ПРОЦЕДУРА ЭКСТРАКЦИИ ПАРАМЕТРОВ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙСОВ, МОДЕЛИРУЕМЫХ ПОТЕНЦИАЛОМ КРОНИГА-ПЕННИ, ОСНОВАННАЯ НА АНАЛИЗЕ ДАННЫХ РАССЕЯНИЯ

А.Е. Широков, А.А. Горбацевич

МИЭТ (Московский Государственный Институт Электронной техники),

124498, г. Москва, Зеленоград, проезд 4806, д.5

В последнее время в связи с активным применением гетероструктур в разных отраслях науки и техники особенно актуальна проблема правильного их расчета. Расчет электронного транспорта в гетероструктурах (ГС) основан на методе эффективной массы, или методе огибающей (МО). В этом методе потенциал, фигурирующий в уравнении Шредингера , состоит из двух частей. Первая часть отлична от нуля в случае неоднородных ГС и является решением уравнения Пуассона. Вторая часть кусочно – постоянна и соответствует скачкообразному изменению свойств материалов, образующих ГС. Величина соответствующего скачка определяется свойствами атомов, непосредственно примыкающих к гетероинтерфейсу (ГИ) и рассчитывается относительно просто без особых вычислительных затрат из “первых принципов”. Однако сам электронный транспорт для достаточно протяженных гетероструктур рассчитать из “первых принципов” довольно проблематично, поэтому для этого применяют МО. При этом особо важную роль играет точность расчета, которая зависит от граничных условий (ГУ) для огибающей волновой функции. Для расчета ГС часто применяют ГУ, зависящие от энергии, что идеологически неверно, поскольку при этом теряется самосопряженность задачи рассеяния. При этом кроме ГУ необходимо также задавать и само положение границы. Практически во всех встречающихся моделях положение границы задается независимо от ГУ из каких-либо “естественных” предположений, что является безусловным недостатком этих моделей.

В отличии от многих других моделей, модель, разработанная нами, позволяет не только получать ГУ для ГС, но и конструктивно находить положение границы для огибающей волновой функции на ГИ, а иногда выяснять более детально его структуру. Эта модель основана на анализе длинноволновых асимптотик амплитуд прохождения и отражения на интерфейсе. В нашей работе продемонстрировано, как реально работает вышеуказанная процедура для ГИ, моделируемого потенциалом Кронига – Пенни с удвоенным периодом [1], однако результаты легко могут быть обобщены и на случай произвольного псевдопотенциала.

Приведем краткое описание нашей модели экстракции ГУ. Наиболее общий вид ГУ для ОВФ таков [2-5]:

$$\begin{pmatrix} \Psi \\ \nabla\Psi \end{pmatrix}_{+} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi \\ \nabla\Psi \end{pmatrix}_{-} \qquad (1)$$

Здесь $\Psi_{\pm}$ - огибающая волновая функция соответственно справа и слева от ГИ, T_{ij}- матрица ГУ, связывающая огибающие по разные стороны от ГИ. При этом условие сохранения потока на ГИ требует, чтобы $\mathrm{Det}\,\hat{T} = \frac{m_2}{m_1}$, $m_{1,2}$ – эффективные массы материалов слева и справа от ГИ. Недиагональные элементы в матрице ГУ для огибающей связаны с тем, что мы сшиваем на границе не точные в.ф., а их длинноволновые асимптотики. В случае, когда недиагональные элементы матрицы ГУ равны нулю, то тогда $T_{11} = 1, T_{22} = \frac{m_2}{m_1}$. Такие ГУ можно получить интегрированием уравнения Шредингера для огибающей волновой функции по бесконечно малой области вблизи ГИ. Недиагональный элемент T_{21} матрицы ГУ может быть связан с наличием на гетерогранице некоторого δ - функционного потенциала, элемент же T_{12} уже не имеет столь ясной трактовки. Надо сказать, что недиагональные элементы матрицы ГУ очень часто дают малый вклад во все расчеты, поэтому для многих ГС пользуются диагональными ГУ, получая при этом удовлетворительное совпадение с экспериментом. Такие ГУ носят название "стандартных граничных условий" (СГУ). Вместо матрицы $\hat{T}$ удобно ввести матрицу с единичным детерминантом [6,7]:

$$\hat{T} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\,\hat{t} \tag{2}$$

В рамках МЭМ данные рассеяния - амплитуды коэффициента отражения r и коэффициента прохождения t задаются выражениями для огибающих слева и справа от гетероперехода (при условии, что волна падает слева):

$$\Psi = \begin{cases} e^{ik_1(x-\delta_1)} + re^{-ik_1(x-\delta_1)}, & x < x_0. \\ te^{-ik_2(x-\delta_2)}, & x > x_0. \end{cases}$$

Здесь δ - фазовые сдвиги слева и справа от гетероперехода. Для данных рассеяния r и t, используя ГУ (1), получаем следующие соотношения:

$$r = e^{2ik_1(x_0-\delta_1)}\frac{k_1t_{22} - k_2t_{11} - it_{21} - ik_1k_2t_{12}}{k_1t_{22} + k_2t_{11} + it_{21} - ik_1k_2t_{12}},$$

$$t = e^{i[k_1(x_0-\delta_1)-k_2(x_0-\delta_2)]}\frac{m_2}{m_1}\frac{2k_1}{k_1T_{22} + k_2T_{11} + iT_{21} - ik_1k_2T_{12}}.$$

Аналогично можно получить соответствующие выражения для рассеяния справа налево. Существенно, что в данные рассеяния входит положение границы x_0. Далее проводится разложение выражений для r и t и соответствующие разложения сравниваются с разложениями r и t, полученных для той или иной микроскопической модели. Сравнение соответствующих коэффициентов в получающихся разложениях позволяет получить не только параметры ГУ, но и положение границы, а также величины объемных фаз огибающей волновой функции $\delta_{1,2}$.

В качестве примера применения вышеуказанной процедуры мы рассмотрели модель Кронига-Пенни с удвоенным периодом. Потенциал решетки в этой модели имеет следующий вид:

$$U(x) = -\alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\delta \left[x - \left(n + \frac{1}{2} \right) a \right] + U_n \right), U_n = (-1)^n \Delta \qquad (3)$$

При этом предполагается, что период решетки равен $2a$. ГИ моделируется данной моделью с разными параметрами потенциала. Эта модель переходит в обычную модель Кронига-Пенни в случае ?=0. В результате анализа удалось получить выражения для элементов матрицы ГУ, а также для объемных фаз материалов и для положения границы. Эти результаты дополняют результаты работы [7,8], в которой рассматривались различные модели сильной связи.

Кроме того, наша модель позволяет дать объяснение довольно необычному поведению ОВФ на границе, когда производная ОВФ на границе обращается в ноль, а сама она не равна нулю [9]. В работе [9] рассматривалась квантовая яма с бесконечно высокими стенками в приближении МЭМ в модели Кронига – Пенни (атомный потенциал в яме выбирался в виде δ - гребенки). При этом для энергии электронов вблизи минимумов энергетических зон получается стандартный спектр для ямы, который соответствует обращению в нуль огибающей волновой функции на границах ямы, но сама огибающая в некоторых специальных случаях в ноль не обращается, а обращается в ноль ее производная. Авторы не смогли дать вразумительное объяснение этому факту. Наша же модель явно позволяет связать это странное поведение огибающей с видом ГУ.

На основании вышесказанного можно утверждать, что предложенная нами модель экстракции ГУ является в достаточной степени универсальной, включая в себя достаточно простой, и, в то же время, конструктивный, алгоритм получения как самих ГУ, так и положения границы ГИ.

Литература

1. А.Е. Широков. Тезисы 12-й Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов "Микроэлектроника и информатика - 2005" Москва, МИЭТ, 19-21 апреля 2005, С. 51.
2. T. Ando, S. Mori. Surf. Sci. Vol. 113, P. 124 (1982).
3. J. P. Guypers and W. van Haeringen, Phys. Rev. B47, 10, 310 (1993).
4. J. P. Guypers and W. van Haeringen, Phys. Rev. B48, 11, 469 (1993).
5. T. Ando, H. Akera, Phys. Rev. B40, 11619 (1989).
6. I. V. Tokatly, A.G. Tsibizov, A.A. Gorbatsevich. Phys. Rev. B65, 16, 165328 (2002).
7. A. A.Gorbatsevich Proceed. of 11 th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" St. Petersburg, Russia, June 23-28, P. 81-82 (2003).
8. А. А. Горбацевич, О. В. Жабицкий. Известия вузов: Электроника, №2, 3 (2005).
9. F. B. Pedersen, P. S. Hemmer, Phys. Rev. B50, 7724 (1994).