УДК 621.315.592, 538.915

Г. Ф. Глинский, М. С. Миронова

МЕЖДОЛИННОЕ СМЕШИВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ НА ОСНОВЕ Si/SiO_2

Развита теория, позволяющая учитывать эффекты междолинного смешивания в гетероструктурах на основе непрямозонных полупроводников. Рассчитана зависимость расщепления основного состояния электрона в квантовых ямах $SiO_2/Si/SiO_2(001)$ от ширины квантовой ямы.

Наногетероструктуры, квантовые ямы, уравнение Шредингера

Благодаря большим временам спиновой релаксации и спиновой когерентности электронов, кремний считается перспективным материалом для создания устройств спинтроники. Однако наличие в зоне проводимости шести эквивалентных минимумов (долин) может приводить к декогерентности электронных состояний. По этой причине получить долгоживущие спиновые состояния возможно только при условии расщепления энергетических уровней, сформированных этими долинами. Такая ситуация может быть реализована в квантово-размерных структурах [1].

Существует два основных подхода к описанию гетероструктур с учётом междолинного смешивания: микроскопический (метод сильной связи, метод псевдопотенциалов) и метод огибающих волновых функций. Первые попытки учесть междолинное смешивание в рамках метода огибающих были предприняты в работах [2], [3]. В работе [2] показано, что для бесконечно глубокой квантовой ямы расщепление основного состояния электрона $\Delta E \infty \sin 2k_0 L$, где k_0 – положение минимума зоны проводимости в зоне Бриллюэна; L – ширина ямы. В работе [4] метод огибающих волновых функций был использован для анализа междолинного смешивания в сверхрешетках GaAs/AlAs. В работах [5]–[7] рассматривались эффекты междолинного смешивания в структурах с квантовыми ямами SiGe/Si/SiGe как с помощью метода сильной связи, так и в рамках метода огибающих. При этом потенциал гетероинтерфейса представлялся в виде δ-функции и учет его влияния проводился в рамках теории возмущения. Такой подход позволяет добиться хорошего совпадения с результатами, которые даёт метод сильной связи, однако он является феноменологическим и не учитывает микроскопическое строение гетероинтерфейса.

В работе [8] развита теория, позволяющая учесть микроскопическую симметрию гетероинтерфейса в структурах на основе прямозонных полупроводников. В настоящей статье данный подход обобщается на случай непрямозонных полуповодников и используется для расчета расщепления основного состояния электрона в структурах с квантовыми ямами $SiO_2/Si/SiO_2$.

Рассмотрим гетероструктуру на основе двух полупроводников *A* и *B* со структурой алмаза с двумя одинаковыми атомами в элементарной ячейке. В качестве приближения будем считать, что параметры решёток объёмных материалов совпадают. Гамильтониан, описывающий движение электрона в объёмном материале *A* можно записать следующим образом:

$$\hat{H}_A = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \sum_i \sum_{\mathbf{a}} V_A(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_i), \tag{1}$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса; m_0 – масса свободного электрона; $\mathbf{a}$ – векторы прямой решетки, нумерующие элементарные ячейки; $V_A(\mathbf{x})$ – локальный потенциал, создаваемый атомом *A*; $\boldsymbol{\chi}_i$ – векторы, указывающие положение атомов в элементарной ячейке в *i*-й подрешетке, $i = 1,2$.

Чтобы описать поведение электрона в гетероструктуре, введем характеристические функции $f_i(\mathbf{a})$, указывающие на замену атомов в *i*-й подрешетке:

$$f_i(\mathbf{a}) = \begin{cases} 1, & \text{если в элементарной ячейке с номером } \mathbf{a} \text{ расположен атом } B; \\ 0, & \text{если в элементарной ячейке с номером } \mathbf{a} \text{ расположен атом } A. \end{cases}$$

Тогда гамильтониан гетероструктуры *A*/*B* можно записать следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \sum_i \sum_{\mathbf{a}} V_A(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_i) + \sum_i \sum_{\mathbf{a}} f_i(\mathbf{a}) \Delta V_{AB}(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\chi}_i), \tag{2}$$

где $\Delta V_{AB}(\mathbf{x}) = V_B(\mathbf{x}) - V_A(\mathbf{x})$ – разность локальных потенциалов, создаваемых атомами *B* и *A*.

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) будем искать в виде разложения по многодолинному базису Кона–Латтинжера $e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}} \left| {}^{\star}\alpha, n, \mathbf{k}_j^0 \right\rangle$, где индексы *n* и *j* нумеруют состояния, преобразующиеся по неприводимому представлению $D^{{}^{\star}\alpha}$ звезды волнового вектора ${}^{\star}\mathbf{k}^0$ полной пространственной группы кристалла O_h^7; $\mathbf{k}$ – волновой вектор, отсчитываемый от точек $\mathbf{k}_j^0$. Блоховские состояния $\left| {}^{\star}\alpha, n, \mathbf{k}_j^0 \right\rangle$, определяющие энергетический спектр электронов $E_A^{{}^{\star}\alpha}\ \mathbf{k}_j^0$ объёмного полупроводника *A* в точках $\mathbf{k}_j^0$, удовлетворяют уравнению Шредингера с гамильтонианом (1):

$$\hat{H}_A \left| {}^{\star}\alpha, n, \mathbf{k}_j^0 \right\rangle = E_A^{({}^{\star}\alpha)}\ \mathbf{k}_j^0 \left| {}^{\star}\alpha, n, \mathbf{k}_j^0 \right\rangle.$$

С учетом коммутационного соотношения $\hat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}} = e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})$ гамильтониан (2) в выбранном базисе принимает следующий вид:

$$\left\langle {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \middle| e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}'\hat{\mathbf{x}}} \middle| {}^{\star}\alpha',n',\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle =$$

$$= \left\{ \left[E_A^{\star\alpha}\left(\mathbf{k}_j^0\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right]\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}\mathbf{p}_{nn'}^{\star\alpha\star\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0\right) \right\}\delta_{jj'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} +$$

$$+\Delta U_{nn'}^{\star\alpha\star\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_{j'}^0 - \mathbf{k}'\right). \qquad (3)$$

Первый член в выражении (3), диагональный по индексам j и j', $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, совпадает с обычным многозонным *kp*-гамильтонианом объёмного материала *A*, где

$$\mathbf{p}_{nn'}^{\star\alpha\star\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0\right) = \left\langle {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \middle| \hat{\mathbf{p}} \middle| {}^{\star}\alpha',n',\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle.$$

Второй член, $\Delta U_{nn'}^{\star\alpha\star\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_{j'}^0 - \mathbf{k}'\right)$, определяет как внутридолинное, так и межДолинное рассеяние электронов на гетероинтерфейсе:

$$\Delta U_{nn'}^{\alpha\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_{j'}^0 - \mathbf{k}'\right) = \sum_i\sum_{\mathbf{a}} f_i(\mathbf{a})\left\langle {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \middle| e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}}\Delta V_{AB}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{a}-\chi_i)e^{i\mathbf{k}'\hat{\mathbf{x}}} \middle| {}^{\star}\alpha',n',\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle. \qquad (4)$$

Учитывая, что

$$\left\langle \mathbf{x} \middle| e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}}} \middle| {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\left(\mathbf{k}+\mathbf{k}_j^0\right)\mathbf{x}}u_{nj}^{\star\alpha}(\mathbf{x}),$$

где V – объем структуры; $u_{nj}^{\star\alpha}(\mathbf{x})$ – периодическая часть блоховской волновой функции в точке $\mathbf{k}_j^0$, удовлетворяющая условию переодичности $u^{\star}{}_{nj}^{\alpha}(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = u_{nj}^{\star\alpha}(\mathbf{x})$ ($\mathbf{a}$ – произвольный вектор трансляции), выражение (4) можно переписать в следующем виде:

$$\Delta U_{nn'}^{\star\alpha\star\alpha'}\left(\mathbf{k}_j^0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_{j'}^0 - \mathbf{k}'\right) =$$

$$= \sum_i\sum_{\mathbf{a}} f_i(\mathbf{a})\frac{1}{V}\int_V e^{-i\left(\mathbf{k}_j^0+\mathbf{k}\right)\mathbf{x}}u_{nj}^{\star\alpha*}(\mathbf{x})\Delta V_{AB}(\mathbf{x}-\mathbf{a}-\chi_i)e^{i\left(\mathbf{k}_{j'}^0+\mathbf{k}'\right)\mathbf{x}}u_{n'j'}^{\star\alpha'}(\mathbf{x})d\mathbf{x} =$$

$$= \sum_i\left\{\frac{1}{\Omega}\int_{\Omega}u_{nj}^{\star\alpha*}(\mathbf{x}+\chi_i)\Delta V_{AB}(\mathbf{x})u_{n'j'}^{\star\alpha'}(\mathbf{x}+\chi_i)e^{-i\left(\mathbf{k}_j^0-\mathbf{k}_{j'}^0\right)\mathbf{x}+\chi_i}e^{-i\left(\mathbf{k}-\mathbf{k}'\right)\mathbf{x}}d\mathbf{x}\times\right.$$

$$\left.\times\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_i(\mathbf{a})e^{-i\left(\mathbf{k}_j^0-\mathbf{k}_{j'}^0\right)\mathbf{a}}e^{-i\left(\mathbf{k}-\mathbf{k}'\right)\mathbf{a}+\chi_i}\right\}, \qquad (5)$$

где Ω – объем элементарной ячейки; N – число элементарных ячеек в кристалле. При выводе формулы (5) предполагается, что $\Delta V_{AB}(\mathbf{x})$ отлично от нуля лишь в пределах элементарной ячейки, поэтому интегрирование по объему можно заменить на интегрирование по элементарной ячейке.

Полагая $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ малыми по сравнению с характерными размерами зоны Бриллюэна, экспоненту в подынтегральном выражении в (5) можно разложить в ряд по степеням $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$:

$$e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x}} = 1 - i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x} + \ldots$$

Так как материалы *A* и *B* обладают одной пространственной группой симметрии O_h^7, потенциал $\Delta V_{AB}(\mathbf{x})$ является инвариантом в точечной группе *i*-го узла T_d и преобразуется в этой группе по единичному представлению. Если ограничиться линейными по $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ членами, то расчет междолинного смешивания сводится к определению следующих матричных элементов:

$$\begin{aligned} &\left\langle {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \middle| \Delta\hat{V}^{\Gamma_1} \middle| {}^{\star}\alpha',n',\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle; \\ &\left\langle {}^{\star}\alpha,n,\mathbf{k}_j^0 \middle| \Delta\hat{\mathbf{V}}^{\Gamma_{15}} \middle| {}^{\star}\alpha',n',\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle \cdot i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \end{aligned} \qquad (6)$$

где $\Delta\hat{V}^{\Gamma_1} = \Delta V_{AB}(\hat{\mathbf{x}})$; $\Delta\hat{\mathbf{V}}^{\Gamma_{15}} = V_{AB}(\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}}$.

Рассмотрим квантовую яму $SiO_2/Si/SiO_2$. Так как в зоне проводимости кремния имеется шесть эквивалентных долин, расчет энергетического спектра электрона необходимо проводить в рамках многозонной модели. Для построения эффективного гамильтониана электрона представим его следующим образом:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{Si}} + \Delta\hat{H},$$

где $\hat{H}_{\mathrm{Si}}$ – гамильтониан, описывающий его движение в объёмном кристалле кремния; $\Delta\hat{H}$ – поправки к эффективному гамильтониану, обусловленные заменой атомов. Применение метода инвариантов к гетероструктуре требует, чтобы пространственная симметрия обоих материалов совпадала. Однако в случае пары Si/SiO_2 это не так. В то же время SiO_2 является диэлектриком с большой шириной запрещённой зоны (~9 эВ), и приближенно можно считать, что в формирование нижних электронных состояний в квантовой яме, сформированной атомами Si, основной вклад внесут состояния зоны проводимости кремния. Пространственная группа симметрии кремния O_h^7 является несимморфной, и для расчета удобнее перейти к симморфной группе T_d^2, добавив бесконечно малое возмущение, которое уничтожает инверсию. При этом шестикратно вырожденное состояние, преобразующееся по неприводимому представлению ${}^{\star}X_1$ группы ., расщепится на два трёхкратно вырожденных состояния, преобразующихся по неприводимым представлениям ${}^{\star}X_1$ и ${}^{\star}X_3$ группы T_d^2. Расчет матричных элементов (6) следует проводить в группе симметрии узла T_d. Будем считать, что блоховские волновые функции, преобразующиеся по представлению ${}^{\star}X_1$ группы T_d^2, имеют экстремум в узлах первой подрешетки и равны нулю в узлах второй подрешетки. Тогда блоховские волновые функции, преобразующиеся по представлению ${}^{\star}X_3$, наоборот, в узлах первой подрешетки равны нулю и имеют экстремум в узлах второй подрешетки. Если в качестве центра

точечной симметрии выбрать узел первой подрешетки, представление $^{\star}X_1$ группы T_d^2 при переходе к точечной группе симметрии T_d перейдёт в прямую сумму представлений $\Gamma_1 \oplus \Gamma_{12}$, а представление $^{\star}X_3$ – в представление Γ_{15}. Для узлов второй подрешетки, наоборот, $^{\star}X_1$ перейдёт в Γ_{15}, а $^{\star}X_3$ – в $\Gamma_1 \oplus \Gamma_{12}$.

Рассмотрим недиагональные поправки к двухзонному ($^{\star}X_1 \oplus {}^{\star}X_3$)-гамильтониану электрона $\hat{H}_{\mathrm{Si}}$. Смешивание между состояниями экстремумов в нулевом приближении по $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ отсутствует, так как

$$\left\langle {}^{\star}X_1,\mathbf{k}_j^0 \middle| \Delta\hat{V}^{\Gamma_1} \middle| {}^{\star}X_3,\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle = \sum_m \left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_1 \right\rangle \left\langle \Gamma_1 \middle| \Delta\hat{V}^{\Gamma_1} \middle| \Gamma_{15}^m \right\rangle \left\langle \Gamma_{15}^m \middle| {}^{\star}X_3^{j'} \right\rangle +$$
$$+ \sum_m \sum_{m'} \left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_{12}^m \right\rangle \left\langle \Gamma_{12}^m \middle| \Delta\hat{V}^{\Gamma_1} \middle| \Gamma_{15}^{m'} \right\rangle \left\langle \Gamma_{15}^{m'} \middle| {}^{\star}X_3^{j'} \right\rangle = 0.$$

Определение линейного по $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ междолинного смешивания *X*-состояний сводится к расчету следующих матричных элементов:

$$\left\langle {}^{\star}X_1,\mathbf{k}_j^0 \middle| \Delta\hat{\mathbf{V}}^{\Gamma_{15}} \middle| {}^{\star}X_3,\mathbf{k}_{j'}^0 \right\rangle = \sum_m \left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_1 \right\rangle \left\langle \Gamma_1 \middle| \Delta\hat{\mathbf{V}}^{\Gamma_{15}} \middle| \Gamma_{15}^m \right\rangle \left\langle \Gamma_{15}^m \middle| {}^{\star}X_3^{j'} \right\rangle +$$
$$+ \sum_m \sum_{m'} \left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_{12}^m \right\rangle \left\langle \Gamma_{12}^m \middle| \Delta\hat{\mathbf{V}}^{\Gamma_{15}} \middle| \Gamma_{15}^{m'} \right\rangle \left\langle \Gamma_{15}^{m'} \middle| {}^{\star}X_3^{j'} \right\rangle.$$

В этих формулах $\left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_1 \right\rangle$, $\left\langle {}^{\star}X_1^j \middle| \Gamma_{12}^m \right\rangle$ и $\left\langle {}^{\star}X_3^{j'} \middle| \Gamma_{15}^m \right\rangle$ – матрицы, связывающие между собой состояния *X* и Γ. Таким образом, построение эффективного гамильтониана гетероструктуры в группе T_d^2 сведено нами к построению эффективного гамильтониана в группе T_d.

Можно показать, что для гетероструктр с квантовой ямой или сверхрешеткой, выращенных в направлении [001], смешивание *x*-долины и *y*-долины возможно только с сохранением составляющих волновых векторов k_x и k_y, а смешивание *x*–*z* и *y*–*z* отсутствует в нулевом приближении по $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$. Таким образом, задача определения электронного спектра в квантовой яме распадается на две независимые подзадачи, одна из которых описывает смешивание *x*–*y*-состояний, а другая – смешивание *z*-состояний. Основное состояние в квантовой яме сформировано из *z*-минимумов зоны проводимости объёмного материала. Это отмечается и в работах [3], [5]–[7].

Введём обозначение:

$$f_{1,2}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_{1,2}(\mathbf{a}) \mathrm{e}^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\mathbf{a}+\chi_{1,2}} \ .$$

Чтобы определить наинизшие состояния в электронном спектре квантовой ямы Si/SiO_2, выращенной в направлении [001], достаточно решить уравнение Шредингера с гамильтонианом:

$$H\ k_z,k_z' = \begin{pmatrix} H^{X_1}\ k_z,k_z' & H^{X_1X_3}\ k_z,k_z' \\ H^{X_3X_1}\ k_z,k_z' & H^{X_3}\ k_z,k_z' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta H^{X_1}\ k_z,k_z' & \Delta H^{X_1X_3}\ k_z,k_z' \\ \Delta H^{X_3X_1}\ k_z,k_z' & \Delta H^{X_3}\ k_z,k_z' \end{pmatrix},$$

где

$$H^{X_1}\ k_z,k_z' = H^{X_3}\ k_z,k_z' = \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m_l}\delta_{k_z,k_z'},$$

$$H^{X_1X_3}\ k_z,k_z' = \left[H^{X_3X_1}\ k_z',k_z\right]^* = iDk_z\delta_{k_z,k_z'},$$

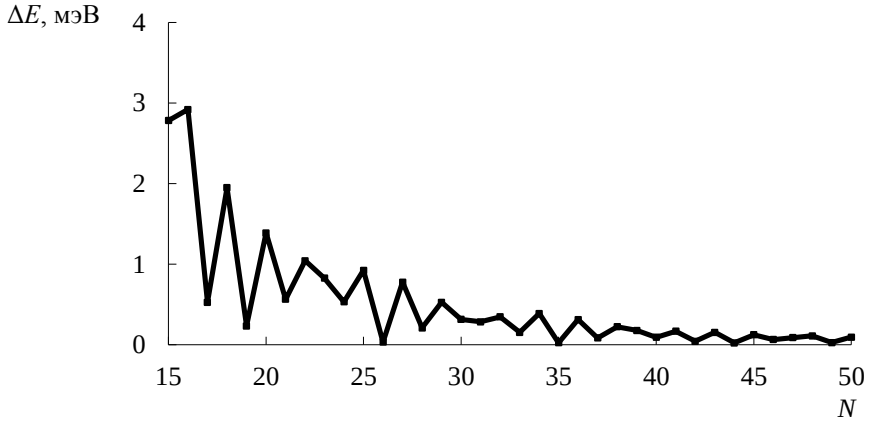
$$\Delta H^{X_1}\ k_z,k_z' = \Delta H^{X_3}\ k_z,k_z' = \left[\Delta U + \frac{\hbar^2\ k_z + {k_z'}^2}{4}\Delta\left(\frac{1}{m_l}\right)\right]\left[f_1\ k_z - k_z'\ + f_2\ k_z - k_z'\ \right],$$

$$\Delta H^{X_1X_3}\ k_z,k_z' = \left[\Delta H^{X_3X_1}\ k_z',k_z\ \right]^* =$$

$$= \left[i\Delta D\ k_z + k_z'\ + \beta\ k_z - k_z'\ \right]\left[f_1\ k_z - k_z'\ - f_2\ k_z - k_z'\ \right],$$

где m_l – продольная эффективная масса электрона; D – параметр, определяющий положение минимума в зоне проводимости кремния; ΔU – разрыв зоны проводимости на интерфейсе; ΔD – поправка к D, связанная с наличием гетероинтерфейса; β – константа долинно-орбитального взаимодействия. Закон дисперсии в SiO_2 полагается параболическим во всей зоне Бриллюэна, с минимумом в точке Г и эффективной массой электрона, равной массе свободного электрона.

С помощью предложенного подхода было рассчитано расщепление основного энергетического состояния электрона ΔE в квантовой яме $SiO_2/Si/SiO_2$ в зависимости от числа атомных слоев кремния N. Результаты расчета представлены на рисунке.



Как видно из рисунка, зависимость имеет немонотонный характер. Период осцилляций не зависит от значения константы долинно-орбитального взаимодействия и определяется только положением долин в зоне Бриллюэна. Полученные результаты хорошо согласуются с работами [5]–[7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Goswami S. Controllable valley splitting in silicon quantum devices // Nature Physics. 2007. Vol. 3, № 1. P. 41–45.

2. Ohkawa F. J., Uemura Y. Theory of Valley Splitting in an *N*-Channel (100) Inversion Layer of Si I. Formulation by Extended Zone Effective Mass Theory // J. Phys. Soc. Jpn. 1977. Vol. 43, № 3. P. 907–916.

3. Sham L. J., Nakayama M. Effective-mass approximation in the presence of an interface // Phys. Rev. B. 1979. Vol. 20, № 2. P. 734–747.

4. Multiband coupling and electronic structure of short-period $(GaAs)_N/(AlAs)_N(001)$ superlattices / G. F. Glinskii, V. A. Lakisov, A. G. Dolmatov, K. O. Kravchenko // Nanotechnology. 2000. Vol. 11, № 3. P. 233–236.

5. Valley splitting theory of SiGe/Si/SiGe quantum wells / M. Friesen, S. Chutia, C. Tahan, S. N. Coppersmith // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75, № 11. P. 115 318–115 330.

6. Electric field effect on electron spin splitting in SiGe/Si quantum wells / M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-M. Jancu, P. Voisin // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77, № 15. P. 155 328–155 336.

7. Nestoklon M. O., Golub L. E., Ivchenko E. L. Spin and valley-orbit splitting in SiGe/Si heterostructures // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 7, № 23. P. 235 334–235 341.

8. Глинский Г. Ф. Полупроводники и полупроводниковые наногетероструктуры: симметрия и электронные состояния. СПб.: Технолит, 2008.

G. F. Glinskii, M. S. Mironova

INTERVALLEY MIXING OF ELECTRONIC STATES IN HETEROSTRUCTURES WITH Si/SiO_2 QUANTUM WELLS

We present a new theory for indirect-gap semiconductor heterostructures, which allows taking into account intervalley mixing. For $SiO_2/Si/SiO_2$ (001) quantum wells we calculate the dependens of electoronic ground state splitting on quantum well width.

Nanoheterostructures, quantum wells, Schrödinger equation