12}$$

Можно показать, что огибающие волновые функции $F_m(\mathbf{x})$ удовлетворяют системе интегро-дифференциальных уравнений. Переход к обычной системе дифференциальных уравнений, т. е. к $\mathbf{x}$-представлению, может быть выполнен только приближенно, если суммирование по зоне Бриллюэна в (12) заменить на интегрирование по бесконечному $\mathbf{k}$-пространству. В этом приближении характеристическая функция $f(\mathbf{a})$ переходит в функцию непрерывной переменной $f(\mathbf{x})$, а полученные в работе эффективные гамильтонианы позволяют осуществить правильную расстановку операторов. Для этого достаточно сделать замену

$$f(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \to f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{k} \to -i\nabla,$$
$$(k_i)^m f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')(k'_j)^n \to (-i\nabla_i)^m f(\mathbf{x})(-i\nabla_j)^n.$$

Для поправок, обусловленных быстроизменяющейся частью интерфейсного потенциала, такая замена приводит к появлению членов, содержащих δ-функции и их производные.

5. Заключение

Получен многозонный kp-гамильтониан для гетероструктур на основе прямозонных полупроводников с одинаковыми параметрами решетки. Потенциал гетероструктуры описывается посредством введения характеристических функций $f_l(\mathbf{a})$, заданных в узлах решетки Браве. Методом теории возмущений с точностью до членов порядка $E_0(E_0/E_g)$ определен однозонный эффективный гамильтониан, учитывающий как kp-взаимодействие зон, так и эффекты рассеяния носителей заряда на гетероинтерфейсе. Наряду с обычными зонными параметрами объемных материалов гамильтониан содержит дополнительные параметры, обусловленные наличием интерфейсов. Предложена последовательная процедура построения эффективных гамильтонианов гетероструктур методом инвариантов. В качестве примера рассматриваются эффективные гамильтонианы точки Γ для гетероструктур на основе прямозонных кубических полупроводников $\mathrm{A^{III}B^{V}}$ без учета (зоны Γ_1 и Γ_{15}) и с учетом (зоны Γ_6 и Γ_8) спина электрона. Так как вид эффективных гамильтонианов непосредственно следует из теории симметрии, полученные данные должны вытекать из любой микроскопической теории гетероструктур в рассматриваемом порядке теории возмущений.

Авторы признательны чл.-корр. РАН Е.Л. Ивченко за плодотворное обсуждение вопросов, затронутых в работе, а также проф. В.А. Волкову за критические замечания, которые способствовали улучшению рукописи.

Приложение I

Параметры однозонного эффективного гамильтониана (8), полученные в рамках теории возмущений:

$$(D_{mm'}^{(\alpha)})_{ij} = \delta_{mm'}\delta_{ij} + \frac{1}{m_0}\sum_{\beta,s}\frac{(p_{ms}^{\alpha\beta})_i(p_{sm'}^{\beta\alpha})_j + (p_{ms}^{\alpha\beta})_j(p_{sm'}^{\beta\alpha})_i}{E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)}},$$

$$\Delta W_{ll'}^{(\alpha)} = \sum_{\beta}\frac{\Delta V_l^{\alpha\beta}\Delta V_{l'}^{\beta\alpha}}{E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)}}, \quad (\Delta P_{l;mm'}^{(\alpha)})_i = \sum_{\beta}\frac{(p_{mm'}^{\alpha\beta})_i\Delta V_l^{\beta\alpha}}{E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)}},$$

$$(\Delta R_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij} = \frac{1}{m_0}\Bigg[\sum_{\beta,\gamma,s}\frac{[(p_{ms}^{\alpha\beta})_i(p_{sm'}^{\beta\gamma})_j + (p_{ms}^{\alpha\beta})_j(p_{sm'}^{\beta\gamma})_i]\Delta V_l^{\gamma\alpha}}{(E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)})(E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\gamma)})}$$

$$+ \sum_{\beta,s}\frac{[(p_{ms}^{\alpha\beta})_i(p_{sm'}^{\beta\alpha})_j + (p_{ms}^{\alpha\beta})_j(p_{sm'}^{\beta\alpha})_i]\Delta V_l^{(\alpha)}}{(E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)})^2}\Bigg], \tag{П.I.1}$$

$$(\Delta M_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij} = \frac{2}{m_0}\sum_{\beta,\gamma,s}\frac{(p_{ms}^{\alpha\beta})_i\Delta V_l^{\beta\gamma}(p_{sm'}^{\gamma\alpha})_j}{(E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)})(E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\gamma)})},$$

$$(\Delta S_{l;mm'}^{(\alpha)})_{ij} = \sum_{\beta,s}\frac{(p_{ms}^{\alpha\beta})_i(\Delta L_{l;sm'}^{\beta\alpha})_j}{E_I^{(\alpha)} - E_I^{(\beta)}}.$$

Приложение II

Однозонные эффективные kp-гамильтонианы гетероструктур на основе прямозонных полупроводников $\mathrm{A^{III}B^{V}}$.

Зона Γ_1. Так как прямое произведение $\Gamma_1^* \otimes \Gamma_1 = \Gamma_1$, эффективный гамильтониан зоны Γ_1 будет определяться одной единичной матрицей I^{Γ_1} размерностью 1×1. Эта матрица является четной относительно инверсии времени. Поэтому, согласно табл. 1, эффективный гамильтониан этой зоны включает в себя пять независимых параметров: γ_0^I, $\Delta\gamma_0$, γ_1^I, $\Delta\gamma_1$ и $\Delta\beta$. Первые четыре константы определяют эффективный гамильтониан $H_0^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ рассматриваемой зоны:

$$H_0^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \gamma_0^I\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta\gamma_0 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \frac{\hbar^2}{2m_0}\big(k^2\gamma_1^I\delta_{\mathbf{kk}'} + \mathbf{k}\cdot\mathbf{k}'\Delta\gamma_1 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\big).$$

Дополнительный параметр $\Delta\beta$, не имеющий аналога в объемных материалах, приводит к поправке вида

$$\Delta H^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}').$$

Параметр γ_0^I определяет положение дна зоны Γ_1 в материале I ($\gamma_0^I = E_I^{\Gamma_1}$), а параметр $\Delta\gamma_0$ — разрыв этой зоны на интерфейсе ($\Delta\gamma_0 = \Delta E^{(\Gamma_1)} = E_{II}^{(\Gamma_1)} - E_I^{(\Gamma_1)}$). Параметры γ_1^I и $\Delta\gamma_1$ характеризуют соответственно эффективную массу электрона в зоне Γ_1 в материале I ($\gamma_1^I = m_0/m_I^*$) и ее изменение при переходе через интерфейс ($\Delta\gamma_1 = m_0/m_{II}^* - m_0/m_I^*$).

В результате эффективный гамильтониан зоны Γ_1 для гетероструктуры $H^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ принимает следующий вид:

$$H^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = E_I^{(\Gamma_1)}\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta E^{(\Gamma_1)} f(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \frac{\hbar^2}{2m_I^*}\left[k^2\delta_{\mathbf{kk}'} + \left(\frac{m_I^*}{m_{II}^*} - 1\right)\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}' f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right] + \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}').$$

Зона Γ_6. В прямом произведении $\Gamma_6^* \otimes \Gamma_6$ содержатся два неприводимых представления Γ_1 и Γ_{25} , поэтому четыре матрицы определяют эффективный гамильтониан зоны Γ_6. Это четная относительно инверсии времени единичная матрица I размерностью 2×2 и три нечетные относительно инверсии времени матрицы, в качестве которых могут быть выбраны матрицы Паули: σ_x, σ_y, σ_z.

Согласно табл. 1, шесть параметров — γ_0^I, $\Delta\gamma_0$, γ_1^I, $\Delta\gamma_1$, $\Delta\beta_1$, $\Delta\beta_2$ — будут определять эффективный гамильтониан зоны Γ_6. Первые пять параметров аналогичны параметрам γ_0^I, $\Delta\gamma_0$, γ_1^I, $\Delta\gamma_1$ и $\Delta\beta$ зоны Γ_1. Дополнительный параметр $\Delta\beta_2$ возникает только при учете спина электрона и имеет релятивистскую малость. В результате будем иметь:

$$H^{(\Gamma_6)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = I\Bigg\{E_I^{(\Gamma_6)}\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta E^{(\Gamma_6)} f(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \frac{\hbar^2}{2m_I^*}\left[k^2\delta_{\mathbf{kk}'} + \left(\frac{m_I^*}{m_{II}^*} - 1\right)\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}' f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right] + \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\Bigg\} + i\,\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_2(\sigma[\mathbf{k}\times\mathbf{k}'])f(\mathbf{k}-\mathbf{k}').$$

Дополнительный член в гамильтониане зоны Γ_6, пропорциональный $\Delta\beta_2$, определяет спин-орбитальную связь на интерфейсе и приводит к интерфейсному эффекту Рашбы.

Зона Γ_{15}. Так как

$$\Gamma_{15}^* \otimes \Gamma_{15} = \Gamma_1 \oplus \Gamma_{12} \oplus \Gamma_{15} \oplus \Gamma_{25},$$

существуют четыре набора матриц размерностью 3×3, которые определяют эффективный гамильтониан зоны Γ_{15}. Все эти матрицы могут быть выражены че-

Таблица П.II.1. Полный набор базисных матриц 3×3, определяющих эффективный гамильтониан зоны Γ_{15}

Представление	Четные относительно инверсии времени	Нечетные относительно инверсии времени
Γ_1	I	–
Γ_{12}	$2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2$ $\sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2)$	–
Γ_{15}	$\{J_y, J_z\}$, $\{J_z, J_x\}$, $\{J_x, J_y\}$	–
Γ_{25}	–	J_x, J_y, J_z

рез единичную матрицу I и матрицы момента $l = 1$: J_x, J_y, J_z. Соответствующие данные приведены в табл. П.II.1, где

$$\{J_i, J_j\} = (1/2)(J_iJ_j + J_jJ_i).$$

Тринадцать независимых констант определяют эффективный гамильтониан зоны Γ_{15}. Четыре константы γ_i^I $(i = 0, 1, 2, 3)$ определяют параметры зоны Γ_{15} объемного материала I. Они связаны с положением экстремума зоны Γ_{15} $E_I^{(\Gamma_{15})}$ и с обычно используемыми параметрами L, M, N следующим образом: $\gamma_0^A = E_I^{\Gamma_{15}}$, $\gamma_1^I - 4\gamma_2^I = L^I$, $\gamma_1^I + 2\gamma_2^I = M^I$, $\gamma_3^I = -2N^I$. Четыре константы $\Delta\gamma_i$ $(i = 0, 1, 2, 3)$ определяют изменение параметров γ_i^I при переходе через интерфейс ($\Delta\gamma_0 = \Delta E^{(\Gamma_{15})}$). Остальные пять параметров $\Delta\beta_i$ $(i = 1, 2, 3, 4, 5)$ не имеют аналогов в объемных материалах. Таким образом, будем иметь:

$$H^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = H_0^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \sum_{i=1}^{5} \Delta H_i^{(\Gamma_{15})},$$

где

$$H_0^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = I\Big\{E_I^{(\Gamma_{15})}\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta E^{(\Gamma_{15})} f(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$
$$+ \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\gamma_1^I k^2 \delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta\gamma_1(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right]\Big\}$$
$$+ \frac{\hbar^2}{2m_0}\left\{(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)\left[\gamma_2^I(2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)\delta_{\mathbf{kk}'}\right.\right.$$
$$\left. + \Delta\gamma_2(2k_zk_z' - k_xk_x' - k_yk_y') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right]$$
$$+ 3(J_x^2 - J_y^2)\left[\gamma_2^I(k_x^2 - k_y^2)\delta_{\mathbf{kk}'}\right.$$
$$\left.\left. + \Delta\gamma_2(k_xk_x' - k_yk_y') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right]\right\}$$
$$+ \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_i \{J_i, J_{i+1}\}\left[\gamma_3^I k_i k_{i+1}\right.$$
$$\left. + \frac{\Delta\gamma_3}{2}(k_ik_{i+1}' + k_{i+1}k_i') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\right],$$

$$\Delta H_1^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_0} I\Delta\beta_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 f(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\Delta H_2^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_2\big\{(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)$$
$$\times [2(k_z - k_z')^2 - (k_x - k_x')^2 - (k_y - k_y')^2]$$
$$+ 3(J_x^2 - J_y^2)[(k_x - k_x')^2 - (k_y - k_y')^2]\big\} f(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\Delta H_3^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_3$$
$$\times \sum_i \{J_i, J_{i+1}\}(k_i - k_i')(k_{i+1} - k_{i+1}') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\Delta H_4^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{m_0 a_0}\Delta\beta_4$$
$$\times \sum_i \{J_i, J_{i+1}\}(k_{i+2} - k_{i+2}') f(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\Delta H_5^{(\Gamma_{15})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_5(\mathbf{J}[\mathbf{k} \times \mathbf{k}']) f(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Параметры $\Delta\beta_{1,2,3}$ аналогичны параметру $\Delta\beta$ зоны Γ_1. Наличие в гамильтониане линейных по $\mathbf{k}$ членов, пропорциональных $\Delta\beta_4$, приводит к смешиванию состояний на интерфейсе. Здесь для удобства введена величина a_0, имеющая размерность длины, в качестве которой удобно выбрать постоянную решетки материала I. Параметр $\Delta\beta_5$ аналогичен параметру $\Delta\beta_2$ в зоне Γ_6, однако в отличие от него не имеет релятивистской малости.

Зона Γ_8. Так как

$$\Gamma_8^* \otimes \Gamma_8 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \Gamma_{12} \oplus 2\Gamma_{15} \oplus 2\Gamma_{25},$$

16 независимых матриц 4×4 будут определять эффективный гамильтониан зоны Γ_8. Все они могут быть выражены через единичную матрицу I и матрицы момента $j = 3/2$: J_x, J_y, J_z. Соответствующие данные приведены в табл. П.II.2.

Согласно данным, представленным в табл. 1, 17 независимых параметров определяют эффективный гамильтониан зоны Γ_8. Параметры γ_i^I и $\Delta\gamma_i$ $(i = 0, 1 \ldots 4)$ определяют параметры зонной структуры объемного материала I и их изменение при переходе через гетероинтерфейс. Остальные 7 параметров $\Delta\beta_i$ $(i = 1 \ldots 7)$ не имеют аналогов в объемных материалах. В соответствии с этим представим эффективный гамильтониан зоны Γ_8 в виде

$$H^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = H_0^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \sum_{i=1}^{7} \Delta H_i^{(\Gamma_8)},$$

Таблица П.II.2. Полный набор базисных матриц 4×4, определяющих эффективный гамильтониан зоны Γ_8

Представление	Четные относительно инверсии времени	Нечетные относительно инверсии времени
Γ_1	I	–
Γ_2	–	$\{J_x, \{J_y, J_z\}\}$
Γ_{12}	$2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2$ $\sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2)$	–
Γ_{15}	$\{J_y, J_z\}$, $\{J_z, J_x\}$, $\{J_x, J_y\}$	$\{J_x, (J_y^2 - J_z^2)\}$, $\{J_y, (J_z^2 - J_x^2)\}$, $\{J_z, (J_x^2 - J_y^2)\}$
Γ_{25}	–	J_x, J_y, J_z J_x^3, J_y^3, J_z^3

где

$$
\begin{aligned}
H_0^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = I\Big\{ & E_I^{(\Gamma_8)}\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta E^{(\Gamma_8)} f(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\
& + \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\gamma_1^I k^2 \delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta\gamma_1(\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right]\Big\} \\
& - \frac{\hbar^2}{6m_0}\big\{(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)\left[\gamma_2^I(2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)\delta_{\mathbf{kk}'}\right. \\
& \left. + \Delta\gamma_2(2k_z k_z' - k_x k_x' - k_y k_y') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right] \\
& + 3(J_x^2 - J_y^2)\left[\gamma_2^I(k_x^2 - k_y^2)\delta_{\mathbf{kk}'}\right. \\
& \left. + \Delta\gamma_2(k_x k_x' - k_y k_y') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right]\big\} \\
& - \frac{2\hbar^2}{m_0}\sum_i \{J_i, J_{i+1}\}\left[\gamma_3^I k_i k_{i+1}\delta_{\mathbf{kk}'}\right. \\
& \left. + \frac{\Delta\gamma_3}{2}(k_i k_{i+1}' + k_{i+1}k_i') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right] \\
& + \frac{\hbar^2}{m_0 a_0}\sum_i \{J_i, (J_{i+1}^2 - J_{i+2}^2)\} \\
& \times \left[\gamma_4^I k_i \delta_{\mathbf{kk}'} + \frac{\Delta\gamma_4}{2}(k_i + k_i') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\right],
\end{aligned}
$$

$$
\Delta H_1^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\hbar^2}{2m_0} I\Delta\beta_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta H_2^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\hbar^2}{6m_0}\Delta\beta_2 & \big\{(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2) \\
& \times \left[2(k_z - k_z')^2 - (k_x - k_x')^2 - (k_y - k_y')^2\right] \\
& + 3(J_x^2 - J_y^2)\left[(k_x - k_x')^2 - (k_y - k_y')^2\right]\big\} f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta H_3^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{2\hbar^2}{m_0}\Delta\beta_3 & \\
\times \sum_i \{J_i, J_{i+1}\} & (k_i - k_i')(k_{i+1} - k_{i+1}') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta H_4^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{m_0 a_0}\Delta\beta_4 & \\
\times \sum_i \{J_i, J_{i+1}\} & (k_{i+2} - k_{i+2}') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned}
$$

$$
\Delta H_5^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_5(\mathbf{J}[\mathbf{k}\times\mathbf{k}']) f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta H_6^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_6 & \\
\times \sum_i \{J_i, (J_{i+1}^2 - J_{i+2}^2)\} & (k_{i+1}k_{i+2} - k_{i+1}'k_{i+2}') f(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned}
$$

$$
\Delta H_7^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = i\,\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\beta_7(\mathbf{J}^3[\mathbf{k}\times\mathbf{k}']) f(\mathbf{k}-\mathbf{k}').
$$

Здесь $E_I^{(\Gamma_8)}$ — положение экстремума зоны Γ_8 в материале I; $\Delta E^{(\Gamma_8)}$ — разрыв зоны; $\gamma_{1,2,3}^I$ — параметры Латтинжера материала I; $\Delta\gamma_{1,2,3}$ — изменение этих параметров при переходе через интерфейс. Параметр γ_4^I, определяющий линейные по $\mathbf{k}$ члены в объемном материале I, и его изменение $\Delta\gamma_4$ имеют релятивистскую малость. Параметры $\Delta\beta_i$ $(i = 1\ldots5)$ аналогичны соответствующим параметра зоны Γ_{15} и не имеют релятивистской малости. Линейный по $\mathbf{k}$ член, пропорциональный $\Delta\beta_4$, приводит к смешиванию состояний на интерфейсе. Член, пропорциональный $\Delta\beta_5$, описывает связь эффективного спина дырки $(S = 3/2)$ с ее орбитальным движением на интерфейсе (интерфейсный эффект Рашбы). Параметры $\Delta\beta_{6,7}$ имеют релятивистскую малость.

Список литературы

[1] O. von Roos. Phys. Rev. B, **27**, 7547 (1983).
[2] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **76**, 045 327 (2007).
[3] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **48**, 4964 (1993).
[4] A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev, Al.L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer. Phys. Rev. B, **65**, 125 302 (2002).
[5] A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev. Phys. Rev. B, **73**, 115 312 (2006).
[6] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rössler. Phys. Rev. B, **54**, 5852 (1996).

[7] H.C. Liu. Appl. Phys. Lett., **51**, 1019 (1987).
[8] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. Phys. Rev. B, **47**, 13 498 (1993).
[9] G.F. Glinskii, V.A. Lakisov, A.G. Dolmatov, K.O. Kravchenko. Nanotechnology, **11**, 233 (2000).
[10] L. Leibler. Phys. Rev. B, **12**, 4443 (1975).
[11] L. Leibler. Phys. Rev. B, **16**, 863 (1977).
[12] M.G. Burt. J. Phys.: Condens. Matter, **4**, 6651 (1992).
[13] E.E. Takhtamirov, V.A. Volkov. Phys. Low-Dim. Structur., **10/11**, 407 (1995).
[14] E.E. Takhtamirov, V.A. Volkov. Semicond. Sci. Technol., **12**, 77 (1997).
[15] Э.Е. Тахтамиров, В.А. Волков. УФН, **167**, 1123 (1997).
[16] Г.Ф. Глинский, К.О. Кравченко. ФТТ, **40**, 872 (1998).
[17] G.F. Glinskii, K.O. Kravchenko. cond-mat/9808174 (unpublished).
[18] Э.Е. Тахтамиров, В.А. Волков. ЖЭТФ, **116**, 1843 (1999).
[19] Г.Ф. Глинский, К.О. Кравченко. Изв. СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, № 1, 20 (1999).
[20] Г.Ф. Глинский, В.А. Лакисов. Изв. СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, № 1, 5 (2000).
[21] А.Г. Долматов, Г.Ф. Глинский. Изв. СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, № 1, 10 (2000).
[22] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **72**, 165 344 (2005).
[23] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **72**, 165 345 (2005).
[24] Г.Ф. Глинский. В кн.: *Нанотехнология: физика, процессы, диагностика, приборы*, под ред. В.В. Лучинина, Ю.М. Таирова (М., Физматлит, 2006) с. 16.
[25] Г.Ф. Глинский. *Полупроводники и полупроводниковые гетероструктуры: симметрия и электронные состояния* (СПб., Технолит, 2008).
[26] E. Takhtamirov, R.V.N. Melnik. New J. Phys., **12**, 123 006 (2010).
[27] P.C. Klipstein. Phys. Rev. B, **81**, 235 314 (2010).
[28] L.J. Sham. Phys. Rev., **150**, 720 (1966).
[29] Г.Ф. Глинский, М.С. Миронова. Изв. СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, № 2, 8 (2013).
[30] G.F. Glinskii, M.S. Mironova. J. Phys.: Conf. Ser., **461**, 012 040 (2013).
[31] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
[32] Г.Ф. Глинский. *Методы теории групп в квантовой механике* (СПб., Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, 2012).
[33] А.И. Шпаковский, Г.Ф. Глинский. Науч.-техн. вед. СПбГПУ, № 3, 56 (2009).

Редактор Т.А. Полянская

Effective Hamiltonians for heterostructures based on direct-gap $A^{III}B^{V}$ semiconductors. Kp-perturbation theory and method of invariants

G.F. Glinskii, M.S. Mironova

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“, 197376 St. Petersburg, Russia

Abstract A regular procedure is proposed for obtaining effective kp-Hamiltonians for arbitrary heterostructures based on lattice-matched direct-gap semiconductors. Heterostructure potential is described using characteristic functions $f_l(\mathbf{a})$, which indicate substitution of reference crystal atoms in sublattice l in primitive cell $\mathbf{a}$. Kp-perturbation theory for heterostructures is developed, taking into account charge carriers scattering on an additional locl potential due to atoms substitution. A method is proposed for constructiong the effective kp-Hmiltonians using method of invariants, which takes into account microscopic summetry of interfaces. Obtained Hamiltonians contain, along with band parameters, additional parameters, which don't have any analogues in bulk materials. As an example effective Hamiltonians are derived for bands Γ_1, Γ_6, Γ_{15} and Γ_8 of heterosturctures based on cubic semiconductoros $A^{III}B^{V}$ with substitution in one sublattice.