

## Междолинная конверсия на границе. Микроскопическая модель

© Л.С. Брагинский, Д.А. Романов

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

(Поступила в Редакцию 15 октября 1996 г.)

Предложена простая модель, позволяющая корректно получить граничные условия на огибающие волновые функции в случае контакта материалов с существенно разным характером электронного спектра (наличие и отсутствие боковой долины либо существенно различное ее положение). Рассмотрено прохождение электрона через такую границу, найдены аналитические выражения для коэффициентов прохождения и междолинного перехода. Зависимости этих коэффициентов от параметров граничащих материалов и характера границы оказываются определяющими для явлений вертикального транспорта. Обсуждаются возможные следствия эффективной конверсии на границах в многослойных структурах.

Вопросы электронных переходов между центральной и боковой долинами являются актуальными в различных явлениях вертикального транспорта. Механизмы междолинного перехода на границе раздела популярной гетеропары GaAs/AlGaAs подробно обсуждались в [1], где на основе численных расчетов получены коэффициенты связи огибающих волновых функций (ОВФ) Г- и X-долин по разные стороны границы. Численные результаты [1] послужили основой для последующего рассмотрения более тонких эффектов, связанных с междолинной конверсией на границе [2]. В этих работах существенно эксплуатируются характерные особенности конкретных материалов, составляющих гетеропару, которые оказываются одинаковыми по кристаллографической симметрии и обладают близкими параметрами.

В частности, а priori неочевидны предположения о раздельной сшивке на гетерогранице блоховских функций различных долин и правомерность использования положений энергетических уровней граничных атомов из "объемных" данных по промежуточным соединениям. Поскольку результаты [1] представлены в численном виде, они не допускают качественного исследования важности сделанных предположений и зависимости характера и интенсивности междолинной конверсии от параметров структуры. Указанные недостатки являются естественными следствиями того, что хотя использованная в [1] модель ЛКАО с учетом  $s$ - $p$ -гибридизации и достаточно хорошо описывает конкретную структуру, она приводит к слишком сложным выражениям, не допускающим аналитического исследования.

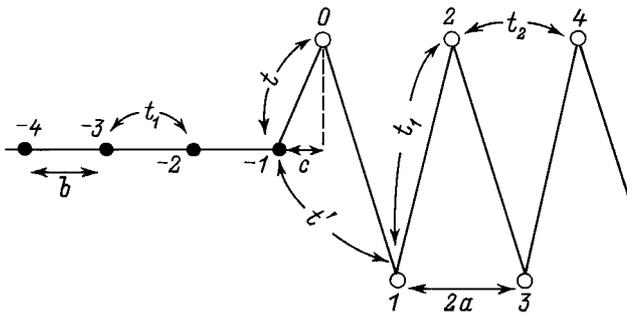
Возникает естественный вопрос: как быть в случае контакта материалов с существенно разным положением боковых долин или, тем более, в случае, когда в одном из материалов боковая долина вовсе отсутствует (структуры металл-полупроводник, металл-диэлектрик-полупроводник, граница полупроводника с вакуумом)? Насколько в этом общем случае можно будет доверять выводам, сделанным в результате расчетов типа [1]? Поэтому актуальной является задача поиска и исследования простых моделей, которые позволили бы качественно исследовать процессы междолинной кон-

версии на границе в зависимости от параметров самой границы и граничащих материалов.

В настоящей работе предложена простая одномерная модель, которая является обобщением модели, рассмотренной нами ранее в [3]. Предлагаемая модель позволяет корректно получить условия сшивки на полную блоховскую волновую функцию и на огибающую в случае контакта материалов с существенно разным положением боковой долины и аналитически проделать весь путь от обобщенных граничных условий до физических величин — коэффициентов прохождения и междолинной конверсии, — вычисляемых по огибающим волновым функциям.

### 1. Модель "двухдолинный зигзаг"

Заметим, что сами по себе чисто одномерные модели не могут дать энергетического спектра с боковой долиной просто потому, что решения одномерного уравнения Шредингера могут быть не более чем двукратно вырожденными. Обычно (например, в [1]) это ограничение обходят путем использования в модели типа сильной связи одномерной цепочки из "трехмерных" атомов, волновые функции которых вырождены по проекции орбитального момента. Однако, как уже отмечалось, это приводит к резкому увеличению числа уравнений и делает модель недоступной аналитического исследования. Мы же добились усложнения энергетического спектра, имитирующего реальный двухдолинный закон дисперсии, с помощью изменения самой структуры одномерной цепочки — придания ей зигзагообразной формы (правая часть рис. 1), т.е. учета перехода электронов не только на ближайшие соседние атомы, но и на следующие за ближайшими (фактически это предельный случай рассмотренной в [4] модели фуллереновой нанотрубки). Такая зигзагообразная моноатомная одномерная цепочка является, по-видимому, простейшим вариантом модели, позволяющим аналитически рассмотреть двухдолинную ситуацию.



**Рис. 1.** Контакт цепочка–зигзаг. Темные и светлые точки соответствуют атомам различного типа.

Рассмотрим прежде всего бесконечную зигзагообразную цепочку. Полупериод структуры равен  $a$ , атомы нумеруются целочисленным индексом  $n$ . В приближении сильной связи электронные состояния такой системы, соответствующие энергии  $E$ , описываются конечно-разностным уравнением

$$C_n(E - E_r) - t_1(C_{n+1} + C_{n-1}) - t_2(C_{n+1} + C_{n-1}) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $C_n$  — амплитуда вероятности пребывания электрона на  $n$ -м атоме,  $E_r$  — энергия электронного состояния на изолированном атоме, туннельные интегралы  $t_1$  и  $t_2$  соответствуют переходу электрона между соседними атомами по зигзагу и вдоль оси  $x$ . Предполагается, что величины  $t_1$  и  $t_2$  одного порядка.

Заметим, что рассматриваемая структура имеет несобственный элемент симметрии — сдвиг на  $a$  с отражением относительно оси  $x$ . Формально именно эта дополнительная симметрия делает возможным вырождение однозонного спектра, т.е. наличие боковой долины. В этом смысле она моделирует более сложную ситуацию с «трехмерными» атомами, о которой говорилось выше. Физическим механизмом, реализующим возможность вырождения, как раз и являются легкие переходы «через соседа» в нашей цепочке.

Уравнение (1) приводит к двухдолинному закону дисперсии электрона

$$\varepsilon_r(k) = E_r - 2t_1 \cos(ka) - 2t_2 \cos(2ka), \quad (2)$$

причем параметры зонной структуры связаны с величинами  $t_1$ ,  $t_2$  и  $a$  следующим образом:

$$t_1 = \frac{\Delta}{4}, \quad t_2 = \frac{\Delta}{16} \frac{m_2 + m_1}{m_2 - m_1}, \quad a^2 = \frac{m_2 - m_1}{m_2 m_1 \Delta}, \quad (3)$$

где  $m_1$  и  $m_2$  — эффективные массы соответственно в центральной и боковой долинах,  $\Delta$  — энергетический зазор между этими долинами.

Описание поведения зонного электрона в медленно меняющихся внешних полях естественно проводить с помощью огибающей волновой функции (ОВФ). Заметим, однако, что введение ОВФ является в этом случае нетривиальной процедурой. Действительно, обычная

процедура введения ОВФ в методе сильной связи [5] предполагает определение непрерывной функции  $\Psi(x)$ , которая в точках  $x = n$  принимала бы значения  $C_n$ . Однако в нашей ситуации наличие внутризонного вырождения не позволяет воспользоваться этим простым рецептом и требует аккуратного введения двух огибающих функций. В связи с принципиальностью этого момента для дальнейшего изложения — остановимся на нем более подробно.

Поскольку мы собираемся использовать обе ОВФ при написании граничных условий, неудобно разделять их с помощью процедур в импульсном пространстве. Поэтому воспользуемся искусственным приемом, имеющим, однако, прозрачный физический смысл. Будем сначала формально считать верхние и нижние атомы на рис. 1 различными (т.е. разрушим дополнительную симметрию системы и избавимся от двухдолинности за счет появления двухзонности). Тогда вместо уравнения (1) получим систему двух связанных разностных уравнений на  $C_{2n}$  и  $C_{2n+1}$ . Вводя теперь непрерывные функции  $\Psi_1(x)$  и  $\Psi_2(x)$ , связанные с амплитудами  $C_n$  как

$$\Psi_1(2na) = \frac{1}{\sqrt{a}} C_{2n}, \quad \Psi_2((2n+1)a) = \frac{1}{\sqrt{a}} C_{2n+1}, \quad (4)$$

получаем для них из (1) систему уравнений, которая инвариантна относительно замены  $\Psi_1(x) \rightarrow \Psi_2(x)$ ,  $\Psi_2(x) \rightarrow \Psi_1(x)$ . Поэтому она диагонализуется введением функций

$$\Psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2), \quad \Psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2), \quad (5)$$

которые, таким образом, определяются уравнениями

$$\begin{aligned} 2t_1 \cos h\left(a \frac{d}{dx}\right) \Psi_+ - 2t_2 \cos h\left(2a \frac{d}{dx}\right) \Psi_+ \\ = (E - E_r) \Psi_+, \\ -2t_1 \cos h\left(a \frac{d}{dx}\right) \Psi_- - 2t_2 \cos h\left(2a \frac{d}{dx}\right) \Psi_- \\ = (E - E_r) \Psi_-. \end{aligned} \quad (6)$$

Функции (5) и есть требуемые огибающие, причем  $\Psi_-$  соответствует центральной долине, а  $\Psi_+$  — боковой. Как легко видеть, при разложении в уравнениях (6) по малости  $a$  в сравнении с длиной волны электрона действительно получаются уравнения эффективной массы, соответствующие массе центральной и боковой долин в (3).

## 2. Контакт цепочка–зигзаг: граничные условия на ОВФ

Перейдем теперь к рассмотрению контакта зигзага с обычной линейной цепочкой. Будем считать, что последняя занимает область  $x < 0$  (рис. 1) и описывается

стандартным уравнением сильной связи

$$C_n(E - E_l) - t_l(C_{n+1} + C_{n-1}) = 0, \quad n < -1, \quad (7)$$

причем в общем случае  $a \neq b \neq c$ . Как видно из рис. 1, три атома на границе полуцепочек ( $n = -1, 0, 1$ ) находятся в выделенном положении. Для них приближение сильной связи дает уравнения

$$\begin{aligned} C_{-1}(E - E_l) - t_l C_{-2} - t C_0 - t' C_1 &= 0, \\ C_0(E - E_r) - t_1 C_1 - t_2 C_2 - t C_{-1} &= 0, \\ C_1(E - E_r) - t' C_{-1} - t_1(C_0 + C_2) - t_2 C_3 &= 0, \end{aligned} \quad (8)$$

которые и играют роль условий сшивки для амплитуд  $C_n$ . В дальнейшем для простоты изложения полагаем туннельный интеграл  $t' = 0$ .

Выражая в уравнениях (8) амплитуды  $C_n$  через ОВФ согласно (4) (и аналогичному соотношению для левой полуцепочки) и используя уравнения (6), приходим к следующим нелокальным условиям сшивки для ОВФ:

$$\begin{aligned} t_1 \sqrt{b} \Psi_l(b - c) &= t \sqrt{a} [\Psi_+(0) + \Psi_-(0)], \\ t \sqrt{b} \Psi_l(-c) &= t_2 \sqrt{a} [\Psi_+(-2a) + \Psi_-(-2a)], \\ \Psi_+(-a) - \Psi_-(-a) &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Заметим, что простой вид третьего уравнения является следствием сделанного нами упрощающего предположения  $t' = 0$ .

Наличие именно трех граничных условий является в данном случае необходимым и достаточным для полного определения электронной волновой функции во всем пространстве. Действительно, ОВФ слева от границы определяется двумя свободными параметрами, а ОВФ справа от границы — четырьмя. Одна из "левых" констант и две из "правых" констант определяются условиями на бесконечности, а оставшиеся три константы — уравнениями (9). Нелокальность полученных граничных условий отвечает формально бесконечному порядку дифференциальных уравнений, определяющих ОВФ (аналогично [3]).

Для получения граничных условий обычного вида, связывающих ОВФ и их производные, удобно в (9) разложить (до первого порядка) функции  $\Psi_i$  по малости межатомных расстояний по сравнению с длиной волны. Такая процедура, естественно, будет соответствовать приближению эффективной массы в уравнениях (6) (и соответствующем уравнении для левой полуцепочки). После очевидных преобразований получившиеся дифференциальные граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_+ - \Psi_- - a(\Psi'_+ - \Psi'_-) &= 0, \\ \left(\frac{t_1}{t} - \frac{t}{t_2}\right) \sqrt{\frac{b}{a}} \Psi_l + \frac{t_1}{t} \sqrt{\frac{b}{a}} b \Psi'_l &= 2a(\Psi'_+ + \Psi'_-), \\ \frac{t_1}{t} \sqrt{\frac{b}{a}} (\Psi_l + b \Psi'_l) &= (\Psi_+ + \Psi_-). \end{aligned} \quad (10)$$

Такие граничные условия обеспечивают резкую (резонансную!) зависимость влияния границы от параметров структуры. Действительно, члены, содержащие межатомные расстояния  $a$  и  $b$ , являются малыми и в первом приближении могут быть опущены. Тогда при  $t_l/t - t/t_1 \neq 0$  соотношения (10) сводятся к требованию обращения в нуль на границе всех трех волновых функций, т.е. к полному отсутствию связи между полупространствами (и между долинами в правом полупространстве). Если же  $t_l/t - t/t_1 = 0$ , малости во втором из уравнений (10) сокращаются. В результате получаются равенство  $\Psi_+$  и  $\Psi_-$  на границе и обычная раздельная связь между функциями и их производными по разные стороны границы.

### 3. Коэффициенты конверсии и прохождения

Граничные условия (10) позволяют легко получить коэффициенты прохождения и междолинной конверсии при падении электронной волны на границу раздела. Пусть исходная волна падает справа и принадлежит центральной долине. Тогда огибающие волновые функции имеют вид

$$\Psi_- = e^{-ik_-x} + A e^{ik_-x}, \quad \Psi_+ = B e^{ik_+x}, \quad \Psi_l = D e^{-ik_lx}, \quad (11)$$

где  $k_l, k_-$  и  $k_+$  — решения уравнений  $E = \varepsilon_{l,-,+}$  соответственно. Коэффициенты прохождения и конверсии в боковую долину даются выражениями

$$\begin{aligned} T_c &= \frac{\sin k_+ a}{\sin k_- a} \frac{(1 - 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_+ a)}{(1 + 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_- a)} |D|^2, \\ C_{cs} &= \frac{t_1 b \sin k_l b}{t_1 a (\sin k_- a) (1 + 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_- a)} |B|^2. \end{aligned} \quad (12)$$

После несложных, но громоздких преобразований получаем

$$\begin{aligned} T_c &= \frac{\sin k_- a \sin k_l b (1 - 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_+ a)}{\cos^2 \left(\frac{k_- a - k_+ a}{2}\right) (1 + 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_- a)} \\ &\quad \times \frac{2\alpha (\cos k_- a + \cos k_l b)^2}{\alpha^2 + 1 - 2\alpha \cos(k_l b + k_- a + k_+ a)}, \\ C_{cs} &= \frac{t_2 \sin k_- a \sin k_+ a}{2t_1 \cos^2 \left(\frac{k_- a - k_+ a}{2}\right) (1 + 4 \frac{t_2}{t_1} \cos k_- a)} \\ &\quad \times \frac{\alpha^2 + 1 + 2\alpha \cos k_l b}{\alpha^2 + 1 - 2\alpha \cos(k_l b + k_- a + k_+ a)}. \end{aligned} \quad (13)$$

Введенный здесь структурный параметр

$$\alpha = t_2 t_1 / t^2 \quad (14)$$

определяет степень согласованности характеристик материалов и их границы (в смысле рассуждений после

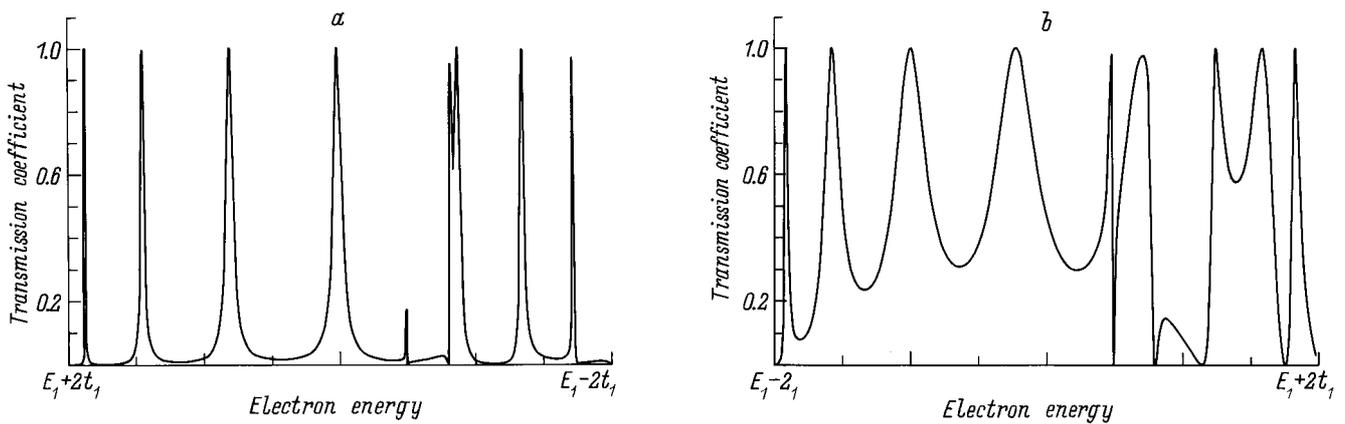


Рис. 2. Энергетическая зависимость коэффициента прохождения электрона через структуру цепочка–зигзаг–цепочка.  $a = b$ ,  $L = 20a$ ,  $t_1 = 0.3$ ,  $t_2 = 0.7$ ,  $t = 2$  (a) и 0.6 (b).

формулы (10)). Выражения для прохождения и конверсии из боковой долины  $T_s$  и  $C_{sc}$  получаются из (13) заменой  $k_- \leftrightarrow k_+$  и  $t_1 \leftrightarrow t_2$ .

Как можно заметить, при  $t_1 \rightarrow 0$  (что соответствует расщеплению верхней и нижней половин зигзага на независимые линейные цепочки) выражение (13) для коэффициента прохождения переходит в соответствующую формулу работы [3]. Более нетривиальным является предельный переход  $t_2 \rightarrow 0$ , т.е. выравнивание зигзага в цепочку. Однако аккуратное использование предельной формы решения для  $k_+$  позволяет и в этом случае прийти к тому же выражению.

Видно, что энергетическая зависимость обоих коэффициентов ( $T_c$  и  $C_{cs}$ ) существенно определяется величиной безразмерного структурного параметра  $\alpha$ . В частности, если величина  $\alpha$  далека от единицы, оба процесса (прохождения и конверсии) оказываются сильно подавленными, в меру малости постоянной решетки по сравнению с длиной волны ОВФ ( $k_-a \ll 1$  либо  $k_+a \ll 1$ ). Если же параметры границы и граничащих материалов таковы, что выполняются условия структурного резонанса  $\alpha \approx 1$ , ситуация коренным образом меняется. В этом случае, при дополнительном условии малости энергетического междолинного расстояния  $\Delta$  в сравнении с шириной разрешенной зоны (что имеет место, например, в GaAs) члены  $\sim (k_{\pm}a)^2$  в числителях и знаменателях выражений (13) сокращаются. В результате получаем  $T_c, C_{cs} \sim 1$ , т.е. эффективное прохождение сопровождается эффективной конверсией.

#### 4. Наблюдаемые эффекты: прохождение в трехслойной структуре с участием боковой долины

Апеллируя к наиболее адекватной постановке эксперимента, мы рассмотрели также прохождение электронов в трехслойной структуре: двухдолинный зигзаг зажат

между двумя однодолинными линейными цепочками. Не приводя громоздкую формулу для коэффициента прохождения в этом случае, ограничимся результатами численных расчетов по этой формуле, приведенными на рис. 2.

Толщина среднего слоя взята  $L \gg a$ , его параметры  $t_1 = 0.3$ ,  $t_2 = 0.7$  моделируют типичное расположение центральной и боковой долин в прямозонных полупроводниках. Кривые, приведенные на рис. 2, a и b, различаются значением параметра  $t$ , определяющего степень перемешивания волновых функций приграничных атомов.

В ситуации, далекой от условия структурного резонанса (рис. 2, a), несмотря на большую величину  $t$ , т.е. на легкость электронных переходов между атомами, лежащими по разные стороны границы, прохождение электрона через структуру оказывается существенно подавленным в большей части зоны. Эффективное запираение электрона в области среднего слоя приводит к появлению хорошо выраженных квазиуровней и к узким резонансам коэффициента прохождения через структуру. Поскольку коэффициенты  $T_s$ ,  $C_{sc}$  и  $C_{cs}$  малы по одному и тому же параметру, в области энергии боковой долины модуляция коэффициента прохождения составляет порядка единицы, так что характер резонансных пиков резко усложняется.

Картина прохождения через структуру оказывается существенно иной в условиях структурного резонанса (рис. 2, b). В этом случае граничные условия (10) обеспечивают легкое проникновение "оглабющей" волны через границу раздела. Поэтому в левой части кривой узкие пики сменяются плавными осцилляциями. Заметная величина параметра  $\Delta$  обеспечивает, тем не менее, относительную слабость междолинных переходов. Вследствие этого в правой части кривой, т.е. в области энергий выше дна боковой долины, видны резкие модуляции, связанные с эффективным квантованием движения "бокового" электрона.

## 5. Возможная связь с экспериментом

В заключение остановимся на физическом смысле полученных результатов и на их связи с имеющимися и возможными экспериментами. Обратной стороной простоты и наглядности рассмотренной нами модели является невозможность сколько-нибудь последовательного количественного сравнения результатов с экспериментальными. Тем не менее мы можем сделать важные качественные выводы, которые, возможно, проливают свет на некоторые необъясненные моменты в ряде известных экспериментов.

Основной физический результат работы содержится в граничных условиях (9) и их дифференциальном варианте (10). Эти условия препятствуют как прохождению носителей через границу, так и междолинной конверсии, если не выполняется специфическое соотношение между параметрами материалов и характеристиками границы, т. е. отсутствует структурный резонанс. Это может служить возможным качественным объяснением низкого квантового выхода и сдвига функции распределения при эмиссии электронов из полупроводника в вакуум (с точки зрения нашей модели граница с вакуумом описывается как очевидный предельный случай) в так называемых фотокатодах с отрицательным электронным сродством [6–9]. Дополнительным подтверждением справедливости такого объяснения является отсутствие в этих экспериментах особенностей функции распределения вылетевших электронов, связанных с наличием боковой долины в GaAs.

Другая интересная для экспериментального исследования область — ситуация близости к структурному резонансу. Как показано выше, в этом случае граничные условия сводятся к "классическим". Из сравнения с результатами работы [1] можно сделать вывод о том, что наиболее популярные гетероструктуры GaAs/GaAlAs как раз находятся в условиях структурного резонанса (что, по-видимому, коррелирует с их структурным совершенством). В этом случае изменение параметра  $\alpha$  в результате внешних воздействий должно влечь за собой заметное изменение характера прохождения через границу гетеропары. Это может служить качественным объяснением наблюдавшейся в [10,11] аномально сильной зависимости от гидростатического давления тока через X-долину в туннельном диоде AlAs/GaAs/AlAs.

Таким образом, в рамках точно решаемой квазиодномерной модели мы получили условия сшивки огибающих волновых функций для случая контакта материалов, в электронном спектре одного из которых имеется боковая долина. Характер междолинного смешивания существенно определяется специфической комбинацией параметров материалов и самой границы. На основе граничных условий найдены аналитические выражения для коэффициентов прохождения и междолинной конверсии на границе, которые резонансным образом зависят от указанной комбинации параметров. Предсказываются дополнительные пики вольт-амперных характеристик трехслойных гетероструктур и их зависимость от давления.

Авторам приятно поблагодарить Е.Л.Ивченко и В.А.Волкова за полезные обсуждения.

Настоящая работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 96-02-19028) и программы "Университеты России" (грант № 95-0-7.2-151).

## Список литературы

- [1] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. **B 40**, 11619 (1989).
- [2] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. Phys. Rev. **B 20**, 13498 (1993).
- [3] Л.С. Брагинский, Д.А. Романов. ФТТ **37**, 7, 2122 (1995).
- [4] D.A. Romanov, O.V. Kibis. Phys. Lett. **A 178**, 335 (1993).
- [5] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978), С. 615.
- [6] А.Л. Мусатов, В.Л. Коротких, В.Д. Шадрин. ФТТ **23**, 3, 929 (1981).
- [7] H.-J. Drouhin, C. Hermann, G. Lampel. Phys. Rev. **B 31**, 3859 (1985).
- [8] Е.Л. Нолле. ФТТ **31**, 1, 225 (1989).
- [9] А.С. Терехов, Д.А. Орлов. Письма в ЖЭТФ **59**, 827 (1994).
- [10] J.H. Burnett et al. Phys. Rev. **B 47**, 1991 (1993).
- [11] S.S. Lu, M.I. Natan, C.C. Meng. J. Appl. Phys. **60**, 525 (1991).