

РЕЗОНАНСНОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ РЕЗКОЙ ГЕТЕРОГРАНИЦЫ  
ЭЛЕКТРОНОМ ПРОВОДИМОСТИ

Кисин М. В.

В рамках модели Кейна рассмотрено прохождение электроном проводимости резкого гетероперехода. Предсказан эффект резонансного (безотражательного) прохождения гетерограницы между двумя полупроводниками, из которых узкозонный имеет меньшее средство к электрону.

*Введение.* Надбарьерный перенос горячих электронов в полупроводниковых гетероструктурах определяет механизм работы ряда новых приборов СВЧ и оптоэлектроники [1, 2]. Если гетерограница является достаточно резкой, так что размеры переходного слоя малы по сравнению с де-Бройлевской длиной волны электрона проводимости, то на характеристики переноса будет влиять квантово-механический эффект надбарьерного отражения [3]. В простейшей модели прямоугольного барьера  $\Delta_c$  в параболической зоне проводимости коэффициент прохождения  $T$ , равный отношению потоков прошедшей и падающей волн, всегда меньше единицы и описывается выражением [3]

$$T = \frac{4r}{(1+r)^2}, \quad (1)$$

где  $r = k_2/k_1$  — отношение составляющих импульса поперек границы для прошедшего ( $k_2$ ) и падающего ( $k_1$ ) электронов.

Простая зависимость (1) характерна, например, для широкозонных гетеропереходов типа GaAs—GaAlAs, в которых описание зоны проводимости возможно в рамках однозонного метода эффективной массы. В настоящее время, однако, все более широкое применение находят гетероструктуры, в которых разрывы зон  $\Delta_c, v$  на гетерогранице сравнимы или даже превосходят ширину запрещенной зоны одного из полупроводников. К ним относятся, например, гетеропары CdTe—CdHgTe, PbTe—PbSnTe, GaSb—InAs, CdTe—InSb и другие. Корректный анализ электронных свойств таких гетероструктур возможен только в рамках многозонных моделей. В данной работе получено выражение для коэффициента прохождения резкой гетерограницы в рамках четырехзонной модели Кейна [4]. Показано, что если электронное средство узкозонного материала меньше, чем широкозонного, то при определенной энергии падающего электрона возможно резонансное безотражательное ( $T=1$ ) прохождение гетерограницы.

## 1. Описание модели

В параболической модели электронного спектра, соответствующей однозонному методу эффективной массы с гамильтонианом  $\hat{H} = \hbar^2 k^2 / 2m$ , плотность потока вероятности вдоль оси  $x$  (перпендикулярно гетерогранице) имеет следующий вид:

$$S_x = \psi^* \frac{\hbar k_x}{2m} \psi + \left( \frac{\hbar k_x}{2m} \psi \right)^* \psi = \frac{\hbar k}{m} |C|^2. \quad (2)$$

Условия непрерывности волновой функции  $\psi$  и ее производной  $\hbar k_x$  определяют связь амплитуд падающей ( $C_1$ ) и прошедшей ( $C_2$ ) волн  $2C_1 = C_2(1+r)$ , откуда и следует выражение (1). Данный простой пример может быть обобщен на

случай разных эффективных масс электронов проводимости в полупроводниках гетеропары. Граничные условия, сохраняющие поток (2), сводятся при этом к непрерывности  $\psi$  и  $\frac{\hbar k_x}{m} \psi$  [5], и в (1) меняется только выражение для  $r$ , которое принимает вид

$$r = \frac{k_2}{k_1} \frac{m_1}{m_2} \approx \frac{k_2}{k_1} \frac{E_{g2}}{E_{g1}}. \quad (3)$$

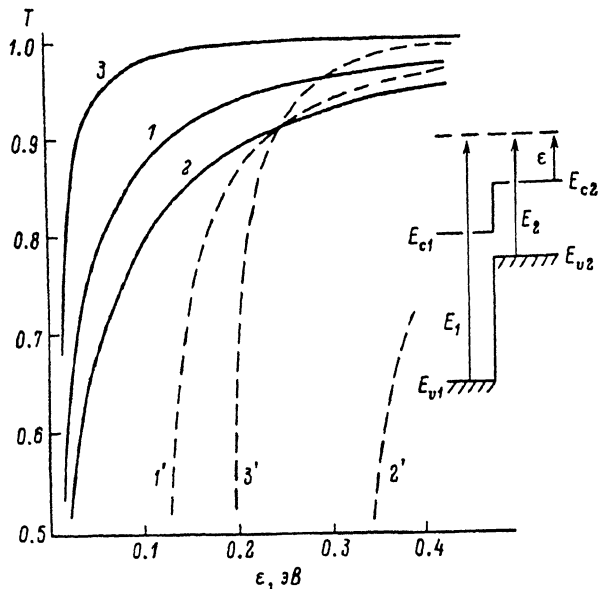
Последнее соотношение должно получаться и при анализе многозонной модели в качестве предельного случая широкозонной ( $\Delta_c, r \ll E_{1,2}$ ) гетеропары.

Уравнение Шредингера для простейшей бесспиновой кейновской модели может быть записано в базисе  $\{S, X, Y, Z\}$

$$\begin{aligned} E_g U + P(\hbar \mathbf{K}) &= EU, \\ P \hbar \mathbf{K} U &= EV. \end{aligned} \quad (4)$$

Коэффициент прохождения для различных гетеропереходов.

1, 1' — GaAs—GaAlAs,  $E_{g1} \sim 1.4$ ,  $E_{g2} \sim 2.0$ ,  $\Delta_1 \sim \Delta_2 \sim 0.3$ ,  $\Delta_g \sim -0.2$  эВ; 2, 2' — InAs—GaSb,  $E_{g1} \sim \Delta_1 \sim 0.4$ ,  $E_{g2} \sim \Delta_2 \sim 0.8$ ,  $\Delta_g \sim 0.5$  эВ; 3, 3' — InAs—InSb,  $E_{g2} \sim 0.2$ ,  $\Delta_2 \sim 0.9$ ,  $\Delta_g \sim 0.5$  эВ [10]. 1—3 соответствуют  $K=0$ . На вставке — взаимное расположение зон, обеспечивающее существование резонанса.



Здесь  $U$  и  $V$  — соответственно скалярная и векторная части полной огибающей волновой функции, которую, используя (4), выразим через  $U$  следующим образом:

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ P \hbar \mathbf{K} / E \end{pmatrix} U(x) \exp(iKy). \quad (5)$$

Здесь и далее энергия электрона проводимости отсчитывается от потолка валентной зоны, а импульс  $K$  вдоль границы направлен по оси  $y$ . Вкладами 2-го порядка по оператору импульса  $\hbar \mathbf{K}$  мы пренебрегаем. Это оправдано, поскольку нас интересуют процессы только в зоне проводимости. В этом случае выражение для плотности потока будет иметь вид, характерный для релятивистских задач, и определяться элементами межзонной матрицы скорости, аналогичной матрице  $c\hat{\alpha}$  в гамильтониане Дирака [6],

$$S_x = \psi_i^{(\ast)} P_{ij}^{(x)} \psi_j = P(U^\ast V_x + V_x^\ast U) = \frac{2P^2}{E} k |C|^2. \quad (6)$$

При одинаковом значении кейновской скорости  $P$  в контактирующих материалах непрерывность потока обеспечивается непрерывностью компонент  $U$  и  $V$  полной огибающей (5). Использование таких граничных условий приведет к замене выражения для  $r$  в (1) на

$$r = \frac{k_2}{k_1} \frac{E_1}{E_2}. \quad (7)$$

Поскольку энергии  $E_1$  и  $E_2$  отсчитываются от потолка валентной зоны в полупроводниках 1 и 2 соответственно (см. рисунок), в предельном случае гетеропары из широкозонных материалов имеем (3).

При наличии спин-орбитального взаимодействия, описываемого величиной расщепления валентной зоны  $\Delta$ , гамильтониан Кейна удобно записывать в ба-

зисе собственных функций момента. В выбранной нами системе координат матрица гамильтониана распадается на две субматрицы  $\hat{H}^{(\mu)}$ ,  $\mu = \pm 1$ . Первая строка субматриц имеет вид

$$H_{1i}^{(\mu)} = \left\{ E_g; \frac{1}{\sqrt{2}} P k_{\mu}; \frac{1}{\sqrt{6}} P k_{-\mu}; \frac{1}{\sqrt{3}} P k_{-\mu} \right\}; \quad k_{\mu} = k_x + i\mu K, \quad (8)$$

что, например, при  $\mu = +1$  соответствует использованию базиса

$$\left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle = S \uparrow; \quad \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{(X + iY) \uparrow}{\sqrt{2}}; \quad \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow}{\sqrt{6}}; \\ \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{(X - iY) \uparrow - Z \downarrow}{\sqrt{3}}. \quad (9)$$

Первый столбец матрицы  $\hat{H}^{(\mu)}$  получается эрмитовым сопряжением (8), кроме того,  $H_{44} = -\Delta$ . Остальные элементы обеих субматриц равны нулю. Возможность понижения размерности задачи связана с двукратным вырождением объемного спектра. Нетрудно убедиться, что собственные функции субматриц  $\hat{H}^{(\mu)}$ , представляющие собой столбцы с компонентами

$$\psi^{(\mu)}(K) = \left\{ 1; \frac{P k_{-\mu}}{\sqrt{2} E}; \frac{P k_{\mu}}{\sqrt{6} E}; \frac{P k_{\mu}}{\sqrt{3} (E + \Delta)} \right\} U(x) \exp(iKy), \quad (10)$$

переходят друг в друга при обращении времени и повороте системы координат на  $180^\circ$  вокруг оси  $z$ :

$$\hat{C}_{2z} \hat{T} \psi^{(\mu)}(K) = \hat{C}_{2z} \psi^{(-\mu)}(-K) = \psi^{(-\mu)}(K). \quad (11)$$

Такая симметрия решений удобна для анализа двумерных задач без центра инверсии [7], чем и объясняется наш выбор системы координат.

Аналогично (6) плотность потока через границу имеет вид

$$S_x = P \left[ U^* \left( \frac{1}{\sqrt{2}} V_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} V_2 + \frac{1}{\sqrt{3}} V_3 \right) + \text{к. с.} \right] = \frac{2P^2 k}{3} |C|^2 \left( \frac{2}{E} + \frac{1}{E + \Delta} \right), \quad (12)$$

где  $V_1 - V_3$  — три последние компоненты огибающей (10), унитарно эквивалентные векторной части (5). Граничные условия, сохраняющие поток, сводятся к непрерывности  $U$  и линейной комбинации компонент огибающей в круглых скобках. Граничные условия дают связь между амплитудами падающей и прошедшей волн, при этом решения с разными  $\mu$  не смешиваются:

$$2C_1 = C_2 (1 + r_K + i\mu q_K), \\ r_K = \frac{k_2 E_1 (E_1 + \Delta_1) (3E_2 + 2\Delta_2)}{k_1 E_2 (E_2 + \Delta_2) (3E_1 + 2\Delta_1)}, \quad (13) \\ q_K = \frac{K}{k_1} \frac{\Delta_1}{3E_1 + 2\Delta_1} \left[ 1 - \frac{E_1 (E_1 + \Delta_1) \Delta_2}{E_2 (E_2 + \Delta_2) \Delta_1} \right],$$

что и определяет вид коэффициента прохождения в модели Кейна

$$T_K = \frac{4r_K}{(1 + r_K)^2 + q_K^2}. \quad (14)$$

В модели Дирака, описывающей гетеропереходы на основе халькогенидов свинца, можно получить аналогичное выражение с параметрами

$$r_D = \frac{k_2 E_1}{k_1 E_2}; \quad q_D = \frac{K}{k_1} \left( 1 - \frac{E_1}{E_2} \right). \quad (15)$$

Заметим, что обращение в нуль коэффициента при  $C_2$  в (13) соответствует возникновению на гетерогранице локализованных пограничных состояний [8]. Условия возникновения таких состояний в зоне проводимости существенно зависят от квантового числа  $\mu$  [7], т. е. спектр пограничных состояний не вырожден. Фактически это является результатом спинового расщепления

спектра в системе без центра инверсии [9, 10], причем в нашем случае, как видно из (13), величина расщепления порядка параметра спин-орбитального взаимодействия  $\Delta$ .

## 2. Анализ результатов

Чтобы получить зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона проводимости  $\varepsilon$  над барьером, надо добавить к (13), (14) соотношения, описывающие законы дисперсии электрона в контактирующих материалах. В модели Кейна

$$T \cdot (K^2 + k^2) = \frac{3E(E - E_g)(E + \Delta)}{3E + 2\Delta} \quad (16)$$

с индексом 1 или 2 для материалов слева или соответственно справа от границы. Из полученных соотношений следует интересный вывод о возможности резонансного (с коэффициентом прохождения  $T=1$ ) прохождения единственной гетерограницы. Действительно, пусть для простоты  $K=0$ . Тогда  $T_K$  однозначно определяется величиной  $r_K$ , которую можно привести к виду

$$r_K^2 = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta_c} \left( 1 + \frac{\Delta_v}{\varepsilon + E_{g2}} \right) \frac{3 - \frac{\Delta_2}{E_2 + \Delta_2}}{3 - \frac{\Delta_1}{E_1 + \Delta_1}} \equiv Z_1 Z_2 Z_3. \quad (17)$$

Здесь  $\Delta_c = E_{c2} - E_{c1}$ ,  $\Delta_v = E_{v2} - E_{v1}$ . Пусть для определенности  $\Delta_c > 0$ . В противном случае можно поменять местами индексы 1 и 2, т. е. «перевернуть» структуру и воспользоваться инвариантностью результатов относительно обращения времени. Зависимость правой части (17) от  $\varepsilon$  в основном определяется первыми двумя сомножителями, описывающими вклад ближайших зон. При  $\Delta_v < 0$  (гетеропереход I типа) зависимость монотонная и резонанс отсутствует. Однако при  $\Delta_v > 0$  (гетеропереход II типа) второй сомножитель становится больше единицы и убывает с ростом  $\varepsilon$ . Поскольку характерные масштабы изменения  $Z_1$  и  $Z_2$  определяются разными зонными параметрами, возможна ситуация, когда  $r_K=1$  и, следовательно,  $T_K=1$ . В предельных случаях сильного и нулевого спин-орбитального взаимодействия, когда  $Z_3=1$ , выражение для энергии резонанса становится особенно простым:

$$\varepsilon_0 = \frac{E_{g2} \Delta_c}{E_{g1} - E_{g2}}, \quad (18)$$

т. е. полупроводник с меньшей шириной запрещенной зоны ( $E_{g2}$ ) должен иметь меньшее электронное сродство. Наличие у электрона продольного импульса  $K$  качественно не меняет вида зависимости  $T(\varepsilon)$ , приводя лишь к сдвигу порога надбарьерного прохождения.

Физическая природа резонанса достаточно очевидна. Действительно, если кинетическая энергия падающего электрона лишь немного превышает  $\Delta_c$ , то рассогласование скоростей по обе стороны гетерограницы значительно, и коэффициент прохождения мал. Однако с ростом  $\varepsilon$  скорость электрона в узкощелевом полупроводнике нарастает быстрее, чем в широкозонном, и при энергии порядка  $\varepsilon_0$  сравнивается со скоростью падающего электрона. Поскольку в данной постановке задачи плотность потока определяется именно оператором скорости, то резонанс скоростей должен приводить к отсутствию отраженного потока и, следовательно, к резонансной прозрачности барьера.

Из известных по литературе гетеропар приведенным условиям удовлетворяет гетеропереход InAs—InSb. На рисунке показаны результаты расчета  $T(\varepsilon)$  для гетеропереходов GaAs—GaAlAs, InAs—GaSb и InAs—InSb. Первая гетеропара состоит из широкозонных полупроводников и приведена для сравнения. В двух других гетеропереходах разрывы зон на границе сравнимы с величинами  $E_{g1, 2}$ , при этом, однако, зависимость  $T(\varepsilon)$  отклоняется от кривой 1 в разные стороны, поскольку в последней гетеропаре выполняются условия резонанса. Коэффициент прохождения здесь имеет вид ступеньки с  $T=1$  при  $\varepsilon > \varepsilon_0 \sim 0.25$  эВ, так как при энергиях порядка  $\varepsilon_0$  спектры обоих полупровод-

ников сильно непараболичны и скорости падающего и прошедшего электронов практически совпадают, определяясь величиной кейновской скорости  $P$ . Штриховыми линиями показан коэффициент прохождения для электрона, имеющего импульс  $K$  вдоль границы. Для удобства сравнения для каждого гетероперехода бралась величина  $K$ , соответствующая при чисто продольном движении значению энергии падающего электрона  $E_1 = E_{g1} + 0.5 \Delta_c$ .

В том случае, если  $E_{g1} \gg E_{g2}$ , зависимость  $T(\epsilon)$  вблизи  $\epsilon_0$  будет иметь характерный колоколообразный вид, однако гетеропереходы с расположением зон II типа, удовлетворяющие такому условию, автору неизвестны. Интересно отметить, что в пределе  $E_{g1} \gg E_{g2}$ ,  $\Delta_c$  эффект резонансного прохождения может быть достаточно корректно описан и в рамках простой однозонной параболической модели электронного спектра.

#### Список литературы

- [1] Hess K. // Sol. St. Electron. 1988. V. 31. N 3/4. P. 319—324.
- [2] Capasso F. // Semicond. a. Semimet. / Ed. by R. K. Willardson, A. C. Beer. N. Y., 1985. V. 22. Pt D. P. 2—173.
- [3] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1974. 752 с.
- [4] Kane E. O. // J. Phys. Chem. Sol. 1957. V. 1. P. 249—261.
- [5] Ben Daniel D. B., Duke C. B. // Phys. Rev. 1966. V. 152. N 3. P. 683—692.
- [6] Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., 1969. 624 с.
- [7] Кисин М. В. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 2. С. 292—296.
- [8] Сурис Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2015.
- [9] Васьюк Ф. Т. // Письма ЖЭТФ. 1979. Т. 30. В. 9. С. 574—577.
- [10] Ruan Y. Ch., Ching W. Y. // J. Appl. Phys. 1987. V. 62. N 7. P. 2885—2897.

Институт радиотехники  
и электроники АН СССР  
Саратовский филиал

Получена 16.06.1989  
Принята к печати 24.10.1989