07

Дно размерной подзоны в сверхрешетке с сильно связанными мелкими квантовыми ямами

© *А.Б. Пашковский*

АО „НПП „Исток“ им. Шокина“, Фрязино, Московская обл., Россия
E-mail: solidstate10@mail.ru

Поступило в Редакцию 20 июня 2025 г.
В окончательной редакции 16 июля 2025 г.
Принято к публикации 25 июля 2025 г.

На основе аналитического решения дисперсионного уравнения проведена оценка энергетического положения дна размерной подзоны в мелких сверхрешетках. Показано, что для верхних долин сверхрешеток GaAs/AlAs, используемых в гетероструктурах полевых транзисторов, глубина дна размерной подзоны относительно верха барьера находится на уровне 0.11−0.13 eV.

Ключевые слова: сверхрешетка, размерные подзоны, потенциальный барьер.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.21.61522.20411

Как показал эксперимент [1] и теоретические оценки [2–4], использование короткопериодных сверхрешеток GaAs/AlAs может заметно улучшать характеристики гетероструктурных полевых транзисторов. Однако при этом возникает вопрос, как будут вести себя горячие электроны в области домена сильного поля при переходе в верхние долины полупроводника. Ведь в $Al_xGa_{1-x}As$ при мольной доле алюминия $x = 0.4$ происходит инверсия X- и Г-долин. Таким образом, если для гетероперехода GaAs/AlAs по Г-долине слой AlAs образует барьер высотой 1.04 eV, то по X-долине AlAs это уже квантовая яма глубиной около 0.26 eV [5] (рис. 1). Возникает закономерный вопрос: не будут ли электроны после перехода в узкозонном канале в верхние долины и дальнейшего перехода в квантовые ямы AlAs там релаксировать и задерживаться? В принципе подобные процессы могли бы отрицательным образом сказываться на характеристиках прибора. По сути дела это вопрос, как соотносится расстояние от нижнего квантового уровня в яме по X-долине до края ямы с тепловой энергией электронов. Для одного или двух барьеров не представляет сложности оценить высоту квантовых уровней [6]. Однако вопрос интересен и для существенно большего числа барьеров [1,2]. Нижний квантовый уровень в наборе квантовых ям (фрагменте сверхрешетки) не может быть ниже дна минизоны самой сверхрешетки. Поэтому для оценок возможного влияния подобных процессов следует знать высоту дна размерной подзоны рассматриваемой сверхрешетки.

Дисперсионное уравнение для потенциала Кронинга–Пени (рис. 1), который описывает данную структуру, давно известно и представлено в многочисленных учебниках, например [6,7].

Для блоховских функций

$$\Psi(x) = u(x)\,\exp(iKx) \qquad (1)$$

(здесь $u(x)$ — амплитуда блоховской функции, периодичная с периодом сверхрешетки, K — волновой вектор), для которых условие, что K является действительным числом и определяет разрешенные для всех существующих случаев состояния, это достаточно сложное трансцендентное уравнение относительно трех переменных, имеющее вид

$$\cos\big(K(a+b)\big) = \cos(ka)\mathrm{ch}(\gamma b) - 0.5\left[\frac{k}{\gamma} - \frac{\gamma}{k}\right]\sin(ka)\mathrm{sh}(\gamma b), \qquad (2)$$

что, по всей видимости, в большинстве случаев не дает возможности для аналитического анализа без его существенного упрощения. Не сильно облегчает ситуацию и тот факт, что две переменные — волновой вектор k и декремент затухания γ — связаны:

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2}E}. \qquad (3)$$

Здесь U_0 — высота барьера, E — энергия электрона (отсчет идет от дна X-долины AlAs), m_1, m_2 — эффективная масса электрона в яме и барьере, $\hbar$ — постоянная Планка.

Поэтому ранее были разработаны различные подходы (см., например, работу [7]), позволившие сделать ряд общих выводов, в частности о проседании дна зоны проводимости относительно квантового уровня в слабо связанных ямах. Однако похоже задача о сверхрешетке с набором мелких, сильно связанных ям, разделенных тонкими барьерами, подобная описанной выше, раньше просто не возникала.

Рассмотрим уравнение (2) при $K = 0$. В этом случае оно принимает вид

$$k^2\sin(ka)\mathrm{sh}(\gamma b) + 2k\gamma\big(1 - \cos(ka)\mathrm{ch}(\gamma b)\big) - \gamma^2\sin(ka)\mathrm{sh}(\gamma b) = 0. \qquad (4)$$

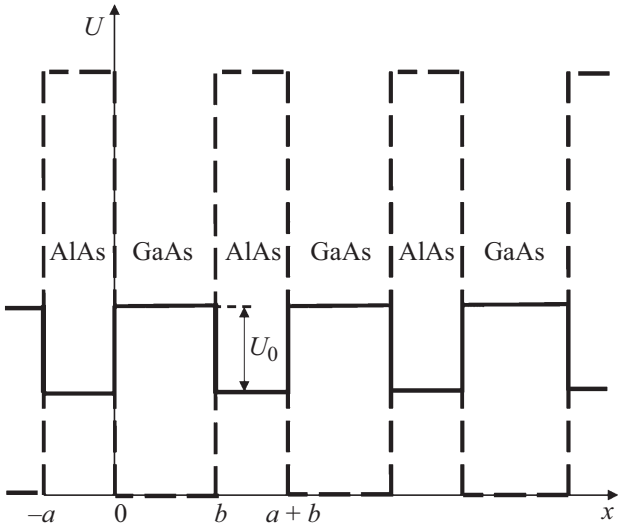


Рис. 1. Схематическая зонная диаграмма сверхрешетки AlAs/GaAs: сплошная линия — X-долина, штриховая — Г-долина. Отсчет ведется от дна Г-долины GaAs.

Разложим все входящие функции в ряд Тейлора в предположении малости входящих в них аргументов

$$\sin(ka) \approx ka, \qquad \cos(ka) \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2},$$

$$\mathrm{sh}(\gamma b) \approx \gamma b, \qquad \mathrm{ch}(\gamma b) \approx 1 + \frac{(\gamma b)^2}{2}. \tag{5}$$

Естественно, такое разложение имеет смысл в том случае, когда соответствующие аргументы достаточно малы. И синус, и косинус достаточно точно описываются первыми членами ряда при аргументе

$$k\,a < \pi/4. \tag{6}$$

Таким образом, высота квантового уровня в рассматриваемой мелкой яме должна быть как минимум в 15 раз меньше, чем в бесконечно глубокой яме с тем же расстоянием между стенками. В рассматриваемом случае при толщине барьера AlAs в три монослоя (примерно 7.5 Å) [1] и эффективной массе электрона в X-долине $0.55m_0$ [5] для бесконечно глубокой ямы это ~ 1.2 eV. При этом для одиночной ямы глубиной 0.26 eV высота уровня составляет 0.18 eV, а соответственно его глубина 0.08 eV. Следует отметить, что в разных источниках (см., например, работы [8,9]) данные по эффективным массам и междолинным зазорам могут отличаться.

В приближении (5) уравнение (3) сводится к выражению

$$k^2 a(a+b) - \gamma^2 b(a+b) + \frac{\gamma^2 k^2 a^2 b^2}{2} = 0, \tag{7}$$

а его решение относительно волнового вектора с учетом малости аргументов для входящих в него функций (а значит, последний член в (7) отбрасывается) становится очень простым

$$k^2 \approx \frac{b}{a}\gamma^2. \tag{8}$$

С учетом (3) для соответствующей энергии можно записать

$$E \approx \frac{m_2 b}{m_1 a + m_2 b} U. \tag{9}$$

А при близости или равенстве эффективных масс

$$E \approx \frac{b}{a+b} U. \tag{10}$$

Мы рассмотрели решение задачи при $K = 0$ и соответственно $\cos\big(K(a+b)\big) = 1$. В этом случае любое малое изменение K ведет к увеличению волнового вектора k. Для удобства без нарушения общности можно записать $\cos\big((K+\Delta K)(a+b)\big) = 1 - \alpha\gamma^2 b^2$. Здесь α — малая величина. Легко показать, что в этом случае величина волнового вектора в рассматриваемой системе возрастает

$$k^2 \approx \frac{b}{a}\gamma^2\left(1 + \frac{2b\alpha}{a+b}\right). \tag{11}$$

Таким образом, в данном случае формула (10) описывает разрешенное состояние в решетке с минимальной энергией — дно размерной подзоны. Следует отметить, что даже с учетом (10) в интересующей нас решетке условие малости аргумента (6) не выполняется. Однако в этом случае разложение в ряд Тейлора можно приближенно записать в следующем виде:

$$\sin(ka) \approx ka - \frac{(k_0 a)^2 ka}{6},$$

$$\cos(ka) \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2} + \frac{(k_0 a)^2 (ka)^2}{24},$$

$$\mathrm{sh}(\gamma b) \approx \gamma b + \frac{(\gamma_0 b)^2 \gamma b}{6},$$

$$\mathrm{ch}(\gamma b) \approx 1 + \frac{(\gamma b)^2}{2} + \frac{(\gamma_0 b)^2 (\gamma b)^2}{24}, \tag{12}$$

где k_0, γ_0 — решения (8) уравнения (7).

В приближении равенства эффективных масс в яме и барьере ($0.55m_0$ и $0.5m_0$) [5], вводя обозначение

$$G^2 = \gamma^2 + k^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} U \tag{13}$$

и подставляя разложение (12) в уравнение (4), после элементарных преобразований получаем

$$k^2 \approx \gamma^2 \frac{b}{a}\left(1 + \frac{ab(2b^2 + 2ab - 2a^2)G^2}{12(a+b)^2}\right)$$

$$\times \left(1 + \frac{ab(2b^2 + 4ab - a^2)G^2}{12(a+b)^2}\right)^{-1}. \tag{14}$$

Решение (14) справедливо для $k\,a < \pi/2$, что вполне достаточно для поставленной задачи ($k(U_0)\,a = \pi/2.15$). На рис. 2 приведен график функции

$$f\left(\frac{b}{a}, aG\right) = \left(1 + \frac{b(b^2 + 2ab - 2a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2}\right)$$

$$\times \left(1 + \frac{b(2b^2 + 4ab - a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2}\right)^{-1}. \tag{15}$$

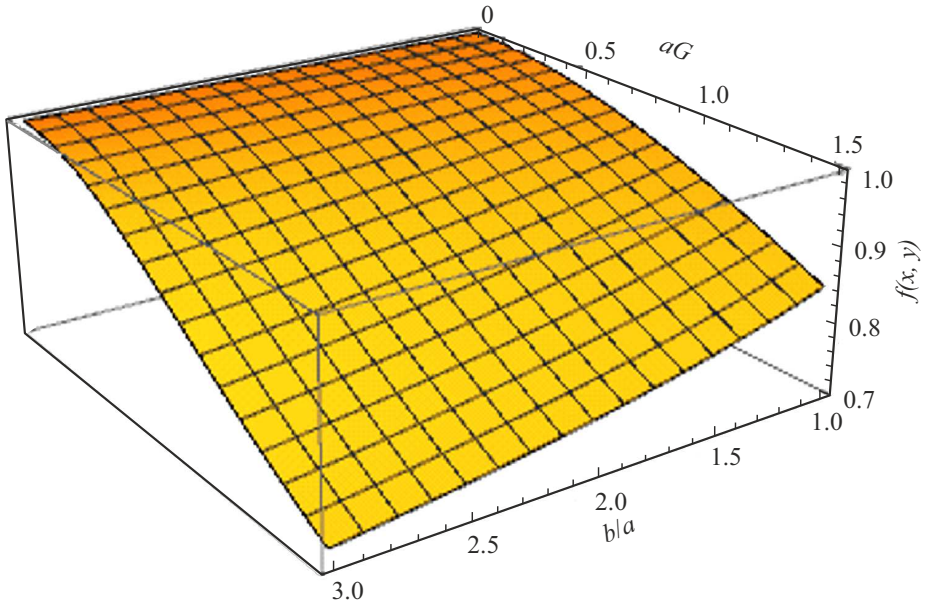


Рис. 2. График поправочной функции (15) в зависимости от отношения толщины барьера b к размеру квантовой ямы a и произведения $aG = a\sqrt{\gamma^2 + k^2}$.

Из графика (а это величина поправочного коэффициента к (7)) видно, что в интересующем нас диапазоне параметров значение поправочной функции (15) находится в диапазоне 0.75–0.85.

Следует отметить, что поправка к (8) в (14) принципиальным образом отличается от той, что можно было бы получить из (7):

$$k^2 \approx \frac{\gamma^2 b}{a}\left(1 - \frac{a\gamma^2 b^2}{2(a+b)}\right), \tag{16}$$

если не отбросить в (7) последнее слагаемое как малое. Это обусловлено тем, что в (14) учтены все члены малости соответствующего порядка, а в (7), если не отбросить последний член, — нет.

Разложение (12) можно еще уточнить, добавив члены следующего порядка малости:

$$\sin(ka) \approx ka - \frac{(k_0 a)^2 ka}{6} + \frac{(k_0 a)^4 ka}{120},$$

$$\cos(ka) \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2} + \frac{(k_0 a)^2 (ka)^2}{24} - \frac{(k_0 a)^4 (ka)^2}{720},$$

$$\mathrm{sh}(\gamma b) \approx \gamma b + \frac{(\gamma_0 b)^2 \gamma b}{6} + \frac{(\gamma_0 b)^4 \gamma b}{120},$$

$$\mathrm{ch}(\gamma b) \approx 1 + \frac{(\gamma b)^2}{2} + \frac{(\gamma_0 b)^2 (\gamma b)^2}{24} + \frac{(\gamma_0 b)^4 (\gamma b)^2}{720}. \tag{17}$$

Его подстановка в уравнение (3) позволяет уточнить формулу (13):

$$k^2 \approx \frac{\gamma^2 b}{a}\left(1 + \frac{ab(b^2 + 2ab - 2a^2)G^2}{12(a+b)^2} + \frac{a^2 b^2 (b^3 + 3ab^2 - 10a^2 b + 3a^3)G^4}{360(a+b)^3}\right) \times \left(1 + \frac{ab(2b^2 + 4ab - a^2)G^2}{12(a+b)^2} + \frac{a^2 b^2 (3b^3 + 5ab^2 - 12a^2 b + a^3)G^4}{360(a+b)^3}\right)^{-1}. \tag{18}$$

Величина этого уточнения составляет менее 10 % даже при $ka = \pi$ (рис. 3). На этом рисунке приведен график функции

$$f\left(\frac{b}{a}, aG\right) = \left(1 + \frac{b(b^2 + 2ab - 2a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2} + \frac{b^2 (b^3 + 3ab^2 - 10a^2 b + 3a^3)a^4 G^4}{360a^2 (a+b)^3}\right) \times \left(1 + \frac{b(2b^2 + 4ab - a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2} + \frac{b^2 (3b^3 + 5ab^2 - 12a^2 b + a^3)a^4 G^4}{360a^2 (a+b)^3}\right)^{-1} - \left(1 + \frac{b(b^2 + 2ab - 2a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2}\right) \times \left(1 + \frac{b(2b^2 + 4ab - a^2)a^2 G^2}{12a(a+b)^2}\right)^{-1}. \tag{19}$$

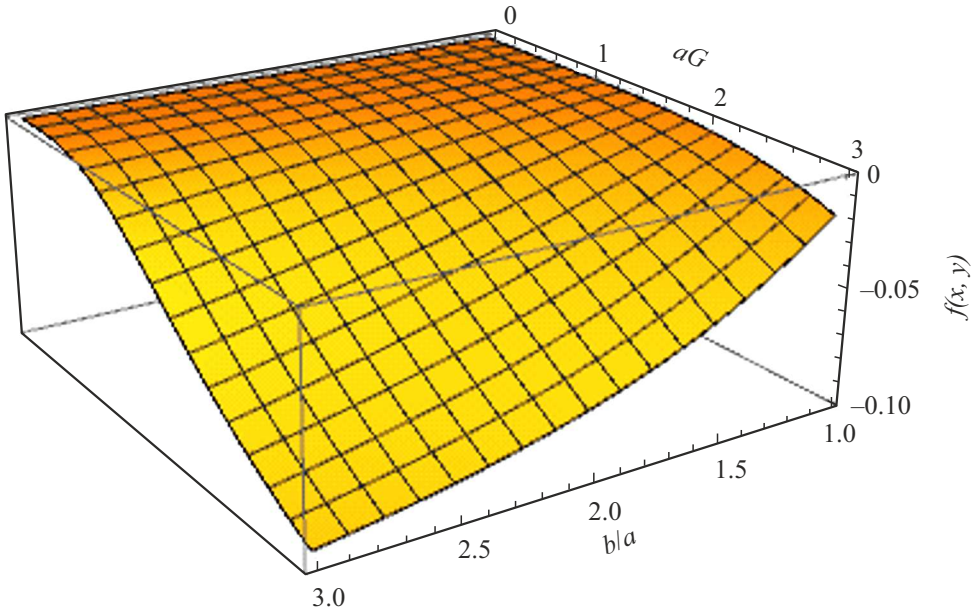


Рис. 3. График поправочной функции (19) в зависимости от отношения толщины барьера b к размеру квантовой ямы a и произведения $aG = a\sqrt{\gamma^2 + k^2}$.

С учетом (8), (12) и (19) дно размерной подзоны в рассматриваемой системе находится на глубине (расстояние от верха барьера до дна подзоны) 0.11−0.13 eV. С одной стороны, это существенно (в 3−3.5 раза) больше энергии электронов при температурах кристаллической решетки до 450 K (максимальная допустимая температура в канале транзистора на основе GaAs). С другой стороны, в верхние долины обычно попадают достаточно горячие электроны, для которых такой потенциальный барьер не слишком эффективен. Однако для устранения возможных релаксационных эффектов и повышения эффективности системы барьеров со стороны подложки в таких структурах, по-видимому, следует делать дополнительное донорно-акцепторное легирование [2]. Со стороны затвора, особенно в очень тонких структурах, скорее всего, будет достаточно потенциала, связанного с поверхностными состояниями.

С увеличением толщины слоев AlAs дно подзоны будет опускаться, приближаясь ко дну квантовой ямы, а высота барьера, который должен преодолеть электрон для выхода из ямы, увеличиваться. Уже при ширине слоя 10 атомных монослоев даже высота уровня в соответствующей одиночной квантовой яме всего 0.05 eV, а при ширине более 12 монослоев вообще появляется второй квантовый уровень.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что для верхних долин сверхрешеток GaAs/AlAs, используемых в гетероструктурах полевых транзисторов, глубина дна размерной подзоны относительно верха соответствующего барьера находится на уровне 0.11−0.13 eV, т. е. эффективная высота барьера почти вдвое меньше, чем в структуре со слоями AlAs толщиной более 10 атомных монослоев.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A.B. Pashkovskii, S.A. Bogdanov, A.K. Bakarov, A.B. Grigorenko, K.S. Zhuravlev, V.G. Lapin, V.M. Lukashin, I.A. Rogachev, E.V. Tereshkin, S.V. Shcherbakov, IEEE Trans. Electron Dev., **68** (1), 53 (2021). DOI: 10.1109/TED.2020.3038373

[2] А.Б. Пашковский, С.А. Богданов, А.К. Бакаров, К.С. Журавлев, В.Г. Лапин, В.М. Лукашин, С.Н. Карпов, И.А. Рогачев, Е.В. Терешкин, ФТП, **57** (1), 21 (2023). DOI: 10.21883/FTP.2023.01.54926.3554 [A.B. Pashkovskii, S.A. Bogdanov, A.K. Bakarov, R.S. Zhuravlev, V.G. Lapin, V.M. Lukashin, S.N. Karpov, I.A. Rogachev, E.V. Tereshkin, Semiconductors, **57** (1), 20 (2023). DOI: 10.21883/SC.2023.01.55616.3554].

[3] D.A. Safonov, A.N. Vinichenko, Yu.D. Sibirmovsky, N.I. Kargin, I.S. Vasil'evskii, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., **498**, 012031 (2019). DOI: 10.1088/1757-899X/498/1/012031

[4] А.Н. Виниченко, В.П. Гладков, Н.И. Каргин, М.Н. Стриханов, И.С. Васильевский, ФТП, **48** (12), 1660 (2014). [A.N. Vinichenko, V.P. Gladkov, N.I. Kargin, M.N. Strikhanov, I.S. Vasil'evskii, Semiconductors, **48** (12), 1619 (2014). DOI: 10.1134/S1063782614120227].

[5] S. Adachi, *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors* (John Wiley & Sons, N.Y., 2009).

[6] В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин, *Основы наноэлектроники* (Логос, М., 2006).

[7] М. Херман, *Полупроводниковые сверхрешетки* (Мир, М., 1989).

[8] M. Fischetti, IEEE Trans. Electron Dev., **38** (3), 634 (1991). DOI: 101109/16.75176

[9] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, Appl. Phys. Lett., **89** (3), 5815 (2001). DOI: 101063/1.1368156