

УДК 621.315.592

КОРРЕКТНОСТЬ УРАВНЕНИЙ ШЕСТИЗОННОЙ $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -МОДЕЛИ В ПРИМЕНЕНИИ К ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМ ГЕТЕРОСТРУКТУРАМ*

В. П. Жуков¹, М. П. Федорук^{1,2}, А. Ф. Зиновьева³,
А. В. Ненашев^{2,3}, А. В. Двуреченский^{2,3}

¹*Институт вычислительных технологий СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 6*

²*Новосибирский государственный университет,
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2*

³*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13*

E-mail: aigul@isp.nsc.ru

На примере задачи вычисления энергетического спектра дырок в системе Ge/Si с квантовыми точками исследована проблема корректности шестизонной $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели в применении к гетероструктурам с резкими границами. Граничные условия, удовлетворяющие требованию сохранения потока частиц, а также непрерывности волновой функции на гетерогранице, сформулированы на уровне дифференциальных уравнений и характеризуются единственным параметром μ , который зависит от свойств гетероперехода. Показано, что при определённом выборе μ возникают нефизические интерфейсные состояния, заполняющие всю запрещённую зону. Путём рассмотрения простейших случаев — одиночного гетероперехода и квантовой ямы — найдены условия (диапазон μ) отсутствия таких нефизических состояний.

Ключевые слова: энергетический спектр, квантовые точки, гетеропереход, кремний, германий, волновая функция.

Введение. Задача нахождения энергетического спектра носителей заряда в низкоразмерных структурах является главной при исследовании или разработке структур, свойства которых определяют квантово-размерные эффекты. Один из основных методов, применяемых для решения этой задачи, — метод эффективной массы. Существует несколько его модификаций на базе $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -метода [1], включающих в рассмотрение от одной до восьми зон. Такие модели, как модель Кейна, шестизонная $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модель, хорошо зарекомендовали себя для объёмных материалов. Однако при решении задач нахождения энергетического спектра для двумерных структур (гетеропереходов и сверхрешёток) возникают определённые проблемы. Даже для объёмных полупроводников при больших значениях волнового вектора k возникают так называемые паразитные состояния внутри запрещённой зоны. Эти состояния являются нефизическими и требуют некоторых усилий для их устранения. Есть много работ, посвящённых данной проблеме, и в каждой приводится свой подход к её решению (см. [2, 3] и цитируемую в них литературу). В основном это выбор определённых параметров гетеросистемы или вида оператора гамильтониана, при которых решение задачи исключает существование паразитных состояний. Наиболее общее рассмотрение этой проблемы дано в [4].

Отметим, что в шестизонной $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели паразитных состояний нет. Однако в ней вблизи резкого гетероперехода могут возникать интерфейсные состояния в запрещённой

*Работа выполнена при поддержке Сибирского отделения РАН (интеграционный проект № 83).

зоне. Помимо реальных интерфейсных состояний в некоторых гетеросистемах [5, 6] при определённом выборе граничных условий возможны состояния с большими k (за пределами зоны Бриллюэна). В наиболее распространённых гетеропарах Si-Ge и GaAs-AlAs, как известно из расчётов *ab initio*, такие состояния отсутствуют. Поэтому интерфейсные состояния, возникающие в $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели, следует считать нефизическими для данных гетеропар. Однозначного способа устранения таких состояний, подходящего для всех гетеросистем, до сих пор нет. При переходе к нуль-мерным системам (квантовым точкам) ситуация усугубляется тем, что возникает несколько гетерограниц со сложной геометрией и разной симметрией и часто подход, выработанный для одной гетерограницы или системы идентичных повторяющихся гетерограниц, не годится.

Появление таких сложных нанообъектов, как квантовые точки, ставит задачу нахождения граничных условий, обладающих следующими свойствами:

- 1) сохранение потока на гетерогранице (что эквивалентно эрмитовости гамильтониана);
- 2) приемлемость для любой ориентации гетерограницы;
- 3) отсутствие нефизических интерфейсных состояний.

В разд. 1 данной работы предложен гамильтониан для наноразмерных гетероструктур, имеющий дивергентный вид и инвариантный относительно преобразований координат. Волновая функция, являющаяся решением уравнения Шрёдингера с таким гамильтонианом, автоматически удовлетворяет граничным условиям с требуемыми свойствами 1 и 2. В разд. 2 данные граничные условия применены к решению задачи нахождения основного дырочного состояния для наиболее простого случая — одиночного гетероперехода. Найден диапазон параметров граничных условий, при которых интерфейсные состояния отсутствуют. В разд. 3 показано, что выбранные граничные условия могут быть использованы в задаче определения энергетического спектра квантовой точки Ge/Si. В разд. 4 обсуждается применимость предложенных граничных условий к наиболее распространённым гетеропарам.

1. Постановка задачи. Граничные условия, удовлетворяющие вышеприведённым требованиям, естественным образом могут быть получены из гамильтониана путём интегрирования в малой окрестности гетерограницы. Этот подход обладает определённым преимуществом, так как позволяет решить задачу для объектов со сложной огранкой, состоящей из множества плоскостей различной ориентации (квантовых точек). Таким образом, проблема выбора граничных условий может быть сведена к проблеме определения вида гамильтониана в гетеросистеме из двух полупроводников с различными эффективными массами. В шестизонной модели волновая функция дырки Ψ представляет собой вектор из шести компонент, которые соответствуют трём ветвям валентной зоны. Каждая ветвь с учётом спина даёт две компоненты волновой функции. Стационарное уравнение Шрёдингера для неё имеет вид [7]

$$E\Psi = \hat{H}\Psi \equiv - \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_0 \end{pmatrix} \Psi + \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \hat{\varepsilon} \end{pmatrix} \Psi + \frac{\Delta}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi + U\Psi. \quad (1)$$

Первое слагаемое описывает кинетическую энергию, второе связано с деформационными эффектами, а третье обозначает спин-орбитальное взаимодействие. Величина $\hat{\varepsilon}$ — матрица размера 3×3 , определяемая упругой деформацией в системе; Δ — величина спин-орбитального расщепления валентной зоны; U — добавка к потенциальной энергии, обеспечивающая разрыв зон на гетерогранице. Величины U , Δ и компоненты матрицы $\hat{\varepsilon}$ являются вещественными функциями координат.

Как известно [7], для случая постоянных эффективных масс оператор

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} L \frac{\partial^2}{\partial x^2} + M \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) & N \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & N \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \\ N \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & L \frac{\partial^2}{\partial y^2} + M \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) & N \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ N \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} & N \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} & L \frac{\partial^2}{\partial z^2} + M \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \end{pmatrix}.$$

Здесь L , M , N — положительные коэффициенты, связанные с эффективной массой частицы в различных направлениях. Величины L , M , N выражаются через параметры Латтинжера:

$$L = (\gamma_1 + 4\gamma_2)\hbar^2/2m_0, \quad M = (\gamma_1 - 2\gamma_2)\hbar^2/2m_0, \quad N = 6\gamma_3\hbar^2/2m_0,$$

где m_0 — масса свободного электрона, \hbar — постоянная Планка.

Для L , M , N , зависящих от координат, выбор граничных условий обусловлен видом самого гамильтониана, поскольку выражение для оператора скорости определяется следующим образом:

$$\hat{\mathbf{V}}^j = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H^j}{\partial \mathbf{k}}, \quad (2)$$

откуда видно, что поток носителей заряда зависит не только от волновой функции Ψ , но и от параметров L , M , N .

Мы ограничимся рассмотрением случая, когда все компоненты волновой функции непрерывны на гетерогранице. Однако, как и при стандартных граничных условиях, которые имеют вид [3]

$$\Psi_r = \Psi_l, \quad \hat{V}_{tr} \Psi^r = \hat{V}_{tr} \Psi^l$$

(индексы r и l относятся к правой и левой стороне интерфейса, а \hat{V}_{tr} — поперечная компонента оператора скорости (2)), производные волновой функции могут быть разрывными. Непрерывность волновой функции накладывает определённые требования на вид гамильтониана. В частности, можно ответить на вопрос о положении коэффициентов L , M , N по отношению к оператору производной. Этот вопрос обсуждался в работах [4, 8], и здесь мы его рассмотрим только для сохранения полноты изложения.

Выражение $L\partial^2\Psi/\partial x^2$ при непостоянном L можно записать как $L\partial^2\Psi/\partial x^2$, $\partial^2(L\Psi)/\partial x^2$, $\partial/\partial x(L\partial\Psi/\partial x)$. Гамильтониан \hat{H} должен быть эрмитовым оператором. Требование эрмитовости приводит к тому, что первые два варианта используются только в виде комбинации

$$L\partial^2\Psi/\partial x^2 + \partial^2(L\Psi)/\partial x^2.$$

Однако в случае разрыва L на гетерогранице данное слагаемое приводит к тому, что волновая функция, удовлетворяющая уравнению Шрёдингера, также будет разрывной. Таким

образом, единственно возможным (в силу требования непрерывности Ψ) является следующее положение обсуждаемых коэффициентов относительно операторов производных:

$$\partial/\partial x(L\partial\Psi/\partial x).$$

Вид операторов с непостоянным коэффициентом N , приводящих к одному и тому же выражению в случае $N = \text{const}$, также может быть различным. С учётом того, что эти операторы должны быть инвариантными относительно преобразований координат (в частности, относительно замен вида $x \rightarrow y, y \rightarrow x$), можно предложить два варианта:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(N \frac{\partial \psi_k}{\partial x_l} \right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_l} \left(N \frac{\partial \psi_k}{\partial x_k} \right). \quad (4)$$

Здесь индексы k и l пробегает значения 1, 2, 3; $(x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z)$. Под ψ_k понимается вектор (ψ_1, ψ_2, ψ_3) или (ψ_4, ψ_5, ψ_6) в зависимости от того, на какие компоненты Ψ данная часть оператора действует. Предполагается суммирование по «немым» индексам. Оба оператора (3), (4) эрмитовы. В общем случае оператор с непостоянным коэффициентом N может иметь вид линейной комбинации (3) и (4):

$$\mu \frac{\partial}{\partial x_k} \left(N \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_l} \right) + (1 - \mu) \frac{\partial}{\partial x_l} \left(N \frac{\partial \Psi_k}{\partial x_k} \right), \quad (5)$$

где μ — новый параметр модели, который принимает значения от 0 до 1. В работе [4] предложено использовать крайний случай $\mu = 0$, ограничившись рассмотрением лишь этого значения.

Исходя из вышеизложенного, \hat{H}_0 может иметь вид

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \mathfrak{L}_x & \mathfrak{N}_{yx} & \mathfrak{N}_{zx} \\ \mathfrak{N}_{xy} & \mathfrak{L}_y & \mathfrak{N}_{zy} \\ \mathfrak{N}_{xz} & \mathfrak{N}_{yz} & \mathfrak{L}_z \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где

$$\mathfrak{N}_{\alpha\beta} = \mu \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(N \frac{\partial}{\partial \beta} \right) + (1 - \mu) \frac{\partial}{\partial \beta} \left(N \frac{\partial}{\partial \alpha} \right); \quad \mathfrak{L}_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(L \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(M \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(M \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

а выражения для \mathfrak{L}_y и \mathfrak{L}_z получаются из последнего равенства циклической перестановкой координат.

Предложенный вид гамильтониана является наиболее общим вариантом, учитывающим непостоянство коэффициентов L, M, N на гетерогранице. Однако проведённые в данной работе исследования возможных решений этой задачи для квантовой точки показали, что существует диапазон значений параметра μ , зависящий от величин L, M, N , при котором спектр гамильтониана является нефизическим. Другими словами, качественная зависимость энергии E , соответствующей локализованной в окрестности квантовой точки собственной функции оператора \hat{H}_0 , от характерного пространственного масштаба собственной функции R имеет вид, изображённый на рис. 1. При малых R^{-1} энергия растёт с увеличением R^{-1} , однако начиная с некоторого значения она уменьшается. При

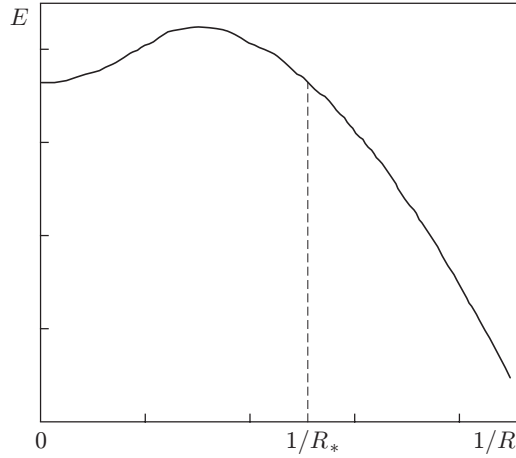


Рис. 1. Качественная зависимость энергии E связанного состояния от характерного пространственного масштаба R волновой функции этого состояния при неудачном выборе параметра μ

$R \rightarrow 0$ существует асимптотика $E \sim 1/R^2$, $E < 0$. Волновая функция при $R \rightarrow 0$ оказывается локализованной около границы контакта двух материалов с разными параметрами в слое толщиной $\sim R$ и имеет типичный масштаб осцилляций вдоль контактной границы также порядка R . Эта ситуация эквивалентна ситуации с отрицательной массой и является нефизической. Характерная величина пространственного масштаба R_* , при которой E становится равной энергии состояния с волновой функцией, обладающей наибольшим пространственным масштабом, имеет порядок нанометра.

При правильном выборе параметра μ этой ситуации можно избежать, и в следующем разделе на примере модельной задачи определения энергетического спектра для случая контакта двух полупроводников продемонстрирован подход, позволяющий найти допустимый диапазон значений μ , при котором задача имеет физически разумные решения.

2. Задача определения энергетического спектра для контакта двух полупроводников. Для нахождения области возможных значений параметра μ рассмотрим модельную задачу, которая может быть решена аналитически практически полностью. Пусть полупространство $x < 0$ занимает полупроводниковый материал А, а $x > 0$ — материал В. Нас будут интересовать условия возникновения состояний, локализованных на границе раздела материалов. Такие состояния соответствуют нефизическим решениям, представленным в разд. 1.

Поставленная задача описывается уравнениями (1), (6) с граничными условиями

$$\Psi = 0 \quad \text{при } |x| \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Для простоты положим $\hat{\varepsilon} = 0$, $\Delta_A = \Delta_B = 0$.

Будем искать решение этой задачи в виде $\Psi = \tilde{\Psi}(x)e^{ik_y y}$. Видно, что в данном случае система уравнений (4) расщепляется на четыре блока, содержащие компоненты (ψ_1, ψ_2) , (ψ_3) , (ψ_4, ψ_5) , (ψ_6) . Для определения μ достаточно рассмотреть только первый блок. Таким образом, имеем следующие уравнения (знак « \sim » над ψ_1, ψ_2 опускаем):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(L \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) + ik_y \mu N \frac{\partial \psi_2}{\partial x} + ik_y (1 - \mu) \frac{\partial (N \psi_2)}{\partial x} + (E - U - M k_y^2) \psi_1 = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(M \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) + ik_y \mu \frac{\partial (N \psi_1)}{\partial x} + ik_y (1 - \mu) N \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + (E - U - L k_y^2) \psi_2 = 0. \quad (9)$$

Непрерывность функции в точке разрыва коэффициентов при $x = 0$ даёт

$$\psi_1(x = -0) = \psi_1(x = +0); \quad \psi_2(x = -0) = \psi_2(x = +0). \quad (10)$$

Граничные условия, обеспечивающие сохранение потока, естественным образом возникают из гамильтониана путём интегрирования в малой окрестности гетерограницы. Интегрируя (8) и (9) по бесконечно малому интервалу, включающему гетерограницу, получим

$$L_A \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)_{x=-0} + (1 - \mu) N_A i k_y \psi_2(x = -0) = L_B \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)_{x=+0} + (1 - \mu) N_B i k_y \psi_2(x = +0), \quad (11)$$

$$M_A \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right)_{x=-0} + \mu N_A i k_y \psi_1(x = -0) = M_B \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right)_{x=+0} + \mu N_B i k_y \psi_1(x = +0). \quad (12)$$

Решение задачи (7)–(12) запишем в виде суммы экспонент. При $x < 0$

$$\psi_1 = a_1 e^{i k_1 x} + a_2 e^{i k_2 x}; \quad \psi_2 = R_1 a_1 e^{i k_1 x} + R_2 a_2 e^{i k_2 x}. \quad (13)$$

Коэффициенты $R_{1,2}$ можно найти, подставив выражение (13) в уравнение (8) и собрав отдельно члены с $e^{i k_1 x}$ и $e^{i k_2 x}$:

$$R_{1,2} = \frac{E - U_A - L_A k_{1,2}^2 - M_A k_y^2}{N_A k_{1,2} k_y}.$$

Волновые векторы k_1, k_2 являются корнями уравнения

$$(E - U_A - L_A k^2 - M_A k_y^2)(E - U_A - M_A k^2 - L_A k_y^2) - N_A^2 k_y^2 k^2 = 0,$$

в чём можно убедиться, подставив в систему (8), (9) волновую функцию, пропорциональную $e^{i k x}$. Причём в силу (10) интерес представляют только корни со строго отрицательной мнимой частью.

При $x > 0$

$$\psi_1 = a_3 e^{i k_3 x} + a_4 e^{i k_4 x}; \quad \psi_2 = R_3 a_3 e^{i k_3 x} + R_4 a_4 e^{i k_4 x}, \quad (14)$$

$$R_{3,4} = \frac{E - U_B - L_B k_{3,4}^2 - M_B k_y^2}{N_B k_{3,4} k_y}.$$

Волновые векторы k_3, k_4 являются корнями уравнения

$$(E - U_B - L_B k^2 - M_B k_y^2)(E - U_B - M_B k^2 - L_B k_y^2) - N_B^2 k_y^2 k^2 = 0,$$

причём в силу (10) интерес представляют только корни со строго положительной мнимой частью.

Подставляя (13), (14) в (10)–(12), получаем систему линейных уравнений для $a_{1,2,3,4}$. Условие её разрешимости (равенство нулю определителя) даёт значение энергии состояния, локализованного около $x = 0$. Таким образом, поиск $a_{1,2,3,4}$ осуществляется подбором значения E , обращающего в 0 определитель системы.

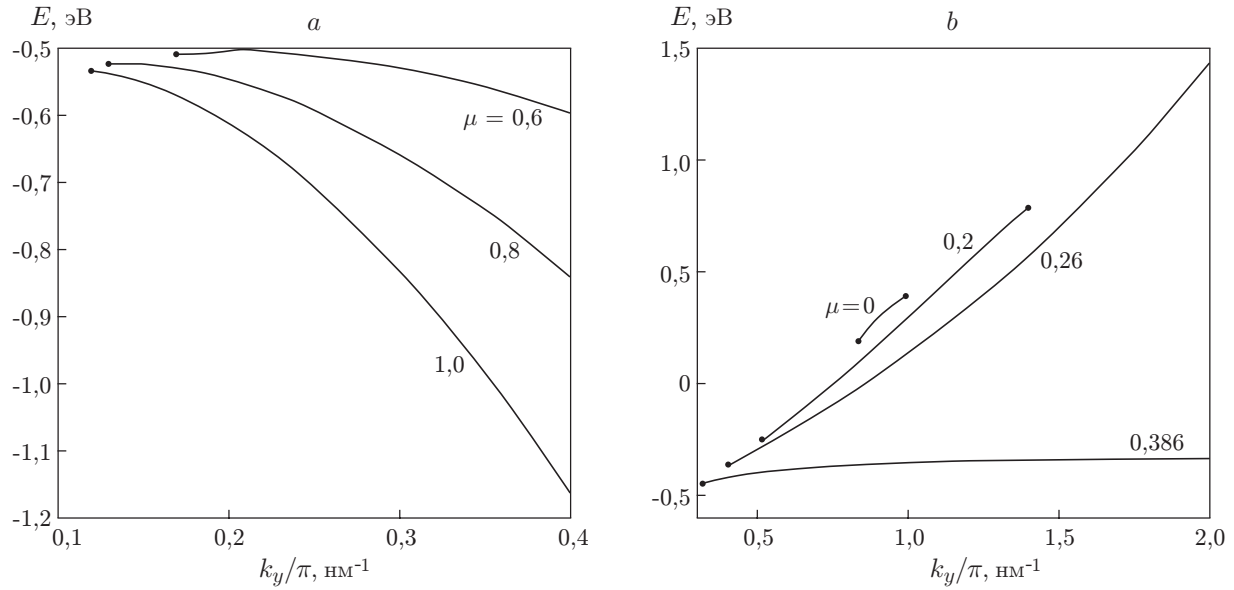


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния E от k_y в задаче определения спектра для контакта германия и кремния при различных μ : для $\mu \leq 0,26$ область существования локализованного состояния ограничена как со стороны малых, так и со стороны больших k_y (a); для $\mu > 0,26$ эта область ограничена только со стороны малых k_y (b)

Результаты решения для гетеросистемы Ge/Si в зависимости от μ представлены на рис. 2 и 3. Расчёт показал, что для $0 \leq \mu < \mu^* \approx 0,26$ локализованных на гетерогранице состояний при $k_y \rightarrow \infty$ нет. В диапазоне $\mu^* < \mu < \mu_0 \approx 0,386$ существуют локализованные состояния с положительной энергией, которая стремится к $+\infty$ при $k_y \rightarrow \infty$. Наконец, при $\mu_0 < \mu \leq 1$ энергия локализованных состояний отрицательна и стремится к $-\infty$ при увеличении k_y . В двух последних случаях с увеличением k_y волновая функция оказывается локализованной во всё более узкой окрестности гетерограницы.

Отсюда можно сделать вывод, что физически разумные решения получаются при $\mu \in [0; \mu_0]$. При бóльших μ , строго говоря, основного состояния не существует.

В случае произвольной гетеропары для нахождения значений μ_0 и μ^* , разделяющих

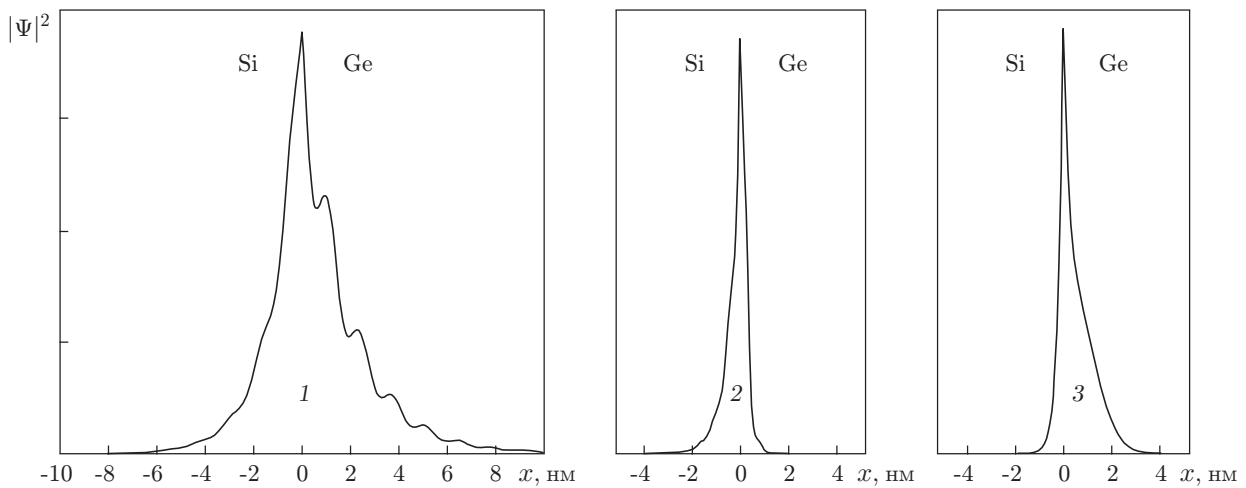


Рис. 3. Распределение $|\Psi|^2$ в задаче определения спектра для контакта германия и кремния (кривая 1 — $\mu = 0, k_y/\pi = 0,9 \text{ nm}^{-1}$; 2 — $\mu = 0,26, k_y/\pi = 2 \text{ nm}^{-1}$; 3 — $\mu = 1, k_y/\pi = 0,3 \text{ nm}^{-1}$)

три указанных диапазона, необходимо рассмотреть предел $k \rightarrow \infty$. Легко видеть, что в этом пределе энергия локализованных состояний стремится к $\pm\infty$, как k_y^2 , а значения $k_{1,2,3,4}$ — как k_y . Введём обозначения

$$q_{1,2,3,4} = k_{1,2,3,4}/k_y, \quad e = E/k_y^2, \quad u_{A,B} = U_{A,B}/k_y^2.$$

В этих обозначениях граничные условия (10)–(12) дадут следующие уравнения:

$$a_1 + a_2 - a_3 - a_4 = 0;$$

$$R_1 a_1 + R_2 a_2 - R_3 a_3 - R_4 a_4 = 0;$$

$$L_A(q_1 a_1 + q_2 a_2) + (1 - \mu)N_A(R_1 a_1 + R_2 a_2) - \quad (15)$$

$$- L_B(q_3 a_3 + q_4 a_4) - (1 - \mu)N_B(R_3 a_3 + R_4 a_4) = 0;$$

$$M_A(R_1 q_1 a_1 + R_2 q_2 a_2) + \mu N_A(a_1 + a_2) - M_B(R_3 q_3 a_3 + R_4 q_4 a_4) - \mu N_B(a_3 + a_4) = 0,$$

где

$$R_{1,2} = \frac{e - u_A - L_A q_{1,2}^2 - M_A}{N_A q_{1,2}}; \quad R_{3,4} = \frac{e - u_B - L_B q_{3,4}^2 - M_B}{N_B q_{3,4}};$$

$q_{1,2}$ являются корнями уравнения

$$(e - u_A - L_A q^2 - M_A)(e - u_A - M_A q^2 - L_A) - N_A^2 q^2 = 0 \quad (16)$$

с отрицательной мнимой частью, а $q_{3,4}$ — корнями уравнения

$$(e - u_B - L_B q^2 - M_B)(e - u_B - M_B q^2 - L_B) - N_B^2 q^2 = 0 \quad (17)$$

с положительной мнимой частью.

Для вычисления предельного значения $e_\infty = \lim_{k_y \rightarrow \infty} e$ в (16), (17) необходимо положить $u_A = u_B = 0$. Далее, анализируя e_∞ как функцию μ , можно определить μ_0 (значение μ , при котором $e_\infty = 0$) и μ^* (значение μ , разделяющее области существования и отсутствия решений системы (15)–(17) при $k_y \rightarrow \infty$).

В таблице приведены значения μ_0 для некоторых гетеропар, вычисленные путём решения системы (15)–(17). Значения L, M, N были получены из параметров Латтинжера [9] (для материалов III–V) и в [7] (для Si и Ge).

Гетероструктура	L_1	M_1	N_1	L_2	M_2	N_2	μ_0
GaAs/AlAs	15,22	2,86	17,58	7,04	2,12	8,52	0,416
InAs/GaAs	54	3	55,2	15,22	2,86	17,58	0,129
InAs/AlAs	54	3	55,2	7,04	2,12	8,52	0,118
GaSb/GaAs	32,2	4	36	15,22	2,86	17,58	0,213
InP/AlP	11,48	1,88	12,6	6,19	1,93	7,38	0,576
InN/GaN	8,76	1,2	9,78	5,67	1,17	6,6	0,421
Ge/Si	31,5	5,75	34,14	6,22	3,22	8,28	0,386

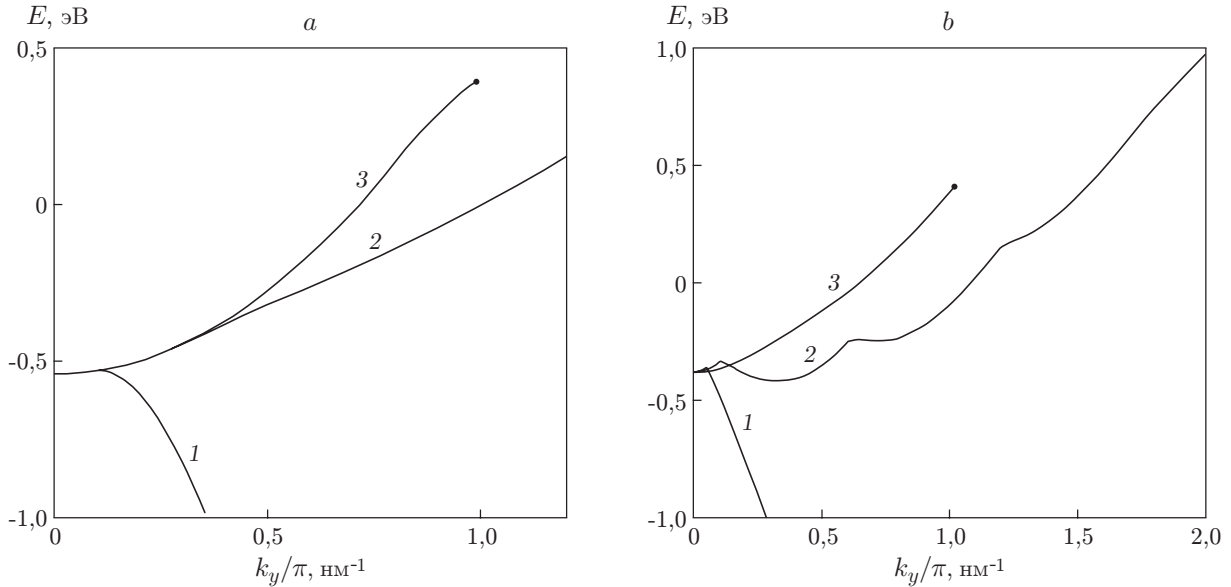


Рис. 4. Зависимость энергии основного состояния E от k_y в задаче определения спектра для тонкого слоя Ge в матрице Si: при толщине слоя $d = 40$ нм (а) и $d = 2$ нм (б). Кривые 1 — $\mu = 1$, 2 — $\mu = 0,3$, 3 — $\mu = 0$. Кривые 1 и 2 уходят в бесконечность, как $\sim k_y^2$, кривые 3 имеют конечную длину (для больших k_y локализованного состояния при $\mu = 0$ не существует)

Если взять пару гипотетических материалов А и В с коэффициентами $L_A = M_A = (L_{\text{Ge}} + M_{\text{Ge}})/2$, $N_A = N_{\text{Ge}}$ и $L_B = M_B = (L_{\text{Si}} + M_{\text{Si}})/2$, $N_B = N_{\text{Si}}$, то спектр будет нефизическим ($e_\infty < 0$) при $|\mu - 1/2| > 0,376$, т. е. в окрестности 0 и 1. В обратном случае $e_\infty > 0$. Если взять два материала с параметрами германия и кремния, но в качестве N_{Ge} взять величину значительно меньше её реального значения, то нефизические решения будут отсутствовать при любом $\mu \in [0, 1]$.

Изложенный выше подход применим и к более сложной системе, например к тонкому слою Ge в бесконечной матрице кремния. Был проведён расчёт при различных μ для слоёв Ge толщиной $d = 2$ нм и $d = 40$ нм (рис. 4). Решение этой задачи показало, что границы существования физически разумных решений по параметру μ совпадают для обеих задач: для слоя германия в кремнии и для контакта этих полупроводников. Это свидетельствует в пользу того, что найденные для более простой задачи границы изменения параметра μ являются справедливыми и для систем с более сложной геометрией, например квантовых точек.

3. Задача определения энергетического спектра для квантовой точки. Рассмотрим задачу определения основного состояния квантовой точки германия в матрице кремния, имеющей вид правильной пирамиды со стороной основания 10 нм и высотой $h_p = 1$ нм. Основание пирамиды расположено на состоящей из германия плоской смачивающей поверхности толщиной 0,54 нм (четыре атомных слоя) [10].

Такая задача уже не может быть решена аналитически даже частично. Поэтому она решена численно с помощью конечно-разностной схемы. Был построен конечно-разностный аналог оператора Шрёдингера \hat{H}_h , в котором различные компоненты волновой функции и коэффициенты задачи вычислялись в узлах равномерной конечно-разностной сетки, сдвинутых относительно друг друга на половину шага определённым образом. Например, компоненты волновой функции ψ_1 и ψ_4 вычислялись в узлах $(i + 1/2, j, k)$; ψ_2 и ψ_5 — в узлах $(i, j + 1/2, k)$; ψ_3 и ψ_6 — в узлах $(i, j, k + 1/2)$. Это позволяло использовать для аппроксимации уравнений значения величин только в ближайших узлах сетки и давало

хорошую точность. Кроме того, оператор \hat{H}_h был эрмитовым и дивергентным. Последнее автоматически обеспечивало правильный конечно-разностный аналог сшивания решения на гетерогранице без её выделения (схема сквозного счёта). Поиск основного состояния осуществлялся с помощью итерационного процесса, который сводился к решению уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\hat{H}_h \Psi \quad (18)$$

на большом отрезке $t \in [0; T]$. Значение T выбиралось достаточным для того, чтобы выделилась наиболее медленно затухающая гармоника, соответствующая основному состоянию. При решении (18) использовался неявный метод. Здесь «время» t — параметр итераций. Подробно эти вопросы изложены в [11].

Для расчёта применялись следующие параметры германия и кремния [7]: $L_{\text{Ge}} = 31,5$, $M_{\text{Ge}} = 5,75$, $N_{\text{Ge}} = 34,14$, $L_{\text{Si}} = 6,22$, $M_{\text{Si}} = 3,22$, $N_{\text{Si}} = 8,28$ (в единицах $\hbar^2/2m_0$), $\Delta_{\text{Ge}} = 0,289$ эВ, $U_{\text{Ge}} = -0,54$ эВ, $\Delta_{\text{Si}} = 0,044$ эВ, $U_{\text{Si}} = 0$ эВ. Для простоты полагалось, что $\hat{\epsilon} = 0$.

Полученное в результате расчёта при $\mu = 0$ распределение $|\Psi^2|$ изображено на рис. 5, *a*. Видно, что решение локализовано в области, занятой германием. Значение энергии основного состояния $\approx -0,356$ эВ.

Расчёт при $\mu = 1$ не даёт физически разумного решения. Результатом решения (18) является сильно осциллирующая в пространстве волновая функция Ψ , локализованная около гетерограницы (рис. 5, *b*). Соответствующая ей энергия оказывается большой отрицательной величиной. Кроме того, отсутствует сходимость по пространственному шагу, т. е. при уменьшении шага сетки энергия не стремится к постоянному значению.

Также были проведены расчёты при $\mu = 1$ для пирамиды германия больших размеров (размер основания пирамиды достигал 100 нм, а высота 10 нм). Оказалось, что при достаточно большом пространственном шаге конечно-разностной сетки выделяется решение, подобное изображённому на рис. 5, *a*. При уменьшении шага наблюдается сходимость конечно-разностного решения. Однако при дальнейшем уменьшении шага сетки, начиная с шага 1 нм, появляется нефизическое решение, подобное изображённому на рис. 5, *b*. Как

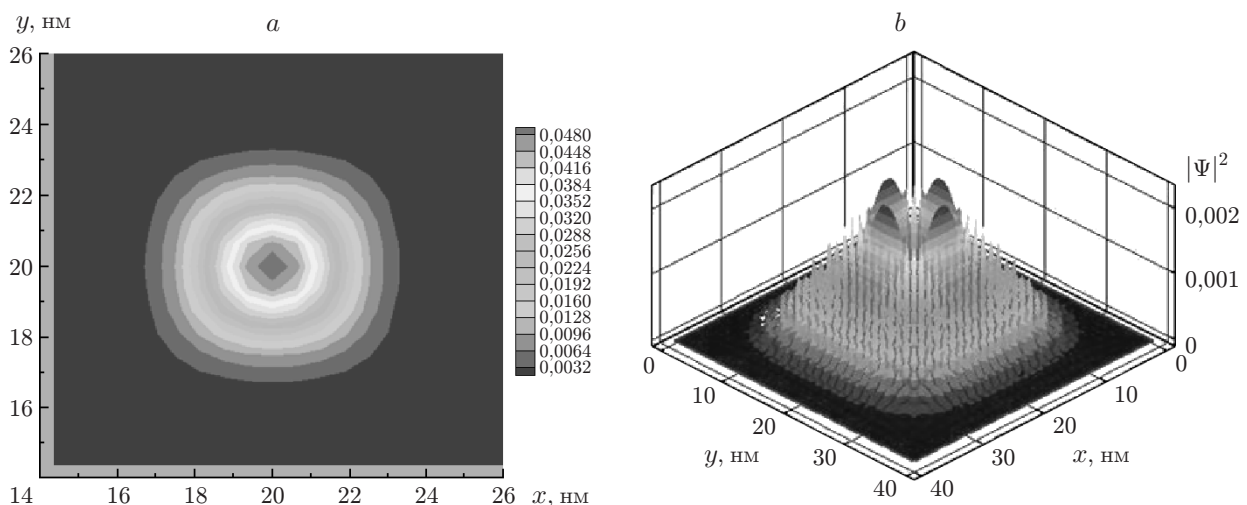


Рис. 5. Распределение $|\Psi|^2$ в плоскости, проходящей через основание ($z = \text{const}$) пирамиды: при $\mu = 0$ (*a*), при $\mu = 1$ (*b*)

было показано выше, возникающие при построении основного состояния трудности в случае $\mu = 1$ связаны не с дефектами конечно-разностной схемы, а со свойствами исходных дифференциальных уравнений (1). При определённом соотношении значений коэффициентов L, M, N материалов, входящих в гетероструктуру, существует диапазон значений μ , в котором спектр оператора \hat{H} является нефизическим, а именно энергия состояний с волновой функцией, локализованной в бесконечно узкой окрестности гетерограницы и имеющей бесконечно большой волновой вектор вдоль неё, стремится к $-\infty$. Для того чтобы спектр был физическим, μ должно принадлежать определённому диапазону значений, зависящему от конкретных значений L, M, N .

4. Выбор значений μ . В качестве феноменологического критерия приемлемости данных граничных условий можно рассматривать отсутствие нефизических интерфейсных состояний на гетерогранице. Результаты, представленные в предыдущих разделах, показывают, что этот критерий выполняется только при $\mu < \mu_0$, где μ_0 — значение μ , при котором $e_\infty = 0$ (см. разд. 2).

Из рис. 4 видно, что различные значения μ из диапазона $0 < \mu < \mu_0$, который не является заведомо нефизическим, дают приблизительно одинаковые значения энергии основного уровня E при характерных масштабах по y больших $(k_y/\pi)^{-1} \sim 0,4^{-1} = 2,5$ нм при $d = 40$ нм и $(k_y/\pi)^{-1} \sim 0,05^{-1} = 20$ нм при $d = 2$ нм. Таким образом, с точки зрения вычисления уровня основного состояния величина конкретного значения μ из диапазона $0 < \mu < \mu_0$ не играет роли в случае структур с достаточно большим латеральным размером (~ 10 нм). При меньших размерах решение становится зависимым от μ , и для его выбора нужно привлечь модели, рассматривающие гетеропереход на атомном уровне, например модель сильной связи или расчёты из первых принципов.

Значения μ_0 и μ^* зависят от коэффициентов L, M и N материалов, формирующих гетероструктуру (см. таблицу).

Следует заметить, что так называемые стандартные граничные условия не удовлетворяют критерию отсутствия интерфейсных состояний для большинства гетеропар, приведённых в таблице. Легко проверить, что для шестизонной **кp**-модели такие граничные условия сводятся к уравнениям (10)–(12), в которых параметр $\mu = 0,5$. В частности, условие $\hat{V}_x \Psi_1^r = \hat{V}_x \Psi_1^l$ эквивалентно уравнению (11), а условие $\hat{V}_x \Psi_2^r = \hat{V}_x \Psi_2^l$ — уравнению (12) при $\mu = 0,5$. Если мы посмотрим на границы приемлемых значений μ (см. таблицу), то увидим, что данное значение μ лежит в области, соответствующей нефизическим решениям. С этой точки зрения можно сделать вывод, что стандартные граничные условия не подходят для системы Ge-Si и для большинства других гетеросистем, по крайней мере при выборе условия непрерывности волновой функции на границе. Тем не менее стандартные граничные условия широко используются на практике. Обсудим условия, когда их применение не приводит к противоречиям.

Как правило, задача нахождения спектра носителей заряда в квантовых точках решается с помощью разностных схем, удовлетворяющих требованиям эрмитовости [12–14]. При рассмотрении гетероструктур с характерными размерами $\gtrsim 10$ нм необходимо выбрать не слишком малый шаг сетки ($\gtrsim 1$ нм). При этом мелкомасштабные осцилляции волновой функции, соответствующие нефизическим решениям, будут отфильтровываться разностной схемой. Обычно так и происходит, поскольку вычислители, как правило, не используют сетку с шагом меньшим, чем постоянная решётки кристалла (около 0,5 нм для Si и Ge). При изучении наноструктур, у которых хотя бы один характерный размер ~ 1 нм, упомянутый эффект возникновения нефизических решений игнорировать нельзя и требуется подбирать правильное значение параметра μ .

Заключение. В данной работе сформулированы граничные условия на гетеропереходе для волновой функции дырки в рамках шестизонной **кp**-модели. Показано, что требо-

вание непрерывности волновой функции фиксирует вид граничных условий (и соответствующий вид гамильтониана) с точностью до единственного параметра μ , являющегося характеристикой гетероперехода.

На примере вычисления энергетического спектра дырки в квантовой точке Ge/Si показано, что при некоторых «нефизических» значениях параметра μ задача нахождения основного состояния является некорректной, а именно отсутствует сходимость энергии и волновой функции при уменьшении шага сетки конечно-разностной схемы. При малом шаге сетки в качестве основного состояния оказывается сильно осциллирующее интерфейсное состояние. Такие нефизические интерфейсные состояния, возникающие при неудачном выборе μ , заполняют всю запрещённую зону.

Определён диапазон значений μ , в котором задача корректна. Показано, что стандартные граничные условия (непрерывность волновой функции и перпендикулярной к границе компоненты скорости) соответствуют значению $\mu = 0,5$ и для большинства гетеропар приводят к нефизическому решению.

Предложенный подход применён к резким гетеропереходам, т. е. к системам с резко меняющимися характеристиками. Это, однако, не является ограничением подхода, так как гамильтониан в форме (9) может использоваться и для плавно меняющихся в пространстве параметров.

Заметим также, что уравнения более сложной восьмизонной модели имеют структуру, подобную рассматриваемым в данной работе. Соответственно в этой модели могут возникать аналогичные проблемы при описании структур с меняющимися в пространстве эффективными массами.

Авторы благодарят канд. физ.-мат. наук А. В. Родину за полезное обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Luttinger J. M., Kohn W.** Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // *Phys. Rev.* 1955. **97**, N 4. P. 869–883.
2. **Lassen B., Melnik R. V. N., Willatzen M.** Spurious solutions in the multiband effective mass theory applied to low dimensional nanostructures // *Commun. Computat. Phys.* 2009. **6**, N 4. P. 699–729.
3. **Rodina A. V., Alekseev A. Y., Efros A. L. et al.** General boundary conditions for the envelope function in the multiband **kp** model // *Phys. Rev. B.* 2002. **65**, N 12. 125302.
4. **Foreman B.** Choosing a basis that eliminates spurious solutions in **k · p** theory // *Phys. Rev. B.* 2007. **75**, N 23. 235331.
5. **Сурис Р. А.** Пограничные состояния в гетеропереходах // *Физика и техника полупроводников.* 1986. **20**, № 11. С. 2008–2015.
6. **Tokatly I. V., Tsibizov A. G., Gorbatsevich A. A.** Interface electronic states and boundary conditions for envelope functions // *Phys. Rev. B.* 2002. **65**, N 16. 165328.
7. **Бир Г. Л., Пикус Г. Е.** Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
8. **Burt M. G.** Resolution of the out-of-zone solution problem in envelope-function theory // *Superlattices and Microstructures.* 1998. **23**, N 2. P. 531–534.
9. **Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R.** Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys // *Journ. Appl. Phys.* 2001. **89**, N 11. P. 5815–5875.
10. **Voigtlander B.** Fundamental processes in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth // *Surf. Sci. Rep.* 2001. **43**, N 5–8. P. 127–254.

-
11. **Жуков В. П., Федорук М. П.** Конечно-разностный метод вычисления основного состояния наноструктур в шестизонном $\mathbf{k}\mathbf{p}$ приближении // Вычислительные технологии. 2010. **15**, № 6. С. 57–74.
 12. **Jiang H., Singh J.** Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study // Phys. Rev. B. 1997. **56**, N 8. P. 4696–4701.
 13. **Pryor C.** Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations // Phys. Rev. B. 1998. **57**, N 12. P. 7190–7195.
 14. **Stier O., Grundmann M., Bimberg D.** Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory // Phys. Rev. B. 1999. **59**, N 8. P. 5688–5701.

Поступила в редакцию 9 июля 2013 г.
