

УДК 539.293.011

Г.Ф. КАРАБАЕВ, В.Н. ЧЕРНЫШОВ**,*, А.Н. РАЗЖУВАЛОВ**,**

АНАЛИЗ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ОГИБАЮЩИХ ФУНКЦИЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ GaN/InGaN(0001)¹

В рамках метода огибающих функций рассмотрены различные условия их сшивания на гетерограницах GaN/InGaN(0001). Обычно используются условия сшивания, при которых для состояний в центре плоской зоны Бриллюэна функции сшиваются с функциями, а производные с производными. В этом случае огибающие функции обладают симметрией (антисимметрией) относительно центра квантовой ямы. Такого не должно быть в анизотропных нитридных гетероструктурах. Предложены условия сшивания, основанные на псевдопотенциальных расчетах. Эти условия качественно отличаются от обычно используемых и приводят к разрывам огибающих функций на гетерограницах, а также к снятию упомянутой выше симметрии даже без учета встроенных полей спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Огибающие функции электронов оказываются сдвинутыми относительно центра квантовой ямы в направлении гексагональной оси [0001], а огибающие функции дырок – в противоположном направлении. Рассмотренные нами разные условия сшивания приводят к энергетическим уровням в яме, отличающимся друг от друга в пределах нескольких миллиэлектронвольт. Важные для оптических характеристик интегралы перекрывания огибающих функций электронов и дырок различаются незначительно при использовании разных условий сшивания, однако некоторые из них становятся ненулевыми за счет снятия искусственной симметрии.

Ключевые слова: гетероструктура, огибающие функции, условия сшивания, квантовая яма, уровень энергии.

Введение

При квантовом моделировании электронных и дырочных состояний в реальных гетероструктурах широко применяется метод огибающих функций (*кр*-метод, метод эффективной массы) в том или ином виде [1–4]. Его использование обусловлено простотой и доступностью широкому кругу исследователей и настоятельной потребностью в проведении теоретического анализа получаемых в экспериментах результатов. Такой широкий интерес привел к появлению различных вариантов метода, различающихся, главным образом, формой и содержанием условий сшивания огибающих функций на гетерограницах. В подавляющем большинстве работ предполагается, что актуальные электронные (дырочные) состояния материалов, формирующих гетерограницу, описываются почти совпадающими волновыми функциями. Поэтому соответствующие огибающие функции разных материалов также считаются совпадающими [3] на гетерогранице. Это можно считать оправданным, когда контактируют на гетерогранице близкие по кристаллохимическому строению материалы, имеющие близкое строение электронных (дырочных) энергетических зон. Однако блоховские волновые функции и для родственных материалов не всегда совпадают, например, за счет различия объемов элементарных ячеек в материалах гетеропары, даже при учете деформации, согласующей постоянные решетки в плоскости гетерограницы. Такой случай реализуется в гетероструктурах на основе нитридов Al, Ga, In. Различие кристаллических потенциалов также способствует различию блоховских волновых функций. Поэтому представляет интерес выяснить роль различия блоховских функций в формировании условий сшивания огибающих функций и исследовать их влияние на электронные состояния в наноструктурах. Вторая группа условий сшивания огибающих функций связана с непрерывностью плотности потока вероятности. В ранних исследованиях для однозонных приближений эти условия постулировали, а затем и для многозонных случаев их получали путем интегрирования системы уравнений для огибающих функций по малому интервалу координаты, охватывающему гетерограницу. Здесь наиболее широко используются два варианта. В первом («неточном») уравнения (гамильтониан) для огибающих функций сначала симметризовали, чтобы гамильтониан стал эрмитовым, а затем выполняли интегрирование. Так поступают многие, однако такой подход признан неточным [5]. Во втором

¹ Работа выполнена при поддержке ГК № 13.G25.31.0042, постановление № 218 правительства РФ.

(«точном») более аккуратно располагали операторы дифференцирования в гамильтониане, а затем проводили интегрирование. Этот подход опирается на точную теорию огибающих функций [3–5].

Заметим, что в работе [6] при рассмотрении варизонных структур впервые было предложено обоснованное расположение операторов дифференцирования в уравнениях метода огибающих функций, которое отличается от симметризованного и обеспечивает эрмитовость задачи, а в уравнениях найдены ранее не учитываемые члены. Эти результаты были получены при использовании блоховских функций, зависящих от состава твердого раствора. В работе [7] этот подход был распространен на гетероструктуры.

Однако в упомянутых выше двух вариантах непрерывность огибающих функций постулировалась, с чем трудно согласиться, когда в разных слоях гетероструктуры необходимо использовать разные блоховские функции для представления волновой функции. В работах Барта (см., например, [4]) используются одинаковые блоховские функции во всех слоях гетероструктуры и непрерывность огибающих функций очевидна. Однако обычно в уравнениях метода эффективной массы для гетероструктур в каждом слое используются свои параметры, характерные для материала слоя. Поэтому представляет интерес проанализировать условия сшивания на гетерограницах обычных (не бартовских) огибающих функций и обсудить роль разрыва этих огибающих функций в формировании энергетических уровней и электронных состояний. Этот подход не новый. Он был применен Андо и Акерой в работе [8], где рассматривалось Γ – X -смешивание электронов в гетероструктурах GaAs/AlAs и использовался метод сильной связи для получения условий сшивания огибающих функций. В [9, 10] и ряде других работ этот подход с использованием метода псевдопотенциала применялся для получения условий сшивания огибающих функций.

Таким образом, в теории огибающих функций, применяемой к наноструктурам, еще нет полной ясности, и касается это не только условий сшивания на резкой гетерогранице, но и применимости самого понятия резкой гетерограницы (по вопросу о «плавной» гетерогранице см. [11]).

Настоящая работа посвящена рассмотрению модельной задачи, в которой предполагается исследовать гетерограницу вюртцитных кристаллов GaN/InGa_{0.8}N(0001) и квантовую яму GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN при различном выборе условий сшивания: а) часто используемых в литературе (назовем их «стандартными»); б) полученных нами при расчете гетероструктур методом псевдопотенциала. Целью работы является выяснение величины сдвига уровней дырок и электронов в квантовой яме и анализ изменений вида огибающих функций, обусловленных различным выбором граничных условий.

Уравнения для огибающих функций дырок

Рассмотрим дырочные состояния в квантовой яме GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN, выращенной вдоль гексагональной оси z . При этом для упрощения расчетов будем пренебрегать спин-орбитальным взаимодействием, тем более что в такой системе оно весьма мало. Обсудим сначала хорошо известный дырочный гамильтониан в вюртцитном кристалле типа GaN [2, 3]. Вершина валентной зоны рассматриваемых кристаллов располагается в центре зоны Бриллюэна гексагонального кристалла. Она двукратно вырождена, волновые функции при преобразованиях из группы C_{6v}^4 симметрии вюртцитного кристалла преобразуются как координаты X и Y (т.е. по представлению Γ_6). Ниже вершины валентной зоны на расстоянии величины кристаллического расщепления Δ_1 располагается отщепленная валентная зона. Соответствующая волновая функция преобразуется по единичному представлению Γ_1 (т.е. как координата Z или функция S -типа). Функции X , Y , Z напоминают соответствующие функции валентной зоны полупроводников A^3B^5 со структурой сфалерита. Огибающие функции валентных состояний $F = (F_x, F_y, F_z)^T$ (индекс T означает транспонирование) удовлетворяют уравнениям

$$H_{3 \times 3} F = E F. \quad (1)$$

Соответствующий kp -гамильтониан размерности 3×3 представим в виде [2, 3]

$$H_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} \Delta_1 + \hat{k}_x L_1 \hat{k}_x + \hat{k}_y M_1 \hat{k}_y + \hat{k}_z M_2 \hat{k}_z & \hat{k}_x N_1 \hat{k}_y + \hat{k}_y N'_1 \hat{k}_x & \hat{k}_x N_2 \hat{k}_z + \hat{k}_z N'_2 \hat{k}_x \\ \hat{k}_y N_1 \hat{k}_x + \hat{k}_x N'_1 \hat{k}_y & \Delta_1 + \hat{k}_x M_1 \hat{k}_x + \hat{k}_y L_1 \hat{k}_y + \hat{k}_z M_2 \hat{k}_z & \hat{k}_y N_2 \hat{k}_z + \hat{k}_z N'_2 \hat{k}_y \\ \hat{k}_z N_2 \hat{k}_x + \hat{k}_x N'_2 \hat{k}_z & \hat{k}_z N_2 \hat{k}_y + \hat{k}_y N'_2 \hat{k}_z & \hat{k}_x M_3 \hat{k}_x + \hat{k}_y M_3 \hat{k}_y + \hat{k}_z L_2 \hat{k}_z \end{pmatrix}.$$

Здесь начало отсчета энергии принято на вершине отщепленной зоны, компоненты вектора $\mathbf{k} = -i\nabla$ записаны в порядке, определенном согласно «точной» теории Барта [3, 4]. Поэтому далее будем именовать данный вариант как «точный». Часто используемый симметризованный вариант получается из написанного выше при замене N_1 и N'_1 на $\frac{1}{2}(N_1 + N'_1)$, а N_2 и N'_2 на $\frac{1}{2}(N_2 + N'_2)$. Коэффициенты в гамильтониане H_{33} (общий множитель $\frac{\hbar^2}{2m_0}$ у этих коэффициентов опущен, $\hbar$ – постоянная Планка, m_0 – масса свободного электрона) определяются через матричные элементы оператора импульса и зонные энергии, вычисленные в центре зоны Бриллюэна с помощью какого-либо метода точного анализа объемной зонной структуры:

$$\begin{aligned} L_1 &= 1 - 6(\sigma + \delta) = A_2 + A_4 + A_5, \quad L_2 = 1 - 6\sigma_z = A_1, \quad M_1 = 1 - 6\delta = A_2 + A_4 - A_5, \\ M_2 &= 1 - 6\pi = A_1 + A_3, \quad M_3 = 1 - 6\pi_z = A_2, \quad N_1 = -6(\sigma - \delta) = 2A_5, \\ N_2 &= -6\delta = \sqrt{2}A_6, \quad N'_1 = -6\sigma_{xz} = A_2 + A_4 - A_5 - 1, \quad N'_2 = -6\pi = A_1 + A_3 - 1. \end{aligned}$$

Здесь σ включает вклад от матричных элементов x -компонента оператора импульса p_x между состоянием X и состояниями симметрии Γ_1 ; σ_z – от z -компонента импульса p_z между Z (Γ_1)-состоянием и состояниями Γ_1 ; σ_{xz} определяется также вкладом от состояний Γ_1 ; π и π_z – вкладами от состояний Γ_6 , а δ – вкладами от состояний с симметрией Γ_5 . Детальные формулы для их вычисления могут быть найдены в [3].

Существует много расчетов указанных параметров и их комбинаций. Наиболее популярны параметры $A_1 - A_6$. Они рассчитываются, подгоняются с учетом экспериментальных данных и приводятся наряду с другими параметрами материалов в таблицах обзорных статей и книг [12, 13].

При использовании «точного» и симметризованного вариантов гамильтониана предполагается, что огибающие функции $F = (F_x, F_y, F_z)^T$ непрерывны при переходе через гетерограницу, а условия сшивания их производных определяются путем интегрирования уравнений (1) по бесконечно малому интервалу переменной z , охватывающему гетерограницу.

Количественные результаты расчета дырочных состояний методом огибающих функций с учетом этих граничных условий обсудим ниже, вместе с результатами, которые будут получены для случая граничных условий, определенных с помощью расчетов методом модельного псевдопотенциала [14]. Использовались экспериментальные значения структурных постоянных и диэлектрической проницаемости: $a_0(\text{GaIn}) = 3,189 \text{ \AA}$; $c_0(\text{GaIn}) = 5,185 \text{ \AA}$; $\epsilon_\infty(\text{GaIn}) = 5,8$; $a_0(\text{InN}) = 3,545 \text{ \AA}$; $c_0(\text{InN}) = 5,703 \text{ \AA}$; $\epsilon_\infty(\text{InN}) = 9,3$.

При описании квантовых состояний в нитридных гетероструктурах $w\text{-GaIn}/(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$ необходимо учитывать влияние деформации слоев, возникающей из-за большого различия постоянных решеток кристаллов $w\text{-GaIn}$. Величина деформации слоев $w\text{-InGaIn}$ вдоль оси z дается формулой

$$\epsilon_{33} = \frac{\Delta c(x)}{c_0(x)} = -\frac{2C_{13}(x)\Delta a(x)}{C_{33}(x)a_0(x)}, \quad (2)$$

где постоянные решетки недеформированного твердого раствора $w\text{-InGaIn}$ определяются согласно закону Вегарда формулами $c_0(x) = x c(\text{InN}) + (1-x) c(\text{GaIn})$, $a_0(x) = x a(\text{InN}) + (1-x) a(\text{GaIn})$, а упругие постоянные твердого раствора в линейном приближении по составу равны $C_{13}(x) = x C_{13}(\text{InN}) + (1-x) C_{13}(\text{GaIn})$, $C_{33}(x) = x C_{33}(\text{InN}) + (1-x) C_{33}(\text{GaIn})$. Принимаем, что постоянная решетки деформированных слоев $w\text{-InGaIn}$ вдоль гексагональной оси $c(x) = c_0(x) + \Delta c(x)$, а постоянная решетки в базальной плоскости $a(x) = a(\text{GaIn})$. Поэтому $\Delta a(x) = a(\text{GaIn}) - a_0(x)$.

Зонная структура твердых растворов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ рассчитывалась в приближении виртуального кристалла. Зонные энергии раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ зависят от состава в области малых x практически линейно. Разрывы валентной зоны и зоны проводимости учитывались нами согласно соотношению 40:60 [13]. Рассчитанные уровни энергий и волновые функции в центре зоны Бриллюэна позволили определить параметры дырочного гамильтониана, входящего в уравнение (1). Эти параметры отрицательны. Их значения приведены в таблице.

**Рассчитанные методом модельного псевдопотенциала параметры дырочного kp -гамильтониана
GaN и $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ (в ед. $\hbar^2 / 2m_0$)**

Вещество	Δ_1 , эВ	L_1	L_2	M_1	M_2	M_3	N_1	N'_1	N_2	N'_2
GaN	0,022	-6,04	-7,41	-0,17	-0,35	-0,37	-4,7	-1,17	-4,00	-1,35
$\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$	0,34	-7,16	-8,61	-0,26	-0,30	-0,22	-5,63	-1,26	-4,79	-1,30

Обсуждение условий сшивания огибающих функций на резкой гетерогранице

Рассмотрим сначала традиционный подход, именуемый «точным». В нем предполагается, что огибающие дырочные функции F_x, F_y, F_z на гетерогранице первого (барьерного GaN) слоя и второго (ямного $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$) слоя непрерывны. Непрерывным также считается получаемое при интегрировании уравнения (1) выражение

$$\begin{pmatrix} M_2 \hat{k}_z & 0 & N'_2 k_x \\ 0 & M_2 \hat{k}_z & N'_2 k_y \\ N_2 k_x & N_2 k_y & L_2 \hat{k}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Здесь k_x и k_y – компоненты волнового вектора в плоскости гетерограницы; $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$. Если ввести вектор-функцию, содержащую три огибающих функции и три их первых производных, а также использовать индексы b и w для обозначения параметров и огибающих функций, относящихся соответственно к барьеру и яме, можно выразить условия сшивания в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} F_{bx} \\ F_{by} \\ F_{bz} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{bx} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{by} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{bz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i(N'_{w2} - N'_{b2})k_x}{M_{b2}} & \frac{M_{w2}}{M_{b2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i(N'_{w2} - N'_{b2})k_y}{M_{b2}} & 0 & \frac{M_{w2}}{M_{b2}} & 0 \\ \frac{i(N_{w2} - N_{b2})k_x}{L_{b2}} & \frac{i(N_{w2} - N_{b2})k_y}{L_{b2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{L_{w2}}{L_{b2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{wx} \\ F_{wy} \\ F_{wz} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{wx} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{wy} \\ \frac{\partial}{\partial z} F_{wz} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Матрица переноса, входящая в (4), при $k_x = k_y = 0$ является диагональной, напоминающей условия сшивания Бен – Даниеля – Дюка [15] для однодолинного случая. Подставляя параметры, приведенные в таблице, обнаруживаем, что диагональные элементы матрицы переноса имеют величины порядка единицы, а недиагональные – порядка десятых долей, умноженных на малые волновые числа k_x, k_y . На основе расчетов методом псевдопотенциала и с использованием подхода, развитого в работах [9, 10], мы получили при $k_x = k_y = 0$ матрицу переноса Q_{bw} в численном виде, существенно отличающуюся от представленной в (4):

$$Q_{bw} = \begin{pmatrix} 0,924 & 0 & 0 & 0,00287 & 0 & 0 \\ 0 & 0,924 & 0 & 0 & 0,00287 & 0 \\ 0 & 0 & 0,998 & 0 & 0 & 0,00701 \\ -1,438 & 0 & 0 & 1,368 & 0 & 0 \\ 0 & -1,438 & 0 & 0 & 1,368 & 0 \\ 0 & 0 & -0,016 & 0 & 0 & 0,863 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Главное отличие нашей матрицы переноса состоит в том, что производные от огибающих функций смешиваются на гетерогранице с самими огибающими функциями даже при $k_x = k_y = 0$, чего нет в матрице (4). При наличии такого смешивания важно указать, что при расчете (5) в качестве единицы длины мы выбрали постоянную решетки GaN вдоль гексагональной оси. При дру-

гом выборе единицы длины недиагональные элементы матрицы (5) изменятся. Отметим, что условия сшивания (4) получены в предположении, что уравнение (1) выполняется не только внутри каждого из слоев, но и на гетерогранице, что в общем случае несправедливо. Как уже отмечалось, широко используемые «симметризованные» уравнения приводят к условиям сшивания, которые получаются из (4) при замене чисел N_2 и N'_2 на их полусумму.

Результаты расчета энергетических уровней в квантовой яме

Расчеты проведены для состояний в квантовой яме, сформированной тонким слоем твердого раствора $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$, заключенным между двумя толстыми слоями GaN. Структура считается выращенной вдоль гексагональной оси. Координаты гетерограниц первой $z = z_1 = 0$ и второй $z = z_2 = n \cdot c(x)$ (n – целое число, $c(x)$ – постоянная решетки деформированного твердого раствора вдоль гексагональной оси). При анализе дырочных состояний начало отсчета энергии было выбрано в вершине кристаллически отщепленной валентной зоны GaN. В этом случае энергия вершины валентной зоны GaN оказалась равной 0,022 эВ, разрыв вершин валентных зон на границе принят равным 0,213 эВ. Таким образом, верхняя валентная зона в квантовой яме располагается при энергии 0,235 эВ, кристаллически отщепленная валентная зона твердого раствора располагается ниже всех зон при энергии – 0,105 эВ, поскольку величина кристаллического расщепления в деформированном слое твердого раствора оказалась большой (0,34 эВ). Следовательно, для дырок верхней валентной зоны слой твердого раствора является квантовой ямой, а для дырок кристаллически отщепленной зоны ямой следует считать слой GaN.

Процедура отыскания собственных энергий и огибающих волновых функций была стандартной. В каждом из слоев находились общие решения квантовых уравнений (1), они содержали по шесть произвольных коэффициентов в каждом слое для случая дырочных состояний и по два коэффициента в случае электронных состояний. Общее число коэффициентов равно 18 для дырочных огибающих и 6 – для электронных. На каждой гетерогранице для дырочных состояний мы имеем по шесть условий сшивания и шесть условий задаем на бесконечности для локализованных в яме состояний – всего получаем 18 уравнений для 18 неизвестных коэффициентов. Из условия разрешимости соответствующих алгебраических уравнений находим энергетический спектр, а затем получаем и огибающие функции. Аналогично проводим расчет для электронных состояний. В случае $k_x = k_y = 0$ система уравнений для огибающих функций разбивается на три независимых простых уравнения, матрица сшивания огибающих функций и их производных также разбивается на три подматрицы, так что в этом случае решение находится просто. Результаты для энергий дырок в центре плоской зоны Бриллюэна $k_x = k_y = 0$ в зависимости от ширины квантовой ямы изображены на рис. 1.

Сплошными линиями представлены результаты псевдопотенциального расчета, кружочками и крестиками – результаты расчета со стандартными и нашими («псевдопотенциальными») условиями сшивания соответственно. Заметим, что при $k_x = k_y = 0$ «неточные» (используются симметризованные гамильтонианы) граничные условия не отличаются от «точных» (используются несимметризованные гамильтонианы).

Как и следовало ожидать, различие в выборе условий сшивания сильнее проявляется в случае тонких квантовых ям. При увеличении их толщин и в случае локализованных в центре ямы состояний энергетические уровни для разных вариантов условий сшивания сближаются. Явно видно также, что, за исключением самых верхних дырочных уровней, точные псевдопотенциальные результаты сильнее отличаются от полученных методом огибающих функций в обоих вариантах условий сшивания, чем последние друг от друга. Расчеты для электронных уровней демонстрируют еще меньшие отличия в зависимости от выбора условий сшивания, поскольку сами условия различаются незначительно.

Характер возникающих в квантовой яме подзон описывает рис. 2. На нем изображены зависимости энергий от волнового вектора k_y при $k_x = 0$ для трех подзон «тяжелых» и трех подзон «легких» дырок. Этот рисунок соответствует ширине квантовой ямы, равной 4 постоянным решетки $c(x)$ и выбору условий сшивания согласно (5). Энергетические подзоны, рассчитанные при условиях сшивания (4), здесь не представлены, чтобы не загромождать рисунок. Они расположены ниже соответствующих подзон, изображенных на рис. 2.

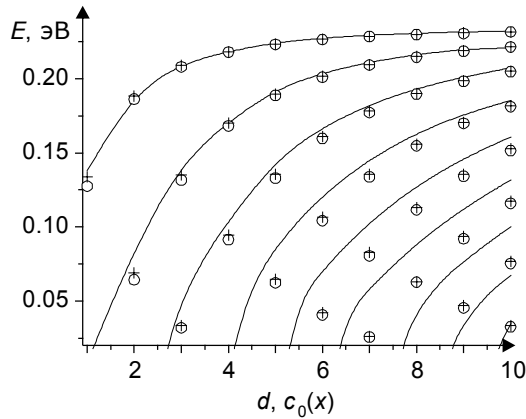


Рис. 1. Зависимость положений дырочных уровней в квантовой яме GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N(n)/GaN от ширины ямы $d = n c_0(x)$. За начало отсчета энергии взято положение кристаллически отщепленной валентной зоны в GaN

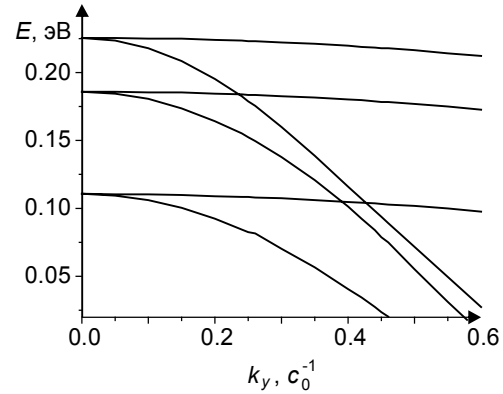


Рис. 2. Зависимость дырочных уровней от k_y при $k_x = 0$. Условия сшивания соответствуют выбору (5)

Наряду с расчетами дырочных и электронных уровней проведен анализ соответствующих огибающих функций в квантовой яме In_{0.2}Ga_{0.8}N с шириной в 4 постоянных решетки. Тройка таких функций F_x, F_y, F_z соответствует каждому дырочному уровню, если уровень не вырожден. В случае вырождения (двукратного в центре плоской зоны Бриллюэна) имеются две подобных тройки. Чтобы снять вырождение, примем для расчета $k_x = 0, k_y = 0,05$. В этом случае уровни энергии слегка расщепляются (на 1–2 МэВ). Для уровней «тяжелых» дырок отлична от нуля огибающая функция F_x , а F_y, F_z равны нулю, для уровней «легких» дырок, наоборот, функция $F_x = 0$, а F_y и F_z отличны от нуля, причем F_z на порядок меньше F_y при малых k_y . С ростом k_y вклад функции F_z увеличивается. Электронная огибающая функция F_s , отвечающая единственному внутри квантовой ямы уровню, локализована в яме. Для иллюстрации роли разных граничных условий в формировании электронной и дырочной плотности вероятности на рис. 3 и 4 представлены квадраты модулей огибающих функций.

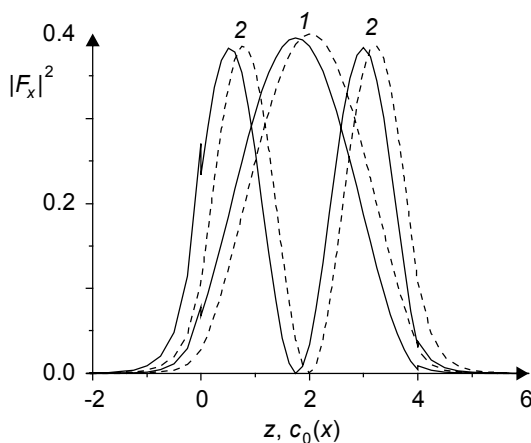


Рис. 3. Плотность вероятности $|F_x|^2$, рассчитанная для двух последовательных уровней тяжелых дырок в яме GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N(4 c(x))/GaN(0001). Цифры относятся к основному (1) и второму (2) дырочному уровню. Пунктирными линиями изображены плотности вероятности, найденные при стандартных условиях сшивания, сплошными линиями – при условиях сшивания, полученных на основе псевдопотенциальных расчетов

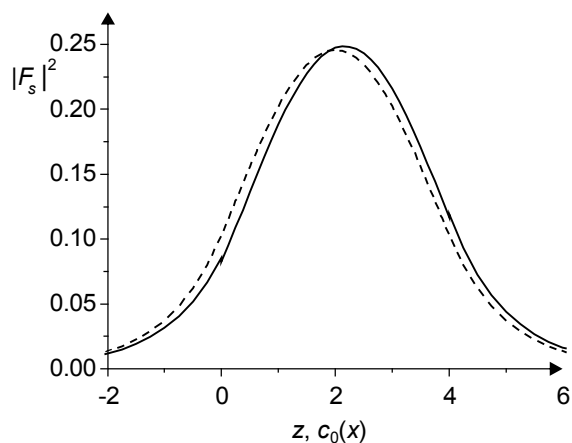


Рис. 4. Плотность вероятности $|F_s|^2$, рассчитанная для основного электронного уровня в квантовой яме GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N(4 c(x)) GaN(0001). Пунктирной линией изображена плотность вероятности, найденная при стандартных условиях сшивания, сплошной линией – при условиях сшивания, полученных на основе псевдопотенциальных расчетов

Из рис. 3 и 4 видно, что стандартные условия сшивания приводят к симметричному относительно центра ямы распределению плотности вероятности, а условия сшивания, полученные при псевдопотенциальных расчетах, такой симметрии не дают. Дырочные плотности вероятности относительно центра ямы смещены влево. Кроме того, на левой гетерогранице отчетливо видны разрывы огибающих функций и их производных. Разрывы на правой границе также имеют место, но за счет асимметрии они вместе с самой функцией меньше по величине. В случае электронных состояний асимметрия проявляется в сдвиге огибающей функции относительно центра ямы вправо. Однако величина сдвига здесь меньше, чем у дырочных состояний. Важные для оптических характеристик интегралы перекрывания огибающих функций электронов и дырок оценены при использовании разных условий сшивания. Оказалось, что они практически не меняются, однако некоторые из них становятся ненулевыми за счет снятия искусственной симметрии. Проведен также анализ сверхрешеточных состояний в зависимости от выбора условий сшивания. Поскольку в барьерных областях функции быстро затухают, различие между расчетами ям и сверхрешеток очевидно и вблизи ямных слоев невелико. Из рисунков (и из полученных формул) видно, что стандартные условия сшивания огибающих функций приводят к завышению симметрии рассматриваемой структуры, тогда как условия сшивания, полученные из псевдопотенциальных расчетов, явно отражают присутствующую в реальной структуре асимметрию. В расчетах принято направление $[0001]$ за ось z . Следовательно, можно заключить, что дырочные волновые функции в случае «псевдопотенциальных» условий сшивания сдвинуты относительно центра ямы в сторону, противоположную гексагональной оси, а электронные волновые функции – вдоль этой оси. Можно также сделать вывод о том, что уравнения метода огибающих функций обычно обладают более высокой симметрией в сравнении с симметрией исходной задачи. Однако более точная формулировка условий сшивания, не опирающаяся только на уравнения для огибающих функций, приводит к восстановлению исходной симметрии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luttinger J.M. and Kohn W. // Phys. Rev. – 1955. – V. 97. – P. 869–883.
2. Chuang S.L. and Chang C.S. // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – No. 4. – P. 2491–2504.
3. Francisco Mireles and Sergio E. Ulloa // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 60. – P. 13959–13667.
4. Burt M.G. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – No. 11. – P. 7518–7525.
5. Foreman B. A. // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48. – P. 4964–4967; Phys. Rev. Lett. – 1998. – V. 81. – P. 425–428.
6. Караваев Г.Ф., Тиходеев Ю.С. // ФТП. – 1991. – Т. 25. – № 7. – С. 1237–1242.
7. Foreman B. A. // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – No. 3. – P. 1909–1921.
8. Ando T. and Akera H. // Phys. Rev. B. – 1989. – V. 40. – No. 17. – P. 10619–10633.
9. Гриняев С.Н., Караваев Г.Ф., Чернышов В.Н. // Изв. вузов. Физика. – 1992. – Т. 35. – № 9. – С. 64–76.
10. Гриняев С.Н., Чернышов В.Н. // ФТП. – 1992. – Т. 26. – С. 2057–2067.
11. Караваев Г.Ф., Гриняев С.Н. // ФТТ. – 2006. – Т. 48. – № 5. – С. 893–901.
12. Junqiao Wu. // J. Appl. Phys. – 2009. – V. 106. – P. 011101.
13. Hadis Morkoc. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices. V. 1: Materials Properties, Physics and Growth. – Weinheim, WILEY-VCH: Verlag GmbH, & Co. KGaA, 2008. – 1257 p.
14. Чалдышев В.А., Гриняев С.Н. // Изв. вузов. Физика. – 1983. – Т. 26. – № 3. – С. 38–61.
15. BenDaniel D.J. and Duke C.B. // Phys. Rev. – 1966. – V. 152. – P. 683–692.

*Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова

Поступила в редакцию 10.04.12.

Национального исследовательского Томского государственного университета,
г. Томск, Россия

**Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru, vnchern@tpu.ru

Караваев Геннадий Федорович, д.ф.-м.н., профессор, зав. лаб. теоретической физики;

Чернышов Виктор Николаевич, к.ф.-м.н., доцент, ст. науч. сотр.;

Разжувалов Александр Николаевич, к.ф.-м.н., доцент, науч. сотр.