

Рассеяние дырок гетерограницами GaAs/AlAs (111) и (110)

© Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов[†]

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 18 апреля 2005 г. Принята к печати 23 сентября 2005 г.)

На основе 18-зонной $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели проведен анализ волновых функций состояний валентной зоны. Найдено, что обычно используемое приближение не зависящих от энергии эффективных масс для зон легких и тяжелых дырок оправдано только вблизи вершины валентной зоны. Рассмотрены условия сшивания огибающих функций дырок на гетерограницах GaAs/AlAs с ориентациями (111) и (110) как с учетом, так и без учета спин-орбитального взаимодействия для энергий в окрестности вершины валентной зоны. Они получены в результате упрощения описания электронных состояний методом псевдопотенциала. Полученные условия сшивания полностью согласуются с симметрией задачи. В них присутствует смешивание огибающих функций с их нормальными производными и смешивание производных с функциями. Показано, что смешивание легких и тяжелых дырок на гетерогранице не имеет места для границы (111), но существует для границы (110). Найдено, что для гетерограницы (110) имеется заметно большее, чем для границы (001), резонансное смешивание состояний.

PACS: 73.50.Dn, 73.40.Kp

Большая часть работ, посвященных изучению рассеяния дырок гетерограницами GaAs/AlAs, относится к гетероструктурам с ориентацией гетерограниц (001) [1–9]. Именно для таких систем в работе [10] в рамках метода огибающих функций нами предложена модель для описания рассеяния дырок гетерограницами. Имеется лишь небольшое число исследований, касающихся рассеяния дырок другими гетерограницами GaAs/AlAs [11,12]. Насколько нам известно, в настоящее время нет работ, посвященных адекватному анализу условий сшивания огибающих функций дырок в гетероструктурах GaAs/AlAs для ориентаций (111) и (110) плоскости гетерограницы. В то же время, как показано в работах [13–20], наноструктуры с такими границами обладают рядом интересных свойств. В настоящей работе на основе подходов, изложенных в [10], предложены модели для описания рассеяния дырок гетерограницами GaAs/AlAs ориентаций (111) и (110), на их основе проведен анализ дырочных состояний и рассмотрено туннелирование электронов в данных гетероструктурах.

Опишем кратко основные идеи метода нахождения условий сшивания для огибающих функций. На первом этапе на основе использованного нами ранее для электронных состояний в зоне проводимости подхода [19–21] находятся условия сшивания для огибающих без учета спин-орбитального взаимодействия.

Соответствующие условия можно представить в виде

$$\mathbf{F}^1 = \bar{\mathbf{T}}\mathbf{F}^2. \quad (1)$$

Здесь $\bar{\mathbf{T}}$ — матрица сшивания для огибающих функций на гетерогранице $z' = z'_0$, разделяющей среды с номерами 1 и 2. Мы полагаем, что ось z' направлена перпендикулярно слоям гетероструктуры. Огибающие функции $F_m^l(z'_0)$ и их первые производные $(d/dz')F_m^l(z'_0)$

при $z' = z'_0$, соответствующие блоховским состояниям $|\mathbf{K}_m^l\rangle$ с номером m в выбранной точке зоны Бриллюэна для среды с номером l , составляют вектор-столбец \mathbf{F}^l размерностью $2v_m$. Для получения достаточно точных условий сшивания огибающих функций необходимо решить две основные проблемы. Во-первых, определить число v_m огибающих функций, входящих в условия сшивания. Это число должно равняться количеству ветвей в комплексной зонной структуре материалов, образующих гетероструктуру, которые вносят основной вклад в формирование волновых функций. Данная величина определяется из анализа матриц сшивания, полученных с помощью численных расчетов методом псевдопотенциала [19–23], и зависит от ориентации гетерограниц, области энергий, значений параллельных гетерограницам компонент волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} . Во-вторых, $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модель для расчета зонной структуры должна быть достаточно простой, но в то же время полученные с ее помощью результаты должны хорошо воспроизводить данные псевдопотенциальных расчетов для отмеченных выше наиболее важных ветвей комплексной зонной структуры. Заметим, что число состояний $|\mathbf{K}_m^l\rangle$, используемых при построении $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели, может быть больше v_m , но только v_m огибающих входят в условия сшивания (1). При выполнении этих требований матрица $\bar{\mathbf{T}}$ оказывается слабо зависящей от энергии и этой зависимостью можно пренебречь. Адекватность условий сшивания огибающих (1) решаемой задаче может быть определена из анализа псевдопотенциальных расчетов в каждом конкретном случае. В матрице $\bar{\mathbf{T}}$ можно выделить блоки размерности $(v_m \times v_m)$, связывающие функции с функциями, $\bar{\mathbf{T}}_{11}$, функции с производными и наоборот, $\bar{\mathbf{T}}_{12}$ и $\bar{\mathbf{T}}_{21}$ соответственно, и производные с производными, $\bar{\mathbf{T}}_{22}$.

При учете спин-орбитального взаимодействия строится соответствующая $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модель для расчета зонной структуры в базисе из функций $|\mathbf{K}_m^l\rangle\alpha$, $|\mathbf{K}_m^l\rangle\beta$, где α и

[†] E-mail: vnchern@elefot.tsu.ru
Fax: (3822) 233015

β — двухкомпонентные спиноры с проекциями спина σ_z на ось z , равными $1/2$ и $-1/2$ соответственно.

Ясно, что огибающие функции при этом становятся двухкомпонентными спинорами, а порядки матриц сшивания удваиваются. Условия сшивания для огибающих имеют вид, аналогичный (1), где \mathbf{F} есть вектор-столбец с компонентами $F_m(z'_0)\alpha$, $F_m(z'_0)\beta$ и $F'_m(z'_0)\alpha$, $F'_m(z'_0)\beta$ ($m = 1, \dots, v_m$, штрих означает производную по z'). Мы не предполагаем дополнительного смешивания состояний гетерограницами при учете спин-орбитального взаимодействия. Следовательно, матрица сшивания \mathbf{T} для огибающих при учете спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \bar{T}_{11} & 0 & \bar{T}_{12} & 0 \\ 0 & \bar{T}_{11} & 0 & \bar{T}_{12} \\ \bar{T}_{21} & 0 & \bar{T}_{22} & 0 \\ 0 & \bar{T}_{21} & 0 & \bar{T}_{22} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где \bar{T}_{ij} ($i, j = 1, 2$) — блоки матрицы $\bar{\mathbf{T}}$, входящей в формулу (1), найденные при решении задачи без учета спин-орбитального взаимодействия.

Мы провели псевдопотенциальные расчеты и построили модели в рамках приближения огибающих функций для гетероструктур GaAs/AlAs с ориентациями гетерограниц (111) и (110) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Данный выбор \mathbf{k}_{\parallel} обусловлен тем, что дырочные состояния для этих материалов в основном расположены в окрестности Γ -точки (Γ_{15} -состояния без учета спина). Другие долины (X и L) расположены либо значительно ниже по энергии в валентной зоне, либо значительно выше в зоне проводимости, поэтому состояния данных долин не входят в \mathbf{kr} -модель, а соответствующие огибающие не присутствуют в условиях сшивания. Поэтому в функциях $|\mathbf{K}_m^L\rangle\alpha$ и $|\mathbf{K}_m^L\rangle\beta$ номер m соответствует только разным Γ -состояниям.

При построении \mathbf{kr} -модели (без учета спина) мы учитывали состояния Γ_{15V} , Γ_{1C} , Γ_{15C} и Γ_{12C} . Здесь индексы V и C указывают на принадлежность состояний к валентной зоне и зоне проводимости соответственно. Таким образом, с учетом вырождения данных состояний матрица \mathbf{kr} -гамильтониана без учета спина имеет размерность (9×9) , а с учетом спин-орбитального взаимодействия (18×18) . При вычислениях мы учитывали следующие матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия H_{SO} :

$$\begin{aligned} \langle X_V | H_{SO} | Y_V \rangle &= -i\Delta_0/3, & \langle X_C | H_{SO} | Y_C \rangle &= -i\Delta_1/3, \\ \langle X_V | H_{SO} | Y_C \rangle &= -i\bar{\Delta}/3, & \langle X_V | H_{SO} | \Gamma_{12C} \rangle &= -i\Delta_2. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $|X_V\rangle$, $|Y_V\rangle$, $|X_C\rangle$, $|Y_C\rangle$ — состояния симметрии Γ_{15} типа x и y (в системе координат, обычной для объемных кристаллов). Используя свойства симметрии, остальные матричные элементы H_{SO} легко можно получить из (3).

Значения параметров Δ_0 , Δ_1 и $\bar{\Delta}$ хорошо известны из различных литературных данных [24–26]. В наших расчетах мы использовали следующие значения:

$\Delta_0 = 0.341$ эВ, $\Delta_1 = 0.171$ эВ, $\bar{\Delta} = -0.061$ эВ для GaAs и $\Delta_0 = 0.30$ эВ, $\Delta_1 = 0.15$ эВ, $\bar{\Delta} = -0.05$ эВ для AlAs. Матричный элемент $\Delta_2 = \langle X_V | H_{SO} | \Gamma_{12} \rangle$ введен нами для описания расщепления зоны тяжелых дырок в направлении [111] волнового вектора. Для обоих материалов мы приняли значение $\Delta_2 = 0.005$ эВ. Такое Δ_2 приводит к известным [24–26] величинам смещения экстремума зоны тяжелых дырок из центра зоны Бриллюэна для направления [111] волнового вектор.

При решении различных задач, в которых принимается во внимание спин-орбитальное взаимодействие, часто вместо функций $|\mathbf{K}_m^L\rangle\alpha$ и $|\mathbf{K}_m^L\rangle\beta$ с определенными значениями проекций спина на ось z используются собственные функции оператора момента импульса $|j, m_j\rangle$ ($j = 3/2, 1/2$; $m_j = \pm 1/2, \dots, \pm j$). В частности, вместо функций состояния Γ_{15V}

$$|X_V\rangle\alpha, \quad |Y_V\rangle\alpha, \quad |Z_V\rangle\alpha, \quad |X_V\rangle\beta, \quad |Y_V\rangle\beta, \quad |Z_V\rangle\beta \quad (4)$$

можно использовать их линейные комбинации (функции Латгинджера–Кона)

$$\begin{aligned} |3/2, 3/2\rangle &= (1/\sqrt{2})(X_V + iY_V)\alpha, \\ |3/2, -3/2\rangle &= (1/\sqrt{2})(X_V - iY_V)\beta, \\ |3/2, 1/2\rangle &= (1/\sqrt{6})[(X_V + iY_V)\beta - 2Z_V\alpha], \\ |3/2, -1/2\rangle &= (1/\sqrt{6})[(X_V - iY_V)\alpha + 2Z_V\beta], \\ |1/2, 1/2\rangle &= (1/\sqrt{3})[(X_V + iY_V)\beta + Z_V\alpha], \\ |1/2, -1/2\rangle &= (1/\sqrt{3})[-(X_V - iY_V)\alpha + Z_V\beta]. \end{aligned} \quad (5)$$

Известно, что первые 4 функции из набора (5) образуют базис представления Γ_8 двойной группы T_d^2 , две последних — базисные функции представления Γ_7 .

Перейдем к обсуждению полученных результатов. Рассеяние электронов гетерограницами исследовано в модели с разрывным на гетерограницах псевдопотенциалом с использованием техники матрицы рассеяния [19–23, 27], комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Детальное изложение методов расчета приведено в работах [19–23]. Для вычислений использовались псевдопотенциалы [28]. Вычисления проводились в интервале энергий от -0.5 до 0 эВ. Нуль энергии выбран в вершине валентной зоны E_V GaAs. В приведенных далее матрицах сшивания для огибающих соответствующие матричные элементы приведены в атомных единицах. Считается, что GaAs находится слева от AlAs, гетерограница выбрана проходящей по общей плоскости из атомов As для ориентации гетерограниц (111). Для ориентации (110) гетерограница проведена посередине между атомными плоскостями соседних кристаллов.

Гетерограница (111)

Структура с данным направлением роста имеет группу симметрии C_{3V} . Анализ матриц сшивания для состояний с энергиями в окрестности вершины валентной зоны при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ без учета спин-орбитального взаимодействия показал, что основной вклад в них вносят зона симметрии Λ_1 и двукратно вырожденная зона Λ_3 . Найдено, что при использовании 9-зонной \mathbf{kp} -модели наиболее важные ветви комплексной зонной структуры хорошо воспроизводят данные псевдопотенциальных расчетов. Однако, в отличие от случая с гетерограницей (001), состояния Γ_{12C} вносят для данной гетерограницы существенный вклад при определении состояний симметрии Λ_3 . В условия сшивания для огибающих входят следующие 3 состояния Γ_{15V} :

$$\frac{1}{\sqrt{3}} |X_V + Y_V + Z_V\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} |X_V - Y_V\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{6}} |X_V + Y_V - 2Z_V\rangle. \quad (6)$$

В данном случае \mathbf{F} есть вектор-столбец с компонентами F_m, F'_m ($m = 1, 2, 3$) в порядке, соответствующем (6). Матрица сшивания для огибающих $\bar{\mathbf{T}}$ в соответствии с симметрией группы C_{3V} является квазидиагональной и разбивается на три двумерных блока, соответствующих состоянию Λ_1 и двукратно вырожденному состоянию Λ_3 . Численные значения матричных элементов t_{ij} ($i, j = 1, \dots, 6$) матрицы $\bar{\mathbf{T}}$ находятся с помощью расчета методом псевдопотенциала с последующим усреднением по энергии. Мы нашли, что $t_{11} = 1.029$, $t_{22} = t_{33} = 1.089$. Отличие данных чисел от единицы связано с различиями в волновых функциях состояний Γ_{15V} для GaAs и AlAs. Производные от огибающих связаны между собой через матричные элементы $t_{44} = 0.700$ и $t_{55} = t_{66} = 1.314$. Эти численные значения в основном отражают различия в эффективных массах для GaAs и AlAs. Связь огибающих функций с их производными и наоборот дается через матричные элементы $t_{14} = -0.0911$, $t_{25} = t_{36} = 0.2544$ и $t_{41} = 0.0018$, $t_{52} = t_{63} = -0.0136$ соответственно. В соответствии с симметрией задачи остальные элементы матрицы $\bar{\mathbf{T}}$ равны нулю. Расчеты коэффициентов прохождения дырок через различные структуры (без учета спин-орбитального взаимодействия) показывают адекватность упрощенных моделей.

Перейдем к рассмотрению результатов с учетом спин-орбитального взаимодействия. В области энергий в окрестности E_V расположены 2 близко расположенные зоны тяжелых дырок ($h1$) и ($h2$) симметрии Λ_4 и Λ_5 . Экстремумы в этих зонах незначительно смещены из точки $\mathbf{k} = 0$. Вследствие операции обращения времени имеет место соотношение $E_{h1}(\mathbf{k}) = E_{h2}(-\mathbf{k})$, где \mathbf{k} — вектор вдоль направления [111]. Имеются также двукратно вырожденные зоны симметрии Λ_6 двойной группы. Это зоны легких дырок (l) и расположенная при $k = 0$ ниже по энергии на величину, близкую к Δ_0 , спин-отщепленная зона (s). Матрица сшивания для огибаю-

щих \mathbf{T} размерности (12×12) в базисе из функций

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{3}} |X_V + Y_V + Z_V\rangle\alpha, & \quad \frac{1}{\sqrt{3}} |X_V + Y_V + Z_V\rangle\beta, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |X_V - Y_V\rangle\alpha, & \quad \frac{1}{\sqrt{2}} |X_V - Y_V\rangle\beta, \\ \frac{1}{\sqrt{6}} |X_V + Y_V - 2Z_V\rangle\alpha, & \quad \frac{1}{\sqrt{6}} |X_V + Y_V - 2Z_V\rangle\beta \end{aligned} \quad (7)$$

может быть получена из $\bar{\mathbf{T}}$ с помощью (2).

Удобнее, однако, использовать следующие линейные комбинации функций $|j, m_j\rangle$ (5):

$$\begin{aligned} |\varphi 1\rangle &= \frac{1}{2} \left[\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, 1/2\rangle + |3/2, -1/2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{2}+i}{\sqrt{3}} \left(|3/2, 3/2\rangle - \frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle \right) \right], \\ |\varphi 2\rangle &= \frac{1}{2} \left[-\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, 1/2\rangle + |3/2, -1/2\rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sqrt{2}-i}{\sqrt{3}} \left(|3/2, 3/2\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle \right) \right], \\ |\varphi 3\rangle &= \frac{1}{2} \left[\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, 1/2\rangle + |3/2, -1/2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{2}+i}{\sqrt{3}} \left(-|3/2, 3/2\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle \right) \right], \\ |\varphi 4\rangle &= \frac{1}{2} \left[-\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, 1/2\rangle + |3/2, -1/2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{2}-i}{\sqrt{3}} \left(|3/2, 3/2\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle \right) \right], \\ |\varphi 5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{1+i}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle \right], \\ |\varphi 6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1+i}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Первые 4 функции в (8) образуют базис четырехмерного представления Γ_8 , две последних — базис двумерного представления Γ_7 . Данные функции являются собственными функциями оператора $D_{1/2}(g)$, где g — отражение в плоскости $(1\bar{1}0)$, $g(xyz) = (yxz)$, причем

$$\begin{aligned} D_{1/2}(g)|\varphi j\rangle &= -i|\varphi j\rangle \quad (j = 1, 3, 5), \\ D_{1/2}(g)|\varphi j\rangle &= i|\varphi j\rangle \quad (j = 2, 4, 6). \end{aligned} \quad (9)$$

Функции $|\varphi 1\rangle$ и $|\varphi 2\rangle$ образуют базис одномерных представлений Λ_4 и Λ_5 соответственно. Пары функций $|\varphi 3\rangle$, $|\varphi 5\rangle$ и $|\varphi 4\rangle$, $|\varphi 6\rangle$ преобразуются по разным строкам двумерного представления Λ_6 и не смешиваются поэтому ни в объеме, ни на гетерограницах.

Перейдем к анализу волновых функций состояний валентной зоны.

Волновые функции состояний тяжелых дырок можно представить в виде

$$\begin{aligned} |h1\rangle &= \exp(ikz')D_{h1}|\varphi1\rangle + |\chi_{h1}\rangle, \\ |h2\rangle &= \exp(ikz')D_{h2}|\varphi2\rangle + |\chi_{h2}\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

где функции $|\chi\rangle$ отражают незначительный вклад состояний из зоны проводимости. Численные расчеты показали, что коэффициенты $|D_{h1}| \approx |D_{h2}|$ и для GaAs меняются от 1 до ~ 0.92 в указанном выше интервале энергий. Все средние значения спина (спиновых матриц Паули) $\bar{\sigma}_z(h1)$, $\bar{\sigma}_z(h2)$, $\bar{\sigma}_x(h1) = -\bar{\sigma}_y(h1)$ и $\bar{\sigma}_x(h2) = -\bar{\sigma}_y(h2)$ для состояний тяжелых дырок равны нулю.

Перейдем к рассмотрению состояний легких дырок, волновые функции которых запишем в виде

$$\begin{aligned} |l1\rangle &= \exp(ikz')(D_{l3}|\varphi3\rangle + D_{l5}|\varphi5\rangle) + |\chi_{l1}\rangle, \\ |l2\rangle &= \exp(ikz')(D_{l4}|\varphi4\rangle + D_{l6}|\varphi6\rangle) + |\chi_{l2}\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

Функции $|\chi\rangle$ отражают вклад состояний из зоны проводимости. Найдено, что числа $|D_{l3}|$ ($|D_{l4}|$) в данном интервале энергий для GaAs меняются от 1 до ~ 0.6 , а $|D_{l5}|$ ($|D_{l6}|$) — от 0 до ~ 0.75 . Таким образом, как и для направления (001), учет состояний $|1/2, 1/2\rangle$ и $|1/2, -1/2\rangle$ спин-отщепленной зоны Γ_7 необходим для правильного описания волновых функций легких дырок, особенно в области энергий в окрестности спин-отщепленной зоны. Для легких дырок средние значения спина удовлетворяют соотношениям $\bar{\sigma}_z(l1) = \bar{\sigma}_z(l2) = 0$, $\bar{\sigma}_x(l1) = -\bar{\sigma}_y(l1) = -\bar{\sigma}_x(l2) = \bar{\sigma}_y(l2)$. Для GaAs в указанном интервале энергий $\bar{\sigma}_x(l1)$ медленно меняется от $-\sqrt{2}/3$ до -0.0034 .

Волновые функции состояний спин-отщепленной зоны представим в виде

$$\begin{aligned} |s1\rangle &= \exp(ikz')(D_{s5}|\varphi5\rangle + D_{s3}|\varphi3\rangle) + |\chi_{s1}\rangle, \\ |s2\rangle &= \exp(ikz')(D_{s6}|\varphi6\rangle + D_{s4}|\varphi4\rangle) + |\chi_{s2}\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Как и ранее, функции $|\chi\rangle$ отражают вклад состояний из зоны проводимости. Найдено, что $|D_{s5}|$ ($|D_{s6}|$) для GaAs в интервале энергий от вершины спин-отщепленной зоны ($-\Delta_0$) до -0.5 эВ меняются от 1 до ~ 0.89 , а $|D_{s3}|$ ($|D_{s4}|$) от 0 до ~ 0.36 . Таким образом, анализ волновых функций показывает, что учет состояний Γ_8 необходим для правильного описания волновых функций спин-отщепленной зоны. Как и для остальных зон, $\bar{\sigma}_z = 0$, $\bar{\sigma}_x = \bar{\sigma}_y$. В области энергий спин-отщепленной зоны для GaAs $\bar{\sigma}_x(s1)$ монотонно меняется от $-\sqrt{2}/6$ до $\sim (-0.52)$ ($\bar{\sigma}_x(s1) = -\bar{\sigma}_x(s2)$).

Перейдем к рассмотрению условий сшивания для огибающих функций. Для данной гетерограницы более простые матрицы сшивания получаются с использованием базиса из функций $|\varphi\rangle$, определенных соотношениями (8). Матрица сшивания для огибающих функций в

этом базисе $\tilde{\mathbf{T}}$ может быть получена с помощью унитарного преобразования определенной в (2) матрицы \mathbf{T} . Будем считать, что $\tilde{\mathbf{F}}$ — вектор-столбец с компонентами $\tilde{\mathbf{F}}_m$, $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ ($m = 1, \dots, 6$), заданными в том же порядке, как и в (8). Условия сшивания для огибающих функций запишем в виде

$$\tilde{\mathbf{F}}^1 = \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{F}}^2. \quad (13)$$

В соответствии с симметрией задачи матрица $\tilde{\mathbf{T}}$ распадается на 4 независимых блока. Первые два одинаковых блока соответствуют состояниям с симметрией представлений Λ_4 и Λ_5 . В первом блоке размерности (2×2) имеются матричные элементы \tilde{t}_{ij} матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ с $i, j = 1, 7$ во втором — элементы \tilde{t}_{ij} с $i, j = 2, 8$. Эти два блока описывают рассеяние гетерограницами тяжелых дырок. Два других блока размерности (4×4) (\tilde{t}_{ij} с $i, j = 3, 5, 9, 11$ и \tilde{t}_{ij} с $i, j = 4, 6, 10, 12$) соответствуют состояниям, отвечающим разным строкам двумерного представления Λ_6 , и описывают рассеяние гетерограницами легких дырок и дырок спин-отщепленной зоны. Таким образом, для гетерограницы (111) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ нет смешивания состояний легких и тяжелых дырок.

Приведем ненулевые матричные элементы \tilde{t}_{ij} матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$, выраженные через элементы t_{ij} рассмотренной ранее матрицы \mathbf{T} . Сшивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ описывается матричными элементами \tilde{t}_{ij} ($i, j = 1, \dots, 6$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{11} &= \tilde{t}_{22} = t_{22}, \quad \tilde{t}_{33} = \tilde{t}_{44} = (2/3)t_{11} + (1/3)t_{22}, \\ \tilde{t}_{55} &= \tilde{t}_{66} = (1/3)t_{11} + (2/3)t_{22}, \\ \tilde{t}_{35} &= -\tilde{t}_{46} = -\tilde{t}_{53} = \tilde{t}_{64} = i(\sqrt{2}/3)(t_{11} - t_{22}). \end{aligned} \quad (14)$$

Поскольку разность $t_{11} - t_{22}$ мала, имеется незначительное смешивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ состояний легких дырок и дырок спин-отщепленной зоны на гетерогранице.

Сшиванию производных от огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ между собой соответствуют матричные элементы \tilde{t}_{ij} ($i, j = 7, \dots, 12$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{77} &= \tilde{t}_{88} = \tilde{t}_{55}, \quad \tilde{t}_{99} = \tilde{t}_{10\ 10} = (2/3)t_{44} + (1/3)t_{55}, \\ \tilde{t}_{11\ 11} &= \tilde{t}_{12\ 12} = (1/3)t_{44} + (2/3)t_{55}, \\ \tilde{t}_{9\ 11} &= -\tilde{t}_{10\ 12} = -\tilde{t}_{11\ 9} = \tilde{t}_{12\ 10} = i(\sqrt{2}/3)(t_{44} - t_{55}). \end{aligned} \quad (15)$$

Так как $t_{44} \neq t_{55}$, то из (15) следует, что имеется смешивание гетерограницей функций $\tilde{\mathbf{F}}'_m$, соответствующих состояниям из зоны легких дырок и спин-отщепленной зоны.

Сшивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ с их производными $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ описывается матричными элементами \tilde{t}_{ij} ($i = 1, \dots, 6; j = 7, \dots, 12$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{17} &= \tilde{t}_{28} = t_{25}, \quad \tilde{t}_{39} = \tilde{t}_{4\ 10} = (2/3)t_{14} + (1/3)t_{25}, \\ \tilde{t}_{5\ 11} &= \tilde{t}_{6\ 12} = (1/3)t_{14} + (2/3)t_{25}, \\ \tilde{t}_{3\ 11} &= -\tilde{t}_{4\ 12} = -\tilde{t}_{59} = \tilde{t}_{6\ 10} = i(\sqrt{2}/3)(t_{14} - t_{25}). \end{aligned} \quad (16)$$

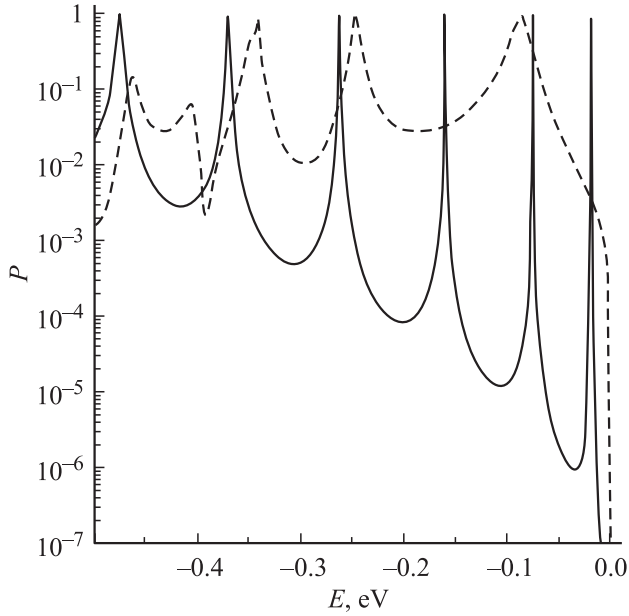


Рис. 1. Коэффициенты прохождения P для структуры GaAs/AlAs(3)/GaAs(12)/AlAs(3)/GaAs(111) при $k_{\parallel} = 0$. Сплошная линия — P_{hh} , штриховая — P_{ll} .

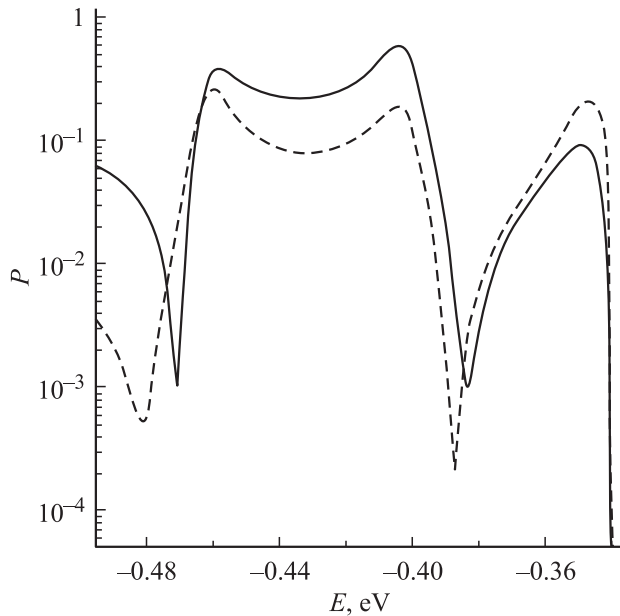


Рис. 2. Коэффициенты прохождения P для структуры GaAs/AlAs(3)/GaAs(12)/AlAs(3)/GaAs(111) при $k_{\parallel} = 0$ в области энергий спин-отщепленной зоны. Сплошная линия — P_{ss} , штриховая — P_{sl} .

Сшиванию $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ с $\tilde{\mathbf{F}}_m$ соответствуют матричные элементы \tilde{t}_{ij} ($i = 7, \dots, 12; j = 1, \dots, 6$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{71} = \tilde{t}_{82} = t_{52}, \quad \tilde{t}_{93} = \tilde{t}_{104} &= (2/3)t_{41} + (1/3)t_{52}, \\ \tilde{t}_{115} = \tilde{t}_{126} &= (1/3)t_{41} + (2/3)t_{52}, \\ \tilde{t}_{113} = -\tilde{t}_{124} = -\tilde{t}_{95} = \tilde{t}_{106} &= i(\sqrt{2}/3)(t_{41} - t_{52}). \end{aligned} \quad (17)$$

Как и в предыдущих случаях, некоторые из матричных элементов (16) и (17) описывают смешивание гетерограницами состояний из зоны легких дырок и спин-отщепленной зоны.

Приведем результаты расчета коэффициентов прохождения P для структуры GaAs/AlAs(3)/GaAs(12)/AlAs(3)/GaAs(111) (в скобках указано число монослоев). Имеются следующие коэффициенты прохождения: $P_{hh1}, P_{hh2}, P_{ll}, P_{ss}, P_{sl}, P_{ls}$. Поскольку спиновое расщепление зон тяжелых дырок мало, то $P_{hh1} \approx P_{hh2} \approx P_{hh}$. Коэффициенты прохождения P_{hh} и P_{ll} определены для всех энергий в выше указанном интервале энергий, P_{ss}, P_{sl}, P_{ls} — только для энергий спин-отщепленной зоны. В данной структуре состояния, соответствующие зоне легких дырок и спин-отщепленной зоне, двукратно вырождены, а в зоне тяжелых дырок — почти вырождены.

На рис. 1 приведены коэффициенты прохождения P_{hh}, P_{ll} . Имеется ряд резонансов для P_{hh}, P_{ll} , энергетическое положение которых зависит от ширины ямы.

На рис. 2 приведены коэффициенты прохождения P_{ss}, P_{sl} ($P_{ls} \approx P_{sl}$) в области энергий спин-отщепленной зоны. Как и для гетерограницы (001) [10], имеется сильное смешивание состояний из зоны легких дырок и спин-отщепленной зоны.

Гетерограница (110)

Данное направление (при $k_{\parallel} = 0$) без учета спин-орбитального взаимодействия имеет группу симметрии, в которой всего два элемента симметрии: тождественное преобразование и преобразование $g(xyz) = (yxz)$ (отражение в плоскости $(1\bar{1}0)$). В этой группе имеется два представления: четное — Σ_1 и нечетное — Σ_2 .

Более сложный вид как для GaAs, так и для AlAs по сравнению с предыдущими случаями имеет комплексная зонная структура. Ее существенным отличием (по сравнению с направлениями [001] и [111]) является появление экстремума в области комплексных k_{\perp} , где k_{\perp} — вектор вдоль направления [110]. Этот экстремум реализуется для состояний симметрии Σ_2 при энергии E_0 ($E_0 > E_V$). Ниже этой энергии имеется две зависимости — $k_{\perp 1}(E)$ и $k_{\perp 2}(E)$, где k_{\perp} — чисто мнимые, причем $k_{\perp 1}(E_V) = 0$, при $E > E_0$ $\text{Re}[k_{\perp 1}(E)] = -\text{Re}[k_{\perp 2}(E)]$ и $\text{Im}[k_{\perp 1}(E)] = \text{Im}[k_{\perp 2}(E)]$. Отметим, что для правильного описания нечетных состояний симметрии Σ_2 в \mathbf{k} -гамильтониане необходимо учитывать состояния Γ_{12c} .

Анализ матриц сшивания без учета спин-орбитального взаимодействия для энергий в окрестности E_V показал, что основной вклад в условия сшивания для волновых функций вносят 4 зоны: 2 состояния симметрии Σ_1 и 2 состояния симметрии Σ_2 , т.е. $\nu_m = 4$. Следовательно, для построения модели мы должны использовать 4 огибающих функции. В условия сшивания для огибающих входят 3 состояния Γ_{15v} и одно

состояние Γ_{15C} :

$$|Z_V\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}|X_V + Y_V\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}|X_V - Y_V\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}|X_C - Y_C\rangle. \quad (18)$$

В данном случае \mathbf{F} есть вектор-столбец с компонентами F_m, F'_m ($m = 1, 2, 3, 4$) в порядке, соответствующем (18). Матрица сшивания для огибающих $\bar{\mathbf{T}}$ имеет размерность (8×8) и разбивается на 2 квазидиагональных блока (с размерностями (4×4)), соответствующих состояниям симметрии Σ_1 и Σ_2 , так что $\bar{\mathbf{T}} = \bar{\mathbf{T}}(\Sigma_1) \otimes \bar{\mathbf{T}}(\Sigma_2)$. В блок для четных состояний симметрии Σ_1 входят огибающие функции первых двух состояний из (18) ($m = 1, 2$); в блок для нечетных — функции последних двух состояний из (18) ($m = 3, 4$). Приведем численные значения матричных элементов t_{ij} ($i, j = 1, \dots, 4$) матриц $\bar{\mathbf{T}}(\Sigma_1)$ и $\bar{\mathbf{T}}(\Sigma_2)$:

$$\bar{\mathbf{T}}(\Sigma_1) = \begin{pmatrix} 0.9865 & 0 & 0 & -1.2468 \\ 0 & 1.0315 & -0.2838 & 0 \\ 0 & 0.0362 & 0.9126 & 0 \\ 0.0098 & 0 & 0 & 0.6882 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

$$\bar{\mathbf{T}}(\Sigma_2) = \begin{pmatrix} 1.0328 & 0.2252 & 0 & 0 \\ -0.0393 & 0.9393 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0392 & 0.1925 \\ 0 & 0 & -0.0044 & 0.9863 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Из (19) и (20) видно, что каждая из этих матриц разбивается еще на два блока. Данное обстоятельство можно объяснить следующим образом. При повороте на 180° вокруг оси $[001]$ направление оси $[110]$ меняется на обратное, при этом (при выборе гетерограницы посередине между атомными плоскостями) данная структура переходит от порядка расположения АВ к ВА, но, поскольку матрица \mathbf{T} не зависит от порядка следования слоев, она должна быть инвариантной относительно такого преобразования. Функции $|Z_V\rangle$ и $(1/\sqrt{2})|X_V + Y_V\rangle$ на плоскости гетерограницы имеют различную симметрию. Первая не меняется при повороте на 180° вокруг оси $[001]$, вторая при этом меняет знак, а для соответствующих производных имеем обратную ситуацию. Поэтому в (19) равны нулю матричные элементы, соответствующие сшиванию этих огибающих функций (и их производных) между собой, но имеют место сшивание огибающих функций F_1 с производными F'_2 и наоборот. Вид матрицы (20) определяется тем, что две последних функции в (18) имеют одинаковую симметрию.

Расчеты коэффициентов прохождения дырок через различные структуры показывают адекватность упрощенных моделей псевдопотенциальному описанию.

Перейдем к рассмотрению результатов с учетом спин-орбитального взаимодействия. В соответствии с симметрией двойной группы все состояния в области энергий в окрестности E_V расщепляются при учете спина. Пары близко расположенных зон соответствуют симметрии Σ_3 и Σ_4 . Вследствие операции обращения времени имеет

место соотношение $E_{\Sigma_3}(\mathbf{k}) = E_{\Sigma_4}(-\mathbf{k})$, где \mathbf{k} — вектор вдоль направления $[110]$.

Матрица сшивания для огибающих \mathbf{T} размерности (16×16) в базисе из функций

$$\begin{aligned} &|Z_V\rangle\alpha, \quad |Z_V\rangle\beta, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|X_V + Y_V\rangle\alpha, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|X_V + Y_V\rangle\beta, \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}|X_V - Y_V\rangle\alpha, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|X_V - Y_V\rangle\beta, \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}|X_C - Y_C\rangle\alpha, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|X_C - Y_C\rangle\beta \end{aligned} \quad (21)$$

может быть получена из $\bar{\mathbf{T}}$ с помощью (2). При этом \mathbf{T} разобьется на два блока, соответствующих состояниям симметрии Σ_3 и Σ_4 , поэтому состояния из расщепленных спин-орбитальным взаимодействием зон не смешиваются ни в объеме, ни на гетерограницах.

Для анализа волновых функций удобно использовать следующие линейные комбинации функций $|j, m_j\rangle$:

$$\begin{aligned} |\varphi 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle + |3/2, 3/2\rangle \right], \\ |\varphi 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -3/2\rangle + |3/2, 3/2\rangle \right], \\ |\varphi 3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{-1+i}{\sqrt{2}} |3/2, -1/2\rangle + |3/2, 1/2\rangle \right], \\ |\varphi 4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1-i}{\sqrt{2}} |3/2, -1/2\rangle + |3/2, 1/2\rangle \right], \\ |\varphi 5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1-i}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle + |1/2, 1/2\rangle \right], \\ |\varphi 6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{-1+i}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle + |1/2, 1/2\rangle \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Данные функции являются собственными функциями оператора $D_{1/2}(g)$, где g — отражение в плоскости $(1\bar{1}0)$, причем

$$\begin{aligned} D_{1/2}(g)|\varphi j\rangle &= i|\varphi j\rangle \quad (j = 1, 3, 5), \\ D_{1/2}(g)|\varphi j\rangle &= -i|\varphi j\rangle \quad (j = 2, 4, 6). \end{aligned} \quad (23)$$

Функции $|\varphi 1\rangle, |\varphi 3\rangle$ и $|\varphi 5\rangle$ преобразуются по представлению Σ_3 , а $|\varphi 2\rangle, |\varphi 4\rangle$ и $|\varphi 6\rangle$ по представлению Σ_4 .

Волновые функции состояний для энергий в окрестности E_V можно представить в виде

$$\begin{aligned} |n1\rangle &= \exp(ikz')(D_{n1}|\varphi 1\rangle + D_{n3}|\varphi 3\rangle + D_{n5}|\varphi 5\rangle) + |\chi_{n1}\rangle, \\ |n2\rangle &= \exp(ikz')(D_{n2}|\varphi 2\rangle + D_{n4}|\varphi 4\rangle + D_{n6}|\varphi 6\rangle) + |\chi_{n2}\rangle, \end{aligned} \quad (24)$$

где $n = h, l, s$, слагаемые $|\chi\rangle$ отражают вклад остальных функций. Для всех состояний $|D_{n1}| \approx |D_{n2}|, |D_{n3}| \approx |D_{n4}|, |D_{n5}| \approx |D_{n6}|, \bar{\sigma}_z = 0, \bar{\sigma}_x = -\bar{\sigma}_y, \bar{\sigma}_x(n1) \approx -\bar{\sigma}_x(n2)$.

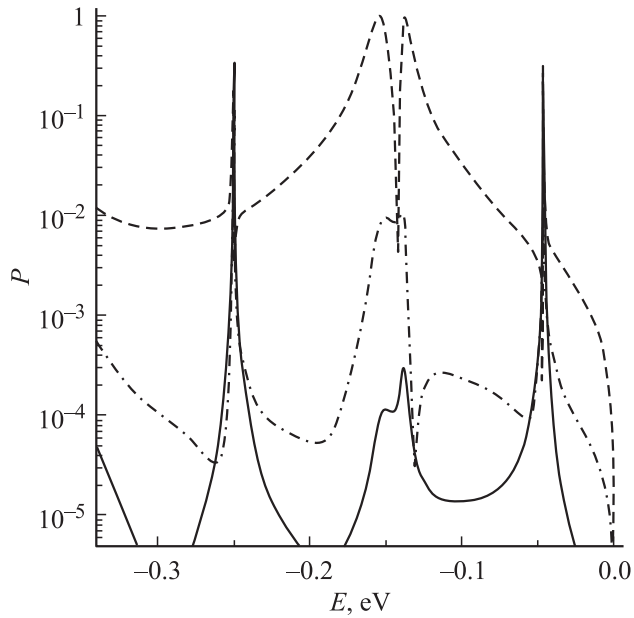


Рис. 3. Коэффициенты прохождения P для структуры GaAs/AlAs (6)/GaAs (12)/AlAs (6)/GaAs (110) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Сплошная линия — P_{hh} , штрихпунктирная — P_{hl} , штриховая — P_{ll} .

Как показали численные расчеты для зон тяжелых дырок в GaAs, в указанном выше диапазоне энергий коэффициенты $|D_h|$ меняются в интервалах: $|D_{h1}|$ от ~ 0.58 до ~ 0.65 , $|D_{h3}|$ от ~ 0.81 до ~ 0.42 , $|D_{h5}|$ от 0 до ~ 0.48 ; средняя компонента спина $\bar{\sigma}_x(h1)$ изменяется от 0 до ~ 0.7 .

Для зон легких дырок в GaAs в том же интервале энергий $|D_{l1}|$ меняются от ~ 0.81 до ~ 0.28 , $|D_{l3}|$ от ~ 0.58 до ~ 0.69 , $|D_{l5}|$ от 0 до ~ 0.61 , а $\bar{\sigma}_x(l1)$ от $\sim (-0.62)$ до $\sim (-0.52)$.

Для состояний спин-отщепленной зоны в GaAs в интервале энергий от $-\Delta_0$ до -0.5 эВ $|D_{s1}|$ меняются от 0 до ~ 0.31 , $|D_{s3}|$ от 0 до ~ 0.15 , $|D_{s5}|$ от 1 до ~ 0.90 , а $\bar{\sigma}_x(s1)$ от $-1/3\sqrt{2}$ до $\sim (-0.52)$.

На рис. 3 приведены результаты расчета коэффициентов прохождения для структуры GaAs/AlAs (6)/GaAs (12)/AlAs (6)/GaAs (110) для E выше энергий спин-отщепленной зоны. Расчет проводился с использованием матрицы сшивания (4). Поскольку спиновое расщепление зон мало, то $P_{n1m1} \approx P_{n2m2} \approx P_{nm}$, где $(n, m = h, l)$. Имеется ряд резонансов для P_{hh} и P_{ll} , энергетическое положение которых зависит от ширины ямы. Из рисунка видно значительно большее, чем для границы (001), резонансное смешивание состояний зон легких и тяжелых дырок. Имеются два типа резонансных пиков. Пики первого типа в основном связаны с уровнями состояний тяжелых дырок в квантовой яме GaAs. При энергии $\sim (-0.045)$ эВ имеет место как пик в коэффициенте прохождения P_{hh} ($P_{hh} \approx 0.22$), так и пики $P_{hl} \approx 0.30$ и резонанс типа Фано с $P_{ll} \approx 0.15$. Похожая ситуация имеет место и для другого пика, связанного

со вторым уровнем для состояний тяжелых дырок в квантовой яме GaAs, при энергии $\sim (-0.25)$ эВ. Здесь $P_{hh} \approx 0.32$, $P_{hl} \approx 0.24$ и $P_{ll} \approx 0.11$. Расчеты показали, что для резонансов первого типа с увеличением толщины барьеров P_{hh} уменьшается, а P_{ll} увеличивается. Резонансный пик при $E \approx (-0.14)$ эВ, обусловленный уровнем состояний легких дырок в квантовой яме GaAs, расщепляется на два, причем в области провала этого пика имеются максимумы P_{hl} и P_{hh} . Найдено, что при увеличении толщины барьеров глубина провала возрастает, а величина максимума P_{hh} уменьшается. Таким образом, при увеличении толщины барьеров для обоих типов пиков уменьшается P_{hh} и увеличивается P_{ll} . Такая необычная структура пиков обусловлена значительным смешиванием состояний легких и тяжелых дырок, а также связана с существенной разницей в вероятностях туннелирования легких и тяжелых дырок через слой AlAs. Отметим, что переход дырок в результате туннелирования из зоны тяжелых дырок ($h1$) в зону легких дырок ($l1$) (и наоборот) сопровождается также значительным изменением средних значений спина $\bar{\sigma}_x$ и $\bar{\sigma}_y$. Для другой пары тяжелых ($h2$) и легких ($l2$) дырок изменения средних значений спина отличаются знаками.

В заключение сформулируем основные результаты и выводы данной работы. Анализ состояний валентной зоны показал, что обычно используемое приближение не зависящих от энергии эффективных масс для зон легких и тяжелых дырок оправдано только вблизи вершины валентной зоны. В интервале энергий от -0.5 до 0 эВ найдены условия сшивания для огибающих функций дырок на гетерограницах GaAs/AlAs (111) и (110) как с учетом, так и без учета спин-орбитального взаимодействия. Они получены в результате упрощения описания электронных состояний методом псевдопотенциала и полностью согласуются с симметрией задачи. Эффективность предложенных нами моделей для огибающих функций подтверждается хорошим согласием результатов модельных и псевдопотенциальных расчетов коэффициентов прохождения в различных структурах. Используя найденные числовые значения элементов матрицы сшивания для огибающих функций, можно оценить параметры, характеризующие смешивание дырок на гетерогранице. В отличие от гетерограницы (001) найдено, что смешивание легких и тяжелых дырок на гетерогранице (111) не происходит. Для гетерограницы (110) имеется заметно большее, чем для границы (001), резонансное смешивание данных состояний.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-02-17508.

Список литературы

- [1] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 5693 (1981).
- [2] И.Л. Алейнер, Е.Л. Ивченко. Письма ЖЭТФ, **55**, 662 (1992).
- [3] Е.Л. Ивченко, А.Ю. Каминский, И.Л. Алейнер. ЖЭТФ, **104**, 3401 (1993).

- [4] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rossler. Phys. Rev. B, **54**, 5852 (1996).
- [5] A.M. Malik, M.J. Godfrey, P. Dawson. Phys. Rev. B, **59**, 2861 (1999).
- [6] Xiao-Ling Ye, Y.H. Chen, J.Z. Wang, Z.G. Wang, Z. Yang. Phys. Rev. B, **63**, 115 317 (2001).
- [7] M.V. Kisin, B.L. Gelmont, S. Luryi. Phys. Rev. B, **58**, 4605 (1998).
- [8] M. Morifuji, C. Hamaguchi. Phys. Rev. B, **52**, 14 131 (1995).
- [9] R. Magri, A. Zunger. Phys. Rev. B, **62**, 10 364 (2000).
- [10] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **39** (3), 336 (2005).
- [11] E.C. Valadares. Phys. Rev. B, **46**, 3935 (1992).
- [12] T.-S. Kim, S.-R. Eric Yang, A.Y. MacDonald. Phys. Rev. B, **62**, R7747 (2000).
- [13] Y. Kajikawa. Phys. Rev. B, **51**, 16 790 (1995).
- [14] S. Nojima. Phys. Rev. B, **47**, 13 535 (1993).
- [15] Y. Kajikawa, N. Nishimoto, Y. Higuchi. Phys. Rev. B, **69**, 205 320 (2004).
- [16] S. Dohrmann, D. Hagele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, M. Oestreich. Phys. Rev. Lett., **93**, 147 405 (2004).
- [17] J. Xia. Phys. Rev. B, **43**, 9856 (1991).
- [18] S. Cho, A. Sanz-Hervas, A. Majerfeld, B.W. Kim. Phys. Rev. B, **68**, 035 308 (2003).
- [19] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35** (1), 105 (2001).
- [20] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 6, 51 (2003).
- [21] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35** (7), 841 (2001).
- [22] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992).
- [23] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 9, 64 (1992).
- [24] M. Cardona, N.E. Cristensen, G. Fasol. Phys. Rev. B, **38**, 1806 (1988).
- [25] M.P. Surh, M. Li, S.G. Louie. Phys. Rev. B, **43**, 4286 (1991).
- [26] P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, **53**, 12 813 (1996).
- [27] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9945 (1988).
- [28] В.А. Чалдышев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 3, 38 (1983).

Редактор Л.В. Шаронова

The hole scattering by GaAs/AlAs (111) and (110) interfaces

G.E. Karavaev, V.N. Chernyshov

Siberian Physical-Tech.
Institute at Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The analysis of wave functions of valence band states is carried out on the basis of 18-band $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -model. It is found that the conventionally used approaches of energy-independent effective masses for bands of light and heavy holes is valid only near the valence-band top. The matching conditions for the envelope functions of holes at GaAs/AlAs(111) and (110) interfaces are considered both with and without an allowance being made for the spin-orbit interaction of energies in the vicinity of the valence-band top. These conditions are obtained as a result of simplification of electronic states description with the pseudopotential method. The obtained matching conditions completely agree with symmetry of a problem. In these conditions, envelope functions are mixed with their normal derivatives and the derivatives are mixed with functions. It is shown that light and heavy holes are not mixed at (111)-heterointerface and are mixed at (110)-heterointerface. It is found that for (110) interface the mixing at resonance energies of these states are noticeably larger than for (001) interface.