

ГРАНИЧНІ УМОВИ В МЕТОДІ ОБВІДНОЇ ФУНКЦІЇ ТА ВПЛИВ НА НИХ ЗОВНІШНІХ ФАКТОРІВ

К.Є. Глухов, Д.М. Берча

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул.Волошина, 54

В роботі одержано граничні умови, які забезпечують зшивання обвідних функцій та їх похідних на гетеропереходах у напівпровідникових надгратках при просторовій залежності матеріальних параметрів та у випадку прикладання всестороннього тиску.

ВСТУП

Сьогодні у фізиці твердого тіла спостерігається широке використання першопринципних розрахунків фізичних властивостей матеріалів. Цьому процесу у значній мірі сприяє вдосконалення та розповсюдження обчислювальної техніки. Однак, незважаючи на зростання потужності сучасних комп'ютерів, і досі існують задачі, для яких більш доцільними виявляються класичні наближення теорії твердого тіла. Зокрема до таких задач відносяться дослідження електронних властивостей кристалічних систем з великою кількістю атомів у елементарній комірці. Яскравим прикладом систем такого роду можуть бути напівпровідникові надгратки (НГ) – штучні матеріали зі створеною додатковою періодичністю. Широке практичне застосування, яке знайшли ці гетероструктури у приладобудуванні, зокрема, у якості активного середовища твердотільних лазерів, зумовлює значний інтерес, до цих матеріалів, що існує у світі.

Найбільш часто застосовуваним і добре себе зарекомендуваним методом розрахунку енергетичних станів напівпровідникових НГ є метод ефективної маси, відомий також як метод обвідної функції (ОФ). Відомо, що у тому випадку, коли метою дослідження є саме енергетичні стани, дуже зручною є матрична форма цього методу. Головна ідея при цьому полягає у побудові так званої матриці перенесення, що описує зміну ОФ та її просторової похідної при зміщенні вздовж осі росту НГ на віддаль одного періоду. Одержане в такий спосіб співвідношення, а також теорема Блоха дозволяють одержати

замкнений вираз, що пов'язує енергію E та хвильовий вектор k – закон дисперсії $E(k)$. З точки зору розрахунку, головна трудність цього методу полягає саме у побудові матриці перенесення для конкретної гетероструктури. Матриця перенесення одержується в результаті добутку елементарних матриць перенесення, які описують розповсюдження ОФ через фрагменти структури (ями та бар'єри) і матриць граничних умов (ГУ), що забезпечують зшивання ОФ та їх похідних на гетеропереходах (ГП). В той час, як форма матриць перенесення через області ям та бар'єрів є добре відомою (принаймі у найбільш простому та широко вживаному випадку плоского енергетичного профілю), вигляд ГУ часто вибирається з феноменологічних міркувань, таких як, наприклад, вимога збереження густини струму [0,2]. Такий спосіб не може бути визнаний задовільним у випадках просторової залежності матеріальних параметрів та у присутності зовнішніх тисків, оскільки ці фактори можуть призводити до значних збурень енергетичних станів матеріалів-компонентів і, як наслідок, до значних відхилень станів НГ від результатів одержуваних у спрощених моделях.

Саме знаходженню вигляду ГУ у цих двох важливих випадках присвячена дана робота.

ГРАНИЧНІ УМОВИ ПРИ ПРОСТОРОВІЙ ЗАЛЕЖНОСТІ МАТЕРІАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ

Найпростішим варіантом ГУ, що застосовуються при одержанні енергетич-

них станів НГ, є безпосередня зшивка ОФ матеріалів „1” і „2” та їх похідних на ГП. Такі ГУ у матричному зображенні (у вигляді матриці переходу) мають діагональний вигляд:

$$\mathbf{T}_{21} = \begin{bmatrix} t_{11} & 0 \\ 0 & t_{22} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Цей запис означає, що між ОФ F_i та її першою похідною F'_i , що належать i -му матеріалу, на ГП виконується співвідношення:

$$\begin{bmatrix} F_2 \\ F'_2 \end{bmatrix} = \mathbf{T}_{21} \cdot \begin{bmatrix} F_1 \\ F'_1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

До відомих умов цього типу відносяться ГУ Басарда [0] ($t_{11} = 1, t_{22} = m_2/m_1$, де m_i – ефективні маси i -го матеріалу), ГУ одержані в роботі Жу та Кромера [3] ($t_{11} = (m_1/m_2)^{\frac{1}{2}}, t_{22} = (m_2/m_1)^{1+\frac{1}{2}}$) та їхнє узагальнення, вперше запропоноване у роботі Харрісона [4] ($t_{11} = A_1/A_2, t_{22} = A_2 m_2 / A_1 m_1$, де сталі величини A_i залежать від характеристик гетерограниці). Ці, останні, ГУ можуть бути представлені і у дещо іншому вигляді [5]:

$$\mathbf{T}_{21} = \begin{bmatrix} \left(m_1/m_2\right)^\alpha & 0 \\ 0 & \left(m_2/m_1\right)^{\alpha+1} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

де замість величин A_i введено параметр α . Причому, у роботі [6], при моделюванні енергетичних станів НГ ($GaAs$)_N/ $(AlAs)$ _M, було встановлено, що використання величини α у якості змінного параметру моделі, який приймає значення з інтервалу $[-\frac{1}{2}, 0]$, дозволяє одержати непогане (похибка ~ 4%) узгодження розрахованих та експериментально одержаних значень енергій переходів між найнижчими мінізонами цих НГ.

Зауважимо, що форма ГУ природним чином пов'язана з виглядом ефективного гамільтоніану, що описує стан розглядуваної системи. При використанні припущення про можливість опису гетероструктури цим ефективним гамільтоні-

аном в усьому просторі, ГУ можна одержати шляхом інтегрування відповідного рівняння ефективної маси через ГП. Так у найпростішому випадку, коли НГ представляється моделлю Кроніга-Пенні, рівняння ефективної маси має вигляд:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx^2} + U_i^{SL}(x) \right\} F_i(x) = E F_i(x), \quad (4)$$

де U_i^{SL} – сталі значення потенціалу в i -му матеріалі.

Перше інтегрування (4) по малому Δ -околу ГП, та подальший граничний перехід при $\Delta \rightarrow 0$, дозволяє знайти ГУ для похідних F'_i :

$$\frac{1}{m_1} F'_1 = \frac{1}{m_2} F'_2, \quad (5)$$

а послідовне двократне інтегрування (4), після знаходження аналогічної границі, дає ГУ для обвідних F_i :

$$F_1 = F_2. \quad (6)$$

Як легко бачити, ГУ, що визначаються виразами (6) та (5), ідентичні ГУ Басарда [0]. Інші форми ГУ виникають при врахуванні просторової залежності ефективної маси. Дійсно, у випадку коли m є функцією x , оператор кінетичної енергії

$$\hat{T} = \frac{1}{2m(x)} \hat{p}^2,$$

а отже і весь гамільтоніан, стають неермітовими, і не можуть описувати реальної системи. Різні спроби симетризації форми оператора кінетичної енергії і призводять до появи різних форм ГУ. З цього приводу варто відмітити один з найбільш загальних виразів, вперше представлений у роботі фон Рос [7]:

$$\hat{T} = \frac{1}{2} m^\alpha(\mathbf{r}) \hat{p} m^{-1-2\alpha}(\mathbf{r}) \hat{p} m^\alpha(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Зазначимо, що використання саме цієї форми оператора \hat{T} , при умові стрибкоподібної зміни ефективної маси від одного сталого значення до іншого сталого значення на ГП, приводить до ГУ виду (3).

Продовжуючи розгляд різних типів ГУ, що використовуються при моделюванні енергетичних станів НГ, знайдемо вигляд матриці переходу для одновимір-

ної задачі з оператором кінетичної енергії виду (7), але за умови що просторова поведінка ефективної маси $m(x)$ та модельного потенціалу $U(x)$ можуть бути представлені не кусково-сталими, а кусково-гладкими функціями (див. Рис. 1).

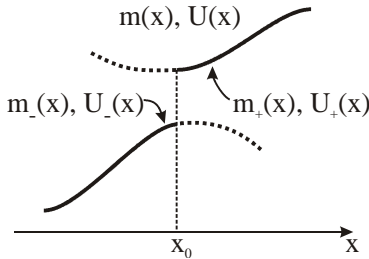


Рис. 1. Схематичний профіль просторової залежності ефективної маси та потенціалу в околі ГП.

Для одержання відповідних ГУ, представимо $m(x)$ та $U(x)$ у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} m(x) &= m_+(x)\theta(x-x_0) + m_-(x)\theta(x_0-x), \\ U(x) &= U_+(x)\theta(x-x_0) + U_-(x)\theta(x_0-x). \end{aligned} \quad (8)$$

Тут через $m_{\pm}(x)$ та $U_{\pm}(x)$ позначено залежності матеріальних параметрів справа та зліва від площини ГП $x = x_0$, а через $\theta(x)$ позначено функцію Хевісайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Здійснивши перше інтегрування по Δ -околу ГП одержимо:

$$\left. \frac{(m^\alpha(x)F(x))'}{m^{1+2\alpha}(x)} \right|_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} = \int_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} k_\alpha^2(s;E)F(s)ds. \quad (9)$$

Тут $k_\alpha^2(x;E) = \frac{2}{\hbar^2} \frac{(U(x)-E)}{m^\alpha(x)}$. Зазначимо, що оскільки $k_\alpha^2(x;E)$ є результатом арифметичних дій над кусково-гладкими функціями $m(x)$ та $U(x)$, вона також є кусково-гладкою, а отже інтеграл у правій частині (9), при граничному переході $\Delta \rightarrow 0$ перетворюватиметься на нуль. Це дозволяє записати ГУ для похідних ОФ:

$$\frac{(m_+^\alpha F_+)' }{m_+^{1+2\alpha}} = \frac{(m_-^\alpha F_-)' }{m_-^{1+2\alpha}}. \quad (10)$$

У виразі (10), для скорочення запису у всіх функціях випущено аргумент x_0 .

Для знаходження ГУ, накладених на самі ОФ, повернемося до виразу (9), але тепер будемо вважати верхню межу інтегрування змінною, а потім ще раз проінтегруємо вираз (9) за цією змінною:

$$\begin{aligned} (m^\alpha(x)F(x)) \Big|_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} &= \frac{(m_-^\alpha F_-)' }{m_-^{1+2\alpha}} \int_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} m^{1+2\alpha}(x)dx \\ &+ \int_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^{x_0+\frac{\Delta}{2}} m^{1+2\alpha}(x) \int_{x_0-\frac{\Delta}{2}}^x k_\alpha^2(s;E)F(s)dsdx \end{aligned} \quad (11)$$

Граничний перехід при $\Delta \rightarrow 0$ у виразі (11) дає:

$$m_+^\alpha F_+ - m_-^\alpha F_- = 0. \quad (12)$$

Одержані вирази (12) та (10) дозволяють записати матрицю переходу для розглянутої задачі, однак спочатку з міркувань зручності знайдемо у явному виді похідні, що входять у (10). Тепер цей вираз набуває виду:

$$\alpha \frac{m_+^\alpha F_+' }{m_+^{2+\alpha}} + \frac{F_+' }{m_+^{1+\alpha}} = \alpha \frac{m_-^\alpha F_-'}{m_-^{2+\alpha}} + \frac{F_-'}{m_-^{1+\alpha}}. \quad (13)$$

Зараз можна виписати матрицю переходу з матеріалу „1”(-) в матеріал „2”(+):

$$\mathbf{T}_{21} = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^\alpha & 0 \\ \alpha m_2^{1+\alpha} m_1^\alpha \left(\frac{m_1'}{m_1^{2+2\alpha}} - \frac{m_2'}{m_2^{2+2\alpha}}\right) & \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{\alpha+1} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

З (14) легко побачити, що ГУ нашої задачі містять недиагональний елемент. Відмітимо, що ГУ такої структури зустрічаються в роботах [3, 8], проте наш вираз (14) одержано за умови плавної просторової залежності матеріальних параметрів в околі ГП і залежність недиагонального елемента t_{21} матриці переходу від параметра α одержана нами явно. Це дає нам змогу порівняти наш результат з результатом

роботи [3], в якій наявність недиагонального елемента матриці \mathbf{T}_{21} , автори пов'язують з присутністю дельта-функціональної добавки до потенціалу на ГП. Якщо у розглянуту нами задачу, ввести доданок до потенціалу:

$$U_{\delta}(x) = U_{\delta} \cdot \delta(x - x_0), \quad (15)$$

то, як це можна показати, повторюючи проілюстровані вище кроки, для похідних на ГП, замість (13), одержимо наступні ГУ:

$$\left[\frac{\alpha m'_+ F_+}{m_+^{2+\alpha}} + \frac{F'_+}{m_+^{1+\alpha}} \right] - \left[\frac{\alpha m'_- F_-}{m_-^{2+\alpha}} + \frac{F'_-}{m_-^{1+\alpha}} \right] = \\ = -\frac{U_{\delta}}{\hbar^2} \left[\frac{F_+}{m_+^{\alpha}} + \frac{F_-}{m_-^{\alpha}} \right]. \quad (16)$$

Зазначимо, що ГУ для самих ОФ не зміняться.

Аналіз (16) показує, що і наша модель з просторово змінними матеріальними параметрами, які зазнають розриву на площині ГП і модель з розривними, але сталими матеріальними параметрами при наявності дельта-функціонального доданку до потенціалу на ГП, розглянута в роботі [3], призводять до ГУ однакової структури. Цей результат є доволі цікавим з тієї точки зору, що він свідчить про можливість врахування, при чисельних розрахунках, просторової залежності матеріальних параметрів шляхом введення недиагонального елемента t_{21} у матрицю переходу.

Моделювання залежності енергетичних станів від величини потужності дельта-функціональної добавки U_{δ} при фіксованих значеннях параметру α ($= -\frac{1}{2}, 0$) було здійснено нами для ряду короткоперіодних НГ $(GaAs)_N/(AlAs)_M$ в роботі [6]. При цьому було одержано зменшення енергій мінізон при зростанні U_{δ} . Хоча з якісної точки зору така поведінка і є зрозумілою: зростання амплітуди додаткового потенціалу на ГП має призводити до появи локалізованих станів з енергіями що лежать у забороненій зоні, проте кількісне узгодження з експериментальними значеннями при введенні у модель параме-

тру U_{δ} погіршувалось. Цей результат свідчить про наявність залежності між параметрами α та U_{δ} , якою в роботі [6] ми нехтували. Нажаль для використання цієї залежності у розрахунках нам необхідні відомості про просторову поведінку ефективної маси та її похідної в околі ГП. Оскільки ці залежності невідомі, при моделюванні ми маємо використовувати одночасну зміну обох параметрів α і U_{δ} , що, як показують наші розрахунки, дійсно дозволяє одержати співпадіння розрахункових та експериментальних величин переходів між мінізонами для всіх розглянутих у роботі [6] короткоперіодних НГ.

ГРАНИЧНІ УМОВИ ПРИ ДЕФОРМАЦІЯХ

Згідно результатів першопринципних досліджень короткоперіодних НГ $(GaAs)_N/(AlAs)_M$, представлених нами в роботі [9], присутність ГП призводить до неоднорідності поля внутрішніх деформацій у надкомірках цих НГ. Цей результат дозволяє дещо по новому підійти до задачі про еволюцію енергетичних станів у НГ під дією зовнішніх тисків, яка має велике прикладне значення. Звичайним методом введення деформаційних ефектів у ефективний гамільтоніан ϵ , розроблений Биром та Пикусом метод математичної деформації [10], який дозволяє провести розклад «деформованих» (збурених) станів кристалу по повній системі «недеформованих» (незбурених) станів. Однак, у стандартному варіанті цього методу, розробленого для звичайних кристалів, поле деформацій вважається однорідним, що у випадку НГ буде не так.

Отже, запишемо зміну координат $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ точок простору, викликану деформацією:

$$\mathbf{r}' = (\mathbf{1} + \boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{r}, \quad (17)$$

тут через $\mathbf{1}$ позначено одиничну матрицю, а під $\boldsymbol{\epsilon}$ ми розуміємо тензор деформації. Це перетворення координат призведе до зміни виду оператора імпульсу:

$$\hat{\mathbf{p}}' = (\mathbf{1} - \boldsymbol{\epsilon}) \hat{\mathbf{p}}. \quad (18)$$

Оскільки розглядувана нами деформація є неоднорідною, тобто компоненти тензора $\varepsilon(\mathbf{r})$ є просторово залежними функціями, при побудові оператора кінетичної енергії «деформованого» гамільтоніану, виникатимуть нові доданки. Дійсно, знайдемо величину $\hat{\mathbf{p}}'^2$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}'^2 &= \hat{p}'_l \hat{p}'_l = (\delta_{lr} - \varepsilon_{lr}(\mathbf{r})) \hat{p}_l (\delta_{ls} - \varepsilon_{ls}(\mathbf{r})) \hat{p}_s = \\ &= (\delta_{lr} - 2\varepsilon_{lr}(\mathbf{r})) \hat{p}_l \hat{p}_r + \varepsilon_{lr}^2(\mathbf{r}) \hat{p}_l \hat{p}_r + \\ &+ i\hbar \left[\frac{\partial \varepsilon_{lr}(\mathbf{r})}{\partial x_l} + \varepsilon_{ls}(\mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon_{lr}(\mathbf{r})}{\partial x_s} \right] \hat{p}_r \approx \\ &\approx (\delta_{lr} - 2\varepsilon_{lr}(\mathbf{r})) \hat{p}_l \hat{p}_r + i\hbar \frac{\partial \varepsilon_{lr}(\mathbf{r})}{\partial x_l} \hat{p}_r. \end{aligned} \quad (19)$$

Зауважимо, що при записі останнього виразу, ми використали домовленість про сумування по повторним індексам, а на останньому кроці знехтували величинами квадратичними по деформації. Одержаний при цьому результат, поряд з відомим доданком (перший) містить новий доданок, пов'язаний з неоднорідністю поля деформацій. Виходячи з наших результатів, представлених у роботі [9], у сумі

$$i\hbar \frac{\partial \varepsilon_{lr}(\mathbf{r})}{\partial x_l} \hat{p}_r, \quad (20)$$

ми можемо залишити лише величину $i\hbar \frac{\partial \varepsilon_{zz}(\mathbf{r})}{\partial z} \hat{p}_z$ (тут і далі вісь Oz вважається напрямленою вздовж осі росту НГ). Також зазначимо, що оскільки величина $\varepsilon_{zz}(z)$, як це показали наші *ab initio* розрахунки, змінюється від одного, приблизно сталого значення всередині GaAs, до іншого, знов таки, майже сталого значення в AlAs, достатньо реалістично її просторову поведінку, а також поведінку її похідної, можна представити у виді функцій зображених на Рис. 2.

Таким чином, у одновимірному випадку, ефективний гамільтоніан, при наявності деформацій, набуває виду:

$$\hat{H} = \frac{(1 - 2\varepsilon_{zz}(z)) \hat{p}_z^2}{2m} + \frac{i\hbar}{2m} \delta_{\Delta}(z) \hat{p}_z + \tilde{U}(z) \quad (21)$$

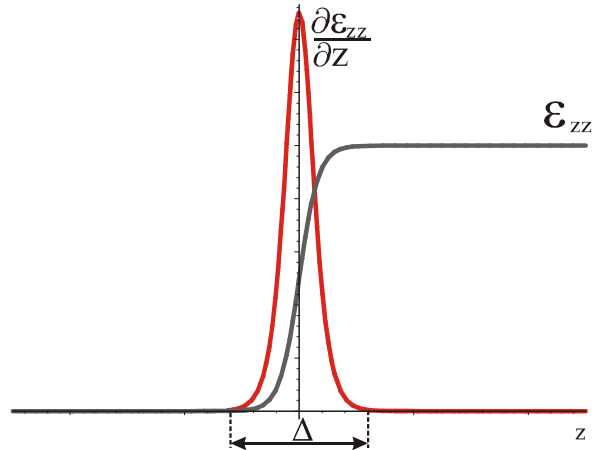


Рис. 2. Схематичний вигляд просторової залежності величин $\varepsilon_{zz}(z)$ та $\varepsilon'_{zz}(z)$

Тут через $\delta_{\Delta}(z)$ позначено похідну $\varepsilon'_{zz}(z)$, яка має виражену дельта-подібну форму на масштабі порядку декількох моношарів. Оскільки ефективний гамільтоніан діє на ОФ, яка є гладкою функцією координат, ми можемо приблизно вважати $\delta_{\Delta}(z)$ справжньою дельта функцією, а просторову поведінку $\varepsilon_{zz}(z)$ вважати стрибкоподібною. Що стосується «деформованого» потенціалу $\tilde{U}(z)$, то обмежуючись розглядом всестороннього тиску, будемо вважати, що

$$\tilde{U}(z) = U(z) + a_i \varepsilon_{ii}, \quad (22)$$

де a_i – величини деформаційного потенціалу.

Значимо, що для виділення саме впливу деформації на ГУ ми не розглядаємо доданків зв'язаних з проаналізованою нами вище просторовою залежністю ефективної маси.

Шляхом простих перетворень, рівняння ефективної маси, що відповідає гамільтоніану (21), можна привести до наступної форми:

$$\left\{ \partial_z^2 + \frac{\delta(z)}{1 - 2\varepsilon_{zz}} \partial_z - \kappa^2(z; E, \varepsilon) \right\} F(z) = 0, \quad (23)$$

де функція $\kappa^2(z; E, \varepsilon) = \frac{2m[U(z) + a_i \varepsilon_{ii} - E]}{\hbar^2(1 - 2\varepsilon_{zz})}$, як функція z має щонайбільше стрибок на ГП.

Знаходячи, шляхом інтегрування через ГП, ГУ, для рівняння (23), одержуємо:

$$F_1 = F_2; \\ \left(1 + \frac{1}{1 - 2\varepsilon_{zz}^{(1)}}\right) F_1' = \left(1 + \frac{1}{1 - 2\varepsilon_{zz}^{(2)}}\right) F_2'. \quad (24)$$

Тут під величинами $\varepsilon_{zz}^{(1)}$ та $\varepsilon_{zz}^{(2)}$ розуміємо граничні значення функції $\varepsilon_{zz}(z)$ з боку матеріалу „1” та матеріалу „2”, відповідно.

Одержаний результат дозволяє очікувати, що у випадку НГ на основі GaAs та AlAs, зміни у мінізонному спектрі індуковані тиском можуть бути задовільно описані у рамках методу ефективної маси при використанні діагональних ГУ виду (3). Однак слід зауважити, що прикладання зовнішнього тиску може призвести до такої модифікації діагональних елементів матриці перенесення, що зміни параметру α вийдуть за межі діапазону $[-\frac{1}{2}, 0]$.

Література

1. G. Bastard, Phys.Rev. B., 24, 5693 (1981).
2. T. Ando, S.Wakahara, H. Akera, Rhys. Rev. B., 40, 11609 (1989).
3. Qi-Gao Zhu, H. Kroemer, Phys. Rev. B., 27, 3519 (1983).
4. W.A. Harrison, Phys. Rev., 123, 85 (1961).
5. E.L. Ivchenko, G.E. Pikus, *Superlattices and Optical Phenomena*, (Springer Verlag, Berlin, 1995).
6. К.Е. Глухов, А.И. Берча, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко, ФТП. 38, 426 (2004)
7. O. von Roos, Phys. Rev. B., 27, 7547 (1983).
8. V. Laikhtman, Phys. Rev. B., 46, 4769 (1992).
9. К.Є. Глухов, Д.М. Берча, Науковий Вісник ЧНУ, вип. 237, 86 (2005).
10. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, (Москва, 1972).

BOUNDARY CONDITIONS IN THE ENVELOPE FUNCTION APPROXIMATION AND INFLUENCE OF THE EXTERNAL FACTORS UPON THEM

K.E. Glukhov, D.M. Bercha

Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

Boundary condition which insure connection between envelope functions and their derivative on the heterojunctions in semiconductor superlattices for the case of spatial dependence of the material parameters and whose for the case of pressure applied where obtained.