

8. Maki K *Phys. Rev. B* **44** 2861 (1991)
9. Stephen M J *Phys. Rev. B* **45** 5481 (1992)
10. Brandt U, Pesch W, Tewordt L Z. *Phys.* **201** 209 (1967)
11. Dukan S, Tesanovic Z *Phys. Rev. Lett.* **74** 2311 (1995)
12. Miller P, Györfy B L J. *Phys.: Kondens. Mater* **7** 5579 (1995)
13. Miyake K *Physica B* **186–188** 115 (1993)
14. Rasolt M, Tesanovich Z *Rev. Mod. Phys.* **64** 709 (1992)
15. Yakovenko V M *Phys. Rev. B* **47** 8851 (1993)
16. Вавилов М Г, Минеев В П *ЖЭТФ* (в печати)

PACS numbers: 71.25.Cx, 73.20.Dx, 73.40.Kp

Динамика электрона с пространственно-зависящей массой и метод эффективной массы для полупроводниковых гетероструктур

В.А. Волков, Э.Е. Тахтамиров

1. Введение

Для квантовомеханического описания динамики электронов кристалла в плавных внешних полях широко используется метод (или приближение) эффективной массы (ЭМ). Применительно к однородным полупроводникам этот метод был разработан 40 лет назад Коном и Латтинжером [1, 2]. Математическим фундаментом подхода Кона–Латтинжера является метод огибающих функций (ОФ) [1], которые медленно меняются на длинах порядка постоянной решетки a . С возникновением и развитием физики полупроводниковых гетероструктур и их использованием в приборах (здесь достаточно указать на многочисленные применения многослойных гетероструктур с квантовыми ямами) встал вопрос об обобщении метода ЭМ на случай пространственно-зависящей ЭМ $m(\mathbf{r})$. За 30 лет предложено много различных формулировок. Среди ряда возникших при этом проблем отметим две очевидные. Первая: неоднозначность оператора кинетической энергии, обусловленная некоммутативностью оператора импульса и функции $m(\mathbf{r})$. *A priori* от этого оператора можно требовать лишь эрмитовости; это является довольно слабым ограничением на его возможную форму, от которой могут существенно зависеть и получаемые решения уравнения ЭМ [3]. Вторая проблема: эффективный потенциал вблизи гетерограницы очень часто не является плавной функцией на масштабах порядка a . Сомнению подвергается тогда сама корректность применения дифференциальных уравнений в рамках метода ОФ.

Ограничимся рассмотрением гетероструктур, состоящих из родственных материалов, когда разрывы зон малы по сравнению с характерными ширинами запрещенных зон; это, как правило, означает, что слабо отличаются и параметры ЭМ. Рассмотрим первую проблему, которая возникает уже и для гетеропереходов (ГП) с плавным на масштабах a изменением химического состава. Выберем за потенциал нулевого приближения потенциал кристаллической решетки (мысленно продолженной на все пространство) одного из материалов структуры, а отличие потенциалов решеток остальных полупроводников от базисного будем считать возмущением. Следуя подходу Кона и Латтинжера и получая

многозонную $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ систему уравнений (см., например, [4]), можно попытаться разрешить проблему о правильном порядке некоммутирующих операторов в операторе кинетической энергии для "однозонных" уравнений (одно уравнение, справедливое вблизи дна зоны проводимости, или система уравнений вблизи потолка валентной зоны).

Само сведение многозонной системы уравнений к однозонному уравнению достигается исключением из многозонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ системы малых ОФ в пользу больших посредством некоей процедуры. Здесь уместно сделать небольшое отступление и воспользоваться формальной аналогией между релятивистским уравнением Дирака и многозонной системой $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ уравнений на ОФ [5], которая проще всего прослеживается в двухзонном приближении (зона проводимости и валентная). В релятивистской теории есть два подхода к получению уравнения для "мелких" состояний электрона. Первый подход заключается в выражении малой позитронной компоненты волновой функции через электронную и подстановке ее в уравнение для электронной компоненты. При этом можно иметь дело либо с точным уравнением, которое не является уравнением на собственные значения ([6], гл. XX, § 28), либо приближенным уравнением, за эрмитовостью которого нужно следить отдельно [7]. Другой подход — преобразование типа Фолди–Вотхизена, приближенное унитарное преобразование уравнения Дирака ([6], гл. XX, § 33). В нашем случае первый подход сравнительно просто реализуется только в двухзонном приближении (см., например, [8]); при учете удаленных зон [9, 10] возникает ряд сложностей. Этот момент является существенным при описании дырочных состояний в структурах на основе III–V полупроводников, поскольку конечность ЭМ тяжелых дырок достигается за рамками двухзонной модели. Будем следовать поэтому второму подходу — унитарному преобразованию, исключающему малые ОФ ([11], § 15). Поскольку мы рассматриваем гетероструктуры, состоящие из родственных материалов, канонический метод Кона–Латтинжера с пространственно-независящей ЭМ будет играть роль первого приближения. Учет пространственной зависимости ЭМ приведет к необходимости рассмотреть поправки к канонической теории, причем следует учитывать все поправки одного порядка малости, не допуская превышения точности. Обратимся к релятивистской аналогии с гипотетическим уравнением Дирака, содержащим неоднородную щель $2c^2m(\mathbf{r})$, где c есть скорость света в вакууме. Обычное однозонное уравнение ЭМ является аналогом нерелятивистского уравнения Шрёдингера. Существенно, однако, что ЭМ в двухзонном приближении пропорциональна локальной ширине запрещенной зоны $E_g(\mathbf{r})$, а относительное изменение ЭМ $\delta m/m \simeq \delta E_g/E_g$. В силу того, что поправка к кинетической энергии, описывающая пространственную зависимость ЭМ, имела бы "релятивистский" характер ($\delta m/m \propto 1/c^2$), искомые уравнения для ГП будут аналогичны уравнению Шрёдингера со всеми релятивистскими поправками, пропорциональными $1/c^2$ как обычными (вклад непараболичности, пропорциональный \mathbf{p}^4 , где \mathbf{p} — оператор импульса, вклад спин-орбитального взаимодействия и член Дарвина), так и новой псевдорелятивистской поправкой, описывающей $\delta m(\mathbf{r})$.

Обширная, хотя и далеко не полная библиография, посвященная попыткам получения уравнений ЭМ с

переменными в пространстве зонными параметрами, содержится в [10]. Некоторые из таких публикаций обсуждались в [12], где с помощью унитарного преобразования многозонная $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ система уравнений приводилась к приближенному однозонному уравнению, описывающему состояния зоны проводимости вблизи Γ -точки в (001) гетероструктурах. В [12] было указано на основной недостаток прежних работ — учет не всех членов одного порядка малости. Здесь нельзя не упомянуть, что для однородных полупроводников уравнение ЭМ, аналогичное уравнению Шрёдингера с первыми релятивистскими поправками, было обсуждено еще в [11] (§ 27).

Вторая трудность, с которой сталкивается метод ОФ, — неплавность реальных ГП, когда переход от одного материала к другому происходит на масштабах порядка a . В этом случае, во-первых, многозонная $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ система Лейблера [4] требует уточнений, а во-вторых, усложняется проблема обратного фурье-преобразования в ограниченном первой зоной Бриллюэна \mathbf{k} -пространстве [1]. Эти преобразования приводят к набору громоздких и неудобных интегро-дифференциальных уравнений. Сведение их к дифференциальным требует определенной жертвы в виде ограничения точности метода. Должна быть оценена и ошибка, допускаемая при этом. Оценка этой ошибки либо даст нам уверенность в отсутствии превышения точности, либо бросит вызов справедливости приближения ЭМ (отметим, что в литературе, включая работы [13] и [10], не была проведена такого рода оценка).

Ниже обсуждается только один из подходов к формулировке приближения ЭМ для гетероструктур, а именно, вывод эффективного гамильтониана, который определен во всем координатном пространстве. При этом используется малость изменения $E_g(\mathbf{r})$. Существует и другой подход, применимый лишь к структурам с математически резкими ГП — введение граничных условий (ГУ) для ОФ на границах раздела полупроводников. Тогда возникает проблема определения пространства функций, в котором определен эффективный гамильтониан [12]. (Исключение составляет ГП между двумя полупроводниками с сильно отличными ширинами запрещенной зоны или контакт полупроводник–диэлектрик. В этом пределе можно ограничиться выводом граничных условий только для ОФ, описывающих полупроводник с малой щелью [14–16].) Если однозонные уравнения учитывают разницу в параметрах ЭМ, то они должны в общем случае включать и все обсужденные выше псевдорелятивистские поправки, поэтому очевидными становятся и недостатки в подходах, использовавшихся, например, в [17, 18], где выводились ГУ для ОФ, являющихся решениями канонического уравнения ЭМ.

Таким образом, можно сформулировать следующие этапы построения корректного приближения ЭМ для гетероструктур: а) получение правильной многозонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ системы уравнений на ОФ; б) сведение ее к однозонным уравнениям при помощи унитарного преобразования в \mathbf{k} -пространстве; в) переход в \mathbf{r} -представление, преобразование полученного уравнения к дифференциальной форме и оценка точности такого преобразования. Следуя этой схеме, в разделе 2 реализован этап а). Уравнения включают вклады, связанные с неплавностью ГП на масштабах порядка a , которые рассматриваются в рамках подхода, использовавшегося в [11] для

описания короткодействующего потенциала. Самое существенное ограничение на точность дифференциальных уравнений в методе ОФ для резких ГП следует из процедуры обратного фурье-преобразования в конечном \mathbf{k} -пространстве (раздел 3). В разделе 4.1 обсуждена применимость однозонных уравнений, а эффекты, связанные с неплавностью ГП, рассмотрены в разделе 4.2 (зона проводимости) и в разделе 4.3 (для валентной зоны).

2. Многозонная $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ система уравнений

Рассмотрим структуру с одним ГП, которая образована из родственных согласованных по постоянной решетки полупроводников со структурой цинковой обманки. Для простоты мы ограничимся следующей моделью кристаллического потенциала структуры:

$$U = U_1 + G[U_2 - U_1] \equiv U_1 + G\delta U,$$

а $U_1 \equiv U_1(\mathbf{r})$ и $U_2 \equiv U_2(\mathbf{r})$ являются периодическими (с одинаковым периодом) продолженными на всю структуру потенциалами левого и правого материалов соответственно, ось z направлена перпендикулярно плоскости ГП, $G \equiv G(z)$ — форм-фактор ГП ($G(z < -d) = 0$, $G(z > d) = 1$; ширина переходной области ГП есть $2d$).

В качестве базиса разложения полной волновой функции $\Psi(\mathbf{r})$ используем полный ортонормированный набор функций Кона–Латтинжера $u_{n0} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, где $u_{n0} \equiv u_{n0}(\mathbf{r})$ — функция Блоха для края ϵ_{n0} n -й зоны левого кристалла в Γ -точке:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n'} \int d\mathbf{k}' \mathcal{F}_{n'}(\mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) u_{n'0}.$$

Суммирование проводится по всем зонам, а интегрирование, если не оговорено обратное, — по первой зоне Бриллюэна; $\mathcal{F}_n(\mathbf{k})$ является ОФ для n -й зоны в \mathbf{k} -представлении. Следуя стандартной процедуре [1], можно получить $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ систему уравнений (релятивистские вклады будут учтены ниже):

$$\left(\epsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) \mathcal{F}_n(\mathbf{k}) + \sum_{n'} \frac{\hbar \mathbf{p}_{nn'} \cdot \mathbf{k}}{m_0} \mathcal{F}_{n'}(\mathbf{k}) + \sum_{n'} \int d\mathbf{k}' \mathcal{M}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \mathcal{F}_{n'}(\mathbf{k}') = \epsilon \mathcal{F}_n(\mathbf{k}); \quad (1)$$

$$\mathcal{M}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}) \times \left[\mathcal{G}(k_z - k'_z) \delta U_{nn'} + \sum_{j \neq 0} C_j^{nn'} \mathcal{G}(k_z - k'_z + K_j) \right]. \quad (2)$$

Здесь m_0 — масса свободного электрона, $\mathbf{p}_{nn'} = \langle n | \mathbf{p} | n' \rangle$, $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$, $C_j^{nn'} = \langle n | \delta U \exp(iK_j z) | n' \rangle$, $\delta U_{nn'} = C_0^{nn'}$, $K_j = (4\pi/a)j$, где $j = \pm 1, \pm 2, \dots$, \mathcal{G} — фурье-преобразование функции G ; выражение (2) справедливо для (001) гетероструктуры при $|k_x| + |k_y| < \pi/a$, где $Ox \parallel [100]$ и $Oy \parallel [010]$.

Если $G(z)$ является достаточно плавной функцией ($a \ll 2d$), мы можем пренебречь вторым слагаемым в квадратных скобках выражения (2) и получить известный набор уравнений на ОФ [4]. В случае же резкого ГП можно действовать в духе метода, использовавшегося в

[11] для описания короткодействующего потенциала:

$$\sum_{j \neq 0} C_j^{nn'} \mathcal{G}(k_z - k'_z + K_j) = \sum_{l=0,1,\dots} (k_z - k'_z)^l D_{lmm'} . \quad (3)$$

Константы $D_{lmm'}$ определяются свойствами функции $G' \equiv dG/dz$ следующим образом:

$$\begin{aligned} D_{0mm'} &= \sum_{j \neq 0} C_j^{nn'} \frac{1}{2\pi i K_j} \int_{-d}^d G'(z) \exp(-iK_j z) dz , \\ D_{1mm'} &= \sum_{j \neq 0} C_j^{nn'} \frac{1}{2\pi i K_j} \int_{-d}^d G'(z) \exp(-iK_j z) \times \\ &\quad \times \left(-\frac{1}{K_j} - iz \right) dz , \dots \end{aligned}$$

Этот подход принципиально применим даже для математически резких ГП. Таким образом, уравнения (1) с учетом (2) и (3) определяют многозонную $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ систему уравнений для структуры с одним ГП. Обобщение на случай многих ГП элементарно. При этом удобно выбрать координаты гетерограниц так, чтобы между ними укладывалось целое число $a/2$, что всегда возможно для (001) гетероструктур. Тогда фазовый множитель при каждом из разложений типа (3) будет равен единице.

Рассмотрим поправки, связанные с резкостью ГП. Члены, пропорциональные $D_{0mm'}, D_{1mm'}, \dots$, могут дать поправки, по порядку величины не большие, чем $a\bar{k}_z, (a\bar{k}_z)^2, \dots$ соответственно. Здесь \bar{k}_z — обратная характерная длина изменения ОФ. Нашей целью является получение однозонных уравнений с пространственно-зависящими параметрами ЭМ, что достигается при учете поправок порядка $(\lambda\bar{k}_z)^2$ к каноническому приближению. Здесь $\lambda = (2mE_g)^{-1/2}$ (для GaAs $\lambda \approx 6 \text{ \AA}$). Поэтому в (3) достаточно ограничиться членами $l = 0$ и $l = 1$.

Включим теперь релятивистские эффекты. Будем рассматривать спин-орбитальное взаимодействие по теории возмущений и положим, что его характерная величина порядка характерного разрыва зон. Мы рассмотрим здесь лишь спин-орбитальное взаимодействие, поскольку остальные релятивистские вклады лишь повлияют на значения констант, которые мы получим. В левую часть системы уравнений (1) войдут следующие поправки:

$$\begin{aligned} &\sum_{n'} \frac{\hbar \langle n | [\mathbf{V} U_1 \times \mathbf{p}] | n' \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma}}{4m_0^2 c^2} \mathcal{F}_{n'}(\mathbf{k}) + \\ &+ \sum_{n'} \frac{\hbar \langle n | [\mathbf{V} \delta U \times \mathbf{p}] | n' \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma}}{4m_0^2 c^2} \int \mathcal{G}(k_z - k'_z) \mathcal{F}_{n'}(k'_z, \mathbf{k}_{\parallel}) dk'_z + \\ &+ \sum_{n'} \int (\mathbf{S}_{0mm'} + (k_z - k'_z) \mathbf{S}_{1mm'}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathcal{F}_{n'}(k'_z, \mathbf{k}_{\parallel}) dk'_z . \end{aligned}$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы спина $1/2$, а векторы $\mathbf{S}_{0mm'}$ и $\mathbf{S}_{1mm'}$ определены следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{0mm'} &= \int_{-d}^d G'(z) \exp(-iK_j z) dz \times \\ &\times \sum_{j \neq 0} \frac{\hbar \langle n | [\mathbf{V}(\exp(iK_j z) \delta U) \times \mathbf{p}] | n' \rangle}{8\pi i K_j m_0^2 c^2} ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{1mm'} &= - \sum_{j \neq 0} \frac{\hbar \langle n | [\mathbf{V}(\exp(iK_j z) \delta U) \times \mathbf{p}] | n' \rangle}{8\pi i K_j m_0^2 c^2} \times \\ &\times \int_{-d}^d G'(z) \exp(-iK_j z) z dz - \\ &- \sum_{j \neq 0} \frac{\hbar \langle n | \exp(iK_j z) [\mathbf{V} \delta U \times \mathbf{p}] | n' \rangle}{8\pi i K_j^2 m_0^2 c^2} \times \\ &\times \int_{-d}^d G'(z) \exp(-iK_j z) dz . \end{aligned}$$

Здесь \mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси z , $\mathbf{n}G'(z) \equiv \mathbf{V}G(z)$. Мы не рассматриваем линейные по \mathbf{k} вклады спин-орбитального взаимодействия. Они либо дадут поправки порядка $(\lambda\bar{k}_z)^3$ (подобно вкладу, ответственному за снятие спинового вырождения в зоне проводимости объемного полупроводника), которыми мы пренебрегаем, либо перенормируют значения некоторых параметров.

3. Проблема обратного фурье-преобразования в пространстве квазимпульсов

Обсудим еще одну проблему, возникающую в методе ОФ и связанную с рассмотрением ограниченного первой зоной Бриллюэна (ЗБ) обратного пространства. Рассмотрим следующее уравнение на ОФ $f(k_z)$ в \mathbf{k} -представлении:

$$\int H(k_z - k'_z) f(k'_z) dk'_z = \epsilon f(k_z) , \quad (4)$$

причем k_z и k'_z ограничены ЗБ. В \mathbf{r} -представлении (4) преобразуется к интегро-дифференциальному уравнению. Проблема состоит в точности, с которой можно получить дифференциальное уравнение в \mathbf{r} -пространстве. Рассмотрим уравнение, подобное (4), но в котором k_z и k'_z принадлежат всему обратному пространству:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H(k_z - k'_z) g(k'_z) dk'_z = \epsilon g(k_z) . \quad (5)$$

Уравнение (5) в отличие от (4) сводится к дифференциальному уравнению в \mathbf{r} -представлении. Для того чтобы уравнения (4) и (5) были приблизительно эквивалентны, необходимо, чтобы функция $g(k_z)$ была малой при $k_z \notin \text{ЗБ}$. В случае плавных возмущений такая малость обеспечивается экспоненциально убывающей ОФ в \mathbf{k} -пространстве, а в случае резких возмущений ОФ будет убывать лишь степенным образом.

Для ОФ с одним разрывом $g(k_z) \propto (\delta\bar{g}/\bar{g})(k_z)^{-1}$ при больших k_z , когда затухнет экспоненциальный вклад, связанный с эффектами плавных полей, здесь $(\delta\bar{g}/\bar{g})$ — характерный относительный разрыв функции в \mathbf{r} -представлении. Если постулировать теперь стандартные уравнения ЭМ [1, 2], то вторая производная ОФ будет разрывна с характерным относительным разрывом порядка единицы, а ошибка от использования дифференциальных уравнений будет порядка $(\bar{k}_z/K)^3$, где $K = 2\pi/a$.

Для квантовой ямы ширины L можно рассмотреть два случая: $\bar{k}_z L \gtrsim 1$ и $\bar{k}_z L \ll 1$. В первом случае ошибка такого же порядка, как и для отдельного ГП, а во втором случае она порядка $(\bar{k}_z L)^{-1} (\bar{k}_z/K)^3$. В последнем случае мы приходим к приближению, когда потенциал кван-

товой ямы можно заменить на дельта-функцию с ошибкой порядка $(\bar{k}_z/K)^2$. Мы используем эти результаты в разделе 4.

4. Однозонные уравнения

4.1. Применимость однозонных уравнений

В \mathbf{k} -пространстве вблизи Γ -точки существует область A_1 , в которой для описания взаимодействия состояний выделенных (близких) зон с состояниями остальных зон можно пользоваться рядом теории возмущений, сходящимся при $k_z < 1/(2\lambda)$ (это следует из двухзонного приближения). Существует также область A_2 , где взаимодействие с удаленными зонами не описывается этим рядом. В нашем случае резких ГП ОФ в \mathbf{k} -представлении убывают степенным образом, поэтому мы должны правильно описать и область A_2 . Однако можно показать, что если отношение характерного разрыва зон к энергетическому зазору между интересующими нас состояниями в области A_1 и состояниями в области A_2 является малым параметром $r \ll 1$, то ошибка от пренебрежения областью A_2 будет меньше или порядка $r(\lambda k_z)^2$.

Ниже мы получим уравнение ЭМ для зоны проводимости, опуская детали унитарного преобразования в \mathbf{k} -представлении и сразу переходя в \mathbf{r} -представление. Формально конечное уравнение будет представлять собой дифференциальное уравнение четвертого порядка, причем удовлетворяющая ему ОФ будет иметь разрывную вторую производную с характерным разрывом порядка самой второй производной (именно этим будет определяться ошибка при переходе к дифференциальному уравнению). Это означает, что для широкой квантовой ямы ошибка полученного уравнения ЭМ будет порядка $(\bar{k}_z \lambda)^3$. В случае же узкой квантовой ямы ($L < \lambda$) уравнение ЭМ должно включать лишь первые поправки, связанные с эффектами резкости ГП, а рассмотрение остальных поправок, в том числе приводящих к пространственной зависимости параметров ЭМ, будет являться превышением точности.

4.2. Зона проводимости

Для плавных ГП однозонное уравнение на ОФ для c -зоны было получено в [12]. В \mathbf{r} -представлении оно имеет вид

$$\begin{aligned} \epsilon_{c0} F_c(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} m^2(z) \mathbf{p} m^{\beta}(z) \mathbf{p} m^{\alpha}(z) F_c(\mathbf{r}) + \Gamma(z) \Delta U_c F_c(\mathbf{r}) + \\ + \alpha_0 \mathbf{p}^4 F_c(\mathbf{r}) + \beta_0 (\mathbf{p}_{\parallel}^2 p_z^2 + p_x^2 p_y^2) F_c(\mathbf{r}) + \\ + \eta [\mathbf{p} \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \Gamma'(z) F_c(\mathbf{r}) = \epsilon F_c(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (6)$$

Разрыв зоны проводимости ΔU_c , модифицированный форм-фактор $\Gamma(z)$ и ЭМ $m(z)$ определяются выражениями

$$\Gamma(z) \Delta U_c = G(z) \delta U_{cc} + \sum_n' \frac{|\delta U_{cn}|^2}{\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0}} G^2(z),$$

$$m(z) = m_1 [1 + m_1 (\mu_2 - \mu_1) \Gamma(z)]^{-1},$$

$$\alpha = \frac{\mu_1}{2(\mu_2 - \mu_1)}, \quad 2\alpha + \beta = -1.$$

В уравнении (6) α_0 и β_0 — параметры непараболичности объемного спектра, а

$$\mu_1 = \sum_n' \frac{2|\langle c|p_x|n\rangle|^2 \delta U_{cc}}{m_0^2(\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})^2} - \sum_{n,l}' \frac{4\langle c|p_x|n\rangle \langle n|p_x|l\rangle \delta U_{lc}}{m_0^2(\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})(\epsilon_{c0} - \epsilon_{l0})},$$

$$\mu_2 = \sum_{n,l}' \frac{2\langle c|p_x|n\rangle \delta U_{nl} \langle l|p_x|c\rangle}{m_0^2(\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})(\epsilon_{c0} - \epsilon_{l0})},$$

$$\eta = \sum_{n,l}' \frac{\hbar \langle c|p_z|n\rangle \langle n|[\nabla \delta U \times \mathbf{p}]_x|l\rangle \langle l|p_y|c\rangle}{4im_0^4 c^2 (\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})(\epsilon_{c0} - \epsilon_{l0})}.$$

Модифицированная ОФ $F_c(\mathbf{r})$ связана с полной волновой функцией $\Psi(\mathbf{r})$ громоздким выражением (см. [12]).

Для включения в уравнение (6) поправок, связанных с неплавностью ГП, следует учесть, что вклады, определяемые членами $D_{0nm'}$, $D_{1nm'}$, $S_{0nm'}$ и $S_{1nm'}$, должны рассматриваться в первом порядке теории возмущений, а вклады от $D_{0nm'}$ и $S_{0nm'}$ — еще и во втором порядке совместно с членами $\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nm'}/m_0$. В результате в гамильтониане уравнения (6) появится дополнительное слагаемое \hat{H}_{abr} :

$$\hat{H}_{abr} = D_{0cc} \delta(z) + \rho \delta'(z) + \tilde{\eta} [\mathbf{p} \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \delta(z). \quad (7)$$

Представим функцию $G'(z)$ в виде суммы симметричной ($G'_s(z)$) и антисимметричной ($G'_a(z)$) частей. Тогда

$$\begin{aligned} D_{0cc} &= - \sum_{j \neq 0} \frac{\langle c|\delta U \cos(K_j z)|c\rangle}{2\pi K_j} \int_{-d}^d G'_a(z) \sin(K_j z) dz, \\ \rho &= \sum_{j \neq 0, n} \frac{\hbar \langle c|p_z|n\rangle \langle n|\delta U \sin(K_j z)|c\rangle}{2\pi(-i)K_j m_0(\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})} \int_{-d}^d G'_s(z) \cos(K_j z) dz + \\ &+ \sum_{j \neq 0} \frac{\langle c|\delta U \cos(K_j z)|c\rangle}{2\pi K_j} \times \\ &\times \int_{-d}^d G'_s(z) \left(\frac{\cos(K_j z)}{K_j} + z \sin(K_j z) \right) dz, \\ \tilde{\eta} &= \sum_{j \neq 0, n} \frac{\hbar \langle c|[\nabla(\sin(K_j z) \delta U) \times \mathbf{p}]_x|n\rangle \langle n|p_y|c\rangle}{4\pi K_j m_0^3 c^2 (\epsilon_{c0} - \epsilon_{n0})} \times \\ &\times \int_{-d}^d G'_s(z) \cos(K_j z) dz. \end{aligned}$$

Преобразуем уравнение (6) с учетом вклада (7) к более компактному виду, справедливому для резких ($2d\bar{k}_z \ll 1$) ГП. С точностью до членов порядка $\max\{d\bar{k}_z(\lambda\bar{k}_z)^2, (d\bar{k}_z)^3\}$ (см. [12]) можно получить окончательное уравнение ЭМ для резкого ГП:

$$\begin{aligned} \epsilon_{c0} F_c(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} m^2(z) \mathbf{p} m^{\beta}(z) \mathbf{p} m^{\alpha}(z) F_c(\mathbf{r}) + \Theta(z) \Delta U_c F_c(\mathbf{r}) + \\ + \alpha_0 \mathbf{p}^4 F_c(\mathbf{r}) + \beta_0 (\mathbf{p}_{\parallel}^2 p_z^2 + p_x^2 p_y^2) F_c(\mathbf{r}) + \\ + d_1 [\mathbf{p} \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \delta(z) F_c(\mathbf{r}) + d_2 \delta(z) F_c(\mathbf{r}) = \epsilon F_c(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь величины $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$, d_1 и d_2 учитывают конечность ширины ГП, $2\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} = -1$, $d_1 = \eta + \tilde{\eta}$,

$$d_2 = \Delta U_c \left(\int_{-d}^d \Gamma(z) dz - d \right) + D_{0cc},$$

$\Theta(z)$ — функция Хэвисайда,

$$\tilde{\alpha} = \frac{4\rho + \mu_1 + 2\Delta U_c \left[d^2 - \int_{-d}^d 2\Gamma(z)z dz \right]}{2(\mu_2 - \mu_1 - 4\rho)}.$$

Обсудим гамильтониан уравнения (8). Первое и третье слагаемые являются потенциальной энергией электрона в c -зоне. Второе слагаемое — пространственно-зависимый оператор кинетической энергии, квадратичный по импульсу (в общем виде такая форма была предложена в [19]). Отметим, что параметр $\tilde{\alpha}$ не является универсальной константой, а зависит как от материалов ГП, так и от формы переходной области ГП. Четвертое и пятое слагаемые в гамильтониане уравнения (8) описывают поправки на слабую непараболичность и определяются только объемными параметрами. Шестое слагаемое описывает поверхностное спин-орбитальное взаимодействие (см., например, [20]), сила которого (d_1) зависит не только от материалов ГП, но и от формы переходной области. Возможность существования вклада, описываемого седьмым слагаемым, обсуждалась в [21]; видно, что этот вклад исчезает для математически резкого ГП.

В случае симметричной квантовой ямы с двумя эквивалентными ГП (с координатами $z = 0$ и $z = L$) гамильтониан для c -зоны имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}^{el} = & \epsilon_c(z) + \frac{1}{2} m^{\tilde{z}}(z) \mathbf{p} m^{\tilde{z}}(z) \mathbf{p} m^{\tilde{z}}(z) + \\ & + \alpha_0 \mathbf{p}^4 F_c(\mathbf{r}) + \beta_0 (\mathbf{p}_{\parallel}^2 p_z^2 + p_x^2 p_y^2) F_c(\mathbf{r}) + \\ & + d_1 [\mathbf{p} \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \{ \delta(z) - \delta(z-L) \} + d_2 \{ \delta(z) + \delta(z-L) \}, \end{aligned}$$

где $\epsilon_c(z)$ — профиль края зоны проводимости.

4.3. Валентная зона

Обсудим кратко проблему получения уравнения ЭМ для валентной зоны. Существуют две часто встречающиеся в литературе формы такого уравнения: "симметризованная" форма (см., например, [22]) и уравнение, полученное в [23]. Теперь, после вывода уравнения для зоны проводимости, мы можем указать и изменения, которые надо внести в метод ЭМ для валентной зоны для учета пространственной зависимости параметров ЭМ. Во-первых, такое уравнение должно включать и члены четвертой степени по оператору импульса (поправки на непараболичность), возникающие из-за взаимодействия состояний валентной зоны с состояниями остальных зон. Во-вторых, поскольку характерные параметры разрыва зон и спин-орбитального взаимодействия, как правило, одного порядка, то гамильтониан уравнения ЭМ должен иметь размерность 6×6 , а не 4×4 , т.е. взаимодействие зоны тяжелых дырок, зоны легких дырок и спин-отщепленной зоны должно рассматриваться "точно". А так как параметры Латтинжера отличаются от параметров ЭМ, использующихся в стандартном уравнении 6×6 (см. [2]), трех констант будет недостаточно при задании параметров ЭМ для валентной зоны. Вышеупомянутые две версии уравнения ЭМ для валентной зоны не удовлетворяют этим требованиям и могут привести к превышению точности.

Вывод уравнения, подобного полученному для зоны проводимости, является довольно громоздкой задачей. Рассмотрим здесь лишь эффект, слабый для объемных

материалов в плавных полях: существование в (001) III–V гетероструктурах смешивания тяжелых (hh) и легких (lh) дырок в центре $2D$ зоны Бриллюэна [24]. Покажем, что неплавность ГП приводит к появлению в гамильтониане для состояний валентной зоны операторов, обеспечивающих такое смешивание. Рассмотрим в первом порядке лишь члены, пропорциональные $D_{0\xi\xi'}$, здесь $\xi, \xi' = X, Y, Z$ — блоховские функции потолка валентной зоны, преобразующиеся по представлению Γ_{15} . Неисчезающие недиагональные матричные элементы имеют вид

$$D_{0XY} = D_{0YX} = \sum_{j \neq 0} \frac{\langle X | U \sin(K_j z) | Y \rangle}{2\pi K_j} \int_{-d}^d G'_s(z) \cos(K_j z) dz.$$

Выпишем элементы матричного гамильтониана для валентной зоны, описывающие $lh-hh$ смешивание:

$$\hat{H}_{h1,l2}^{\text{hole}} = \hat{H}_{h2,l1}^{\text{hole}} = i \frac{D_{0XY}}{\sqrt{3}} \delta(z),$$

где индексы $h1, h2, l1$ и $l2$ нумеруют состояния тяжелых и легких дырок (с учетом спина). Оценка константы перед δ -функцией была проведена с учетом экспериментальных данных для гетероструктур GaAs/AlAs в [24]: (100–300) мэВ Å. Видно, однако, что эта величина зависит от структуры интерфейсов, и сила смешивания тяжелых и легких дырок в центре $2D$ зоны Бриллюэна больше для резких ГП, чем для ГП с плавно меняющимся химическим составом. Для симметричной квантовой ямы можно получить

$$\hat{H}_{h1,l2}^{\text{hole}} = \hat{H}_{h2,l1}^{\text{hole}} = i \frac{D_{0XY}}{\sqrt{3}} \{ \delta(z) - \delta(z-L) \}$$

5. Заключение

Метод огибающих функций, разработанный Коном и Латтинжером для описания электронной структуры объемных полупроводников, был обобщен на случай гетероструктур на основе ненапряженных слоев родственных полупроводников с симметрией цинковой обманки. Для электронных состояний вблизи Γ -точки в (001) гетероструктурах выведено уравнение эффективной массы, учитывающее пространственную зависимость последней и возможную резкость гетерограниц. Кратко рассмотрена проблема получения эффективного гамильтониана для дырочных состояний в таких структурах. Показано, что неплавность гетеропереходов приводит к смешиванию состояний тяжелых и легких дырок даже в центре зоны Бриллюэна. Обсуждена проблема точности разбиваемого подхода.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 96-02-18811) и Федеральной программы "Физика твердотельных наноструктур" (проект 1-094/4).

Список литературы

1. Luttinger J M, Kohn W *Phys. Rev.* **97** 869 (1955)
2. Luttinger J M *Phys. Rev.* **102** 1030 (1956)
3. Brezini A, Sebbani M, Marouf S *Phys. Status Solidi B* **189** 389 (1995)
4. Leibler L *Phys. Rev. B* **12** 4443 (1975)
5. Келдыш Л В *ЖЭТФ* **45** 364 (1963)
6. Мессия А *Квантовая механика* Т. 2 (М.: Наука, 1979)
7. Берестецкий В Б, Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Квантовая электродинамика* (М.: Наука, 1972) § 33

8. Сурис Р А *ФТП* **20** 2008 (1986)
9. Burt M G *Phys. Rev. B* **50** 7518 (1994)
10. Foreman B A *Phys. Rev. B* **54** 1909 (1996)
11. Бир Г Л, Пикус Г Е *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М.: Наука, 1972)
12. Takhtamirov E E, Volkov V A *Semicond. Sci. Technol.* **12** 77 (1997)
13. Foreman B A *Phys. Rev. B* **52** 12241 (1995)
14. Волков В А, Пинскер Т Н *ЖЭТФ* **70** 2268 (1976)
15. Волков В А, Пинскер Т Н *ЖЭТФ* **72** 1087 (1977)
16. Волков В А, Пинскер Т Н *ФТТ* **23** 1756 (1980)
17. Ando T, Wakahara S, Akera H *Phys. Rev. B* **40** 11609 (1989)
18. Einevoll G T, Sham L J *Phys. Rev. B* **49** 10533 (1994)
19. Morrow R A, Brownstein K R *Phys. Rev. B* **30** 678 (1984)
20. Васько Ф Т *Письма в ЖЭТФ* **30** 574 (1979)
21. Zhu Q G, Kroemer H *Phys. Rev. B* **27** 3519 (1983)
22. Eppenga R, Schuurmans M F H, Colak S *Phys. Rev. B* **36** 1554 (1987)
23. Foreman B A *Phys. Rev. B* **48** 4964 (1993)
24. Ivchenko E L, Kaminski A Yu, Rössler U *Phys. Rev. B* **54** 5852 (1996)

PACS numbers: 04.40.Dg, **95.30.-k**, 97.60.Bw

Механизмы взрыва сверхновых: магниторотационная модель

Н.В. Арделян, Г.С. Бисноватый-Коган,
С.Г. Моисеенко

1. Введение

Сверхновые представляют собой последний этап в эволюции массивных звезд. Эволюция, сопровождающаяся ядерным горением и образованием все более тяжелых элементов с растущей энергией связи, заканчивается либо ядерным взрывом при образовании вырожденного углеродно-кислородного ядра с массой примерно 1,5 массы Солнца, либо потерей устойчивости и коллапсом ядра, состоящего из элементов группы железа. Коллапс заканчивается, когда в центре образуется устойчивая нейтронная звезда. При образовании нейтронной звезды выделяется огромная энергия, примерно 20 % энергии-массы покоя звезды, но почти вся она выделяется в виде слабо взаимодействующих и трудно регистрируемых нейтрино. Для объяснения взрыва сверхновой, которым сопровождается образование нейтронной звезды, необходимо использовать менее 0,1 % энергии нейтрино. Но использование даже столь малой части не всегда удается и получение взрыва встречается с большими трудностями. К настоящему времени, после 30 лет работы над этой проблемой, получен вывод о невозможности получения взрыва в простой сферически симметричной модели, впервые сделанный в [21].

Взрыв получается в двух вариантах. В одном предполагается, что развитие конвективной неустойчивости, приводящее к увеличению энергии улетающих нейтрино, приведет к взрыву. Эта модель чувствительна к входным физическим параметрам, способу учета конвекции и даже к численному методу. Получение взрыва в трехмерных расчетах не дает полной уверенности в связи с неизбежным накоплением числовых ошибок [12, 13, 15, 20].

Вторая модель использует преобразование энергии вращения нейтронной звезды с оболочкой в энергию разлета вещества с использованием магнитного поля как передаточного механизма. При расчетах этого варианта в различных приближениях получается ста-

бильное значение коэффициента преобразования энергии порядка нескольких процентов. Этого оказывается достаточным для объяснения взрыва сверхновой. Сначала поле усиливается дифференциальным вращением, а затем это усиленное поле приводит к преобразованию энергии вращения в энергию взрыва. После этого магнитное поле возвращается к своему исходному значению, а звезда становится вращающейся твердотельно и сравнительно медленно.

2. Основные уравнения

магниторотационной модели взрыва

Магниторотационная модель взрыва сверхновой предложена в работе [7], одномерные расчеты изложены в работах [11, 1]. Двумерные расчеты на основе неявной лагранжевой схемы с треугольной сеткой были начаты в работах [2, 3]. В последующих работах [4–6] расчеты велись на усовершенствованной сетке с перестройкой. В [5, 6] впервые был моделирован магниторотационный взрыв вращающегося облака и в настоящее время ведутся расчеты модели взрыва сверхновой с учетом реалистического уравнения состояния сверхплотного вещества нейтронной звезды и нейтринных потерь [8]. Магниторотационная модель взрыва исследовалась в работе [19], где для одномерных расчетов использовалась сферически симметричная модель, а также в работах [17, 23], где проводились двумерные расчеты на эйлеровой сетке, не позволяющей рассматривать большие перепады параметров, при наличии упрощающих предположений относительно структуры поля и при сильно завышенном его значении. Результаты этих работ, где получен эффективный взрыв, не позволяют, тем не менее, судить о его форме, временном масштабе и других характеристиках, относящихся к наблюдательным проявлениям. Отметим, что магниторотационный механизм был рассмотрен в работе [16] для объяснения поддержки свечения Крабовидной туманности за счет закручивания ее магнитного поля вращающейся нейтронной звездой.

Система уравнений магнитной газодинамики, описывающая магниторотационный взрыв сверхновой, имеет вид

$$\begin{aligned}
 \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{u}, & \frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \\
 \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= -\operatorname{grad} \left(p + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}}{8\pi} \right) + \frac{1}{4\pi} \operatorname{div}(\mathbf{B} \otimes \mathbf{B}) - \rho \operatorname{grad} \Phi, \\
 \rho \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{B}}{\rho} \right) &= \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}, \\
 \rho \frac{d\varepsilon}{dt} + p \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, & \eta = \frac{1}{\rho} = \frac{TR}{p}, & \varepsilon = \frac{TR}{\gamma - 1}, \\
 \Delta \Phi &= 4\pi G \rho.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Задача рассматривается в цилиндрической системе координат в предположении экваториальной (плоскость симметрии $z = 0$) и осевой симметрии ($\partial/\partial\varphi = 0$). Здесь $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$, $\mathbf{x} = (r, \varphi, z)$ — радиус-вектор частицы сплошной среды в цилиндрических координатах, \mathbf{u} — вектор скорости, ρ — плотность, p — давление, \mathbf{B} — вектор напряженности магнитного поля, Φ — гравитационный потенциал, ε — внутренняя энергия, G — гравитационная постоянная, R — газовая постоянная, γ — показатель адиабаты. Задача решается в ограниченной области, вне которой плотность равна нулю.