

На правах рукописи

Миронова Мария Сергеевна

Kp-теория возмущений и метод инвариантов в теории гетероструктур на основе
многодолинных полупроводников с вырожденными зонами

специальность 01.04.10 – физика полупроводников

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2014

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)» на кафедре микро- и наноэлектроники.

Научный руководитель:

Глинский Геннадий Федорович
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Дунаевский Сергей Михайлович
доктор физико-математических наук, профессор,
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова»,
главный научный сотрудник

Яфясов Адиль Маликович
доктор физико-математических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»,
профессор

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Защита состоится «11» декабря 2014 г. в 14 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.238.04 при Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)» по адресу 197376, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке СПбГЭТУ «ЛЭТИ» и на сайте www.eltech.ru

Автореферат разослан «10» октября 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д.ф.-м.н, профессор

Мошников В.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Исследование свойств полупроводниковых гетероструктур является одной из основных задач современной физики полупроводников, опто- и наноэлектроники, а так же спинтроники. Свойства таких структур, а значит и приборов на их основе, в основном определяются их электронным спектром, который отличается от электронного спектра объемных материалов. Это отличие обусловлено эффектами размерного квантования, а также эффектами смешивания электронных состояний на гетерогранице. При расчете энергетического спектра носителей заряда в гетероструктурах, помимо эффектов размерного квантования, необходимо учитывать координатную зависимость зонных параметров и сложный характер зонной структуры объемных полупроводников – многодолинность, вырождение.

Существует два подхода к расчету электронного спектра гетероструктур: микроскопический подход (например, метод сильной связи, метод псевдопотенциала) и метод эффективной массы. Эмпирический метод сильной связи и эмпирический метод псевдопотенциала позволяют учесть микроскопическое атомарное строение гетероструктур. Однако для того, чтобы описать все интересующие особенности зонной структуры объемных материалов, составляющих гетероструктуру, необходимо использовать большое число базисных состояний, что приводит к большим размерностям гамильтонианов. Кроме того, вследствие чувствительности данных методов к выбору параметризации, возникают трудности одновременного воспроизведения основных зонных параметров (эффективных масс, положения экстремумов в зоне Бриллюэна и др.) для всех зон, участвующих в формировании уровней размерного квантования.

Число базисных состояний может быть уменьшено при расчете в рамках метода эффективной массы. При этом достаточно точно знать точный закон дисперсии носителей заряда только вблизи интересующих экстремумов (долин). Кроме того, данный метод позволяет напрямую учитывать следующие из эксперимента параметры интересующих зон и долин. Обычный метод эффективной массы предполагает решение дифференциального уравнения Шредингера для огибающей волновой функции носителей заряда, следующее из kp -теории возмущений для объемных материалов. Учет координатной зависимости параметров зонной структуры и эффектов внутри- и междолинного рассеяния носителей заряда на гетерогранице проводится либо посредством постановки граничных условий, накладываемых на огибающую волновую функцию, либо с помощью соответствующего выбора оператора кинетической энергии [1]. Однако одного требования эрмитовости гамильтониана недостаточно для его однозначного определения [2]. Часто для выбора граничных условий в литературе проводится дополни-

тельный анализ микроскопической симметрии гетероструктуры, однако такой подход не является универсальным. Вид оператора кинетической энергии может быть определен посредством kp -теории возмущений для гетероструктур [3,4]. В рамках существующих на сегодняшний день теорий потенциал гетероструктуры описывается функцией непрерывной координаты и, следовательно, не позволяет учесть её микроскопическое строение, что особенно важно для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников. В связи с вышесказанным, представляет интерес развитие метода расчета, который будет сочетать в себе достоинства как микроскопических методов, так и метода эффективной массы.

Цель работы заключалась в развитии обобщенного метода эффективной массы, позволяющего описать эффекты межзонного и междолинного смешивания электронных состояний на гетерограницах с учетом микроскопического атомарного строения произвольных гетероструктур (квантовые ямы, проволоки, точки и сверхрешетки).

Для достижения данной цели решались следующие **задачи**:

1. Построение многозонного многодолинного kp -гамильтониана гетероструктуры на основе полупроводников с произвольным числом атомов в элементарной ячейке.
2. Развитие kp -теории возмущения для гетероструктур с учётом эффектов внутри- и междолинного рассеяния носителей заряда на гетерограницах.
3. Развитие метода инвариантов для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами.
4. Применение разработанного метода инвариантов для построения многозонных многодолинных эффективных kp -гамильтонианов гетероструктур с учетом внутри- и междолинного смешивания электронных состояний на гетерограницах, а также спина и спин-орбитального взаимодействия.
5. Расчет энергетического спектра носителей заряда в гетероструктурах в рамках предложенной теории.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые получен многозонный многодолинный kp -гамильтониан гетероструктур произвольной формы на основе полупроводников с несколькими атомами в элементарной ячейке, позволяющий учесть их микроскопическое атомарное строение.
2. Впервые развита kp -теория возмущений для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами, учитывающая эффекты внутри- и междолинного смешивания электронных состояний на гетерограницах. Показано, что матричные элементы междолинного рассеяния во вто-

ром порядке теории возмущений определяются рассеянием носителей заряда на атомах замещения и kp -взаимодействием зон.

3. Впервые развит метод инвариантов для определения эффективных гамильтонианов гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами, учитывающий их микроскопическое атомарное строение.
4. Впервые предложен эффективный kp -гамильтониан, описывающий междолинное смешивание X -состояний в гетероструктурах Si/SiGe с учетом спина и спин-орбитального взаимодействия.

Достоверность полученных результатов подтверждается результатами симметричного анализа, а также имеющимися литературными данными.

Научная и практическая значимость работы сводится к следующему:

1. Предложен метод инвариантов для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами, позволяющий наиболее удобным образом получать эффективные kp -гамильтонианы гетероструктур в нужном порядке теории возмущений с учетом их микроскопического строения.
2. Получены однозонные эффективные kp -гамильтонианы гетероструктур на основе прямозонных полупроводников со структурой сфалерита (зоны Γ_1 , Γ_{12} , Γ_{15} , Γ_{25} , Γ_6 , Γ_7 и Γ_8).
3. Для гетероструктур на основе полупроводников со структурой сфалерита получен эффективный kp -гамильтониан 8-зонной ($\Gamma_6 \oplus \Gamma_8 \oplus \Gamma_7$) модели Кейна. Гамильтониан записан в k -представлении, что позволяет при определенных условиях избежать возникновения ложных решений.
4. Получен эффективный многозонный многодолинный kp -гамильтониан, описывающий смешивание $\Gamma_1 - X_{1,3}$ -состояний в гетероструктурах AlAs/GaAs.
5. Получен эффективный многодолинный kp -гамильтониан, описывающий смешивание X -состояний зоны проводимости в гетероструктурах Si/SiGe с учетом спина и спин-орбитального взаимодействия.
6. Показано, что уравнения Шредингера с предложенными в работе гамильтонианами для сверхрешеток и одиночных гетероструктур сводятся к конечной системе линейных алгебраических уравнений, что удобно при численном определении их энергетического спектра и огибающих волновых функций носителей заряда.

Положения, выносимые на защиту:

1. Микроскопическое атомарное строение полупроводниковых гетероструктур и их симметрия могут быть учтены в рамках обобщенного метода эффективной массы посредством введения в гамильтониан характеристических функций $f_l(\mathbf{a})$, указывающих на замещение атомов опорного кристалла в l -й подрешетке в элементарной ячейке с номером \mathbf{a} .
2. Эффективные многозонные многодолинные kp -гамильтонианы гетероструктур, учитывающие эффекты рассеяния носителей заряда на атомах замещения, могут быть определены в нужном порядке теории возмущений методом инвариантов.
3. В рамках предложенного обобщенного метода эффективной массы уравнение Шредингера для гетероструктур произвольной формы (квантовые ямы, проволоки, точки и сверхрешетки) может быть записано в двух унитарно-эквивалентных представлениях: узельном и k -представлении. Выбор периодических граничных условий позволяет свести уравнение Шредингера в обоих представлениях к конечной системе линейных алгебраических уравнений.

Результаты работы были использованы при выполнении проектов № 2.1.1/2503 и 2.1.1/10269 «Развитие теории полупроводниковых наноструктур и разработка новых методов их диагностики» аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011 г.)»;

Апробация результатов работы. Полученные в работе результаты докладывались и обсуждались на следующих конференциях: 13-15 Всероссийские молодежные конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (2011-2013 гг.); Российская молодёжная конференция по физике и астрономии «Физика.СПб» (СПб, Россия, 2011-2013 гг.); 65-67 научно-технические конференции проф.-преп. состава СПбГЭТУ (2012-2014 гг.); XI Российская конференция по физике полупроводников (СПб, Россия, 2013 г.); 1st International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures “Saint-Petersburg OPEN 2014” (St. Petersburg, Russia, 2014); 22nd Int. Symp. “Nanostructures: Physics and Technology” (St. Petersburg, Russia, 2014).

Публикации: По материалам диссертации опубликовано 13 работ, из них 4 – статьи в рецензируемых изданиях, рекомендованных в перечне ВАК, 9 – в материалах всероссийских и международных научно-технических конференций.

Структура диссертации: Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Она изложена на 134 страницах машинописного текста, включает 28 рисунков, 9 таблиц, список литературы из 97 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении излагается актуальность темы диссертации, определяется основная цель работы и ее задачи, представлены основные результаты работы, обладающие научной новизной, а также имеющие практическую значимость, перечислены научные положения, выносимые на защиту.

Первая глава представляет собой обзор литературы, посвященный использованию метода эффективной массы для расчета энергетического спектра и огибающих волновых функций носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах.

В первом параграфе (п. 1.1) рассматривается применение kp -теории возмущений для расчета электронного спектра объемных полупроводников. Данный метод является наиболее удобным в тех случаях, когда точный закон дисперсии носителей необходимо точно определить только в ограниченной области k -пространства вблизи экстремумов зон (долин). Так же отмечается тот факт, что в настоящее время kp -метод применяется и для расчета электронного спектра во всей зоне Бриллюэна, для чего используются многозонные модели (30 и более зон).

Во втором параграфе (п. 1.2) рассматривается вывод уравнения Шредингера для огибающей волновой функции в приближении эффективной массы. Обращается внимание на то, что в импульсном представлении данное уравнение является интегральным уравнением для огибающей волновой функции, определенной в пределах зоны Бриллюэна. В силу ограниченности k -пространства, преобразование, связывающее импульсное и координатное представления не является унитарным, а уравнение Шредингера, которому удовлетворяет огибающая волновая функция $F(\mathbf{x})$, вообще говоря, интегро-дифференциальное. Переход к обычному дифференциальному уравнению Шредингера (континуальное приближение) может быть осуществлен лишь приближенно, в предположении, что внешний потенциал $U(\mathbf{x})$ слабо изменяется на масштабах порядка постоянной решетки.

Третий параграф (п. 1.3) посвящен применению метода эффективной массы и kp -теории возмущений к расчету электронных состояний в полупроводниковых гетероструктурах. Существует два эквивалентных подхода к обобщению метода эффективной массы на случай резкого потенциала гетероинтерфейса. Первый подход требует постановки граничных условий на гетероинтерфейсе. Второй подход подразумевает вывод уравнения Шредингера с гамильтонианом, не тре-

бующим постановки граничных условий на гетерогранице. Обычно для этого используется kp -теория возмущений, при этом потенциал гетероструктуры описывается функцией непрерывной координаты. Данный подход позволяет приближенно перейти к дифференциальному уравнению Шредингера. Возникающая при этом ошибка в кинетической энергии меньше, чем ошибка вследствие пренебрежения непараболичностью закона дисперсии [4]. Однако такой подход не позволяет учесть микроскопическое атомарное строение гетероструктур, что особенно важно для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников.

В четвертом параграфе (п. 1.4) обсуждается модель Кейна для гетероструктур на основе узкозонных полупроводников со структурой сфалерита. Однозонная модель не позволяет описать сильно непараболический характер закона дисперсии электронов в зоне проводимости данных материалов. В рамках модели Кейна kp -взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости учитывается точно, а запутывание с остальными состояниями за счет kp -взаимодействия учитывается посредством теории возмущений. Модель Кейна для гетероструктур должна описывать все эффекты, возникающие в рамках соответствующих однозонных моделей (эффект смешивания тяжелой и легкой дырки, интерфейсный эффект Рашбы и др.). Существенной трудностью при расчете энергетического спектра и огибающих волновых функций носителей заряда в гетероструктурах в рамках модели Кейна является возникновение ложных решений вследствие как неточности закона дисперсии при больших \mathbf{k} , так и использования континуального приближения.

В пятом параграфе (п. 1.5) рассматривается применение метода эффективной массы к описанию эффектов междолинного смешивания состояний носителей заряда в гетероструктурах на основе многодолинных полупроводников. В рамках данного метода короткодействующая часть интересного потенциала обычно представляется в виде δ -функции Дирака и учитывается посредством теории возмущений [5].

В шестом параграфе (п. 1.6) приводятся выводы по первой главе.

Вторая глава посвящена развитию kp -теории возмущений и метода инвариантов в теории гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами.

В первом параграфе (п. 2.1) проводится построение многозонного многодолинного гамильтониана гетероструктуры на основе полупроводников с произвольным числом атомов в элементарной ячейке. Гетероструктура на основе материалов I и II представляется в виде объемного материала I , часть атомов которого замещена атомами материала II (рисунок 1). Предполагается, что полные пространственные группы материалов I и II являются симморфными и совпадают. Гамильтониан такой гетероструктуры представляется в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_I + \sum_{\mathbf{a}, l} f_l(\mathbf{a}) \Delta U_l(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_l). \quad (1)$$

Здесь \hat{H}_I – гамильтониан, описывающий движение электрона в объемном материале I ; $\Delta U_l(\mathbf{x}) = U_l^{II}(\mathbf{x}) - U_l^I(\mathbf{x})$ – разность локальных потенциалов атомов материалов II и I в подрешетке с номером l ; $\boldsymbol{\chi}_l$ – вектор, определяющий положение атомов в l -й подрешетке; характеристические функции $f_l(\mathbf{a})$ указывают на замещение атомов в элементарной ячейке с номером \mathbf{a} в подрешетке с номером l :

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

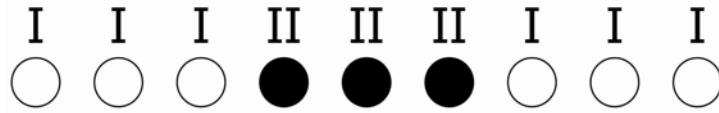


Рисунок 1 – Схематическое изображение гетероструктуры I/II в виде объемного материала I , часть атомов которого замещена атомами материала II

Гамильтониан (1), записанный в многодолинном базисе Кона-Латтинжера, представляет собой сумму многозонного многодолинного kp -гамильтониана материала I и поправки, описывающей внутридолинное, межзонное и междолинное рассеяние носителей заряда на атомах замещения и содержащей фурье-образы характеристических функций:

$$f_l(\mathbf{k}_{0j} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'_{0j'} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} f_l(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k}_{0j} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'_{0j'} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{a}},$$

где N – число элементарных ячеек в гетероструктуре; \mathbf{k} – малый волновой вектор, отсчитанный от положения экстремума \mathbf{k}_{0j} .

Во втором параграфе (п. 2.2) развивается kp -теория возмущений для гетероструктур на основе однодолинных и многодолинных полупроводников. Показано, что эффективные однодолинные kp -гамильтонианы гетероструктур содержат два типа поправок. Поправки, равные нулю при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, не имеют аналогов в объемных материалах. Поправки, отличные от нуля при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, в рассматриваемом порядке теории возмущений определяют изменение зонных параметров при переходе через гетероинтерфейс, в том числе разрывы зон на гетерогранице. В предельном случае, когда все атомы материала I замещены атомами материала II , полученный гамильтониан приближенно переходит в эффективный гамильтониан материала

II. Эффективный гамильтониан гетероструктуры на основе многодолинных полупроводников представляется в виде:

$$H_{mm'}^{\star\alpha\star\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_{0j}, \mathbf{k}'_{0j'}) = H_{mm'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{k}_{0j}) \delta_{\mathbf{k}_{0j}\mathbf{k}'_{0j'}} + \Delta H_{VO}^{\star\alpha\star\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_{0j}, \mathbf{k}'_{0j'}),$$

где $\star\alpha$ – номер неприводимого представления $D^{(\star\alpha)}$ пространственной группы материала I ; $H_{mm'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{k}_{0j})$ – матрица эффективного многозонного гамильтониана гетероструктуры в точке \mathbf{k}_{0j} ; матрица $\Delta H_{VO}^{\star\alpha\star\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_{0j}, \mathbf{k}'_{0j'})$ описывает эффекты междолинного смешивания электронных состояний. Во втором порядке теории возмущений она определяется как рассеянием носителей заряда на атомах замещения, так и kp -взаимодействием зон.

В третьем параграфе (п. 2.3) развивается метод инвариантов для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами с симморфной пространственной группой симметрии. Эффективный гамильтониан гетероструктуры на основе прямозонных полупроводников должен быть эрмитовым, инвариантным относительно инверсии временем и удовлетворять условию инвариантности относительно преобразований r , принадлежащих точечной группе симметрии узла:

$$\sum_{m,m'} D_{nm}^{(\alpha)}(r) H_{mm'}^{\alpha\alpha'}(r^{-1}\mathbf{k}, r^{-1}\mathbf{k}'; f(r\mathbf{a})) D_{m'n'}^{(\alpha')\dagger}(r) = H_{nn'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; f(\mathbf{a})).$$

В таблице 1 приведены все возможные линейные и квадратичные эрмитовы формы, составленные из векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' , и преобразующиеся по неприводимым представлениям группы T_d (точечная группа симметрии узла для кристаллов со структурой алмаза и сфалерита). Построенные методом инвариантов гамильтонианы содержат три типа параметров (констант метода инвариантов): параметры γ_i , определяющие зонную структуру объемного материала I , и параметры $\Delta\gamma_i$ и $\Delta\beta_j$. Параметры типа $\Delta\gamma$ определяют изменение зонных параметров при переходе через гетероинтерфейс и входят в эффективный гамильтониан с эрмитовыми формами, отличными от нуля при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Параметры типа $\Delta\beta$ не имеют аналогов в объемных материалах и входят в гамильтониан с эрмитовыми формами, равными нулю при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. В конце параграфа сформулирован метод инвариантов для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников..

В четвертом параграфе (п. 2.4) проводится анализ уравнения Шредингера с предложенными гамильтонианами для периодических гетероструктур. Вводится два унитарно-эквивалентных представления: узельное и k -представление. Условие периодичности потенциала гетероструктуры позволяет свести уравнение Шредингера в обоих представлениях к конечной системе линейных алгебраических

уравнений для огибающей волновой функции, определенной либо в дискретных точках зоны Бриллюэна (k -представление), либо в узлах решетки Браве опорного кристалла (узельное представление). Предложенный способ расчета может быть использован и для определения связанных состояний в одиночных гетероструктурах при выборе достаточной длины периода. Переход к обычному дифференциальному уравнению Шредингера может быть выполнен лишь приближенно.

В пятом параграфе (п. 2.5) приводятся выводы по второй главе.

Таблица 1. Эрмитовы формы, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы Γ_d .

Представление	Чётные относительно инверсии времени	Нечётные относительно инверсии времени
Γ_1	$1, (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'), (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2$	$i(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}'^2)$
Γ_{12}	$\begin{cases} 2k_z k'_z - k_x k'_x - k_y k'_y \\ \sqrt{3}(k_x k'_x - k_y k'_y) \\ 2(k_z - k'_z)^2 - (k_x - k'_x)^2 - (k_y - k'_y)^2 \\ \sqrt{3}[(k_x - k'_x)^2 - (k_y - k'_y)^2] \end{cases}$	$\begin{cases} i[2(k_z^2 - k'_z{}^2) - (k_x^2 - k'_x{}^2) - (k_y^2 - k'_y{}^2)] \\ \sqrt{3}i[(k_x^2 - k'_x{}^2) - (k_y^2 - k'_y{}^2)] \end{cases}$
Γ_{15}	$\begin{aligned} & i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ & \frac{1}{2}(k_{i+1} k'_{i+2} + k_{i+2} k'_{i+1}) \\ & (k_{i+1} - k'_{i+1})(k_{i+2} - k'_{i+2}) \end{aligned}$	$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \\ & i(k_{i+1} k_{i+2} - k'_{i+1} k'_{i+2}) \end{aligned}$
Γ_{25}	—	$i[\mathbf{k} \times \mathbf{k}']$

В **третьей главе** метод инвариантов используется для построения эффективных гамильтонианов гетероструктур на основе прямозонных полупроводников $A^{III}B^V$ со структурой сфалерита.

В первом параграфе (п. 3.1) приведены эффективные однозонные (зоны $\Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}, \Gamma_{25}$) kp -гамильтонианы гетероструктур без учета спина и спин-орбитального взаимодействия. Анализируется влияние поправок, содержащих параметры $\Delta\gamma$ и $\Delta\beta$ на огибающие волновые функции носителей заряда в гетероструктурах для простой невырожденной зоны (рис. 2, 3). Отмечается, что в третьем порядке теории возмущений гамильтониан для простой невырожденной зоны Γ_1 в континуальном пределе содержит слагаемые $\propto \delta'(z)$. В то же время, в отличие от гамильтонианов, полученных в [3, 4], он не содержит членов $\propto \delta(z)$.

Во втором параграфе (п. 3.2) приведены эффективные однозонные (зоны $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$) kp -гамильтонианы гетероструктур с учетом спина и спин-орбитального

взаимодействия. Число констант в эффективных kp -гамильтонианах зон $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ может быть уменьшено, если проанализировать происхождение рассматриваемых спинорных состояний из соответствующих неспинорных состояний, пренебрегая их запутыванием с остальными состояниями за счет спин-орбитального взаимодействия. С этой целью рассматриваются эффективные гамильтонианы, соответствующие прямым произведениям $\Gamma_{12} \otimes \Gamma_6, \Gamma_{15} \otimes \Gamma_6, \Gamma_{25} \otimes \Gamma_6$.

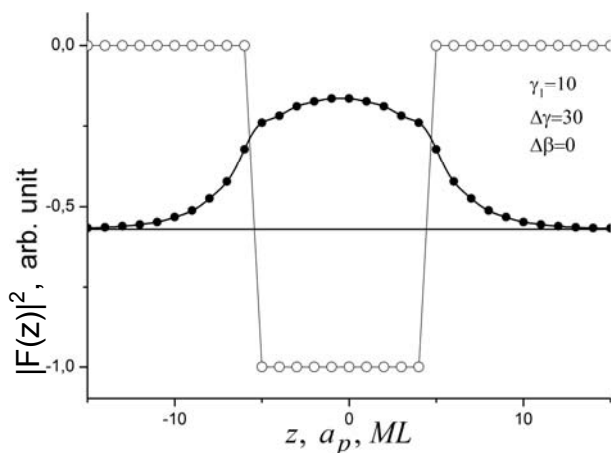


Рисунок 2 – Влияние параметра $\Delta\gamma$ на квадрат модуля огибающей волновой функции для простой невырожденной зоны

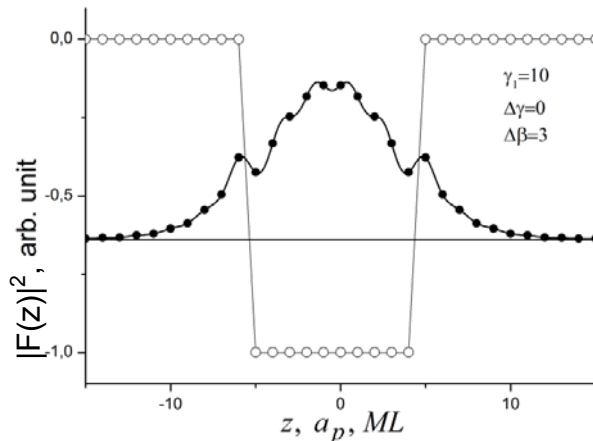


Рисунок 3 – Влияние параметра $\Delta\beta$ на квадрат модуля огибающей волновой функции для простой невырожденной зоны

В третьем параграфе (п. 3.3) метод инвариантов использован для построения 8-зонной ($\Gamma_6 \oplus \Gamma_8 \oplus \Gamma_7$) модели Кейна для гетероструктур. Полученный гамильтониан, наряду с зонными параметрами опорного кристалла и их изменением при переходе через гетероинтерфейс, содержит семь параметров, не имеющих аналогов в объемных материалах. Пять из этих параметров аналогичны параметру $\Delta\beta$ в гамильтониане зоны Γ_1 и в континуальном приближении приводят к разрыву компонент огибающей волновой функции на гетерогранице. Оставшиеся два параметра определяют эффект смешивания тяжелой и легкой дырки на гетерогранице (параметр $\Delta\beta_4$) и интерфейсный эффект Рашбы для дырок. Предложенный гамильтониан записан в k -представлении, что позволяет избавиться от ложных решений, ограничив расчетную область в k -пространстве.

В четвертом параграфе (п. 3.4) приведен расчет энергетического спектра электронов и дырок в одиночной квантовой яме $\text{InSb}/\text{Al}_{0.11}\text{In}_{0.89}\text{Sb}$ (рис. 4) в рамках предложенной модели Кейна для гетероструктур без учета поправок, содержащих параметры типа $\Delta\beta$. Наличие механических напряжений, возникающих вследствие псевдоморфного роста, учитывалось в рамках теории деформационных потенциалов. Результаты расчета позволили описать все особенности, наблюдающиеся на спектрах фотолюминесценции таких структур. Дополнительно

анализируется влияние поправки $\propto \Delta\beta_4$, описывающей смешивание состояний тяжелой и легкой дырки. Показано, что её учет в рамках модели Кейна приводит к спин-орбитальному расщеплению состояний не только в валентной зоне, но и в зоне проводимости.

В пятом параграфе (п. 3.5) приводятся выводы по третьей главе.

Четвертая глава посвящена эффектам междолинного смешивания в гетероструктурах на основе полупроводников со структурой алмаза и сфалерита.

В первом параграфе (п. 4.1) метод инвариантов используется для построения эффективного гамильтониана гетероструктур GaAs/AlAs в рамках многозонной многодолинной модели $\Gamma_1 \oplus X_1 \oplus X_3$. Показано, что с точностью до линейных по \mathbf{k} и \mathbf{k}' слагаемых матричные элементы Γ - X -смешивания электронных состояний определяются тремя независимыми константами.

Во втором параграфе (п. 4.2) предложенный гамильтониан используется для расчета энергетического спектра и огибающих волновых функций в сверхрешетках $(\text{GaAs})_N / (\text{AlAs})_N (001)$. Полученные данные находятся в хорошем согласии с результатом расчета методом псевдопотенциала [6] (рис. 5). Приводится зависимость коэффициентов Γ - X -смешивания от числа монослоев N (рис. 6) и анализируется вклад состояний Γ_1 и $X_{1,3}$ в формирование электронных состояний в сверхрешетке.

В третьем параграфе (п. 4.3) рассматриваются эффекты междолинного смешивания X -состояний в гетероструктурах Si/SiGe. Отмечается, что данный подход является более точным, чем предлагаемый в литературе метод эффективной массы, учитывающий междолинное смешивание Δ -состояний электрона на гетерогранице [5]. Поскольку полная пространственная группа рассматриваемых материалов O_h^7 является несимморфной, для применения предложенной в работе теории необходимо перейти к симморфной группе T_d^2 , что можно сделать, добавив бесконечно малое возмущение, которое уничтожит инверсию. При этом шестимерное неприводимое представление X_1 группы O_h^7 переходит в прямую сумму

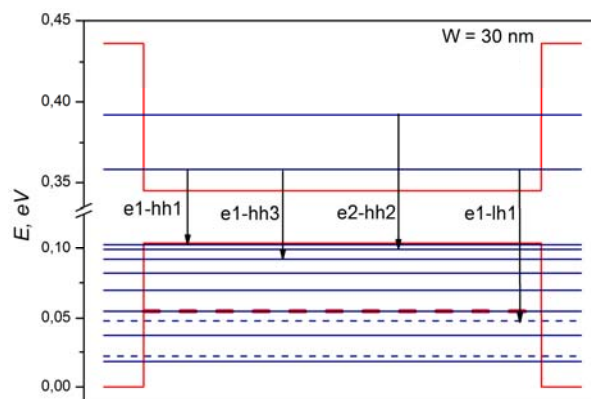


Рисунок 4 – Энергетический спектр носителей заряда в одиночной квантовой яме InSb/Al_{0.11}In_{0.89}Sb при $k_x = k_y = 0$.

Стрелками отмечены переходы, наблюдавшиеся на спектрах фотолюминесценции

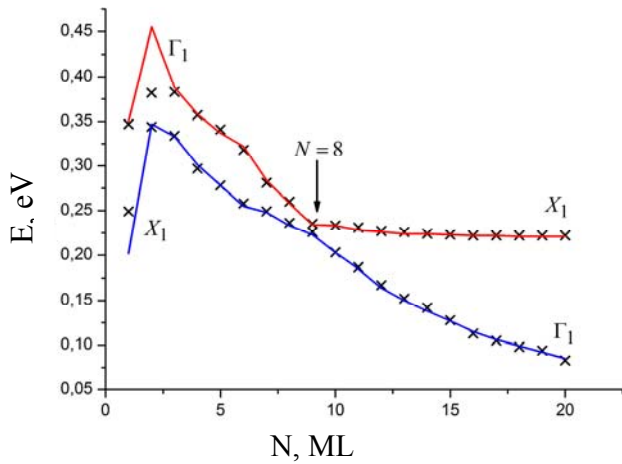


Рисунок 5 – Зависимость положения двух нижних уровней размерного квантования в сверхрешетке $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_N(001)$ при $k_x = k_y = 0, K_z = 0$ от числа монослоев N . Косыми крестами обозначены результаты расчета методом псевдопотенциала [6]

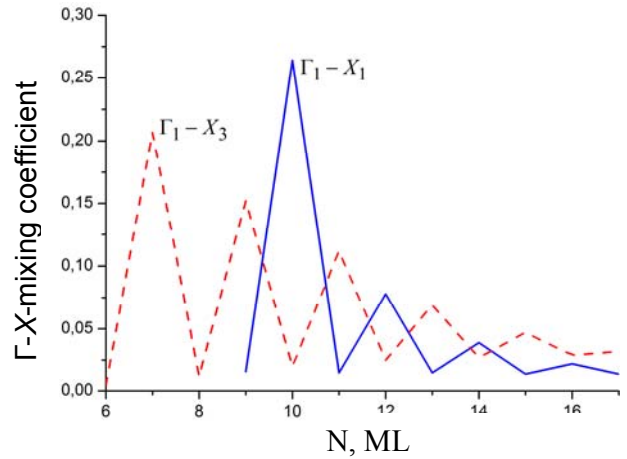


Рисунок 6 – Зависимость коэффициентов Γ - X -смешивания в сверхрешетке $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_N(001)$ при $k_x = k_y = 0, K_z = 0$ от числа монослоев N

трехмерных неприводимых представлений $\star X_1 \oplus \star X_3$ группы T_d^2 , и для расчета энергетического спектра можно использовать эффективные гамильтонианы, полученные ранее для гетероструктур GaAs/AlAs. При этом необходимо учесть, что замещение атомов происходит в двух подрешетках, и матричные элементы внутри- и междолинного смешивания, рассчитанные для первой и для второй подрешетки, вообще говоря, различаются. Предложенный гамильтониан был использован для расчета расщепления основного состояния электрона в квантовой яме

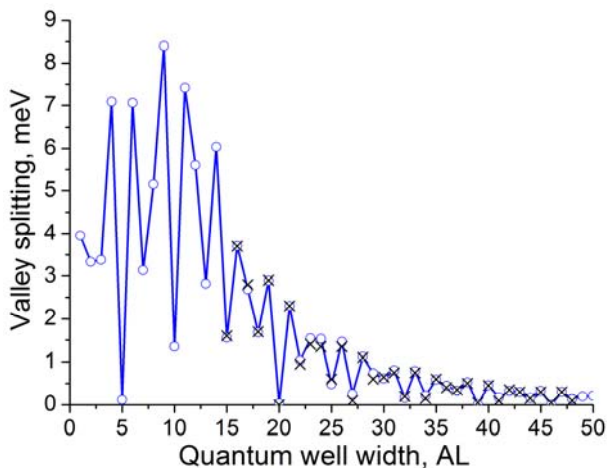


Рисунок 7 – Зависимость расщепления основного состояния электрона в квантовой яме $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}(001)$ от числа атомных слоев кремния. Косыми крестами обозначены результаты расчета в рамках метода сильной связи [5]

$\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}(001)$ в зависимости от числа атомных слоев кремния (рис. 7). Полученные зависимости находятся в хорошем согласии с результатами расчета в рамках метода сильной связи [5].

В четвертом параграфе (п. 4.4) анализируется спин-орбитальное расщепление X_z -состояний в зоне проводимости на гетероинтерфейсе $\text{Si}/\text{SiGe}(001)$. Приведены входящие в соответствующий гамильтониан эрмитовы формы, преобразующие по неприводимым представлениям группы T_d , и составленные из векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' и матриц Паули. Полученный гамильтониан содержит два типа поправок, опи-

сывающих смешивание электронных состояний на гетерогранице за счет спин-орбитального взаимодействия: поправки типа Рашбы ($\propto (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$) и поправки типа Дрессельхауза ($\propto (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y)$). Он был использован для расчета зависимости спин-орбитального расщепления основного состояния электрона в квантовой яме Si/Si_{0.75}Ge_{0.25}(001) от числа атомных слоев кремния (рис. 8) при $k_{\parallel} = 0.17 \pi/x_0$ ($\mathbf{k}_{\parallel} = (1/\sqrt{2})(k_{\parallel}, k_{\parallel}, 0)$, x_0 – толщина монослоя). В квантовых ямах, содержащих четное число атомных слоев кремния, рассматриваемый эффект отсутствует, вследствие наличия в них центра инверсии. Предложенный в работе метод учитывает атомарное микроскопическое строение гетероструктуры и не требует анализа её симметрии.

В пятом параграфе (п. 4.5) приводятся выводы по четвертой главе.

В **приложении I** приведены матрицы, определяющие эффективный гамильтониан $\Gamma_8 \oplus \Gamma_7$ в предположении, что рассматриваемые спинорные состояния сформированы из неспинорных состояний зоны Γ_{15} .

В **приложении II** приведена матрица эффективного kp -гамильтониана 8-зонной ($\Gamma_6 \oplus \Gamma_8 \oplus \Gamma_7$) модели Кейна для гетероструктур.

В **Заключении** сформулированы выводы, перечислены основные достижения и полученные результаты.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Впервые получен многозонный многодолинный kp -гамильтониан гетероструктур произвольной формы на основе полупроводников с несколькими атомами в элементарной ячейке, позволяющий учесть их микроскопическое атомарное строение.
2. Впервые развита kp -теория возмущений для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами, учитывающая эффекты внутри- и междолинного смешивания электронных состояний на гетерограницах. Показано, что матричные элементы междолинного рассеяния во вто-

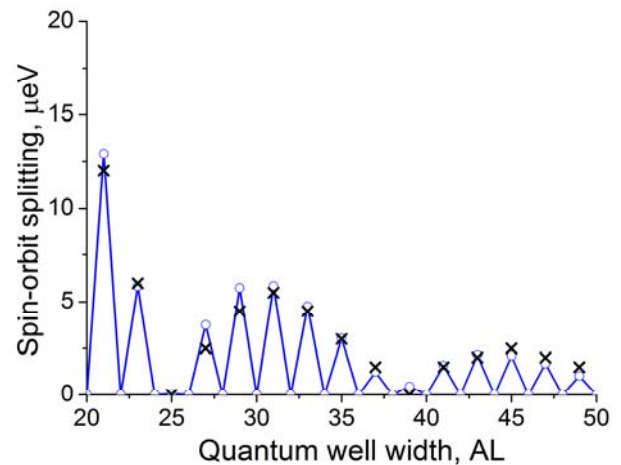


Рисунок 8 – Зависимость спин-орбитального расщепления основного состояния в квантовой яме Si/Si_{0.75}Ge_{0.25}(001) от числа атомных слоев кремния при $k_{\parallel} = 0.17 \pi/x_0$. Косыми крестами обозначены результаты расчета в рамках метода сильной связи [5]

ром порядке теории возмущений определяются рассеянием носителей заряда на атомах замещения и k -взаимодействием зон.

3. Впервые развит метод инвариантов для гетероструктур на основе многодолинных полупроводников с вырожденными зонами, учитывающий их микроскопическое атомарное строение.
4. Показано, что полученные эффективные k -гамильтонианы гетероструктур содержат два типа поправок к методу эффективной массы: поправки, описывающие изменение параметров зонной структуры при переходе через гетерограницу, и дополнительные поправки, не имеющие аналогов в объемных материалах.
5. Метод инвариантов использован для построения эффективных k -гамильтонианов гетероструктур на основе прямозонных полупроводников со структурой сфалерита в рамках однозонных и многозонных моделей ($\Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}, \Gamma_{25}, \Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8, \Gamma_{12} \otimes \Gamma_6, \Gamma_{15} \otimes \Gamma_6, \Gamma_{25} \otimes \Gamma_6$).
6. Методом инвариантов построен эффективный k -гамильтониан гетероструктур в рамках 8-зонной ($\Gamma_6 \oplus \Gamma_8 \oplus \Gamma_7$) модели Кейна.
7. Проанализировано влияние поправок к методу эффективной массы на огибающие волновые функции и энергетический спектр носителей заряда в гетероструктурах. Показано, что учет смешивания состояний тяжелых и легких дырок в квантовых ямах в рамках модели Кейна приводит к линейному по волновому вектору спин-орбитальному расщеплению энергетических уровней не только в валентной зоне, но и в зоне проводимости.
8. Рассчитан энергетический спектр электронов и дырок в одиночной квантовой яме InSb/AlInSb с учетом механических напряжений. Полученные данные находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами исследования фотолюминесценции данных структур.
9. Методом инвариантов построен эффективный многозонный многодолинный k -гамильтониан, описывающий эффекты $\Gamma - X$ -смешивания в гетероструктурах GaAs/AlAs. Показано, что междолинное смешивание $\Gamma_1 - X_{1,3z}$ -состояний на интерфейсе GaAs/AlAs(001) во втором порядке теории возмущений определяется тремя независимыми константами.
10. Рассчитаны энергетический спектр и волновые функции электрона в сверхрешетках $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_N(001)$. Полученные данные хорошо согласуются с результатами расчета методом псевдопотенциала.
11. Впервые предложен эффективный k -гамильтониан, учитывающий междолинное смешивание X -состояний в гетероструктурах Si/SiGe.

12. Впервые предложен эффективный kp -гамильтониан, учитывающий смешивание X_z -состояний зоны проводимости кремния на гетероинтерфейсе Si/SiGe(001) за счет спин-орбитального взаимодействия.
13. Рассчитаны зависимости долинно-орбитального и спин-орбитального расщепления основного состояния в квантовой яме Si/Si_{0.75}Ge_{0.25}(001) от числа атомных слоев кремния. Полученные данные находятся в хорошем согласии с результатами расчета методом сильной связи.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tokatly I. V., Tsibizov A. G., Gorbatsevich A. A. Interface electronic states and boundary conditions for envelope functions // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 165328.
2. Foreman B. A. First-principles envelope-function theory for lattice-matched semiconductor heterostructures // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 165345.
3. Burt M. G. An exact formulation of the envelope function method for the determination of electronic states in semiconductor microstructures // Semicond. Sci. Technol. 1988. Vol. 3. P. 739-753.
4. Тахтамиров Э. Е., Волков В. А. Обобщение метода эффективной массы для полупроводниковых структур с атомарно резкими гетеропереходами // ЖЭТФ 1999. Т. 116. С. 1843-1870.
5. Nestoklon M. O., Ivchenko E. L., Jancu J.-M., Voisin P. Electric field effect on electron spin splitting in SiGe/Si quantum wells // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 155328.
6. Wang L.-W., Zunger A. Linear combination of bulk bands method for large-scale electronic structure calculations on strained nanostructures // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 15806.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ РАБОТЫ

Статьи в изданиях, рекомендованных ВАК

- A1. Глинский Г. Ф., Миронова М. С. Междолинное смешивание электронных состояний в гетероструктурах с квантовыми ямами SiO₂/Si/SiO₂ // Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2013. №2, С.8-14.
- A2. Glinskii G.F., Mironova M.S. Inter-valley mixing in Si/SiO₂ heterostructures // Journal of Physics: Conference Series. 2013. Vol. 461(1). P. 012040.
- A3. Барановский М. В., Глинский Г. Ф., Миронова М. С. Фотоэлектрический метод диагностики гетероструктур InGaN/GaN с множественными квантовыми ямами // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47, № 3. С. 60-64.
- A4. Глинский Г. Ф., Миронова М. С. Эффективные гамильтонианы гетероструктур на основе полупроводников A^{III}B^V. Kp -теория возмущения и метод инвариантов // Физика и техника полупроводников. 2014. Т. 48, № 10. С. 1359.

Тезисы конференций

- A5. Миронова М. С., Глинский Г.Ф. Расчет энергетического спектра в Si/SiO₂ структурах с квантовыми ямами в узельном представлении с учетом эффектов междолинного смешивания // Физика.СПб: Тезисы докл. конф. по физике и астрономии для молодых ученых Санкт-Петербурга и Северо-запада 26 –27 октября 2011г. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2011 г., с. 149.
- A6. Миронова М. С. Глинский Г.Ф. Энергетический спектр и волновые функции электронов в сверхрешетках Si/SiO₂ //13-я всерос. мол. конф. по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тезисы докладов. 21 –25 ноября 2011г. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2011 г., с. 33.
- A7. Миронова М.С., Глинский Г.Ф. Эффекты междолинного смешивания в гетероструктурах на основе непрямозонных полупроводников. Сверхрешетки (AlAs)_M/(GaAs)_N и квантовые ямы SiO₂/Si/SiO₂ // 14-я всерос. мол. конф. по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тезисы докладов. 26 –30 ноября 2012г. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2012 г., с. 51.
- A8. Миронова М. С., Глинский Г.Ф. Междолинное смешивание в гетероструктурах Si/SiO₂ // СПб: Тезисы докладов рос. мол. конф. по физике и астрономии Физика.СПб 24 –25 октября 2012г. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2012 г., с. 150.
- A9. Глинский Г.Ф., Миронова М.С. Метод инвариантов в теории наногетероструктур и его приложение к анализу междолинного смешивания в AlAs/GaAs/AlAs и SiGe/Si/SiGe-квантовых ямах // XI Российская конференция по физике полупроводников СПб, 16-20 сентября 2013 г: Тезисы докладов. СПб.: Изд-во ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2013 г., с. 207.
- A10. Миронова М. С., Глинский Г.Ф. 8-зонная модель Кейна для квантово-размерных гетероструктур на основе кубических полупроводников A³B⁵ // Физика.СПб: Тезисы докладов российской молодежной конференции по физике и астрономии 23 –24 октября 2013г. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2013 г., с. 257.
- A11. Миронова М.С., Глинский Г.Ф. Метод инвариантов в теории полупроводниковых гетероструктур. // 15-я всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тезисы докладов. 25 –29 ноября 2013г. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2013 г., с. 51.
- A12. Mironova M.S. Determination of the InSb/AlInSb quantum well energy spectrum / M.S. Mironova, O.S. Komkov, D.D. Firsov, G.F. Glinskii // Saint-Petersburg OPEN 2014: book of abstracts, St. Petersburg, Russia, March 25-27, 2014. St. Petersburg: Academic University Publishing, 2014. Pp. 322-323.
- A13. Glinskii G.F., Mironova M.S. Method of invariants in semiconductor heterostructures theory and its application for analysis of valley-orbit and spin-orbit mixing in SiGe/Si/SiGe quantum wells // Nanostructures: physics and technology, 22nd International symposium, St. Petersburg, Russia, June 23-27, 2014. St. Petersburg: Academic University Publishing, 2014. Pp. 184-185.