

ELEKTRONSKA STRUKTURA InAs/GaSb KVANTNE JAME: PRIMENA METODA KONAČNIH ELEMENATA I VIŠEZONSKIH 4×4 I 8×8 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ MODELA

D. Čerkez

VF Holding, Cvetna 4, 11080 Zemun

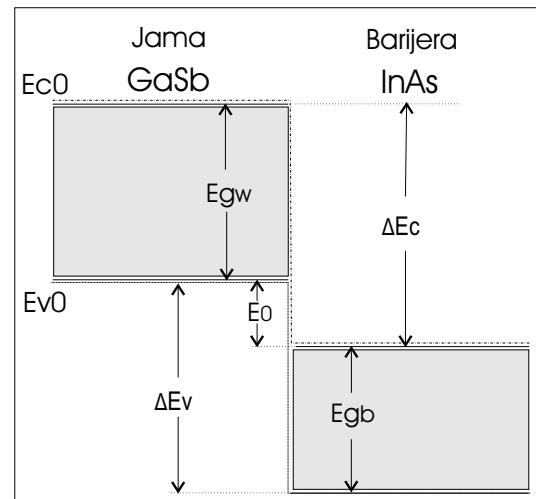
M. Tadić

Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet, p. fah 3554, 11120 Beograd

Sadržaj - Metod konačnih elemenata je primenjen na tri višezonska $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ hamiltonijana: aksijalno simetrični 4×4 Luttinger-Kohnov model i 8×8 Pidgeon-Brownov model u blok-dijagonalnoj aksijalno simetričnoj formi, i pun 8×8 hamiltonijan. Za bazisne funkcije su upotrebљeni pogodno odabrani polinomi proizvoljnog reda u okviru jake formulacije metoda konačnih elemenata. Ovi modeli su primenjeni na strukturu InAs/GaSb II tipa sa razlomljenim energijskim procepom, a poređenja radi razmotrena je i GaAs/AlGaAs kvantna jama. Diskutovane su razlike između rezultata dobijenih različitim modelima. Kao posledica preklapanja između valentne i provodne zone, podzonske disperzione relacije dobijene Pidgeon-Brownovim modelom su esencijalno različite od onih dobijenih primenom modela manje složenosti, dok je primena aksijalne aproksimacije u modelu 8×8 opravdana, jer se rezultati dobijeni ovim modelom dobro slažu sa rezultatima dobijenim pomoću punog 8-zonskog modela.

1. UVOD

Postoji više metoda koji se upotrebljavaju za izračunavanje zonske strukture poluprovodnika, kao što su metod pseudopotencijala, metod jake veze i $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model. Među njima $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model [1, 2], koji pruža jednostavnu parametrizaciju talasnih funkcija i energija u okolini granica, se ističe kao najviše korišćen. Njegova tačnost je zadovoljavajuća u opsegu energija od nekoliko stotina meV u okolini centra Brillouinove zone. Dobre osobine modela su oslanjanje na dobro definisane parametre elektronske strukture koji se određuju eksperimentalno, relativno male matrice koje se dijagonalizuju, efikasno modelovanje efekata naprezanja [3, 4] i jednostavno modelovanje optičkih osobina na osnovu rezultata proračuna elektronske strukture dobijenih ovim modelima. U poluprovodnicima sa direktnim procepom slobodni elektroni i šupljine nalaze se u okolini Γ tačke Brillouinove zone. Uspešan opis ovih struktura zahteva korišćenje modela u kojima je mešanje više zona eksplicitno uzeto u obzir, kao što je Pidgeon-Brownov 8-zonski hamiltonijan, u kome bazisne funkcije predstavljaju periodične delove Blobovih funkcija u centru Brillouinove zone, provodne (CB) i tri najviše valentne zone: zone lakih šupljina (LH), teških šupljina (HH) i otcepljene zone (SO). Nedavno je pokazano da se 8×8 višezonski model može blok dijagonalizovati primenom odgovarajuće unitarne transformacije u okviru aksijalne aproksimacije.



Sl. 1. Zonska struktura materijala II tipa.

Od numeričkih metoda podesnih za rešavanje problema određivanja svojstvenih vrednosti višezonskih hamiltonijana u kvantnim strukturama, u prvo vreme najčešće je korišćen metod konačnih razlika, koji je nedavno, razvojem opšte primenljivog komercijalnog softvera za modelovanje (npr. FEMLAB) počeo da ustupa mesto metodi konačnih elemenata (FEM). Da bi se uvećala tačnost sa prihvatljivim brojem elemenata koriste se elementi višeg reda, najčešće u formi Hermiteovih polinoma.

U ovom radu biće ispitana tačnost primene različitih višezonskih $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modela, u kojima su talasne funkcije razvijene u elemente višeg reda u okviru jake formulacije metoda konačnih elemenata. Konkretni sistem uzet u razmatranje je InAs/GaSb kvantna jama, u kojoj je dno provodne zone u InAs ispod vrha valentne zone u GaSb. Uticaj mešanja između provodne i valentne zone na elektronsku strukturu i optičke osobine ove kvantne jame je veliki. Ovde će biti upoređeni rezultati osmozonskog Pidgeon-Brownovog modela sa rezultatima dobijenim na osnovu aksijalno simetričnog modela i četvorozonskog Luttinger-Kohnovog modela u blok-dijagonalnoj aksijalno simetričnoj varijanti. Podzonske disperzione relacije za GaAs/AlGaAs i InAs/GaSb kvantne jame određene su za zadati red bazisa. U poglavljju 2 opisani su korišćeni višezonski modeli elektronske strukture, čije su osobine uporedjene u ovom radu. U poglavljju 3 dati su rezultati primene ovih modela na GaAs/AlGaAs i GaSb/InAs kvantne jame.

2. TEORIJSKI MODEL

2.1. Višezonski modeli

Hamiltonian koji eksplisitno uključuje mešanje CB, HH, LH i SO zone ima oblik [6]:

$$\begin{aligned} H &= \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^\dagger & H_{22} \end{bmatrix} \\ H_{11} &= \begin{bmatrix} E_{\text{CB}} & -\sqrt{3}T_+ & \sqrt{2}U & -U \\ & E_{\text{HH}} & \sqrt{2}L & -L \\ & & E_{\text{LH}} & Q \\ & & & E_{\text{SO}} \end{bmatrix} \\ H_{12} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -T_- & -\sqrt{2}T_- \\ 0 & 0 & -R & -\sqrt{2}R \\ T_+^* & R & 0 & \sqrt{3}L \\ \sqrt{2}T_+^* & \sqrt{2}R & -\sqrt{3}L & 0 \end{bmatrix} \\ H_{22} &= \begin{bmatrix} E_{\text{CB}} & -\sqrt{3}T_- & \sqrt{2}U & -U \\ E_{\text{HH}} & & \sqrt{2}L^* & -L^* \\ E_{\text{LH}} & & Q & \\ & & & E_{\text{SO}} \end{bmatrix}, \quad (1) \end{aligned}$$

gde su elementi ispod glavne dijagonale kompleksno konjugovani. Ovde je

$$E_{\text{CB}} = E_{c0} + \frac{1}{2}s(k_t^2 + k_z^2), \quad (2a)$$

$$E_{\text{HH}} = E_{v0} + \frac{1}{2}(\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2 + \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)k_t^2, \quad (2b)$$

$$E_{\text{LH}} = E_{v0} + \frac{1}{2}(\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2 + \frac{1}{2}(\gamma_1 - \gamma_2)k_t^2, \quad (2c)$$

$$E_{\text{SO}} = E_{v0} - \Delta_0 - \frac{1}{2}\gamma_1 k_z^2 - \frac{1}{2}\gamma_1 k_t^2, \quad (2d)$$

$$E_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{\pm}, \quad U = \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z, \quad (2e)$$

$$L = \sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3 k_z k_-, \quad R = \sqrt{\frac{3}{2}}(\gamma_{av} k_-^2 - \mu k_+^2), \quad (2f)$$

$$Q = \sqrt{2}\gamma_2 k_z^2 - \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_2 k_t^2, \quad (2g)$$

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad k_t^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2h)$$

$$\gamma_{av} = \frac{1}{2}(\gamma_2 + \gamma_3), \quad \mu = \frac{1}{2}(\gamma_3 - \gamma_2). \quad (2i)$$

E_{c0} i E_{v0} su energije provodne i valentne zone u Γ -tački, Δ je energija spin-orbitalnog cepanja pri $k = 0$, a P je Kaneov matrični element. Parametri γ_i su povezani sa Luttingerovim parametrima za valentnu zonu γ_i^L relacijama

$$\begin{aligned} \gamma_1^L &= \gamma_1 + \frac{E_p}{3E_g} \\ \gamma_i^L &= \gamma_i + \frac{E_p}{6E_g} \quad i = 2, 3 \end{aligned} \quad (3)$$

gde je E_g fundamentalni zonski procep, a $E_p = 2mP^2/\hbar^2$. Da bi se uspostavili korektni granični uslovi na spojevima materijala potrebno je simetrizovati hamiltonijan: $\alpha(z)k_z \mapsto \frac{1}{2}(\alpha(z)k_z + k_z\alpha(z))$ i $\alpha(z)k_z^2 \mapsto k_z\alpha(z)k_z$. Nakon toga se matrica graničnih uslova dobija integracijom hamiltonijana u okolini graničnog spoja.

Kao što je poznato 8×8 model daje pored tačnih i lažna svojstvena rešenja energija. U ovom radu upotребljen je poseban izbor parametra [7] E_p :

$$E_p = 3 \left(\frac{1}{m_c^*} - 2 \right) \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_0} \right)^{-1}, \quad (4)$$

kojim se lažna rešenja mogu ukloniti. Ova aproksimacija modifikuje nefizičku zonsku strukturu punog 8×8 hamiltonijana koja postoji pri velikim vrednostima talasnog vektora, tako da u strukturama sa konfinirajućim potencijalom njen uticaj ne dovodi do pojave lažnih rešenja u energijskom opsegu od interesa. Blok dijagonalni aksijalni 8×8 model dobija se iz punog modela nametanjem uslova $\gamma_2 = \gamma_3$ i unitarnom transformacijom, kao što je nedavno urađeno [8]. Gornja podmatrica blok-dijagonalnog aksijalnog 4×4 hamiltonijana data je sa:

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^\dagger & H_{22} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Ovde su:

$$\begin{aligned} H_{11} &= (\gamma_1 + \gamma_2)k_t^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2, \\ H_{12} &= \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) k_t^2 - i2\sqrt{3}\gamma_3 k_t k_z, \\ H_{22} &= (\gamma_1 - \gamma_2)k_t^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2. \end{aligned} \quad (6)$$

2.2. Metoda konačnih elemenata

Da bi se uvećala tačnost u primeni FEM-a koriste se funkcije višeg reda, nejčešće u formi Hermiteovih polinoma u okviru slabe formulacije. U ovom radu korišćena je jaka formulacija FEM-a koja podrazumeva uspostavljanje kontinuiteta talasne funkcije i njenog pravog izvoda na granicama elemenata izborom bazisnih funkcija. Funkcije koje smo mi koristili na master intervalu $\xi \in [-1, +1]$ su:

$$f_s(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{4}(\xi - 1)^2(\xi + 2), & s = 1 \\ \frac{1}{4}(\xi - 1)^2(\xi + 1)^{s-1}, & s = 2, \dots, n-1 \\ \frac{1}{4}(\xi + 1)^2(2 - \xi), & s = n \\ \frac{1}{4}(\xi + 1)^2(\xi - 1), & s = n+1. \end{cases} \quad (7)$$

Detaljna talasna funkcija u $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modelu je suma periodičnih Blochovih funkcija pomnoženih anvelopnim funkcijama, koje se dobijaju iz višezonskog hamiltonijana:

$$\Psi(r) = \sum_i F^i(r)u_{i0}(r), \quad (8)$$

gde je u_{i0} skup Blochovih funkcija u centru Brillouinove zone, a F^i skup anvelopnih funkcija. U slučaju 1D strukture kakve su razmatrane u ovom radu, konfiniranje postoji u z -pravcu. Usled toga integrali preklapanja bazisnih funkcija su u potpunosti određeni smenom $k_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$ koja će u nastavku biti posebno naznačena. U FEM pristupu anvelope funkcije se dalje razvijaju u red po bazisnim funkcijama (7):

$$F^i(z) = C_e^{ij} f_{ij}^e(z), \quad (9)$$

pri čemu e označava element u podeli strukture. Smenom u $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model dobija se:

$$\langle f_{li}^e | H_{ij}^e(k_t, k_z, z) | f_{jk}^e \rangle C_e^{jk} = E \langle f_{li}^e f_{jk}^e \rangle C_e^{jk}, \quad (10)$$

gde $e = 1, \dots, m$, $i, j = 1, \dots, 8$ i $l, k = 1, \dots, n+1$. Pre uvođenja graničnih uslova, rezultujuća matrica je blok-dijagonalna, dimenzije $m \cdot 8 \cdot (n+1)$. Uvođenjem uslova

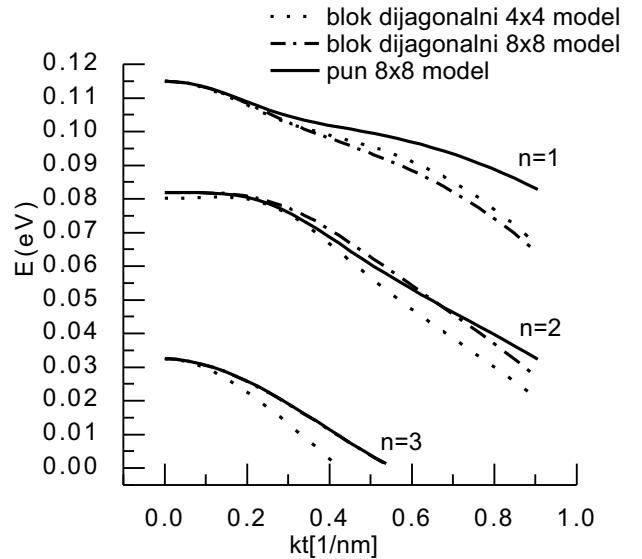
vezivanja, dimenzijs sistema se redukuju za 16 jednačina na svakom spoju između elemenata, tj. po osam za neprekidnost talasne funkcije i njenog prvog izvoda. Dodatna redukcija proistiće iz uslova na granicama strukture: $\Psi(\pm L) = 0$, čime potpuno povezani sistem dobija dimenziju $m \cdot 8 \cdot (n+1) - m \cdot 16$. Prednost parcijalne integracije u matričnim elementima $\langle f_{li}^e | H_{ij}^e(k_t, k_z, z) | f_{jk}^e \rangle$ sastoji se u transformaciji početnog sistema u skup diferencijalnih jednačina prvog reda, pa se bazisne funkcije f_s mogu izabrati iz skupa jednostruko diferencijabilnih umesto iz skupa dvostruko diferencijabilnih funkcija na domenu $[0, L]$. Takođe posle parcijalne integracije, diferenciranje svih prostorno promenljivih parametara, kao što su Luttingerovi parametri, ne postoji, već se ovi parametri aproksimiraju konstantnim vrednostima na svakom elemenatu. FEM proračuni na osnovu 4×4 modela se sprovode na sličan način.

3. NUMERIČKI REZULTATI

Tri razvijena modela primenjena su na izračunavanje zonske strukture GaAs/AlGaAs kvantne jame tipa I, i na GaSb/InAs kvantne jame tipa II. Izabrani domen za rešavanje podeljen je na elemente iste dužine, pri čemu je širina barijere uzeta dovoljno velikom da bude zadovoljen granični uslov $\Psi(\pm L) = 0$. Ulagani parametri su: (a) GaAs: $\gamma_1^L = 6.98$, $\gamma_2^L = 2.06$, $\gamma_3^L = 2.93$, $E_g = 1.519$ eV, $E_p = 20.91$ eV, $\Delta_0 = 0.341$ eV, $m^* = 0.067 m_0$; (b) AlAs: $\gamma_1^L = 3.76$, $\gamma_2^L = 0.82$, $\gamma_3^L = 1.42$, $E_g = 3.099$ eV, $E_p = 14.87$ eV, $\Delta_0 = 0.28$ eV, $m^* = 0.15 m_0$; (c) InAs: $\gamma_1^L = 20$, $\gamma_2^L = 8.5$, $\gamma_3^L = 9.2$, $E_g = 0.417$ eV, $E_p = 18.12$ eV, $\Delta_0 = 0.28$ eV, $m^* = 0.026 m_0$; (d) GaSb: $\gamma_1^L = 13.4$, $\gamma_2^L = 4.7$, $\gamma_3^L = 6.0$, $E_g = 0.812$ eV, $E_p = 22.88$ eV, $\Delta_0 = 0.76$ eV, $m^* = 0.039 m_0$, $E_0 = 0.157$ eV. Parametri za $Al_xGa_{1-x}As$ su interpolirani za $x = 0.3$.

Slika 2 prikazuje disperzije energija prva tri stanja GaAs/AlGaAs kvantne jame širine 4 nm dobijena iz ovih modela. Maksimalni red polinoma u ovoj simulaciji je 4, elementi su uniformne širine pri čemu je barijera tri puta šira od jame da bi se ispunili granični uslovi za talasnu funkciju $\Psi(\pm L) = 0$. Jama je podeljena na 5 elemenata. Poklapanje aksijalnih 4×4 i 8×8 modela je veoma dobro, naročito za prvo stanje i pri manjim vrednostima talasnog vektora. Za veće vrednosti talasnog vektora, posle antiukrštanja pri $k_t = 0.25 \text{ nm}^{-1}$, pun 8×8 model pokazuje odstupanje od ostalih modela. Razlika se može pripisati većoj tačnosti punog $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modela koji uzima u obzir efekte nabiranja energetskih zona.

Na slici 3 prikazana je raspodela stanja u GaAs/AlGaAs kvantnoj jami širine 12 nm. Odnos dužina domena jame i barijere je isti kao u prethodnom slučaju, broj elemenata u jami je 5 a red polinoma 4. Dok je kod jame širine 4 nm broj vezanih stanja bio 3, u slučaju šire jame broj vezanih stanja koje modeli reprodukuju iznosi 8 za $k_t = 0$, ne uzimajući pri tom u obzir Kramersovu degeneraciju 8×8 modela. Poklapanje između aksijalnih modela je i dalje veoma dobro i ne menja se za sve vrednosti talasnog vektora. Takođe uočava se postojanje antiukrštanja pri $k_t = 0.2 \text{ nm}^{-1}$ kao i kod prethodne kvantne jame. Za veće vrednosti k_t



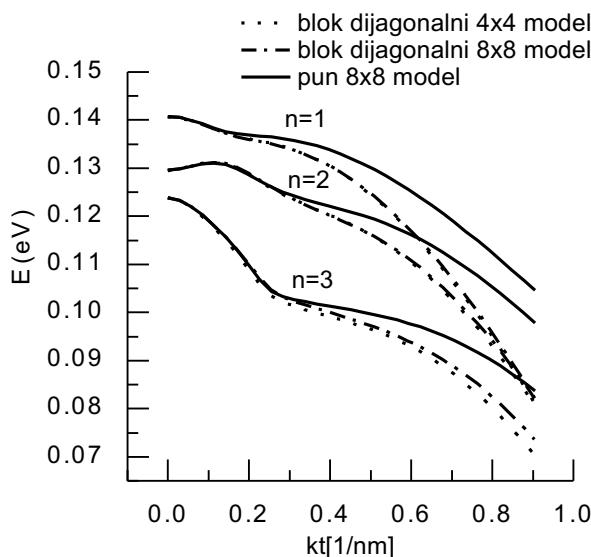
Sl. 2. Disperzija tri osnovna stanja GaAs/AlGaAs kvantne jame širine 4 nm.

odstupanje koje daje pun $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model je veće.

Najinteresantniji slučaj je svakako GaSb/InAs kvantna jama tipa II. Preklapanje provodne zone u InAs i valentne zone u GaSb znači da stanjima, koja su locirana u GaSb i imaju dominantan karakter valentne zone, nezamarljiv doprinos daju i stanja u provodnoj zoni InAs. Kao i u GaAs/AlGaAs strukturi i ovde smo posmatrali jamu širine 4 nm i tri puta širu barijeru. Elementi su uniformne dužine pri čemu je jama podeljena na 5 elemenata, red polinoma je 4. Disperzija osnovnih stanja prikazana je na slici 4. Uočava se velika razlika energija dobijenih na osnovu 4×4 modela u odnosu na ostale. Pošto aksijalni blok dijagonalni 4×4 model ne uzima u obzir sprejanje valentne i provodne zone broj stanja koje reproducuje je samo 4 dok ostali modeli daju skup od 19 stanja. Takođe, položaj osnovnih stanja se razlikuje kao i njihov karakter. Prvo stanje prikazano na slici 4 izabrano je tako da bude na samoj granici valentne zone. Primećuje se da 8×8 modeli pokazuju da ovo stanje ima mešani karakter, za $k_t = 0 \text{ nm}^{-1}$ se ponaša kao stanje valentne zone do $k_t = 0.17 \text{ nm}^{-1}$ uz potpuno poklapanje sa 4×4 modelom, a zatim poprima elektronski karakter. Drugo stanje je potpuno elektronskog karaktera za sve vrednosti talasnog vektora, dok treće stanje ima izrazito hibridni karakter. U GaSb/InAs strukturi postoji dominantno sprejanje stanja između slojeva kao posledica preklapanja energija provodne i valentne zone. Nasuprot tome, primer GaAs/AlGaAs kvante jame pokazuje da u strukturama tipa I sprejanje stanja provodne i valentne zone postoji pretežno unutar slojeva jamskog i barijernog materijala.

4. ZAKLJUČAK

Razvijena su tri $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modela primenom metoda konačnih elemenata: blok-dijagonalni aksijalni 4×4 i 8×8 mod-

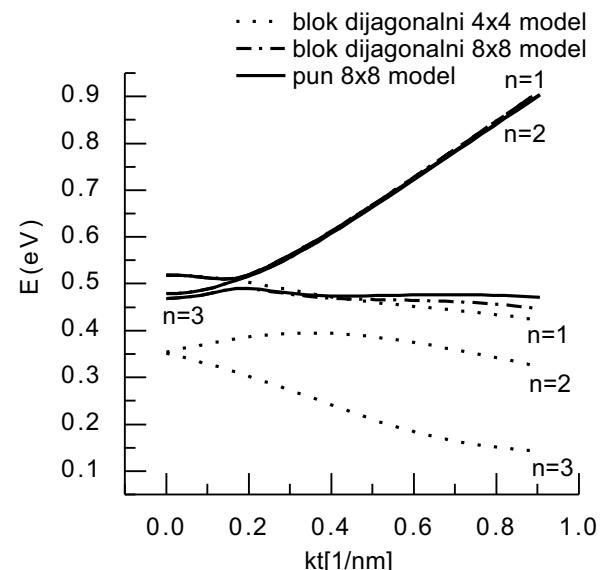


Sl. 3. Disperzija tri osnovna stanja GaAs/AlGaAs kvantne jame širine 12nm.

eli i pun 8×8 model. Za bazisne funkcije su izabrani polinomi proizvoljnog reda u jekoj formulaciji FEM. Efikasnost modela je ispitana na primerima struktura GaAs/AlGaAs kvantne jame tipa I i GaSb/InAs kvantne jame tipa II. Izračunate su disperzije relacije osnovnih stanja i upoređene osobine ovih modela. Pokazano je da postoji dobro slaganje 4×4 i 8×8 aksijalnih modela u primenama na strukture I tipa. U proračunima za strukture II tipa aksijalni 4×4 model pokazuje odstupanja usled svoje ograničenosti na valentnu zonu. Razlike u odnosu na pun 8×8 model su posledica uračunavanja uticaja sprezanja između provodne i valentne zone. Disperzije relacije za GaSb/InAs kvantnu jamu pokazuju znatnu hibridizaciju stanja.

LITERATURA

- [1] J. M. Luttinger and W. Kohn, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields", *Phys. Rev.* 97, pp. 869, 1955.
- [2] E. O. Kane, "Band structure of Indium Antimonide", *J. Phys. Chem Solids* 1, pp. 249, 1957.
- [3] S. L. Chuang and C. S. Chang, " $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method for strained wurtzite semiconductors", *Phys. Rev. B*, vol. 54, No. 4, 1996.
- [4] A. Zakhrova, S. T. Yen, K. A. Chao, "Strain-induced semimetal-semiconductor transitions in InAs/GaSb broken-gap quantum wells", *Phys. Rev. B*, vol. 66, pp. 085312, 2002.
- [5] E. Halvorsen, Y. Galperin and K. A. Chao, "Optical transitions in broken gap heterostructures", *Phys. Rev. B*, vol. 61, No 24, 2000.
- [6] A. T. Meney, B. Gonul, E. P. O'Reilly, "Evaluation of



Sl. 4. Disperzija tri osnovna stanja GaSb/InAs kvantne jame širine 4nm.

various approximations used in the envelope-function method", *Phys. Rev. B*, vol. 50, No. 15, 1994.

- [7] K. A. Kaduki, W. Batty, "Envelope Function Approximation (EFA) Bandstructure Calculations for III-V Non-square Stepped Alloy Quantum Wells Incorporating Ultra-Narrow ($\sim 5\text{\AA}$) Epitaxial Layers", *Physica Scripta*, vol. 61, pp. 213, 2000.
- [8] G. Liu and S. L. Chuang, "Modeling of Sb-based type-II quantum cascade lasers", *Phys. Rev. B*, vol. 65, pp. 165220, 2002.
- [9] P. Enders and M. Woerner, "Exact 4×4 block diagonalization of the eight-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian matrix for tetrahedral semiconductors and its application to strained quantum wells", *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 11, pp. 983-988, 1996.

Abstract - Finite element method is adapted to compute quantum-well states extracted from three multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonians: axially symmetric 4×4 Luttinger-Kohn model, 8×8 Pidgeon-Brown model in the block-diagonal form, and the full 8-band model. Strong formulation of finite element method with the suitably chosen shape functions is employed for numerical calculations. The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ models are applied to the type-II broken-gap GaSb/InAs quantum well, while the GaAs/AlGaAs quantum well is considered for comparison.

ELECTRONIC STRUCTURE OF InAs/GaSb QUANTUM WELLS: APPLICATION OF FINITE ELEMENT METHOD AND MULTIBAND 4×4 AND 8×8 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ MODELS

Dragan Čerkez, Milan Tadić