

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

*А. А. Горбачевич**, *О. В. Жабицкий***

*Московский институт электронной техники
103498, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 августа 2002 г.

Получено точное решение задачи о спектре дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера, в квантовой яме конечной глубины при произвольных одноосных напряжениях в яме и в барьере. Найдены условия топологических переходов, сопровождающихся изменением связности поверхности постоянного значения энергии, и показано, что при определенных значениях параметров модели эффективная масса дырок основной подзоны размерного квантования становится отрицательной.

PACS: 67.57.Lm, 76.60.-k

1. ВВЕДЕНИЕ

Важную роль в использовании современных методов зонной инженерии для создания новых типов гетероструктур играют качественные представления об особенностях формирования энергетического спектра носителей заряда с учетом эффектов размерного квантования. Для невырожденных состояний в зоне проводимости эти представления достаточно элементарны и сводятся к результатам точно решаемой задачи о связанном состоянии электрона в квантовой яме конечной глубины [1]. Более сложная ситуация имеет место в валентной зоне из-за перемешивания ветвей легких и тяжелых дырок при отличных от нуля значениях квазиимпульса поперечного движения носителей заряда (в плоскости квантовой ямы). Простейшей моделью, описывающей этот эффект, служит гамильтониан Латтинжера, в котором не учитывается зона, отщепленная за счет спин-орбитального взаимодействия. Точное решение задачи с гамильтонианом Латтинжера для квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами было получено Недорезовым [2] и уточнено в работах [3, 4]. В последние годы большой интерес вызывают напряженные гетероструктуры, что во многом обусловлено их разнообразными приборными применениями [5]. Использование в качестве дополни-

тельного управляемого параметра деформационного потенциала значительно расширяет возможности создания гетероструктур с заданными свойствами. Выращивая напряженные гетероструктуры разного типа (сжатые или растянутые в плоскости квантовой ямы), можно изменять запрещенную зону и эффективную плотность состояний, управляя тем самым длиной волны излучения и величиной порогового тока в полупроводниковых лазерах [6, 7] и повышая чувствительность детекторов и электрооптических модуляторов [8]. В транзисторных структурах применение напряженных слоев позволяет увеличить подвижность и концентрацию носителей заряда в канале полевого транзистора с модулированным легированием [9], повысить эффективность эмиттера и увеличить коэффициент переноса носителей заряда через базу в гетеропереходном биполярном транзисторе [9]. Решение Недорезова на случай деформированной квантовой ямы было обобщено в работе [10]. Основные закономерности дырочно-го спектра реальных полупроводниковых систем с различающимися латтинжеровскими параметрами в яме и в барьере, конечной высотой потенциального барьера и с учетом напряжений были установлены путем численного расчета в работе [11], где использовались аналитические выражения для собственных функций гамильтониана Латтинжера. Многообразие результатов численных расчетов энергетического спектра дырок в размерно-квантованных по-

*E-mail: aag@qdn.miee.ru

**E-mail: Oleg.Zhabitsky@motorola.com

лупроводниковых гетероструктурах подробно отражено в современной монографической и учебной литературе [7, 12–14].

В настоящей работе получено точное решение для энергетического спектра дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера, в квантовой яме конечной глубины в предположении, что латтинжеровские параметры в яме и в барьере одинаковы, но с учетом возможного различия упругих напряжений в яме и в барьере. Как следует из полученных соотношений, в определенных интервалах изменения параметров системы эффективная масса дырок в основной подзоне размерного квантования E_{h1} становится отрицательной, а изоэнергетическая поверхность — многосвязной, что может иметь разнообразные экспериментальные проявления. Фактически речь идет о новом механизме топологического перехода в энергетическом спектре [15].

Статья имеет следующую структуру. Во втором разделе на примере модельной задачи о квантовой яме с бесконечно высокими барьерами установлены основные факторы, определяющие детали энергетического спектра дырок в размерно-квантованных гетероструктурах, в частности, взаимосвязь величины эффективной массы поперечного (по отношению к оси квантования) движения и порядка следования по энергии подзон размерного квантования. В современной литературе [7, 13, 14] при качественной интерпретации результатов численных расчетов, как правило, используют различные приближения, которые сводятся к пренебрежению «гофрировкой» (wagring) объемного закона дисперсии. Нами показано, что пренебрежение гофрировкой может приводить к потере важных особенностей поперечного закона дисперсии дырок. В третьем разделе получено точное решение модельной задачи о спектре дырок в квантовой яме конечной глубины, найдены условия топологических переходов, сопровождающихся изменением связности поверхности постоянного значения энергии, и построены топологические диаграммы, определяющие границы областей существования многосвязных поверхностей постоянного значения энергии в зависимости от величины напряжений в яме и барьере. Показано, что топологически нетривиальной структуре энергетического спектра благоприятствует наличие растягивающих деформаций в квантовой яме. В четвертом разделе в качестве примера реализации топологических переходов в конкретных физических системах представлены результаты численных расчетов методом огибающей энергетического спектра в напряженных гетероструктурах InP/InGaAs и GaAs/SiGe. Возмож-

ные экспериментальные проявления топологических переходов обсуждены в четвертом разделе и в Заключение.

2. СМЕШИВАНИЕ ЛЕГКИХ И ТЯЖЕЛЫХ ДЫРОК, ГОФРИРОВКА И РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИМИ БАРЬЕРАМИ

Рассмотрим одиночную симметричную квантовую яму шириной L . Пусть плоскость ямы перпендикулярна оси z . Для описания эффектов размерного квантования используем приближение эффективной массы (огибающей). Гамильтониан Латтинжера, записанный для огибающих и описывающий подзоны тяжелых и легких дырок, имеет вид ($\hbar = 1$)

$$H(z) = - \begin{pmatrix} P+Q & L & M & 0 \\ L^* & P-Q & 0 & M \\ M^* & 0 & P-Q & -L \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q \end{pmatrix} + U(z), \quad (1)$$

где

$$P = \frac{\gamma_1}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2),$$

$$Q = \frac{\gamma_2}{2m_0}(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),$$

$$L = -\frac{i\sqrt{3}\gamma_3}{m_0}(k_x - ik_y)k_z,$$

$$M = \frac{\sqrt{3}\gamma_2}{2m_0}(k_x^2 - k_y^2) - i\frac{\sqrt{3}\gamma_3}{m_0}k_xk_y,$$

$U(z)$ — потенциал гетероструктуры ($U(z) = U_0$ для барьера и $U(z) = 0$ в яме), m_0 — масса свободного электрона, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латтинжера, которые в общем случае различны для ямы и барьера. Гамильтониан (1) записан в базисе собственных функций углового момента $Y_{3/2}^{\pm 3/2, \pm 1/2}$. При этом везде ниже зоной тяжелых h (легких l) дырок будем называть зону, отвечающую проекции момента $3/2$ ($1/2$) на ось z при $k_x = k_y = 0$.

Энергетический спектр гамильтониана (1) в объеме полупроводника ($U(z) = \text{const}$) хорошо известен:

$$E_{h,l} = -P \pm \sqrt{Q^2 + |L|^2 + |M|^2}. \quad (2)$$

Каждый энергетический уровень (2) помимо крамеровского вырождения вырожден еще и по состояниям легких и тяжелых дырок. Отличительной особенностью энергетического спектра (2) служит гофрировка, которая пропадает при $\gamma_2 = \gamma_3$.

Размерно-квантованный энергетический спектр невырожденных (без учета крамеровского вырождения) зон (зоны проводимости основных полупроводников) может быть получен непосредственно из выражения для объемного закона дисперсии. Для этого следует подставить в выражение для объемного закона дисперсии квантованные значения продольного квазиимпульса, соответствующего движению вдоль оси размерного квантования, определяемые, в свою очередь, из условий сшивки волновых функций и их производных на гетероинтерфейсах [7, 12, 14]. Каждому квантованному значению продольного квазиимпульса k_n при этом соответствует своя подзона размерного квантования $E_n(k_\perp)$, описывающая зависимость энергии от поперечного квазиимпульса k_\perp (соответствующего движению вдоль плоскости ямы). При квантовании вырожденных состояний валентной зоны основных полупроводников (2) перепутывание ветвей тяжелых и легких дырок при конечных значениях поперечного квазиимпульса значительно усложняет задачу расчета размерно-квантованного спектра.

При равном нулю поперечном квазиимпульсе гамильтониан (1) диагонален, состояния легких и тяжелых дырок расщеплены и их продольные квазиимпульсы квантуются независимо. Задача о квантовании продольного квазиимпульса при этом сводится к задаче об определении спектра невырожденных состояний в квантовой яме конечной глубины [1]. Если пренебречь различием эффективных масс (латтинжеровских параметров) в случаях ямы и барьера, то размерно-квантованные значения продольных квазиимпульсов легких и тяжелых дырок совпадают ($k_{nh0} = k_{nl0} = k_{n0}$; эффективная масса не входит в условие размерного квантования [1]) и положения краев подзон определяются значениями объемных эффективных масс:

$$E_{nh,l0} = -\frac{k_{n0}^2}{2m_{h,l}} = -\frac{(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)k_{n0}^2}{2m_0}. \quad (3)$$

Из данного соотношения следует, что первая подзона размерного квантования тяжелых дырок лежит выше по энергии, чем первая подзона легких дырок.

Интересной особенностью энергетического спектра $E_n(k_\perp)$ размерно-квантованных систем, обнаруженной уже в первых расчетах для квантовых ям [3], является то, что эффективная масса в поперечном законе дисперсии первой подзоны размерного квантования (подзоны тяжелых дырок) оказывается меньше эффективной массы следующей подзоны. В литературе эта закономерность получила название перестановки масс (mass reversal) [7, 13, 14].

Для ее качественной интерпретации используется различная аргументация, которая, в конечном счете, сводится к тому, что в гамильтониане Латтинжера (1) под тем или иным предлогом отбрасываются недиагональные члены [7, 13, 14]. Для поперечного закона дисперсии при этом получаем

$$E_{nh,l}(k_\perp) = E_{nh,l0} - \frac{k_\perp^2}{m_{h,lr}} = E_{nh,l0} - \frac{(\gamma_1 \pm \gamma_2)k_\perp^2}{2m_0}, \quad (4)$$

т. е., действительно, из соотношения (4) следует, что коэффициент при квадрате поперечного квазиимпульса в выражении для энергии тяжелых дырок больше, чем соответствующий член в выражении для легких дырок. Однако получающиеся в результате такой манипуляции значения переставленных масс (4) не зависят ни от геометрических параметров размерно-квантованной гетероструктуры, ни от номера подзоны и, на самом деле, даже качественно не воспроизводят реальную ситуацию. В табл. 1 приведены результаты точного решения [2, 3] (обсуждаемого ниже) для эффективной массы поперечного движения двух первых подзон размерного квантования тяжелых дырок $m_{h1,2}$ (шестой и седьмой столбцы табл. 1) и первой подзоны легких дырок m_{l1} (шестой столбец табл. 2) для различных материалов в виде тонкой пленки (квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами). В четвертом столбце для сравнения помещены численные значения переставленных масс $m_{h,lr}$ (4). Для материалов в верхней части таблицы (Si-подобные материалы) эффективная масса легких дырок действительно больше «поперечной» массы тяжелых дырок. Однако численные значения поперечных масс $m_{h,l1}$ при этом не имеют ничего общего со значениями переставленных масс. У большинства материалов из верхней части табл. 1 эффективная масса поперечного движения легких дырок отрицательна. Для материалов же нижней части табл. 1 (Ge-подобные материалы) поперечная масса легких дырок оказывается меньше поперечной массы тяжелых дырок. Нетрудно показать, что материалы нижней части табл. 1 — это материалы, у которых вторая подзона размерного квантования тяжелых дырок расположена выше по энергии первой подзоны легких дырок, т. е., как следует из (3), для этих материалов выполняется соотношение

$$\nu = \frac{m_h}{m_l} > 4 \quad (5)$$

Таблица 1. Результаты расчета поперечных эффективных масс $m_{h1,2}$ (11) двух первых подзон тяжелых дырок для различных полупроводников. Параметры ν , m_h , m_{hr} , $m_{h\perp 0}$ определены соответственно в (5), (3), (4), (8). В последнем столбце приведены ссылки на источники, из которых взяты значения $\gamma_{1,2,3}$

Материал	ν	m_0/m_h	m_0/m_{hr}	$m_0/m_{h\perp 0}$	m_0/m_{h1}	m_0/m_{h2}	Ссылка
Si	1.45	3.44	4.61	-11.3408	3.47929	4.68684	[14]
GaP	1.64	3.07	4.54	-48.0206	-0.010403	7.03924	[16]
GaP	2.75	2.24	5.18	-3.25551	4.06544	11.9147	[14]
AlAs	2.55	2.12	4.58	-2.79707	3.64245	8.73729	[16]
AlAs	2.30	2.09	4.13	-3.21162	3.25151	6.75966	[14]
AlP	2.47	1.93	4.06	-2.33254	3.26109	7.20948	[16]
AlSb	2.7	2.8	6.37	-3.41378	5.08869	13.5452	[16]
AlN	2.92	0.98	2.39	-2.2217	1.76406	7.29171	[16]
GaN	3.56	1.17	3.42	-1.42	2.71259	22.8286	[16]
GaAs	3.88	2.86	9.04	-3.46228	7.1656	224.439	[16]
GaAs	4.17	2.65	8.95	-3.06429	7.1139	-155.477	[14]
Ge	4.51	4.85	17.6	-5.25372	14.0416	-102.141	[14]
InP	4.40	1.88	6.68	-1.58875	5.39928	-45.4664	[16]
InP	4.92	2.12	8.36	-2.62692	6.61613	-27.9207	[14]
InN	5.2	1.2	4.98	-1.34595	3.96514	-12.5272	[16]
GaSb	5.31	3.74	15.83	-4.76623	12.5128	-38.0669	[14]
GaSb	5.7	4	18.1	-4.87872	14.3526	-33.3938	[16]
InAs	12.33	3	28.5	-1.37294	23.1966	-8.71673	[16]
InAs	12.43	2.93	28.04	-2.89337	22.5455	-10.4123	[14]
InSb	17.32	3.8	50.3	-2.39355	40.7622	-10.4437	[16]
InSb	17.46	3.8	50.72	-4.12938	40.7881	-12.4159	[14]

или

$$\gamma_1 < \frac{10}{3}\gamma_2.$$

Эффективная поперечная масса второй подзоны тяжелых дырок у этих материалов всегда больше эффективной массы первой подзоны. Таким образом, точное утверждение состоит в том, что перестановка поперечных масс происходит не для подзон легких и тяжелых дырок, а для первой и второй подзон размерного квантования в порядке их следования по энергии: первая подзона обладает меньшей поперечной массой, чем вторая. Заметим, что, как показывает расчет, поперечная эффективная масса всех

подзон существенно зависит как от толщины пленки (ширины квантовой ямы), так и от номера подзоны и даже качественно не воспроизводится соотношением (4).

Следует отметить, что процедура отбрасывания недиагональных членов в гамильтониане (1), приводящая к соотношениям (4), не обоснована и с формальной точки зрения, поскольку коэффициент γ_3 , которому пропорциональны недиагональные члены в (1), для всех основных полупроводников больше коэффициента γ_2 [14, 16], определяющего различие эффективных масс легких и тяжелых дырок. Кроме

Таблица 2. Результаты расчета поперечной эффективной массы m_{l1} (11) первой подзоны легких дырок для различных полупроводников. Параметры $\nu, m_l, m_{lr}, m_{l\perp 0}$ определены соответственно в (5), (3), (4), (8)

Материал	ν	m_0/m_l	m_0/m_{lr}	$m_0/m_{l\perp 0}$	m_0/m_{l1}	Ссылка
Si	1.45	5	3.83	19.7808	1.71036	[14]
GaP	1.64	5.03	3.56	56.1206	-7.02045	[16]
GaP	2.75	6.16	3.22	11.6555	-5.45039	[14]
AlAs	2.55	5.4	2.94	10.3171	-2.84356	[16]
AlAs	2.30	4.81	2.77	10.1116	-1.38447	[14]
AlP	2.47	4.77	2.64	9.03254	-1.89515	[16]
AlSb	2.7	7.56	3.99	13.7738	-5.40956	[16]
AlN	2.92	2.86	1.45	6.0617	-4.54101	[16]
GaN	3.56	4.17	1.92	6.76	-18.7366	[16]
GaAs	3.88	11.1	4.92	17.4223	-213.816	[16]
GaAs	4.17	11.05	4.75	16.7643	165.876	[14]
Ge	4.51	21.85	9.1	31.9537	122.365	[14]
InP	4.40	8.28	3.48	11.7488	53.3047	[16]
InP	4.92	10.44	4.2	15.1869	37.2528	[14]
InN	5.2	6.24	2.46	8.78595	18.066	[16]
GaSb	5.31	19.86	7.77	28.3662	55.421	[14]
GaSb	5.7	22.8	8.7	31.6787	53.005	[16]
InAs	12.33	37	11.5	41.3729	29.1383	[16]
InAs	12.43	36.41	11.3	42.2334	29.0831	[14]
InSb	17.32	65.8	19.3	71.9935	138.109	[16]
InSb	17.46	66.36	19.44	74.2894	135.703	[14]

того, при отбрасывании недиагональных членов теряется информация о такой существенной особенности объемного спектра, как гофрировка. Между тем вклад недиагональных членов гамильтониана Латтинжера в размерно-квантованный спектр нетрудно учесть по теории возмущений, считая малым параметром отношение

$$\frac{k_{\perp}}{k_n} \ll 1. \tag{6}$$

Выполнив в (2) разложение по параметру (6), получим

$$E_{h,l} \approx -E_{h,l0} - \frac{k_{\perp}^2}{2m_{h,l\perp 0}}, \tag{7}$$

где для «затравочной» эффективной поперечной массы $m_{h,l\perp 0}$ имеем следующее выражение:

$$\frac{m_0}{m_{h,l\perp 0}} = \gamma_1 \pm \gamma_2 \mp \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2}. \tag{8}$$

При $\gamma_2 = \gamma_3$ (отсутствие гофрировки) затравочные поперечные массы совпадают с объемными массами $m_{h,l}$ (3). Переставленные массы (4) получаются из (8), если положить равным нулю латтинжеровский параметр γ_3 . Нетрудно видеть, что с точностью до вкладов второго порядка по k_{\perp} в энергии это эквивалентно исключению из гамильтониана Латтинжера недиагональных членов.

Как было отмечено авторами ранее [17], затравочная поперечная эффективная масса тяжелых дырок отрицательна для многих полупроводников с достаточно большим отношением параметров γ_3 и γ_2 (см. табл. 1) Это есть прямое следствие гофрировки в объемном законе дисперсии тяжелых дырок. Вместе с тем затравочная эффективная масса (8) не есть поперечная эффективная масса, наблюдаемая в эксперименте, поскольку выражение (8) не учитывает зависимости квантованного квазиимпульса k_n от поперечного квазиимпульса k_\perp , возникающей в результате смешивания ветвей легких и тяжелых дырок при конечных k_\perp . Представим эту зависимость следующим образом:

$$k_{nh,l} = k_{nh,l0} + \frac{\alpha_{h,l} k_\perp^2}{k_{nh,l0}}. \quad (9)$$

Здесь второй член в правой части будем называть фазовым сдвигом, поскольку он определяет изменение фазы волновой функции при изменении поперечного импульса. С учетом фазового сдвига выражение для эффективной массы поперечного движения дырок имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{m_0}{m_{h,l\perp}} &= \frac{m_0}{m_{h,l\perp 0}} + \delta \left(\frac{m_0}{m_{h,l\perp 0}} \right) = \\ &= \gamma_1 \pm \gamma_2 \mp \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2} + 2\alpha_{h,l}(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)k_{nh,l0}, \quad (10) \end{aligned}$$

где $\delta(m_0/m_{h,l\perp 0})$ — изменение эффективной массы поперечного движения, связанное с фазовым сдвигом.

Для определения фазового сдвига следует решить задачу на собственные функции гамильтониана (1) с учетом условия сшивки на границах квантовой ямы. В квантовой яме с бесконечно высокими барьерами условие сшивки сводится к обращению в нуль волновой функции на границе. Для заданного значения энергии гамильтониан Латтинжера (1) имеет восемь линейно независимых решений (с учетом состояний, различающихся направлением продольного квазиимпульса $\pm k_{nh,l}$), образующих базис. Поэтому граничные условия в яме с бесконечно высокими барьерами приводят к системе, состоящей из восьми однородных линейных уравнений относительно коэффициентов разложения собственной волновой функции по базису. Впервые эта задача была решена Недорезовым [2] (при подстановке конкретных значений латтинжеровских параметров в [2] была допущена ошибка в знаке, исправленная в рабо-

те [3]). Решение для поперечной эффективной массы (в котором учтен фазовый сдвиг) имеет вид [2, 3]

$$\begin{aligned} \frac{m_0}{m_{h,l\perp}} &= \frac{m_0}{m_{h,l\perp 0}} + \\ &+ \begin{cases} + \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2^2} \frac{m_0}{\sqrt{m_h m_l}} \frac{1}{\pi n} \operatorname{ctg} \frac{n\pi\nu^{\mp 1/2}}{2}, & n = 2m+1, \\ - \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2^2} \frac{m_0}{\sqrt{m_h m_l}} \frac{1}{\pi n} \operatorname{tg} \frac{n\pi\nu^{\mp 1/2}}{2}, & n = 2m, \end{cases} \quad (11) \end{aligned}$$

где $m_{h,l}$ — объемные эффективные массы тяжелых и легких дырок (3), $m_{h,l\perp 0}$ — затравочные поперечные эффективные массы (8), параметр ν определен в (5). Второй член в правой части (11) определяет вклад в поперечную эффективную массу, связанный с фазовым сдвигом. Результаты расчета поперечных эффективных масс для различных полупроводников приведены в табл. 1 и 2.

Как следует из (11), для основной подзоны размерного квантования ($n = 1$), в силу того что $\nu > 1$, фазовый сдвиг дает положительный по знаку вклад в обратную поперечную эффективную массу тяжелых дырок и отрицательный — в эффективную массу легких дырок для Si-подобных материалов ($\nu < 4$), у которых вторая по энергии подзона является основной подзоной легких дырок.

Для Ge-подобных материалов ($\nu > 4$) вторая по энергии подзона — подзона тяжелых дырок с $n = 2$, и, как следует из (11), вклад фазового сдвига в обратную поперечную эффективную массу для нее отрицателен. Таким образом, именно зависимость импульса размерного квантования от поперечного квазиимпульса (фазовый сдвиг в нашей терминологии) позволяет объяснить основные закономерности, определяющие величину поперечной эффективной массы в различных материалах.

На качественном уровне физическую причину положительного знака фазового сдвига α_h квазиимпульса размерного квантования (увеличения k_z с увеличением k_\perp) для основной подзоны размерного квантования можно интерпретировать следующим образом. При $k_\perp \neq 0$ к волне, отвечающей ветви тяжелых дырок, «припутывается» волна, отвечающая ветви легких дырок с той же энергией, но с меньшим k_z . Условие образования стоячей волны (условие конструктивной интерференции) требует, чтобы некий средний эффективный импульс перепутанных состояний был порядка импульса k_{z0} , определяемого условием интерференции в отсутствие перепутывания ветвей легких и тяжелых дырок (при $k_\perp = 0$). При $k_\perp = 0$ квазиимпульс $k_{z0} = k_{h0}$, а $k_{l0} < k_{z0}$.

Припутывание к волне с $k_{h0} = k_{z0}$ волны с меньшим квазиимпульсом (k_{z0}) уменьшает их средний эффективный импульс. Поэтому, чтобы при увеличении импульса k_{\perp} , определяющего степень перепутывания, эффективный средний импульс оставался порядка k_{z0} , квазиимпульс k_h с ростом k_{\perp} также должен увеличиваться. Эта тенденция будет ослаблена, если сблизить k_h и k_l , сместив, например, ветвь тяжелых дырок вниз по энергии, а ветвь легких дырок вверх, за счет приложенного к системе растягивающего напряжения.

К аналогичному эффекту приводит понижение высоты барьера, в результате чего величина импульса размерного квантования k_{h0} уменьшается [1], уменьшаются также разница между k_{h0} и k_{l0} и величина фазового сдвига. Этот механизм подавления фазового сдвига может быть усилен, если включить в барьере сжимающие напряжения, увеличивающие величину барьера для легких дырок и уменьшающие его для тяжелых дырок. Решению задачи о размерном квантовании энергетического спектра гамильтониана Латтинжера для квантовой ямы конечной глубины в напряженной гетероструктуре посвящен следующий раздел.

3. РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ ДЫРОЧНОГО СПЕКТРА В НАПРЯЖЕННОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ КОНЕЧНОЙ ГЛУБИНЫ

Рассмотрим напряженную гетероструктуру, состоящую из квантовой ямы и симметричных барьеров конечной высоты. Пусть ζ — обусловленный механическими напряжениями сдвиг энергетических уровней в области ямы, а η — в областях барьеров. Будем предполагать, что напряжения не нарушают пространственной симметрии системы и они одинаковы в левом и правом барьерах. Для того чтобы учесть напряжения, необходимо в гамильтониане Латтинжера сделать следующую замену переменных Q соответственно в яме и барьерах:

$$Q^w \rightarrow Q^w + \zeta, \quad Q^b \rightarrow Q^b + \eta. \quad (12)$$

Для удобства обозначений введем нормированные напряжения:

$$\zeta_{h,l} = \frac{m_0 \zeta}{\gamma_2 k_{h,l}^2}, \quad \eta_{h,l} = \frac{m_0 \eta}{\gamma_2 q_{h,l}^2}. \quad (13)$$

В квантовой яме конечной глубины помимо граничного условия на волновые функции следует также учитывать условие на производные. Размерности

гамильтониана и соответствующей матрицы граничных условий можно понизить, выполнив обнаруженное Бройдо и Шэмом [18] преобразование базиса, обеспечивающее обращение в нуль матричных элементов импульса p_z . Впоследствии это преобразование было обобщено для гамильтониана 6×6 [19, 20]. В новом базисе гамильтониан приводится к блочно-диагональному виду, элементами которого служат два одинаковых гамильтониана 2×2 :

$$\tilde{H}(z) = - \begin{pmatrix} P + Q & \tilde{M} \\ \tilde{M}^* & P - Q \end{pmatrix} + U(z). \quad (14)$$

Здесь

$$\tilde{M} = |M| + i \frac{\sqrt{3} \gamma_3}{m_0} |k_{\perp}| k_z,$$

где M определено в (1). Везде ниже будем использовать граничные условия стандартного вида, обеспечивающие непрерывность потока на границах гетероинтерфейсов, находящихся соответственно при $z = 0$ и $z = L$:

$$\begin{aligned} \psi_l(0_-) &= \psi_w(0_+), & \psi_w(L_-) &= \psi_r(L_+), \\ \hat{j}_l \psi_l(0_-) &= \hat{j}_w \psi_w(0_+), & \hat{j}_w \psi_w(L_-) &= \hat{j}_r \psi_r(L_+), \end{aligned} \quad (15)$$

где оператор потока \hat{j} имеет вид [12]

$$\hat{j} = -e \frac{\delta}{\delta \hat{k}_z} \tilde{H}(\hat{k}_z, \mathbf{k}_{\perp}), \quad (16)$$

$\tilde{H}(\hat{k}_z, \mathbf{k}_{\perp})$ — гамильтониан (14), а индексы l, r, w относятся соответственно к левому и правому барьерам и квантовой яме. Возможные отклонения от стандартных граничных условий (15) и связанные с этим физические эффекты рассмотрены в работе [21].

Разрешая матрицу граничных условий в базисе собственных функций гамильтониана (14), получаем следующее выражение, определяющее энергетический спектр дырок в квантовой яме конечной глубины:

$$S(u, t) + S(s, v) = D(s, t, u, v, k_l, k_h) + D(t, s, v, u, k_h, k_l), \quad (17)$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} S(u, t) &= |u| |\tilde{u}| |t| |\tilde{t}| \sin(k_l L + \phi_{\tilde{u}} - \phi_u) \sin(k_h L + \phi_{\tilde{t}} - \phi_t), \\ D(s, t, u, v, k_1, k_2) &= |s| |\tilde{s}| [|\tilde{u}| |v| \sin(k_1 L + \phi_{\tilde{u}} - \phi_s) \times \\ &\times \sin(k_2 L + \phi_{\tilde{t}} - \phi_v) + |u| |\tilde{v}| \sin(\phi_s - \phi_u) \sin(\phi_{\tilde{t}} - \phi_{\tilde{v}})], \end{aligned}$$

$$u, \tilde{u} = (k_l \pm i q_h) (R_l^b M_l^{w*} - R_l^w M_l^{l,r}),$$

$$v, \tilde{v} = (k_h \pm i q_h) (R_h^b M_h^{w*} - R_h^w M_h^{l,r}),$$

$$s, \tilde{s} = (k_l \pm iq_l)(R_h^b M_l^{w*} - R_l^w M_h^{l,r}),$$

$$t, \tilde{t} = (k_h \pm iq_l)(R_h^b M_h^{w*} - R_h^w M_h^{l,r}),$$

$$M_{h,l}^l = |M| - \frac{\sqrt{3}\gamma_3}{m_0} |k_\perp| q_{h,l},$$

$$M_{h,l}^r = |M| + \frac{\sqrt{3}\gamma_3}{m_0} |k_\perp| q_{h,l},$$

$$M_{h,l}^w = |M| + i \frac{\sqrt{3}\gamma_3}{m_0} |k_\perp| k_{h,l}, \quad R_i^j = Q_i^j - P_i^j - E,$$

а ϕ_i — фаза соответствующего коэффициента, E — энергия. В пределе малых k_\perp справедливы следующие соотношения между парами коэффициентов c и \tilde{c} ($c = \{u, v, s, t\}$):

$$c = -\tilde{c}^*.$$

В пределе $U_0, q \rightarrow \infty$ формула (17) переходит в формулу для спектра из работ [2, 10].

Выражение (8) для затравочных (без учета фазового сдвига) эффективных масс подзон тяжелых и легких дырок с учетом напряжений принимает следующий вид:

$$\frac{m_0}{m_{h,l \perp 0}} = \gamma_1 \pm \gamma_2 \mp \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2(1 - \zeta_{h,l})}. \quad (18)$$

Как обсуждалось ранее, третье слагаемое в этом выражении связано с учетом гофрировки объемного спектра. Появление в знаменателе третьего слагаемого множителя $1 - \zeta_{h,l}$ приводит к тому, что положительные напряжения $\zeta_{h,l}$ увеличивают вклад гофрировки, а отрицательные, напротив, уменьшают. Кроме того, при относительно больших напряжениях множитель $1 - \zeta_{h,l}$ может изменить знак вклада гофрировки в эффективную массу.

С учетом напряжений и фазового сдвига выражение для эффективных масс подзон тяжелых и легких дырок имеет вид

$$\frac{m_0}{m_{h,l}} = \gamma_1 \pm \gamma_2 \mp \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2(1 - \zeta_{h,l})} + 2(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)\alpha_{h,l}. \quad (19)$$

Для барьера конечной высоты в пределе $k_\perp \ll k_{z0}$ из (17) получим для коэффициента $\alpha_{h,l}$ в (19), определяющего фазовый сдвиг и знак эффективной массы, следующее выражение:

$$\alpha_{h,l} = \frac{3\gamma_3^2}{2\gamma_2^2} \frac{q_{h,l}}{2 + q_{h,l}L} \frac{1}{(1 - \zeta_h)(1 - \zeta_l)(1 + \eta_h)(1 + \eta_l)} \left\{ \frac{(1 - \zeta_{l,h})(q_{h,l} - q_{l,h})}{k_{h,l}q_h q_l} \left(1 + \frac{\eta_{h,l}q_{h,l}^2 - \zeta_{h,l}k_{h,l}^2}{k_{h,l}^2 + q_{h,l}^2} \right) \pm \right. \\ \pm \frac{1 - \zeta_{l,h}}{q_{h,l}} \frac{k_{h,l}}{k_{h,l}^2 + q_{h,l}^2} \frac{2\gamma_2}{\gamma_1 \mp 2\gamma_2} (1 + \eta_{l,h})(\eta_{h,l} + \zeta_{h,l}) + \frac{1}{k_l k_h} \left[1 + \frac{\zeta_h(q_h - q_l)k_h^2 + q_h \eta_h (k_h^2 + q_h q_l)}{q_l(k_h^2 + q_h^2)} \right] \times \\ \times \left[1 + \frac{\zeta_l(q_l - q_h)k_l^2 + q_l \eta_l (k_l^2 + q_h q_l)}{q_h(k_l^2 + q_l^2)} \right] \times \\ \left. \times \left[\frac{1 + \cos \phi_{l,h}}{\sin \phi_{l,h}} + \frac{(\eta_{l,h} + \zeta_{l,h})(q_{h,l} - q_{l,h})k_{l,h}q_{l,h}}{q_{h,l}(k_{l,h}^2 + q_{l,h}^2) \pm \zeta_{l,h}(q_l - q_h)k_{l,h}^2 + \eta_{l,h}q_{l,h}(k_{l,h}^2 + q_l q_h)} \right] \right\}, \quad (20)$$

где

$$\phi_{l,h} = k_{l,h}L - 2 \arctg \frac{k_{l,h}}{q_{l,h}}.$$

Происхождение первого члена в правой части выражения (20) связано с зависимостью высоты барьера от поперечного квазиимпульса, возникающей в присутствии напряжений даже при одинаковых латтинжеровских параметрах для ямы и барьера. Вторым членом в правой части возникает из-за зависимости фаз ϕ_c в аргументах синусов в левой части (20) от поперечного квазиимпульса и обращается в нуль при стремлении высоты барьера к бесконечности. Последний член в правой части (20) представляет собой модифицированный в меру конечной высоты барьера и напряжений вклад Недорезова [2]. В яме с

бесконечно высокими барьерами фазовый сдвиг α_h для тяжелых дырок всегда положителен и компенсирует вклад в эффективную массу слагаемого, определяемого гофрировкой. При этом фазовый сдвиг и, соответственно, вклад в обратную эффективную массу легких дырок, напротив, отрицателен. В результате эффективная масса поперечного движения для легких дырок в квантовой яме может стать больше, чем для тяжелых. Однако в допускающих аналитическое исследование пределах коэффициент α_h положителен и его вклад в эффективную массу поперечного движения превышает вклад отрицательного третьего слагаемого в правой части (10). При произвольных значениях параметров формула (20) требует уже численного исследования.

На рис. 1 и 2 приведены топологические диаграммы подзон легких и тяжелых дырок в плоскости (ζ, η) для модельной структуры и различных значений ширины квантовой ямы. Значениям $\zeta, \eta > 0$ отвечает сжатие вдоль оси и растяжение в плоскости гетероструктуры. Согласно (1), (13), (14), напряжения любого знака смещают подзоны легких и тяжелых дырок в противоположные по энергии направления: при растяжении в плоскости квантовой ямы подзоны тяжелых дырок смещаются вниз по энергии, а подзоны легких дырок — вверх, при сжатии — наоборот. При достаточно больших по абсолютной величине положительных напряжениях (осевое сжатие, растяжение в плоскости) первая подзона легких дырок становится основной подзоной и лежит по энергии выше первой подзоны тяжелых дырок. Высота барьера для тяжелых (легких) дырок определяется величиной параметра

$$U_{h,l} = U \mp \zeta \pm \eta. \quad (21)$$

Рассмотрим характерные области топологических диаграмм более подробно.

Граница существования первой подзоны тяжелых дырок определяется условиями $U_h = 0$, $k_{h1} = q_{h1} = 0$. При $U_h < 0$ величины k_h и q_h — чисто мнимые, а волновая функция содержит компоненты, не затухающие при $z \rightarrow \pm\infty$. Вблизи этой линии мал параметр U_h (21), определяющий высоту барьера для тяжелых дырок. Поскольку $\zeta_h^{-1} \rightarrow 0$ (13), наибольший вклад в коэффициент α_h в этой области вносит второе слагаемое в фигурных скобках выражения (20). Проводя несложные преобразования, получим выражение для фазового сдвига α_h :

$$\alpha_h \approx -\frac{1}{\zeta_h} \frac{3\gamma_3^2}{2\gamma_2(\gamma_1 - 2\gamma_2)} \rightarrow 0,$$

а эффективная масса первой подзоны тяжелых дырок с учетом того, что $\zeta_h^{-1} \rightarrow 0$, равна затравочной массе (18):

$$\frac{m_0}{m_{h\perp}} = \gamma_1 + \gamma_2. \quad (22)$$

Вблизи границы области существования первой подзоны легких дырок (линия $k_{l1} = 0$, $q_{l1} = 0$) малым параметром служит уже величина высоты барьера для легких дырок, U_l (21). Для фазового сдвига α_l в этом случае имеем

$$\alpha_l \approx -\frac{1}{\zeta_l} \frac{3\gamma_3^2}{2\gamma_2(\gamma_1 + 2\gamma_2)} \rightarrow 0,$$

а эффективная масса первой подзоны легких дырок равна

$$\frac{m_0}{m_{l\perp}} = \gamma_1 - \gamma_2. \quad (23)$$

Таким образом, вблизи границ $k_{h1} = q_{h1} = 0$ и $k_{l1} = q_{l1} = 0$ области существования подзон поперечные эффективные массы положительны и не зависят от напряжений в яме и барьере.

Вблизи второй границы области существования подзон тяжелых и легких дырок имеем

$$q_{l1} \rightarrow +0, \quad q_{h1} \rightarrow +0$$

соответственно для рис. 1 и 2. Этот случай интересен тем, что при $q_{l1} \rightarrow 0$ эффективная масса первой подзоны тяжелых дырок на рис. 1 отрицательна. Проводя несложные выкладки, получим выражение для фазового сдвига в данном приближении:

$$\begin{aligned} \alpha_{h,l} = & \frac{3\gamma_3^2}{2\gamma_2^2} \frac{q_{h,l}}{2 + q_{h,l}L} \times \\ & \times \frac{\eta_{h,l} + \zeta_{h,l}}{(1 - \zeta_h)(1 - \zeta_l)(1 + \eta_{h,l})} \frac{k_{h,l}^2}{k_{h,l}^2 + q_{h,l}^2} \times \\ & \times \left\{ \frac{q_{h,l}}{k_{l,h}} \left(\frac{q_{h,l}}{k_{l,h}} - \text{tg} \frac{k_{l,h}L}{2} \right) \pm \frac{2\gamma_2(1 - \zeta_{l,h})}{\gamma_1 \mp 2\gamma_2} \right\}. \end{aligned}$$

В общем случае не удастся получить простое выражение для эффективных масс первых подзон тяжелых и легких дырок. Численный расчет показал, что для всех полупроводниковых соединений [14] вблизи границы $q_{l1} = 0$ существует полоса значений (ζ, η) , при которых эффективная масса первой подзоны тяжелых дырок отрицательна. Следует также отметить, что существуют и такие комбинации параметров $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$, при которых нет этой области отрицательных эффективных масс m_{h1} , а именно, при $\gamma_3 \rightarrow \gamma_2$, т. е. в сферическом приближении вблизи границы $q_{l1} = 0$, эффективная масса первой подзоны тяжелых дырок положительна. Увеличение отношения γ_3/γ_2 сначала приводит к появлению области отрицательных эффективных масс m_h , а затем к ее расширению.

Рассмотрим область топологических диаграмм вблизи линии $k_{l1} = k_{h1}$, обозначенной штрихами. Связь между квазиимпульсами k_l и k_h при $k_{\perp} = 0$ описывается уравнением

$$k_l^2(\gamma_1 + 2\gamma_2) = k_h^2(\gamma_1 - 2\gamma_2) + 4m_0\zeta.$$

Точные значения квазиимпульсов и нормированных напряжений в яме при этом имеют вид

$$k_{h,l} = \sqrt{\frac{m_0\zeta}{\gamma_2}}, \quad \zeta_{h,l} = 1.$$

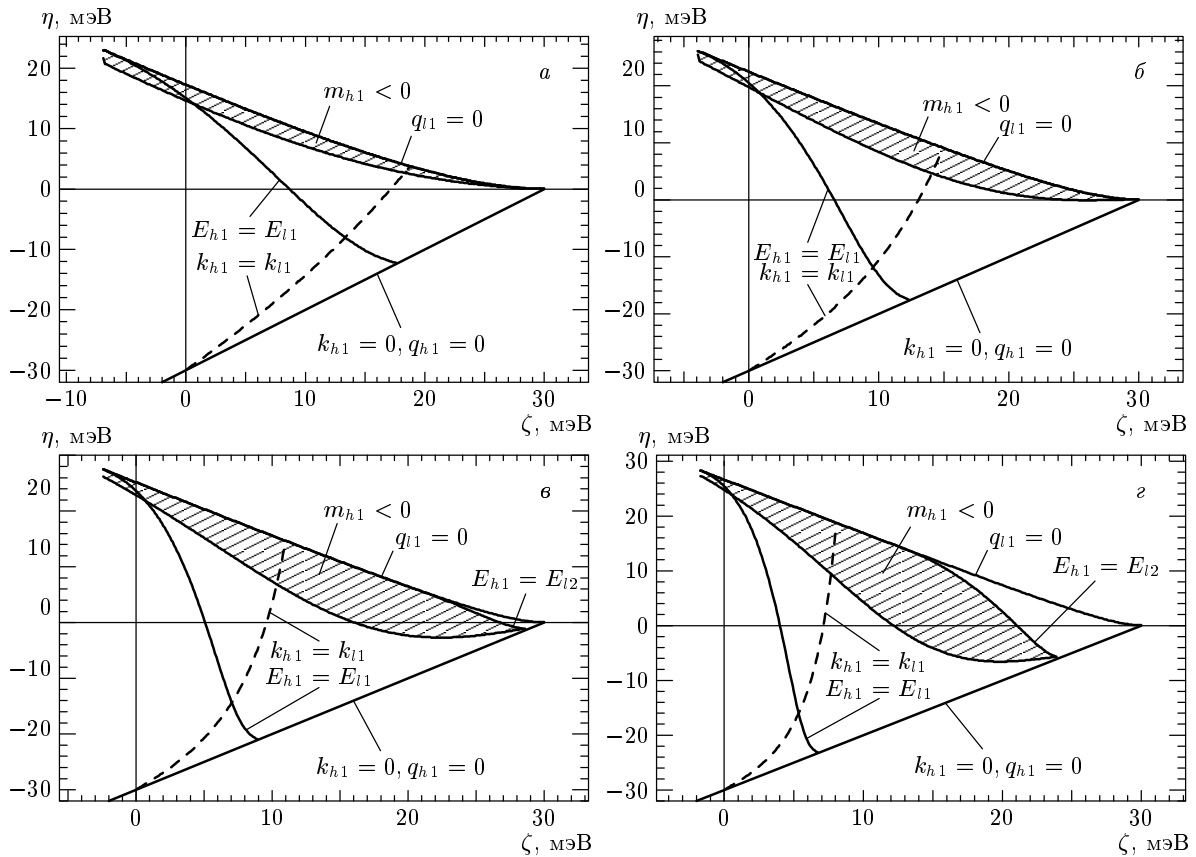


Рис. 1. Зависимость топологической диаграммы для первой подзоны тяжелых дырок в плоскости $\zeta\eta$ для модельной структуры от ширины квантовой ямы: $L = 50$ (а), 75 (б), 100 (в), 125 (г) Å. Высота барьера 30 мэВ, параметры Латтинжера $\gamma_1 = 7.0$, $\gamma_2 = 2.5$, $\gamma_3 = 3.5$

Исследование последнего множителя в квадратных скобках в выражении (20) для фазового сдвига показывает, что вблизи линии $k_l = k_h$ он пропорционален малой величине $1 - \zeta_{l,h}$. Таким образом, все три слагаемых внутри фигурных скобок в (20) пропорциональны малому параметру $1 - \zeta_{l,h}$, а сам фазовый сдвиг имеет особенность,

$$\alpha_{h,l} \propto \frac{1}{1 - \zeta_{h,l}}, \quad (24)$$

которая в выражении (19) для эффективной массы компенсируется третьим слагаемым, связанным с гофрировкой объемного спектра. Из (24) также следует, что на линии $k_l = k_h$ фазовый сдвиг изменяет знак. Левее этой линии он положителен для тяжелых дырок и отрицателен для легких, а правее — отрицателен для тяжелых дырок и положителен для легких. Эффективные массы первых подзон тяжелых и легких дырок в этой области, как видно из рис. 1 и 2, могут быть как положительными, так и отрицательными.

Представляет интерес точка пересечения кривых $q_{l1} = 0$ и $k_{l1} = k_{h1}$ на рис. 1. В этой точке фазовый сдвиг равен нулю, а эффективная масса первой подзоны тяжелых дырок равна

$$\frac{m_0}{m_h} = \gamma_1 + \gamma_2 - \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2},$$

т.е. точно совпадает с затравочной эффективной массой (8) подзоны тяжелых дырок в отсутствие напряжений и зависит только от величины латтинжеровских параметров. Как уже отмечалось ранее, для всех основных полупроводниковых соединений эта масса отрицательна.

Характерная особенность рис. 1 и 2 — наличие линий пересечения краев ($k_{\perp} = 0$) различных подзон тяжелых и легких дырок при изменении величины напряжения при больших L : пересечение подзоны E_{h1} с E_{l2} и подзоны E_{l1} с E_{h2} , E_{h3} , E_{h4} . С увеличением ширины L квантовой ямы условия для пересечения подзон при изменении величины напря-

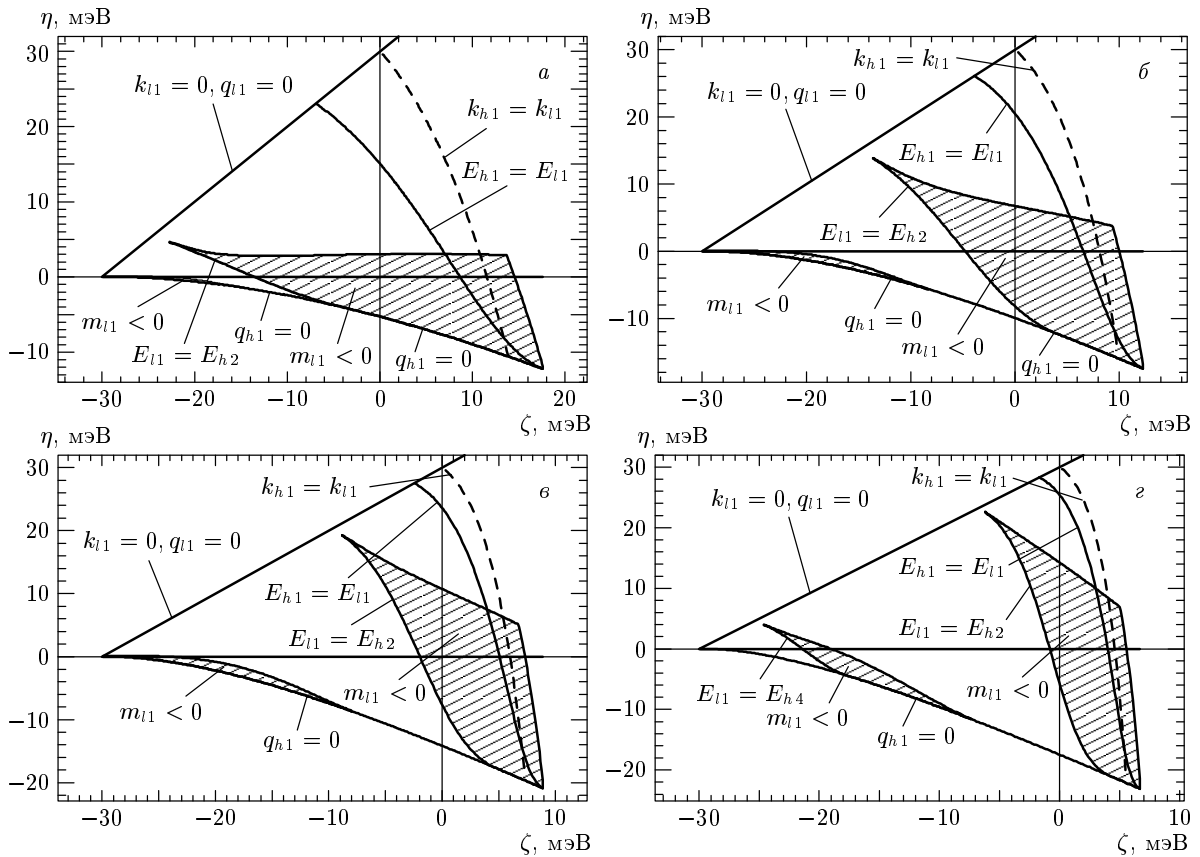


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для первой подзоны легких дырок

жений в структуре облегчаются, поскольку расстояние по энергии между двумя соседними подзонами уменьшается, а число подзон увеличивается. При $\zeta > 0$ (осевое сжатие, растяжение в плоскости) дно потенциальной ямы для легких дырок лежит выше по энергии на величину 2ζ относительно дна потенциальной ямы для тяжелых дырок, а глубина потенциальной ямы увеличивается для легких дырок и уменьшается для тяжелых. Поэтому с ростом напряжений ζ подзоны легких дырок смещаются вверх по энергии, а подзоны тяжелых дырок — вниз, число подзон тяжелых дырок сокращается и увеличивается количество подзон легких дырок. При отрицательных напряжениях, $\zeta < 0$, ситуация диаметрально противоположная: уменьшается высота потенциального барьера для легких дырок и увеличивается для тяжелых дырок, происходит смещение подзон тяжелых дырок по энергии вверх, а подзон легких дырок — вниз.

Пересечение энергетических подзон существенно влияет на фазовые сдвиги (20) и, следовательно, на эффективные массы (19). Действительно, рассмот-

рим первое слагаемое последнего множителя в выражении (20):

$$\frac{1 + \cos \phi_{l,h}}{k_{l,h} \sin \phi_{l,h}} = \frac{\text{ctg}(\phi_{l,h}/2)}{k_{l,h}}$$

Это слагаемое имеет особенность при $\phi_{l,h} = 2\pi n$, где n — целое число. Следовательно, на линии пересечения энергий $E_{h,l1}$ и четных энергий $E_{l,hn}$ фазовый сдвиг $\alpha_{h,l}$ будет иметь особенность вида

$$\alpha_{h,l} \propto \text{ctg}(\pi n).$$

Для первой подзоны легких дырок справа от линий E_{h2} и E_{h4} на семействе рис. 2 фазовый сдвиг имеет особенность $\alpha_l \rightarrow -\infty$, а слева — особенность $\alpha_l \rightarrow \infty$. Следовательно, эффективная масса m_l справа от этих линий имеет особенность $m_l \rightarrow -0$, а слева — особенность $m_l \rightarrow +0$. Аналогично для первой подзоны тяжелых дырок справа от линии E_{l2} на семействе рис. 1 фазовый сдвиг имеет особенность $\alpha_h \rightarrow +\infty$, а слева — особенность $\alpha_h \rightarrow -\infty$. Следовательно, эффективная масса m_h справа от этих

линий имеет особенность $m_h \rightarrow +0$, а слева — особенность $m_h \rightarrow -0$.

Рассмотрим влияние ширины L квантовой ямы на характеристики первой подзоны тяжелых дырок. При увеличении L квазиимпульс k_h уменьшается, а квазиимпульсы q_h и q_l увеличиваются. Поэтому граница $q_{l1} = 0$ сдвигается, как видно из рис. 1, в сторону больших напряжений η . Другим следствием уменьшения квазиимпульса k_h при увеличении ширины ямы является сдвиг рассмотренной выше линии $k_{l1} = k_{h1}$ влево. Как было отмечено ранее, правее этой линии параметр $\zeta_h > 1$. Численный анализ показывает, что при больших ζ при изменении L фазовый сдвиг α_h меняется незначительно, а третье слагаемое в затравочной эффективной массе (19) положительно и, напротив, сильно уменьшается с ростом L . Итак, уменьшение затравочной эффективной массы (19) при больших ζ как раз и является причиной расширения области отрицательных масс m_h .

В случае же первой подзоны легких дырок основным фактором, определяющим влияние ширины L квантовой ямы на параметры топологической диаграммы и поперечную эффективную массу, служит зависимость от ширины L ямы фазового сдвига, вклад которого в эффективную массу (19) для легких дырок в несколько раз выше, чем для тяжелых.

На линии пересечения первых подзон тяжелых и легких дырок выполняется условие

$$k_{h0} = k_{l0}.$$

При этом, как следует из (20), фазовые сдвиги $\alpha_{h,l}$ при приближении к этой линии стремятся к бесконечности, а обратные массы — соответственно к нулю. Поэтому в разложении дисперсионного соотношения (17) по степеням k_{\perp} необходимо учитывать члены более высокого порядка, чем k_{\perp}^2 , что требует численного анализа. Соответствующие расчеты для реальных напряженных гетероструктур представлены в следующем разделе.

Линия пересечения первой подзоны легких и второй подзоны тяжелых дырок характеризуется тем, что в законе дисперсии появляется коническая точка, при этом первый член разложения квазиимпульса линеен по k_{\perp} :

$$k_h = k_{h0} + \alpha_h k_{\perp}, \quad k_l = k_{l0} + \alpha_l k_{\perp}.$$

Проводя вычисления, получим следующее выражение для коэффициентов разложения $\alpha_{h,l}$ при пере-

сечении n -й подзоны тяжелых дырок и m -й подзоны легких дырок:

$$\begin{aligned} \alpha_h^2 &= \frac{3\gamma_3^2}{2\gamma_2^2} \frac{q_h q_l}{k_h k_l} \frac{1 - (-1)^{n+m}}{(2 + q_h L)(2 + q_l L)} \times \\ &\quad \times \frac{1}{(1 - \zeta_h)(1 - \zeta_l)(1 + \eta_h)(1 + \eta_l)} \times \\ &\quad \times \left[1 + \frac{\zeta_h(q_h - q_l)k_h^2 + q_h \eta_h(k_h^2 + q_h q_l)}{q_l(k_h^2 + q_h^2)} \right] \times \\ &\quad \times \left[1 + \frac{\zeta_l(q_l - q_h)k_l^2 + q_l \eta_l(k_l^2 + q_h q_l)}{q_h(k_l^2 + q_l^2)} \right], \\ \alpha_l &= \alpha_h \frac{k_h}{k_l} \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{\gamma_1 + 2\gamma_2}. \end{aligned}$$

Возникновение конической точки при кроссинге подзон различной четности было отмечено в работе [10] при анализе закона дисперсии напряженной квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами и в работе [22], где была развита $(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}})$ -теория возмущений для дырочного спектра квантовой ямы конечной глубины.

Резюмируя, основные характерные особенности топологических диаграмм можно сформулировать следующим образом. Линии $q_{l,h} = 0$ определяют границы области существования локализованных состояний. Левее линии $E_{h10} = E_{l10}$ ($E_{h,ln0} = E_{h,ln}(k_{\perp} = 0)$) подзона E_{h1} лежит выше по энергии, чем E_{l1} , а правее этой линии — ниже. На линии $k_h = k_l$ фазовый сдвиг имеет особенность ($\zeta_h = \zeta_l = 1$), которая в выражении для эффективной массы (10) компенсируется соответствующим особым членом в затравочной эффективной массе (8). На этой линии фазовый сдвиг изменяет знак. Левее он положителен для тяжелых дырок и отрицателен для легких. На диаграммах заштрихованы области отрицательных значений эффективной массы поперечного движения (10). В этих областях подзоны имеют по четыре экстремума, расположенных в направлениях $\langle 110 \rangle$, а поверхности постоянного значения энергии вблизи экстремумов подзон четырехсвязны. Ведущую роль в инверсии знака массы тяжелых дырок играет отрицательный знак затравочной эффективной массы (8), обусловленный гофрировкой в объемном законе дисперсии. Причина же изменения знака эффективной массы подзоны легких дырок — отрицательный знак фазового сдвига. Соотношению параметров, при котором отрицательной эффективной массой обладает основная подзона размерного квантования, на рис. 1 и 2 соответствуют заштрихованные области

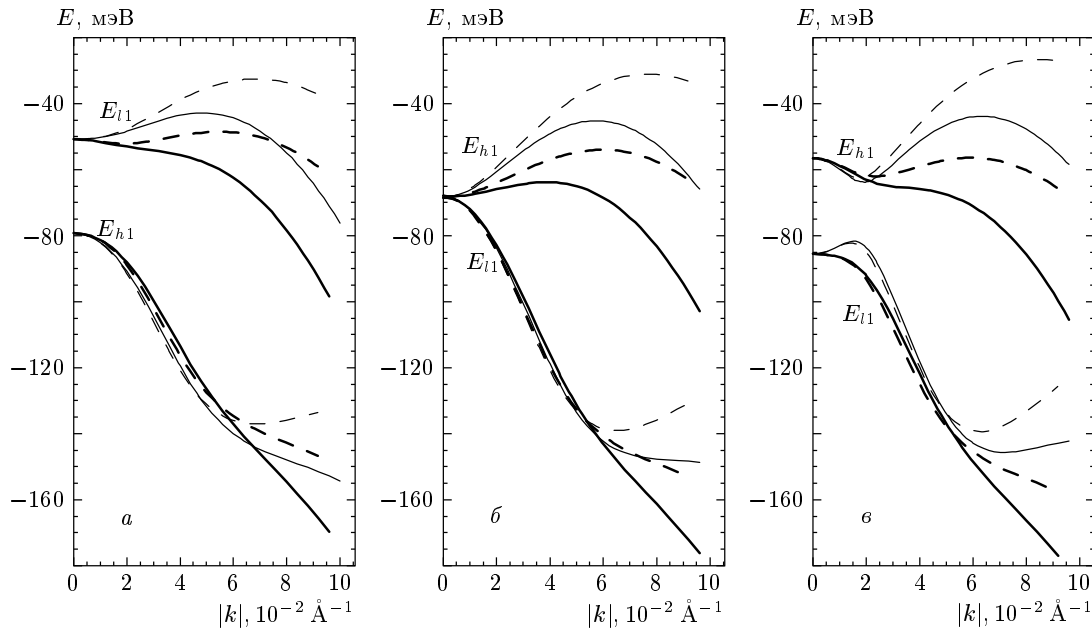


Рис. 3. Законы дисперсии первых подзон тяжелых, E_{h1} , и легких, E_{l1} , дырок в симметричной структуре $\text{InP-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-InP}$ для различных составов материала ямы: $a - x = 0.2$; $b - x = 0.3$; $c - x = 0.4$. При $k = 0$ имеем $E_{l1} > E_{h1}$ (a), $E_{l1} = E_{h1}$ (b), $E_{l1} < E_{h1}$ (c). Толстыми линиями представлены результаты расчетов с несимметризованными граничными условиями [20], тонкими — с симметризованными граничными условиями [12, 26]. Сплошные линии — законы дисперсии в направлении $\langle 100 \rangle$, а штриховые — в направлении $\langle 110 \rangle$. Ширина ямы $L = 35 \text{ \AA}$

вблизи линий $E_{h10} = E_{l10}$ (левее это подзона E_{h1} , правее — E_{l1}). В узком интервале значений параметров вблизи и слева от линии $E_{h10} = E_{l10}$ в заштрихованной области диаграммы рис. 2 подзона E_{h1} имеет пять экстремумов (один экстремум в центре зоны Бриллюэна и четыре — в направлениях $\langle 110 \rangle$). В этой области происходит антикроссинг подзон E_{h1} и E_{l1} . На линии $E_{h2} = E_{l1}$ диаграммы рис. 2, соответствующей кроссингу первой подзоны легких дырок и второй подзоны тяжелых дырок, в энергетическом спектре возникает коническая точка в центре зоны Бриллюэна.

Основной вывод, следующий из анализа топологических диаграмм модельных систем рис. 1 и 2, состоит в том, что в напряженных гетероструктурах имеются области значений параметров, при которых отрицательной эффективной массой обладает основная подзона размерного квантования. Для исследования вопроса о возможности существования отрицательных значений эффективной массы и многосвязных поверхностей постоянного значения энергии в реальных напряженных гетероструктурах следует учесть различие латтинжеровских параметров в яме и в барьере. Задача при этом требует численных расчетов, описанных в следующем разделе.

4. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В НАПРЯЖЕННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ IV ГРУППЫ И СОЕДИНЕНИЙ A_3B_5

Напряженные слои широко применяются в современных оптоэлектронных и транзисторных гетероструктурах. В полевых транзисторных гетероструктурах напряжения служат неизбежной платой за попытку увеличить разрыв зон (band-offset) на гетеропереходе для повышения концентрации носителей заряда в квантовой яме и за стремление использовать материал с меньшей эффективной массой и более высокой подвижностью, чем у материала подложки. В биполярных транзисторных гетероструктурах, где используются соединения с переменным составом с целью создания пространственного градиента ширины запрещенной зоны, напряжения также возникают как сопутствующий эффект и не играют самостоятельной роли. В лазерных гетероструктурах и в детекторах излучения напряжения, напротив, выступают в качестве важного параметра, управляющего взаимным расположением подзон размерного квантования легких и тяжелых дырок и величиной эффективной плотности состояний, определяющей коэффициенты усиления и поглощения

Рис. 4. Двумерные законы дисперсии первых подзон тяжелых, E_{h1} (а), и легких, E_{l1} (б), дырок в симметричной структуре $\text{InP-In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As-InP}$ (симметризованные граничные условия). Ширина ямы $L = 35 \text{ \AA}$

структуры при межзонных переходах [7].

В последнее время значительные успехи достигнуты в области создания квантовых каскадных лазеров [23] на межподзонных переходах [24] в зоне проводимости. Одной из проблем при проектировании таких приборов является конкуренция фотонной рекомбинации и межподзонной фононной релаксации. Испуская фононы, носители заряда накапливаются в минимуме нижней подзоны, что препятствует достижению инверсной заселенности и требует обеспечения специальных условий для отвода носителей заряда из нижней подзоны, значительно усложняющих конструкцию прибора. Как было показано в предыдущем разделе, при определенных соотношениях параметров системы минимумы основной подзоны размерного квантования дырок сдвигаются из центра Γ зоны Бриллюэна в область конечных значений волнового вектора. При этом реализуются благоприятные условия для возникновения межподзонной инверсии заселенности дырок, поскольку дырки, излучательным образом рекомбинируя в точке

Рис. 5. То же, что на рис. 4, в симметричной структуре $\text{InP-In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As-InP}$

Γ , удаляются из области рекомбинации в боковые минимумы подзоны, рассеиваясь на фононах.

Среди известных напряженных гетероструктур наиболее распространены системы, в которых квантовая яма находится в сжатом состоянии. К ним, в частности, относятся гетероструктуры $\text{GaAs-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и $\text{Si-Ge}_x\text{Si}_{1-x}$. Вместе с тем морфология слоев, выращенных в условиях действия растягивающих напряжений, отличается более высоким совершенством, чем под действием напряжений сжатия [25]. Растягивающие напряжения в квантовой яме могут быть достигнуты в системах на основе фосфоросодержащих соединений. Рассмотрим гетероструктуру $\text{InP-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-InP}$. При $x > 0.53$ квантовая яма находится в сжатом состоянии, а при $x < 0.53$ — в растянутом. Численные расчеты выполнялись в рамках стандартного метода огибающей для гамильтониана (1). При проведении расчетов использовались как симметризованные [12, 26], так и несимметризованные [20] граничные условия, по-разному учитывающие разрыв параметров Латтинжера на гетерогранице [27]. Параметры Латтинжера для ямы и барьера принимались соответственно равными $\gamma_1 = 6.98$,

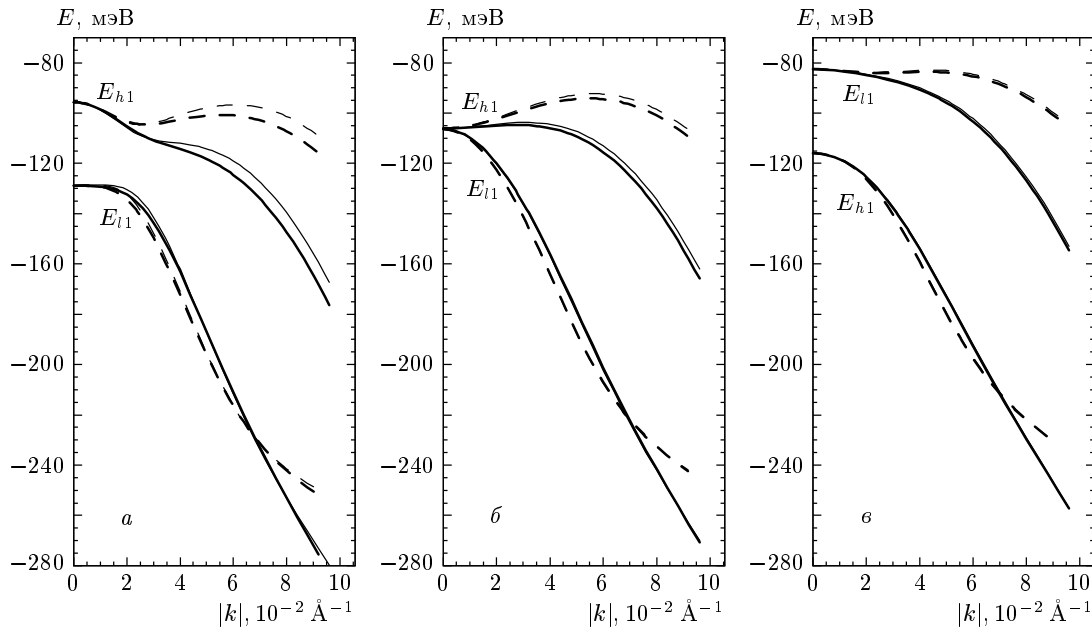


Рис. 6. То же, что на рис. 3, в симметричной структуре GaAs-Si_xGe_{1-x}-GaAs для различных составов материала ямы: а - $x = 0.3$; б - $x = 0.45$; в - $x = 0.6$. При $k = 0$ имеем $E_{l1} < E_{h1}$ (а), $E_{l1} = E_{h1}$ (б), $E_{l1} > E_{h1}$ (в)

$\gamma_2 = 2.06$, $\gamma_3 = 2.93$ для GaAs, $\gamma_1 = 20.0$, $\gamma_2 = 8.5$, $\gamma_3 = 9.2$ для InAs и $\gamma_1 = 5.08$, $\gamma_2 = 1.60$, $\gamma_3 = 2.1$ для InP [16]. Разрывы зон и параметры Латтинжера тройного соединения вычислялись по правилу Вегарда путем линейной интерполяции между соответствующими значениями для гетеропереходов InP-InAs и InP-GaAs [16]. На рис. 3 показана эволюция закона дисперсии первых подзон тяжелых, E_{h1} , и легких, E_{l1} , дырок вблизи линии топологического перехода $E_{h1} = E_{l1}$ при увеличении напряжения ζ в яме. На этой линии меняется знак эффективной массы в точке Г и, соответственно, связность поверхности постоянного значения энергии. Заметим, что дисперсия бокового максимума подзоны легких дырок в плоскости $k_x k_y$ выражена слабо и фактически в системе имеется петля экстремумов с особенностью в плотности состояний. На рис. 4 и 5 представлены двумерные законы дисперсии для первых двух подзон размерного квантования для рис. 3а ($x = 0.2$) и рис. 3в ($x = 0.4$).

Другим примером гетероструктуры с растягивающими напряжениями в квантовой яме может служить система GaAs-Si_xGe_{1-x}-GaAs. Значения как параметров Латтинжера, так и разрывов зон вычислялись по правилу Вегарда. Параметры Латтинжера в яме и в барьере принимались соответственно равными $\gamma_1 = 6.98$, $\gamma_2 = 2.06$, $\gamma_3 = 2.93$ для GaAs [16], $\gamma_1 = 4.22$, $\gamma_2 = 0.39$, $\gamma_3 = 1.44$ для Si и

$\gamma_1 = 13.35$, $\gamma_2 = 4.25$, $\gamma_3 = 5.69$ для Ge [14]. Законы дисперсии первых подзон тяжелых, E_{h1} , и легких, E_{l1} , дырок вблизи линии $E_{h1} = E_{l1}$ изображены на рис. 6.

В гамильтониане Латтинжера не учитывается вклад зоны, отщепленной за счет спин-орбитального взаимодействия. Следует ожидать, что, по крайней мере, в случае, когда межподзонное расстояние меньше энергии спин-орбитального взаимодействия, результаты наших расчетов будут не очень существенно отличаться от более точных расчетов с гамильтонианом 6×6 .

Описанная выше схема создания инверсной заселенности дырочных подзон основана на том, что излучательная рекомбинация и накопление носителей заряда вследствие релаксации на фононах происходят в разных областях **k**-пространства. Данное условие выполняется и в случае, если отрицательной эффективной массой обладает не нижняя, а следующая по энергии подзона. Ситуация, когда отрицательную эффективную массу имеет вторая подзона размерного квантования, как следует из результатов второго и третьего разделов, типична для большинства (в том числе и для ненапряженных) гетероструктур. Следует, однако, отметить, что для эффективной реализации рассмотренного механизма расстояние между подзонами размерного квантования должно превышать энергию оптического фо-

нона, чтобы обеспечить быструю межподзонную релаксацию. В рассмотренных в настоящем разделе гетероструктурах с отрицательной эффективной массой основной подзоны размерного квантования это условие не выполняется и межподзонная релаксация идет на акустических фонах. Вместе с тем, расстоянием между подзонами в случае, если отрицательной эффективной массой обладает вторая по энергии подзона размерного квантования, легко можно управлять, изменяя ширину квантовой ямы. Выяснение вопроса об условиях создания межподзонной инверсной заселенности дырок требует тщательного численного анализа кинетики неравновесных носителей заряда и заслуживает отдельного рассмотрения. Учитывая высокий интерес к источникам когерентного электромагнитного излучения на базе кремния, особого внимания требует исследование системы $\text{Si-Ge}_x\text{Si}_{1-x}$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе установлены основные закономерности формирования энергетического спектра дырок в размерно-квантованных гетероструктурах. Показано, что детали поперечного по отношению к оси квантования закона дисперсии определяются конкуренцией двух факторов — гофрировки в объемном законе дисперсии и зависимости квантованного (продольного по отношению к оси квантования) импульса от поперечного квазиимпульса. При этом в ненапряженных гетероструктурах в глубоких квантовых ямах вторая по энергии подзона размерного квантования, как правило, имеет отрицательную эффективную массу. В работе получено точное решение для энергетического спектра дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера, в квантовой яме конечной глубины с учетом напряжений в яме и в барьере. На основе точного решения показано, что при определенном соотношении параметров системы при наличии растягивающих напряжений в квантовой яме отрицательной эффективной массой может обладать и главная подзона размерного квантования. При изменении параметров системы в напряженных гетероструктурах происходят топологические переходы, сопровождающиеся изменением связности поверхности постоянного значения энергии.

Инверсия знака массы поперечного движения дырок наряду с упоминавшейся выше инверсией заселенности дырочных подзон может иметь и другие экспериментально наблюдаемые следствия. Измене-

ние связности поверхности постоянного значения энергии может быть зарегистрировано в экспериментах по циклотронному резонансу. Следует ожидать, что межэлектронные взаимодействия при достаточно низких температурах приведут к снятию вырождения между четырьмя эквивалентными минимумами энергии в результате возникновения того или иного типа дальнего порядка, подобно тому как происходит снятие междолинного вырождения в инверсионных слоях [28]. В рассматриваемой ситуации неустойчивость будет дополнительно усиливаться из-за наличия ван-хововской особенности плотности состояний, связанной с изменением топологии поверхностей постоянного значения энергии. В последнее время обсуждается возможность использования искусственных гетероструктур для целенаправленного создания условий, обеспечивающих осуществление тех или иных механизмов сверхпроводимости [29, 30]. В этом смысле описанная в данной работе ситуация с изменением топологии спектра интересна для проверки условий реализации механизмов сверхпроводимости, связанных с наличием особенности плотности состояний.

Один из авторов (А. А. Г.) признателен за полезные обсуждения Р. Винклеру (R. Winkler). Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 02-02-16994) и Министерства образования РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
2. С. С. Недорезов, ФТТ **12**, 2269 (1970).
3. А. Матулис, К. Пирагас, ФТП **11**, 2202 (1975).
4. М. И. Дьяконов, А. В. Хаецкий, ЖЭТФ **82**, 1584 (1982).
5. G. S. Osbourn, Phys. Rev. B **27**, 5126 (1983).
6. A. R. Adams, Electron. Lett. **22**, 249 (1986).
7. W. W. Chow and S. W. Koch, *Semiconductor Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*, Springer-Verlag, New-York (1999).
8. S.-C. Hong, G. P. Kothial, N. Debbar, et al., Phys. Rev. B **37**, 878 (1988).
9. М. Шур, *Физика полупроводниковых приборов*, т. 1, Мир, Москва (1992) [M. Shur, *Physics of Semiconductor Devices*, Prentice-Hall (1990)].

10. О. В. Кибис, Л. Д. Шварцман, *Поверхность* **7**, 119 (1985).
11. L. C. Andreani, A. Pasquarelo, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **36**, 5887 (1987).
12. G. Bastard, J. A. Brum, and R. Ferreira, *Sol. St. Phys.* **44**, 229 (1991).
13. C. Weisbuch and B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications*, Academic Press, San Diego (1991).
14. M. Cardona and H. Yu, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, Springer, Berlin (1999).
15. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960).
16. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *Phys. Rev. B* **89**, 5815 (2001).
17. A. A. Gorbatsevich and O. V. Zhabitsky, in *Proceedings of 7th International Symposium «Nanostructures: Physics and Technology»*, St. Peterburg, Russia, June 14–18 (1999), p. 368.
18. D. A. Broido and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **31**, 888 (1985), **34**, 3917 (1986).
19. C. Y.-P. Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **46**, 4110 (1992).
20. B. A. Foreman, *Phys. Rev. B* **48**, 4964 (1993).
21. I. V. Tokatly, A. G. Tsibizov, and A. A. Gorbatsevich, *Phys. Rev. B* **65**, 165328 (2002).
22. О. В. Кибис, *ФТП* **23**, 820 (1989).
23. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco et al., *Science* **264**, 553 (1994).
24. А. Ф. Казаринов, Р. А. Сурис, *ФТП* **5**, 797 (1971).
25. J. E. Guyer, S. A. Barnett, and P. W. Voorhees, *J. Cryst. Growth* **217**, 1 (2000).
26. W. Potz, W. Porod, and D. K. Ferry, *Phys. Rev. B* **32**, 3868 (1985).
27. S. De Franceschi, J.-M. Jancu, and F. Beltram, *Phys. Rev. B* **59**, 9691 (1999).
28. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985).
29. P. M. Platzman and T. Lenosky, *Phys. Rev. B* **52**, 10327 (1995).
30. В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **68**, 211 (1998).