

Электронные состояния в сверхрешетках $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$

© Г.Ф. Караваев[¶], В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 10 сентября 2001 г. Принята к печати 12 ноября 2001 г.)

Исследованы электронные состояния для энергий в зоне проводимости сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$ (111). Расчеты проведены на основе обобщенной на рассматриваемые структуры модели сшивания огибающих функций на гетерограницах. Исследованы минизонные спектры, симметрия и локализация волновых функций, а также вероятности межминизонного инфракрасного поглощения. Показано, что последние имеют значительную величину не только при поляризации света в направлении оси роста сверхрешетки, но также и при нормальном к поверхности структуры падении световой волны. Отмечена перспективность изученных сверхрешеток в качестве материала для фотоприемников инфракрасного излучения.

1. Введение

Как известно, электронные свойства сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$ (111), где x — концентрация атомов Al в твердых растворах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в основном определяются электронами X -, Γ - и L -долин материалов слоев. Отметим, что ΓL - и XL -смешивания состояний электронов при (111)-ориентации гетерограниц имеют место в различных точках зон Бриллюэна для сверхрешеток (см. рис. 1 в [1]). Если число $N + M$ кратно трем, то в точках вдоль линии ΓA (или вдоль линии ΓZ , когда $N + M$ не кратно трем) существенно ΓL -взаимодействие, при этом X -состояния не влияют на формирование минизон и не существует XL -смешивания. Такое XL -смешивание имеет место вдоль линии $M\bar{L}$ (или DA), при этом отсутствует вклад Γ -состояний в электронный спектр. Вклад Γ -, X - и L -долин в формирование нижней части минизонного спектра зависит от взаимного расположения Γ -уровня в квантовой яме $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и X -уровня в AlAs . Ясно, что оно определяется числом монослоев M , N и концентрацией x . В работе [1] мы рассмотрели минизонные электронные энергетические спектры сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N$ (111), в которых главную роль играют электронные состояния X - и L -долин. Для того чтобы исключить влияние Γ -электронов GaAs , мы ограничились случаем достаточно тонких слоев GaAs . В настоящей работе мы растространили проведенный ранее анализ на случай сверхрешеток, в которых слои $(\text{GaAs})_N$ заменены слоями твердого раствора $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$. В этом случае влияние Γ -электронов можно исключить выбором величины x , характеризующей состав твердого раствора, а потому отказаться от ограничения на толщину соответствующих слоев.

2. Методика расчета

Исследования электронных энергетических спектров в сверхрешетках $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$ проведены с использованием методики, изложенной в [1] для структур

$(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N$. Кратко сформулируем основные положения, лежащие в основе этой методики. Для расчета электронной структуры мы применяем метод матрицы рассеяния [2–4]. Как известно, матрица рассеяния содержит всю информацию о системе, и после ее вычисления можно получить решение различных квантовомеханических задач, в том числе исследовать электронные состояния в сверхрешетках. Для упрощения расчетов мы используем приближение огибающих функций [1,2]. Исследования, проведенные в [1] и в настоящей работе, показывают, что для нашей системы можно ограничиться трехдолинным описанием рассеяния электронов на гетерограницах. Это X_1 , X_3 , L_1 — долины зоны проводимости, относящиеся, например, к точкам $\mathbf{k}_x = (00\bar{1})2\pi/a$ и $\mathbf{k}_L = (11\bar{1})\pi/a$ зоны Бриллюэна объемного кристалла (a — его постоянная решетки). Эти точки попадают в одну точку поверхностной зоны Бриллюэна, поэтому на гетерограницах возмож-

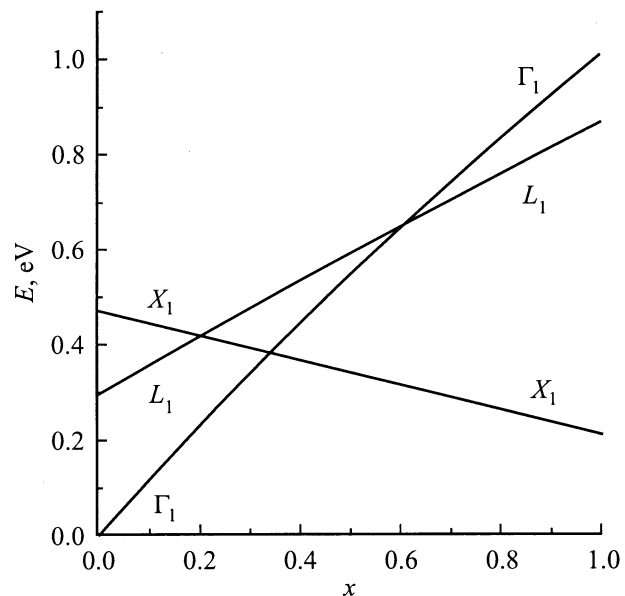


Рис. 1. Зависимость положения уровней Γ_1 -, X_1 - и L_1 -долин от концентрации x алюминия в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

[¶] E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru

но $X-L$ -рассеяние. Матрица сшивания для огибающих функций в таком приближении имеет размерность 6×6 . Матричные элементы этой матрицы, как и в [1,2], были найдены с помощью псевдопотенциальных расчетов. Как показали наши исследования, элементы матрицы сшивания практически линейно зависят от параметра состава x . Необходимые для расчета значения энергий в X и L точках зоны Бриллюэна и матричные элементы оператора импульса для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при различных x также определены методом псевдопотенциала. На рис. 1 представлены концентрационные зависимости энергий Γ_1 -, X_1 -, L_1 -уровней в зоне проводимости $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Из рисунка видно, что с увеличением концентрации x быстро увеличиваются энергии уровней Γ_1 и L_1 . Поэтому их влияние с ростом x будет ослабляться, и главную роль в формировании нижних минизон будут играть X -уровни. Матричные элементы оператора импульса, существенные в нашей модели, линейным образом и слабо зависят от параметра x .

3. Анализ спектра и волновых функций

Подобно статье [1], в настоящей работе был проделан расчет электронного спектра для сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$, обозначаемых далее (M, N) , где $N = 7-9$; $M = 7-14$, при восьми значениях параметра x в интервале от нуля до 0.7. В процедуру расчетов были внесены несущественные изменения. Отметим, что при $x = 0$ расчет полностью совпадает с расчетом, проделанным в статье [1] для структур $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N$. Рассмотрим полученные результаты на примере сверхрешеток (7, 7), (9, 9) и (9, 14). Качественное различие энергетических спектров для этих структур наблюдается лишь при $x = 0$, поскольку только в этом случае главный вклад в формирование второй минизоны в структуре (9, 14) дает L_1 -уровень в GaAs. Для $x > 0.1$ главный вклад в формирование и первой, и второй минизоны дают X_1 -уровни, поэтому для этих значений x качественного различия в поведении спектральных линий для структур не наблюдается. Заметим, также, что при стремлении x к единице спектральные линии всех структур принимают вид, характерный для зоны проводимости AlAs, помещенной в зону Бриллюэна сверхрешетки. Различие в наклоне третьей минизоны, связанное с четностью количества монослоев [1], наблюдается только для структур с $x = 0$ и $x = 0.1$, где третья минизона обусловлена преобладающим вкладом L_1 -долины в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. При $x > 0.1-0.3$ главный вклад в энергию третьей минизоны дает X_1 -долина $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, и, следовательно, наклон третьей минизоны уже не зависит от четности количества слоев $N + M$. Зависимость положения минизонных уровней от параметра x для структур (9, 9) и (9, 14) при $Q = 0$ (сплошные линии) и $Q = \pi/d$ (пунктирные линии) представлена на рис. 2, *a* и *b* соответственно. Здесь Q — компонента сверхреше-

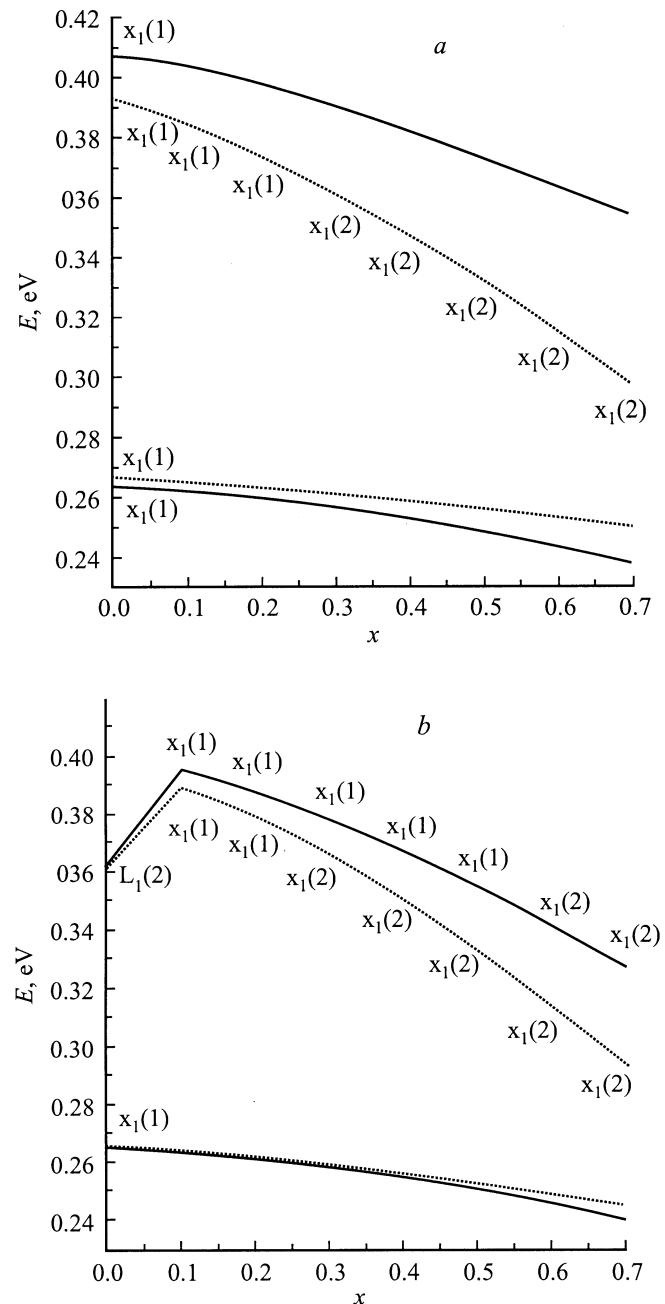


Рис. 2. Зависимость положения двух первых минизонных уровней от концентрации x алюминия в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: *a* — в сверхрешетке (9, 9); *b* — в сверхрешетке (9, 14). Сплошные линии соответствуют уровням в точке $Q = 0$, а пунктирные линии — уровням в точке $Q = \pi/d$. Обозначения $X_1(i)$ и $L_1(i)$ указывают на происхождение состояний, i — соответствует слою AlAs, 2 — слою $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

точного волнового вектора в направлении (111) (вдоль линий $M\bar{L}$ или DA), отсчитанная от точки M (или D), в которую сворачивается точка $X = (00\bar{1})2\pi/a$. Значение $Q = 0$ соответствует точке M для сверхрешетки (9, 9) и D для сверхрешетки (9, 14) зоны Бриллюэна, а значение $Q = \pi/d$ — точкам \bar{L} и A соответственно [1].

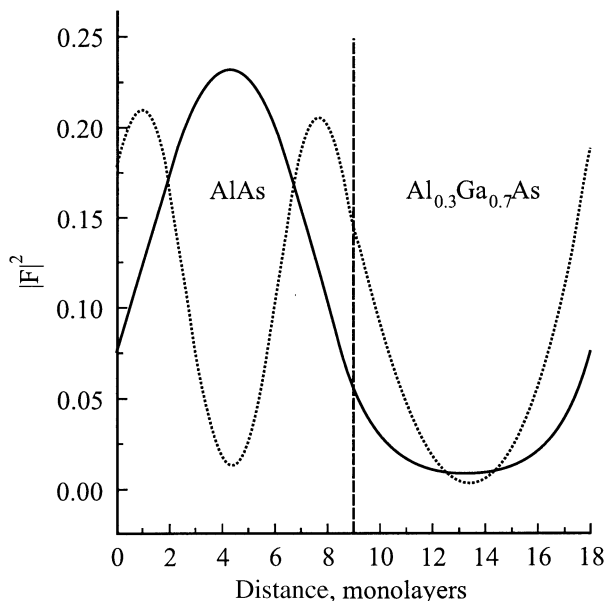


Рис. 3. Средняя по элементарной ячейке объемного кристалла электронная плотность для первой (сплошная линия) и второй (пунктирная линия) минизон в точке $Q = \pi/d$ в пределах периода сверхрешетки (9,9) при $x = 0.3$.

На рис. 2, *a* и *b* также указано происхождение соответствующих уровней. Из рисунков видно, что нижняя минизона для сверхрешеток (9,9) и (9,14) связана с X_1 -состояниями в слоях AlAs. Вторая минизона имеет более сложное происхождение. Для структуры (9,9) в точке $Q = 0$ она обусловлена X_1 -состояниями в слоях AlAs при любом составе твердого раствора, а в точке $Q = \pi/d$ — X_1 -состояниями в слоях AlAs при $x < 0.3$ и X_1 -состояниями в слоях $Al_x Ga_{1-x} As$ при $x > 0.3$. Для структуры (9,14) при x , близких к нулю, вторая минизона обусловлена L_1 -состояниями $Al_x Ga_{1-x} As$, а при $0.1 < x < 0.3$ — X_1 -состояниями в слоях AlAs. А начиная с $x = 0.3$ происхождение состояний в разных точках зоны Бриллюэна для этой минизоны различно. Так, в точке $Q = \pi/d$ они обусловлены X_1 -состояниями $Al_x Ga_{1-x} As$, а в точке $Q = 0$ — X_1 -состояниями в слоях AlAs (до $x = 0.6$) и X_1 -состояниями в слоях твердого раствора (после $x = 0.6$).

На рис. 3 для структуры (9,9) представлена усредненная по элементарной ячейке объемного кристалла полная электронная плотность (т.е. электронная плотность, вычисленная с помощью огибающих функций) для $x = 0.3$ при $Q = \pi/d$ для двух нижних уровней. На границе слоев наблюдается небольшой разрыв, что не противоречит условию непрерывности тока через гетерограницу, так как ток (разумеется, удовлетворяющий условию непрерывности) определяется точными волновыми функциями, а не входящими в них огибающими функциями. Разрыв огибающих волновых функций связан с различием блоховских волновых функций в AlAs и $Al_x Ga_{1-x} As$. Видно, что электронная плотность в основ-

ном сосредоточена в слое AlAs для первой минизоны и в слоях AlAs (49%) и $Al_x Ga_{1-x} As$ (51%) для второй минизоны. Распределение электронной плотности для первой и второй минизон при $Q = \pi/d$ в структурах (7,7) и (9,14) похоже на распределение, представленное на рис. 3.

При $Q = 0$ для x , близких к нулю, в структурах (7,7) и (9,14) электронная плотность первого уровня локализована в слое AlAs, а второго уровня — в слое $Al_x Ga_{1-x} As$. Это объясняется тем, что для этих структур при $x = 0$ преобладающий вклад в энергию второй минизоны обусловлен L_1 -долиной в $Al_x Ga_{1-x} As$. А при $x > 0.1$ для обеих минизон электронные плотности сосредоточены в основном в слое AlAs.

Аналогичное поведение наблюдается и для большинства других исследованных структур.

Подобно тому, как это сделано в статье [1], для всех вышеперечисленных сверхрешеток был проделан расчет величины

$$\Sigma = |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(1)}^2 + |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(2)}^2 + |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(3)}^2.$$

Здесь $\mathbf{P}_{12} = \langle \Psi_1(\mathbf{r}) | \mathbf{P} | \Psi_2(\mathbf{r}) \rangle$ — матричный элемент импульса между волновыми функциями первой и второй минизон, разделенный на размерную величину \hbar/a (\hbar — постоянная Планка), \mathbf{e} — вектор поляризации световой волны, который выбирался так, чтобы величина Σ была максимальной, индексы в скобках нумеруют один из трех возможных вариантов выбора точек \mathbf{k}_x и \mathbf{k}_L , получающихся из выбранных ранее поворотами на 120° вокруг оси (111). Эта величина характеризует способность сверхрешетки к поглощению инфракрасного (ИК) излучения. Расчет показал, что структуры $(AlAs)_M (Al_x Ga_{1-x} As)_N$ (111) способны достаточно эффективно поглощать нормально падающий свет (см. таблицу). Из полученных результатов видно, что величина Σ для нормального падения света приблизительно в 3 раза меньше значения этой величины при боковом падении света на структуру. Но поскольку нормальное

Величина Σ , характеризующая способность поглощения света, для разных сверхрешеток (M, N) , в различных точках зоны Бриллюэна Q , при трех разных значениях x и двух вариантах падения излучения на структуру

(M, N)	x	$Q = 0$		$Q = \pi/2d$		$Q = \pi/d$	
		нормальное	боковое	нормальное	боковое	нормальное	боковое
(7, 7)	0.0	0.012	0.035	0.333	0.902	0.630	1.569
(7, 7)	0.3	0.153	0.503	0.296	0.780	0.621	1.570
(7, 7)	0.6	0.065	0.216	0.152	0.414	0.590	1.556
(9, 9)	0.0	0.221	0.649	0.322	0.895	0.409	1.094
(9, 9)	0.3	0.210	0.625	0.293	0.794	0.410	1.075
(9, 9)	0.6	0.109	0.329	0.187	0.509	0.381	1.014
(9, 14)	0.0	0.005	0.014	0.004	0.013	0.002	0.014
(9, 14)	0.3	0.284	0.799	0.305	0.825	0.337	0.894
(9, 14)	0.6	0.171	0.469	0.196	0.527	0.272	0.723

падение света способно задействовать площадь облучаемой поверхности на несколько порядков большую, чем при боковом падении, полученные результаты являются вполне приемлемыми. Сделанный вывод представляет интерес и требует качественного объяснения. Как и в статье [1], мы провели анализ, который показал, что важную роль играет учет в волновых функциях тех малых добавок, которые связаны с X_5 -состояниями. Мы проанализировали их вклад в полную электронную плотность для состояний двух нижних минизон. Оказалось, что при $Q = 0$ с ростом x для первой минизоны вклад X_5 -состояний достаточно сильно убывает в обоих слоях сверхрешетки, тогда как для второй минизоны он незначительно увеличивается в слое твердого раствора и слабо изменяется в слое AlAs. В целом вклад этих состояний в электронную плотность мал. По сравнению с полной электронной плотностью он на 2 порядка меньше, а амплитуда соответствующей волновой функции меньше на порядок. При поляризации световой волны e перпендикулярно оси (111) основной вклад в матричный элемент импульса вносят слагаемые типа $\langle F_{X_{5x}}(z') | F_{X_1}(z') \rangle \langle X_{5x} | e \cdot \mathbf{P} | X_1 \rangle$. Эти вклады существенны благодаря большой величине матричных элементов $\langle X_5 | \mathbf{P} | X_1 \rangle$ и $\langle X_5 | \mathbf{P} | X_3 \rangle$. По оценкам, величина $\langle F_{X_{5x}}(z') | F_{X_1}(z') \rangle$ порядка 0.1, а матричный элемент $\langle X_{5x} | e \cdot \mathbf{P} | X_1 \rangle$ порядка 6 (в безразмерных единицах). Поэтому величина Σ при нормальном падении света оказывается столь значительной. Относительно малые значения величины Σ в структурах (7, 7), (9, 14) ($x = 0$) при $Q = 0$ объясняются тем, что в этой сверхрешетке первый и второй энергетические уровни образовались под влиянием различных долин. Некоторое увеличение параметра Σ при $Q = \pi/2d$ и $Q = \pi/d$ по сравнению со случаем $Q = 0$ обусловлено в основном возрастанием вклада X_5 -состояний в слое твердого раствора для первой минизоны и возрастанием вклада X_1 -состояний в этом же слое для второй минизоны. Заметим, что с ростом x величина Σ , характеризующая способность к поглощению света, при $Q = 0$ падает — при росте x от 0 до 0.7 она уменьшается в 3 раза. При $Q = \pi/d$ с ростом x от 0 до 0.7 падение величины Σ незначительное, но в интервале x от 0.9 до 1 наблюдается ее резкое уменьшение до нуля.

4. Заключение

Рассмотренные в настоящей работе минизонные спектры и оптические характеристики сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N(111)$ показывают, что на основе подобных сверхрешеток в принципе могут быть получены структуры, поглощающие инфракрасное излучение на межминизонных переходах. Отличительной особенностью таких структур является возможность поглощения света, нормально падающего на плоскость сверхрешетки. Использование в сверхрешетках слоев из твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ вместо чистого GaAs

позволяет увеличить толщину этих слоев, что должно способствовать уменьшению темнового тока. Поэтому такие сверхрешетки представляют интерес в качестве материала для создания фотоприемников ИК излучения. Разработанная в работе модель позволяет достаточно точно и с относительно малыми затратами машинных ресурсов проводить анализ различных сложных структур, которые могут быть созданы на основе AlAs и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 00-02-17996.

Список литературы

- [1] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов. ФТП, **36** (5), 558 (2002).
- [2] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9946 (1988).
- [3] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992).
- [4] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35**, 105 (2001).

Редактор Л.В. Беляков

Electronic states in $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N(111)$ superlattices

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov, R.M. Egunov

Siberian Physical & Techn. Inst.
at Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract Electronic states for energies in the conduction band of superlattices $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N(111)$ have been studied. Calculations are carried out on the basis of the generalised on considered structures envelope-function model of interface band mixing. The miniband spectra, the symmetry and localization of wave functions, and probabilities of interminiband infrared (IR) absorption are investigated. It is shown, that the latter have a considerable magnitude not only under light polarization in the direction of an axis of the superlattice growth, but also under a normal incidence of the light wave at the structure surface. The importance of the investigated superlattices as materials for photodetectors of IR-radiation is marked.