

©1995

## КРАЕВЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

*М.Р.Владимирова, А.В.Кавокин*

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,  
194021, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступила в Редакцию 13 января 1995 г.)

Электронный спектр вблизи границ полупроводниковых сверхрешеток рассчитан методом матриц переноса. Найдены коэффициенты отражения и пропускания электронных волн на контакте двух сверхрешеток. Показано, что фазы обоих коэффициентов существенно зависят от типа контакта (яма-барьер или барьер-яма). Рассчитан коэффициент подбарьерного и надбарьерного прохождения электрона через ограниченную сверхрешетку. Показано, что пики и провалы в частотной зависимости коэффициента прохождения обусловлены интерференцией волн, отраженных от левой и правой границ сверхрешетки. Рассмотрены различные типы локализованных электронных состояний на границах сверхрешеток. В частности, показано, что благодаря перестройке зонной структуры кристалла за счет сверхрешеточного потенциала дискретные локализованные состояния возникают и в надбарьерной области. Рассмотрены таммовские состояния на границе двух сверхрешеток и локализованные состояния электрона в «суперквантовой яме» — ограниченной сверхрешетке, окруженной другой сверхрешеткой. Найдены критерии применимости приближений: бесконечной сверхрешетки для ограниченной сверхрешетки, мини-зонной эффективной массы и граничных условий Бастарда для сверхрешеточных электронных огибающих.

Электронное состояние в бесконечном периодическом прямоугольном потенциале было рассчитано впервые Кронигом и Пенни более 60 лет назад [1]. В 70-е годы с появлением реальных полупроводниковых сверхрешеток были поставлены и решены наиболее актуальные с точки зрения лазерной техники задачи об эффекте Штарка и резонансном туннелировании в сверхрешетке [2,3]. В то же время ряд важных вопросов до сих пор остается невыясненным. В частности, это касается краевых электронных состояний в сверхрешетке.

В реальной структуре сверхрешетка является ограниченной и, следовательно, электронный спектр в той или иной степени испытывает влияние границ. Сверхрешетка может граничить с ямой, с барьером или в общем случае с другой сверхрешеткой. Работ, описывающих такого рода контакты, опубликовано крайне мало. К их списку можно отнести работы [4,5], посвященные расчету электронного спектра дефектной области бесконечной сверхрешетки. С другой стороны, имеется ряд работ [6-9], посвященный микрокристаллическому анализу одиночного гетероперехода, что является аналогией контакта двух сверхрешеток. В центре внимания этих работ граничные условия (ГУ), накладываемые на электронные огибающие вблизи гетероперехода. Анализируются критерии применимости ГУ Бастарда

[<sup>10</sup>], которые используются в большинстве расчетов в рамках метода эффективной массы. Как можно заключить из этого анализа, метод эффективной массы и ГУ Бастарда могут быть применены для обширного класса гетероструктур. В то же время оставалось неясным, может ли метод эффективной массы быть распространен на сверхрешетки и могут ли ГУ Бастарда быть применены к контакту сверхрешеток.

И, наконец, совершенно не освещена в литературе проблема отражения и прохождения электронных волн на границах сверхрешеток, имеющая особую важность для полупроводниковых лазеров.

Целями данной работы являются: 1) расчет коэффициентов отражения и прохождения электронной волны на контакте двух полубесконечных сверхрешеток; 2) анализ энергетической зависимости коэффициентов прохождения электрона через ограниченную сверхрешетку; 3) расчет энергии локализованных электронных состояний в ограниченных сверхрешетках и на контактах сверхрешеток; 4) анализ применимости приближения эффективной массы и ГУ Бастарда на электронные огибающие в сверхрешетке.

Для решения этих задач используется метод матриц переноса [<sup>11,12</sup>], широко применяемый для решения оптических [<sup>13</sup>] и квантовомеханических задач [<sup>4,6</sup>] в периодических системах.

В первом разделе статьи формулируются основные принципы используемого расчетного метода. В качестве примера с помощью метода матриц переноса выводится дисперсионное уравнение для электрона в бесконечной сверхрешетке.

Второй раздел посвящен выводу формул для коэффициента отражения электронной волны от контакта двух сверхрешеток и от ограниченной сверхрешетки. Проанализирована возможность существования локализованных электронных состояний в этих системах и рассчитана энергия локализованных электронных состояний в ограниченных сверхрешетках на основе полупроводниковых соединений GaAs, AlAs, AlGaAs.

В третьем разделе обсуждаются результаты расчетов коэффициентов пропускания через контакт сверхрешеток и ограниченную сверхрешетку типа AlAs/GaAs. Сравняются различные типы контактов, случаи надбарьерного и подбарьерного пропускания, исследуется коэффициент пропускания, в зависимости от числа периодов ограниченной сверхрешетки. Анализируются критерии применимости метода эффективной массы и ГУ Бастарда для контакта сверхрешеток.

## 1. Метод матриц переноса в приложении к полупроводниковой сверхрешетке

Рассмотрим бесконечную полупроводниковую сверхрешетку из материалов *A* и *B* (рис. 1). Электронный гамильтониан в такой системе есть

$$\hat{H}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}(z), \quad (1)$$

где

$$\hat{V}(z) = \begin{cases} 0, & nd \leq z \leq nd + a, \\ V, & nd + a \leq z \leq nd + d \end{cases} \quad (2)$$

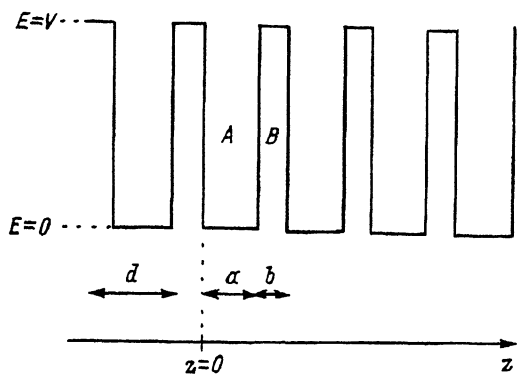


Рис. 1. Энергетическая схема сверхрешетки.

(см. рис. 1),

$$m(z) = \begin{cases} m_A, & nd \leq z \leq nd + a, \\ m_B, & nd + a \leq z \leq nd + d, \end{cases} \quad (3)$$

$n$  — целое.

Здесь  $m_A, m_B$  — эффективные массы электрона с слоев  $A$  и  $B$  соответственно,  $a$  — толщина ямы,  $d = a + b$  — период сверхрешетки.

Уравнение Шредингера для координатной части волновой функции электрона в стационарном состоянии является линейным дифференциальным уравнением второго порядка. При  $z \in [nd, nd + a]$ , т.е. в материале  $A$ , общим решением является

$$\psi_A = C_{1A} e^{ik_A z} + C_{2A} e^{-ik_A z}, \quad (4)$$

где

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}}.$$

Аналогично в материале  $B$  общим решением является

$$\psi_B = C_{1B} e^{ik_B z} + C_{2B} e^{-ik_B z}, \quad (5)$$

где

$$k_B = \sqrt{\frac{2m_B (E - V)}{\hbar^2}}.$$

Для определения четырех неизвестных коэффициентов в (4) и (5) на волновые функции накладывают ГУ, которые в наиболее общем виде могут быть сформулированы таким образом:

$$\begin{aligned} \psi_A \Big|_{z_i=0} &= \alpha \psi_B \Big|_{z_i+0} + \beta \frac{\partial \psi_B}{\partial z} \Big|_{z_i+0}, \\ \frac{\partial \psi_A}{\partial z} \Big|_{z_i-0} &= \gamma \psi_B \Big|_{z_i+0} + \delta \frac{\partial \psi_B}{\partial z} \Big|_{z_i+0}, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $z_i$  — координата контакта материалов  $A$  и  $B$ ;  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  — коэффициенты, которые в каждом случае следует выбирать корректно. Требование непрерывности потока волновой функции на границе выполняется, если потребовать [14,15]

$$\begin{aligned} \psi_A \Big|_{z_i-0} &= \psi_B \Big|_{z_i+0}, \\ \frac{1}{m_A} \frac{\partial \psi_A}{\partial z} \Big|_{z_i-0} &= \frac{1}{m_B} \frac{\partial \psi_B}{\partial z} \Big|_{z_i+0}. \end{aligned} \quad (7)$$

Обозначим линейно независимые решения уравнения Шредингера в слоях сверхрешетки  $y_1^i(z)$  и  $y_2^i(z)$ . Здесь индекс  $i = A, B$  обозначает принадлежность слою  $A$  и  $B$ . Следуя [6], выберем эти решения такими, что

$$y_1^i(0) = 1, \quad y_2^i(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} y_1^i(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} y_2^i(0) = k_i. \quad (8)$$

Определим теперь матрицу переноса через слой  $i$  следующим образом:

$$\begin{aligned} t_{11}^i &= y_1^i(z_i), & t_{12}^i &= y_2^i(z_i) \frac{k_A}{m_A} \frac{m_i}{k_i}, \\ t_{21}^i &= \frac{\partial}{\partial z} y_1^i(z_i) \frac{m_A}{k_A} \frac{1}{m_i}, & t_{22}^i &= \frac{\partial}{\partial z} y_2^i(z_i) \frac{1}{k_i}, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $z_{A,B}$  равно соответственно  $a$  или  $b$ .

Введем в рассмотрение вектор  $\Phi = \begin{pmatrix} \psi_i(z) \\ \varphi_i(z) \end{pmatrix}$ , где  $\psi_i(z)$  есть электронная волновая функция в слое  $i$ , которую можно представить как линейную комбинацию  $y_1^i(z)$  и  $y_2^i(z)$ , а  $\varphi_i(z) = \frac{1}{m_i} \frac{m_A}{k_A} \frac{\partial \psi_i}{\partial z}$ . Здесь коэффициент  $\frac{m_A}{k_A}$  служит для того, чтобы  $\varphi_i(z)$  имела размерность волновой функции.

Рассмотрим теперь для определенности действие матрицы  $\hat{t}_a$  на вектор  $\Phi_A|_{z=0}$ . Выберем  $y_1^A(z) = \cos k_A z$  и  $y_2^A(z) = \sin k_A z$  в соответствии с условием (8). Тогда

$$\begin{aligned} \psi_A(z) &= A \cos k_A z + B \sin k_A z, \\ \Phi_A \Big|_{z=0} &= \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, & \hat{t}^a &= \begin{pmatrix} \cos k_A a & \sin k_A a \\ -\sin k_A a & \cos k_A a \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

Теперь легко видеть, что

$$\hat{t}^a \Phi_A \Big|_{z=0} = \Phi_A \Big|_{z=a}. \quad (11)$$

Аналогично можно выбрать  $y_1^B(z) = \cos k_B z$ ,  $y_2^B(z) = \sin k_B z$ . Тогда

$$\hat{t}^b = \begin{pmatrix} \cos k_B b & \eta' \sin k_B b \\ -\eta \sin k_B b & \cos k_B b \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где  $\eta = \frac{k_B m_A}{k_A m_B}$ . Легко получить соотношение

$$\hat{t}^b \Phi_B \Big|_{z=a} = \Phi_B \Big|_{z=d}.$$

Согласно ГУ Бастарда, при переносе через границу слоев  $A$  и  $B$  вектор  $\Phi$  сохраняется. Следовательно, перенос  $\Phi$  на период сверхрешетки можно описывать последовательным действием матриц  $\hat{t}^a$  и  $\hat{t}^b$ . Это равносильно введению матрицы переноса через период сверхрешетки  $\hat{t}^d$

$$\hat{t}^d = \hat{t}^b \hat{t}^a. \quad (13)$$

Аналогично можно вводить матрицу переноса через произвольное число слоев сверхрешетки как произведение матриц переноса через каждый отдельный слой. Порядок перемножения должен быть обратным порядку переноса.

Обсудим теперь некоторые свойства матрицы переноса. Для этого запишем уравнение Шредингера в слое  $i$  при некоторой энергии  $E_i$  для двух соответствующих линейно независимых решений  $y_1^i(z)$  и  $y_2^i(z)$ , выбранных согласно условиям (8). Домножая первое из уравнений на  $y_2^i(z)$ , а второе на  $y_1^i(z)$  и вычитая одно из другого, получаем

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial}{\partial z} y_1^i(z) y_2^i(z) - \frac{\partial}{\partial z} y_2^i(z) y_1^i(z) \right) = 0,$$

а это есть условие постоянства вронскиана [16] уравнения Шредингера  $W_i(z) = \text{const}$ . Из условий (8) следует  $W_i(z) = k_i$ . Определение (9) позволяет нам заключить, что

$$\det \hat{t}^i = 1 \quad (14)$$

и, следовательно, определитель матрицы переноса через любое число слоев, в том числе через период сверхрешетки, равен единице, так как операция вычисления детерминанта сохраняет произведение.

Из теоремы Блоха следует, что волновую функцию электрона в нашей сверхрешетке можно записать как  $\psi(z) = e^{\pm iQz} U(z)$ , где  $U(z) = U(z+d)$ , а  $Q$  имеет смысл волнового вектора трансляционного движения электрона в сверхрешетке. Отсюда нетрудно видеть, что при переносе на период сверхрешетки  $d$  вектор

$$\Phi(z_i) = \begin{pmatrix} \psi(z_i) \\ \frac{1}{m_i} \frac{m_A}{k_A} \frac{\partial}{\partial z} \psi(z_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(z_i) \\ \varphi(z_i) \end{pmatrix} \quad (15)$$

меняется следующим образом:

$$\Phi(z_i + d) = e^{\pm iQd} \Phi(z_i). \quad (16)$$

В то же время, согласно определению матрицы переноса  $\hat{t}^d$ , имеем

$$\Phi(z_i + d) = \hat{t}^d \Phi(z_i). \quad (17)$$

Сравнение (16) и (17) дает

$$\hat{t}^d \Phi(z_i) = e^{\pm iQd} \Phi(z_i). \quad (18)$$

Это значит, что  $e^{\pm iQd}$  являются собственными значениями матрицы  $\hat{t}^d$ , а  $\Phi(z_i)$  есть ее собственный вектор.

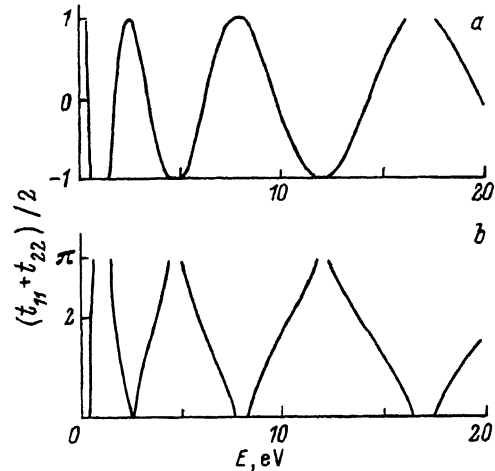


Рис. 2. Энергетическая зависимость суммы диагональных элементов матрицы переноса (а) и дисперсионная диаграмма сверхрешетки (б).

Непосредственно из формулы (18), задающей систему линейных дифференциальных уравнений второго порядка, можно получить секулярное уравнение для этой системы

$$\det \begin{pmatrix} t_{11}^d - e^{\pm i Q d} & t_{12}^d \\ t_{21}^d & t_{22}^d - e^{\pm i Q d} \end{pmatrix} = 0, \quad (19)$$

а из него уравнение связывающее энергию и волновой вектор электрона в сверхрешетке, т.е. дисперсионное уравнение

$$\cos Q d = \frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2}. \quad (20)$$

Секулярное уравнение (19) позволяет также получить следующую формулу для собственных значений матрицы  $\hat{t}^d$ :

$$e^{\pm i Q d} = \frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2}\right)^2 - 1}. \quad (21)$$

Проанализируем две последние формулы. Видно, что при тех энергиях, при которых  $\left| \frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2} \right| > 1$ , собственные значения матрицы  $\hat{t}^d$  являются вещественными числами, а волновой вектор электрона — комплексным числом. Следовательно, при таких значениях энергии электрона собственным решениям соответствуют затухающие волновые функции, т.е. нет разрешенных электронных состояний. Эти значения энергии формируют запрещенные электронные мини-зоны. Если же энергия такова, что  $\left| \frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2} \right| \leq 1$ , то электронное состояние с такой энергией существует, волновой вектор является вещественным числом, а соответствующие собственные значения матрицы  $\hat{t}^d$  комплексны. Такие значения энергии формируют разрешенные мини-зоны.

Исследование зависимости коэффициентов матрицы переноса от энергии показывает, что отрицательные и нулевая энергии  $E \leq 0$  всегда образуют запрещенную мини-зону,  $0 < E \leq V$  может лежать как в разрешенной, так и в запрещенной мини-зоне, а область больших энергий  $E \rightarrow \infty$  всегда принадлежит разрешенной мини-зоне. На рис. 2 показаны зависимость величины  $\frac{t_{11}^d + t_{22}^d}{2}$  от энергии и дисперсионные кривые для электрона в сверхрешетке GaAs/AlAs. Толщина слоя ямы (GaAs) — 5 монослоев, толщина барьера составляет также 5 монослоев. Высота барьера в такой сверхрешетке в  $\Gamma$ -точке  $V = 1.8$  eV. Для простоты мы пренебрегаем эффектами  $\Gamma$ - $X$ -смешивания. Эффективная масса в слоях GaAs  $m_A = 0.067m_0$ , в слоях AlAs  $m_B = 0.124m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона [17]. В исследуемой области энергий, т.е. от 0 до 20 eV, для электрона существуют четыре различные мини-зоны, ширина которых увеличивается с увеличением энергии для мини-зоны. При  $E < V$ , при энергиях ниже высоты барьера для электрона есть только одна разрешенная мини-зона, самая узкая из всех.

## 2. Протяженные и локализованные электронные состояния на границах полупроводниковых сверхрешеток

1) *Контакт двух полубесконечных сверхрешеток.* В бесконечной сверхрешетке электрон, имеющий энергию, принадлежащую разрешенной мини-зоне, распространяется неограниченно справа налево или слева направо. Введем амплитудный коэффициент отражения,  $r$  как

$$r = \frac{E_r}{E_0}, \quad (22)$$

где  $E_r$  — амплитуда отраженной от границы волны,  $E_0$  — амплитуда падающей на гранцу волны. Ясно, что для произвольно выбранной границы в бесконечной сверхрешетке  $r = 0$  как для электрона, падающего слева, так и для электрона, падающего справа. В данном подразделе мы будем искать ответ на вопрос: как изменится коэффициент отражения (22), если на пути электрона поставить контакт двух полубесконечных сверхрешеток.

Итак, рассмотрим контакт двух сверхрешеток. Пусть первая сверхрешетка состоит из материалов  $A$  (яма) шириной  $a$  и  $B$  (барьер) шириной  $b$ , период сверхрешетки  $d = a + b$ . Вторая сверхрешетка состоит из материалов  $C$  (яма) шириной  $c$  и  $D$  (барьер) шириной  $p$ , период сверхрешетки  $l = c + p$ . Возможные типы такого контакта изображены схематически на рис. 3: I тип: яма-барьер (рис. 3,  $a$ ), II тип: барьер-яма (рис. 3,  $b$ ), III тип: яма-яма (рис. 3,  $c$ ); IV тип: барьер-барьер (рис. 3,  $d$ ).

Рассмотрим для определенности контакт типа I. Выпишем ГУ Бастарда для такого контакта

$$\Phi_d(z) \Big|_{z=0} = \Phi_l(z) \Big|_{z=0}. \quad (23)$$

Здесь  $\Phi_d$  и  $\Phi_l$  определены согласно (15) для первой и второй сверхрешеток соответственно, а начало координат выбрано в точке контакта сверхрешеток.

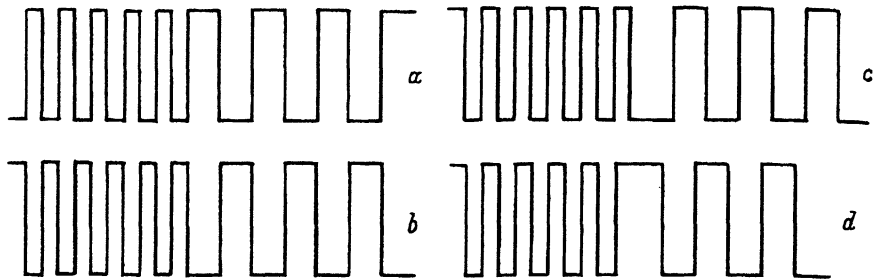


Рис. 3. Типы контактов сверхрешеток.

Волновую функцию в ограниченной сверхрешетке можно представить как линейную комбинацию двух линейно-независимых решений в бесконечной сверхрешетке

$$\psi_d(z) = A\psi_{1d}(z) + B\psi_{2d}(z). \quad (24)$$

Тогда

$$\varphi_d(z) = A\varphi_{1d}(z) + B\varphi_{2d}(z), \quad (25)$$

где  $\varphi_{1d}(z)$  и  $\varphi_{2d}(z)$  — нормированные производные волновых функций в бесконечной сверхрешетке, определенные согласно второму из равенств (15).

Из секулярного уравнения для левой сверхрешетки (19) и основного свойства матрицы переноса (18) легко получить следующие выражения для  $\varphi_{1d}(z)$  и  $\varphi_{2d}(z)$ :

$$\varphi_{1d} = \frac{-t_{11}^d + e^{iQd}}{t_{12}^d} \psi_{1d}, \quad \varphi_{2d} = \frac{-t_{11}^d + e^{-iQd}}{t_{12}^d} \psi_{2d}. \quad (26)$$

Введем условие нормировки на границе сверхрешеток, т.е. в точке  $z = 0$ ,

$$\psi_{1d} = \psi_{2d} = 1 \quad (27)$$

и новые обозначения

$$\xi_{1d} \equiv \frac{\varphi_{1d}}{\psi_{1d}}, \quad \xi_{2d} \equiv \frac{\varphi_{2d}}{\psi_{2d}}. \quad (28)$$

Тогда

$$\left. \frac{\varphi_d}{\psi_d} \right|_{z=0} = \frac{A\xi_{1d} + B\xi_{2d}}{A + B}. \quad (29)$$

Вводя аналогичные обозначения, проведем точно такие же рассуждения для второй сверхрешетки. Это дает

$$\left. \frac{\varphi_l}{\psi_l} \right|_{z=0} = \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{C + P}. \quad (30)$$

Из ГУ Бастарда (23) следует, что функция  $\frac{\varphi(z)}{\psi(z)}$  непрерывна на границе сверхрешеток, т.е. имеет место равенство

$$\frac{A\xi_{1d} + B\xi_{2d}}{A + B} = \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{C + P}. \quad (31)$$



Это и есть уравнение, определяющее зависимость коэффициента отражения от энергии. Действительно, амплитудный коэффициент отражения электронной волны, распространяющейся слева направо, определяется в данном случае как

$$r_d = \frac{B}{A}, \quad (32)$$

а для волны, распространяющейся справа налево, как

$$r_l = \frac{C}{P}. \quad (33)$$

Запишем уравнение (31) в новых обозначениях, тогда

$$\frac{\xi_{1d} + r_d \xi_{2d}}{1 + r_d} = \frac{r_l \xi_{1l} + \xi_{2l}}{1 + r_l}. \quad (34)$$

С точки зрения энергии электрона, распространяющегося в сверхрешетках, возможны четыре различные ситуации (рис. 4): 1) энергия электрона принадлежит запрещенной мини-зоне в обеих сверхрешетках; 2) энергия электрона принадлежит разрешенной мини-зоне в левой сверхрешетке и запрещенной мини-зоне в правой сверхрешетке; 3) энергия электрона принадлежит запрещенной мини-зоне в левой сверхрешетке и разрешенной мини-зоне в правой сверхрешетке; 4) энергия электрона принадлежит разрешенным мини-зонам в обеих сверхрешетках.

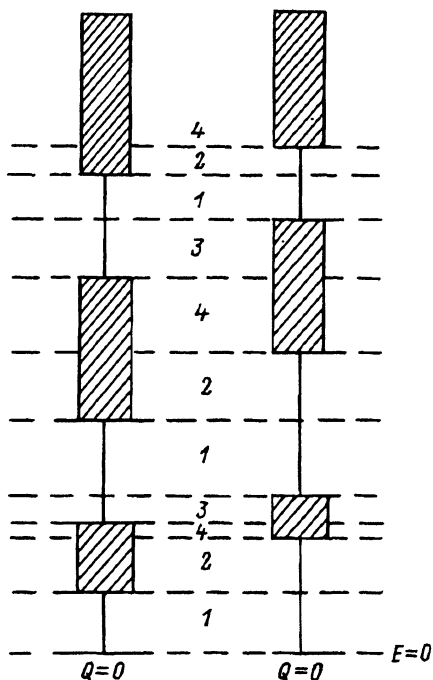


Рис. 4. Зонная диаграмма контакта сверхрешеток.

Закрашенные области соответствуют разрешенным мини-зонам.

Коэффициент  $r_d$  имеет смысл только в области энергий, соответствующей ситуациям 2 и 4, т.е. когда в левой сверхрешетке может распространяться электронная волна. В этих случаях из уравнения (34) получаем

$$r_d = \frac{\xi_{1l} - \xi_{1d}}{\xi_{2d} - \xi_{1l}}. \quad (35)$$

Аналогично коэффициент  $r_l$  определен в областях 3 и 4 и может быть записан как

$$r_l = \frac{\xi_{2d} - \xi_{2l}}{\xi_{1l} - \xi_{2d}}. \quad (36)$$

В случае 1 говорить о каком-либо отражении некорректно. Видно, что в области 4, где оба коэффициента отражения  $r_l$  и  $r_d$  имеют смысл, в общем случае  $r_d \neq \pm r_l$ . Это отражает специфику контакта сверхрешеток и будет подробно обсуждаться далее, в разделе 3.

2) *Таммовские состояния на границе двух полубесконечных сверхрешеток.* Энергии, при которых электрон распространяется в сверхрешетке, т.е. те энергии, которые принадлежат областям 2, 3 или 4 (рис. 4), соответствуют делокализованным электронным состояниям. В области контакта двух запрещенных мини-зон (область 1) могут реализовываться состояния, которым соответствуют волновые функции, затухающие при  $z \rightarrow \pm\infty$ . Такие волновые функции мы получим, если предположим, что  $\psi_{2a} \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} 0$  и  $\psi_{1l} \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} 0$ .

В этом случае уравнение (31) сведется к

$$\xi_{2d} = \xi_{1l}. \quad (37)$$

Уравнение (37) определяет энергию электронного состояния, локализованного в области контакта двух сверхрешеток. Такие состояния можно назвать «таммовскими» по аналогии с локализованными состояниями, возникающими на границе кристалла с вакуумом. Последние впервые были рассмотрены Таммом [18].

Примеры некоторых систем, в которых реализуются таммовские состояния.

а) Контакт двух сверхрешеток: слева  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$ , т.е. сверхрешетка, составленная из слоев GaAs (яма) толщиной 5 монослоев и AlAs (барьер) толщиной 5 монослоев; справа  $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_6$ . На границе таких сверхрешеток реализуется таммовское состояние с энергией  $E = 0.708 \text{ eV}$ , т.е. в запрещенной зоне между первой и второй разрешенными мини-зонами, для обеих сверхрешеток. Интересно заметить, что таммовские состояния могут реализовываться и в надбарьерной области. Необходимым условием является лишь то, что энергия локализованного состояния должна лежать в запрещенных мини-зонах обеих контактирующих сверхрешеток.

б) Контакт сверхрешеток  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$  справа и барьера  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  слева ( $x = 0.35$ ). Соответствующая этой концентрации эффективная масса электрона  $m_{\text{eff}} = (0.67 + 0.083x)m_0 = 0.096m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона. Высота барьера  $V = 1.247 x = 0.436 \text{ eV}$  [17]. Расчет показывает, что таммовское состояние реализуется при энергии  $E = 0.35 \text{ eV}$ , т.е. при энергии ниже дна первой разрешенной мини-зоны в сверхрешетке.

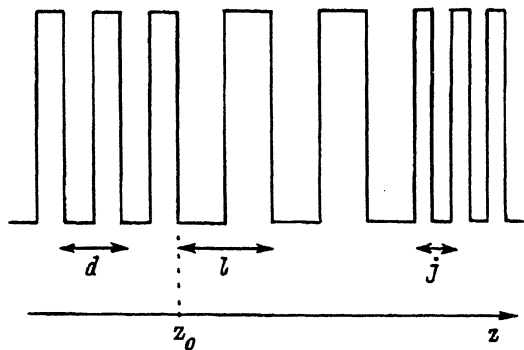


Рис. 5. Ограниченная сверхрешетка, окруженная двумя другими сверхрешетками.

Необходимо заметить, что с точки зрения возможности реализации таммовского состояния типы контактов сверхрешеток I и II (рис. 3, a, b) неэквивалентны. Приведенные выше расчеты выполнены для контакта типа II, в то время как на контакте типа I таммовское состояние не реализуется. Экспериментально таммовские состояния наблюдались Х. Оно и др. в спектрах фотовозбуждения люминесценции от сверхрешетки, состоящей из слоев AlGaAs (барьер) и GaAs (яма), ограниченной слева барьером AlAs [19].

3. *Сверхрешетка с конечным числом периодов («суперквантовая яма»)*. В данном подразделе мы будем рассматривать систему, которую можно назвать «суперквантовой ямой», т.е. сверхрешетку с конечным числом периодов, зажатую между двумя другими полубесконечными сверхрешетками (рис. 5). Обозначим периоды левой, средней и правой сверхрешеток  $d$ ,  $l$  и  $j$  соответственно и запишем условие непрерывности функции  $\frac{\varphi(z)}{\psi(z)}$  согласно уравнению (31) на каждой из стенок «суперямы»:

$$\frac{A\xi_{1d} + B\xi_{2d}}{A + B} = \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{C + P}, \quad \frac{G\tilde{\xi}_{1l} + K\tilde{\xi}_{2l}}{G + K} = -\frac{J\xi_{1j} + L\xi_{2j}}{J + L}. \quad (38)$$

Здесь  $\tilde{\xi}_{1l}$  и  $\tilde{\xi}_{2l}$  — суть  $\frac{\varphi_{1l}}{\psi_{2l}}$  и  $\frac{\varphi_{2l}}{\psi_{1l}}$  соответственно на правой стенке «суперямы». Аналогично  $\xi_{1j}$  и  $\xi_{2j}$  — суть  $\frac{\varphi_{1j}}{\psi_{1j}}$  и  $\frac{\varphi_{2j}}{\psi_{2j}}$  соответственно там же. Коэффициенты  $G, K$  и  $J, L$  введены аналогично  $A, B$  и  $C, P$  и являются коэффициентами в волновых функциях в средней и правой сверхрешетках на правой границе «суперямы».

Уравнения (38) в принципе определяют коэффициент отражения от конечной сверхрешетки, но они требуют некоторой расшифровки. Исследуем связь между параметрами электронного состояния на левой и правой стенках «суперямы».

Во-первых, в силу того что волновая функция в «суперяме» и ее производная имеют разную четность относительно инверсии координат, легко получить следующие соотношения, связывающие  $\xi_{1l}$ ,  $\xi_{2l}$  и  $\tilde{\xi}_{1l}$  и  $\tilde{\xi}_{2l}$ : если «суперяма» имеет целое число периодов, то

$$\xi_{1l} = \tilde{\xi}_{1l}, \quad \xi_{2l} = \tilde{\xi}_{2l}, \quad (39)$$

если «суперяма» состоит из дробного числа периодов, т.е. из  $N$  периодов и одного слоя (ямы или барьера), то

$$\xi_{1l} = -\tilde{\xi}_{2l}, \quad \xi_{2l} = -\tilde{\xi}_{1l}. \quad (39a)$$

Второе упрощение есть результат связи коэффициентов в волновой функции электрона в «суперяме» на ее левой и правой стенках, т.е.  $C, P$  и  $G, K$ . Для начала рассмотрим случай, когда «суперяма» состоит из целого числа периодов  $N$ . Тогда, согласно основному свойству матрицы переноса (11), электронная волновая функция на правой границе «суперямы»  $\psi_l(z_0 + Nl)$  связана с волновой функцией на левой границе «суперямы» следующим образом:

$$\psi_l(z_0 + Nl) = C e^{iQ_1 l N} \psi_{1l}(z_0) + P e^{-iQ_1 l N} \psi_{2l}(z_0). \quad (40)$$

Здесь  $z_0$  — координата левой стенки «ямы»,  $Q_1$  — волновой вектор трансляционного движения электрона в «яме». Равенство (40) дает связь коэффициентов  $C, P$  и  $G, K$  при переносе на целое число периодов

$$G = C e^{iQ_1 l N}; \quad K = P e^{-iQ_1 l N}. \quad (41)$$

Пусть теперь наша «суперяма» состоит из одного слоя для определенности ямы шириной  $s$ . Введем условие нормировки, аналогичное условию (27),

$$\psi_{1l}(z_0) = \psi_{2l}(z_0) = 1. \quad (42)$$

Теперь, пользуясь свойством (18) матрицы переноса через слой  $\hat{t}^c$ , легко получить следующий вид вектора  $\Phi$  на правой границе «ямы»:

$$\Phi(z_0 + c) = \begin{pmatrix} \psi_l(z_0 + c) \\ \varphi_l(z_0 + c) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11}^c(C + P) + t_{12}^c(C\xi_{1l} + P\xi_{2l}) \\ t_{21}^c(C + P) + t_{22}^c(C\xi_{1l} + P\xi_{2l}) \end{pmatrix}. \quad (43)$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\varphi(z_0 + c)}{\psi(z_0 + c)} = \frac{t_{21}^c + t_{22}^c \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{(C+P)}}{t_{11}^c + t_{12}^c \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{(C+P)}}. \quad (44)$$

Объединяя выражения (41) и (44), получим, что при переносе на  $N$  периодов и один слой отношение  $\varphi(z)/\psi(z)$  преобразуется по (44), но  $C$  нужно заменить на  $G$ , а  $P$  — на  $K$ , согласно (41). Таким образом, условие непрерывности отношения  $\varphi(z)/\psi(z)$  на границах «суперямы» (38) сводится в случае дробного числа периодов в «суперяме» к условию

$$\frac{A\xi_{1d} + B\xi_{2d}}{A + B} = \frac{C\xi_{1l} + P\xi_{2l}}{C + P} \quad (45)$$

на левой границе и

$$\frac{t_{21}^c + t_{22}^c \frac{C e^{iQ_1 l N} \xi_{1l} + P e^{-iQ_1 l N} \xi_{2l}}{C+P}}{t_{11}^c + t_{12}^c \frac{C e^{iQ_1 l N} \xi_{1l} + P e^{-iQ_1 l N} \xi_{2l}}{C+P}} = \frac{J\xi_{1j} + L\xi_{2j}}{J + L} \quad (46)$$

на правой границе.

Введем амплитудные коэффициенты отражения от «суперямы»  $r$  как отношение амплитуд падающей и отраженной волн (электрон падает слева)

$$r = \frac{B}{A}. \quad (47)$$

Предположим для простоты, что левая и правая полубесконечные сверхрешетки одинаковы, а «суперяма» имеет целое число периодов. Тогда из формул (38), (41) можно получить следующее простое выражение для коэффициента отражения от «суперямы»:

$$r = r_d \frac{1 - e^{2iQ_1lN}}{1 + r_d \frac{\xi_{2l} - \xi_{2d}}{\xi_{2l} - \xi_{1d}} e^{2iQ_1lN}}, \quad (48)$$

где  $r_d$  определяется (35) и является коэффициентом отражения от контакта двух полубесконечных сверхрешеток с теми же параметрами, что и сверхрешетки, образующие «суперяму». Дробь в правой части уравнения (48) описывает эффект конечной ширины «суперямы». При  $N \rightarrow \infty$  коэффициент отражения от «суперямы»  $r$  переходит в коэффициент отражения от контакта полубесконечных сверхрешеток  $r_d$ .

Ясно, что коэффициент отражения  $r$ , так же как и  $r_d$ , имеет смысл только при энергиях, лежащих в разрешенных мини-зонах левой сверхрешетки. Кроме того, коэффициент  $r$ , очевидно, очень чувствителен к числу периодов «суперямы»  $N$ .

4) *Локализованные электронные состояния в ограниченной сверхрешетке.* В области контакта разрешенных мини-зон внутренней сверхрешетки с запрещенными мини-зонами внешних сверхрешеток могут возникать локализованные электронные состояния, аналогичные локализованным электронным состояниям в обычной квантовой яме. В общем виде энергия таких состояний может быть определена из уравнений (38), (39), (39а), (41) и (46). В данном подразделе мы рассмотрим два важных частных случая ограниченных сверхрешеток.

I. «Суперквантовая яма» с зеркальной симметрией (рис. 6,а). В этом случае система уравнений для энергии локализованного состояния получается из уравнений (45) и (46) как

$$\frac{-\sin(k_c c)(1+f) + \cos(k_c c) [F_1^N \xi_{1l} + f F_2^N \xi_{2l}]}{\cos(k_c c)(1+f) + \sin(k_c c) [F_1^N \xi_{1l} + f F_2^N \xi_{2l}]} = \xi_{1d},$$

$$f = \frac{\xi_{1l} - \xi_{2d}}{\xi_{2d} - \xi_{2l}}, \quad (49)$$

где

$$F_1 = e^{iQ_1l}, \quad F_2 = e^{-iQ_1l}, \quad (50)$$

$k_c = \sqrt{\frac{2m_c E}{\hbar^2}}$  — волновой вектор электрона в материале ямы,  $m_c$  — эффективная масса электрона в материале ямы.

Для «суперямы»  $(\text{GaAs})_6/(\text{AlAs})_6$ , состоящей из четырех ям и пяти барьеров, зажатой слева и справа сверхрешетками  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$ , численный расчет дает энергию нижнего локализованного состояния  $E = E_0 + 7 \text{ meV}$ , где  $E_0$  — энергия дна первой электронной мини-зоны в бесконечной сверхрешетке  $(\text{GaAs})_6/(\text{AlAs})_6$ ,  $E_0 = 0.374 \text{ eV}$ .

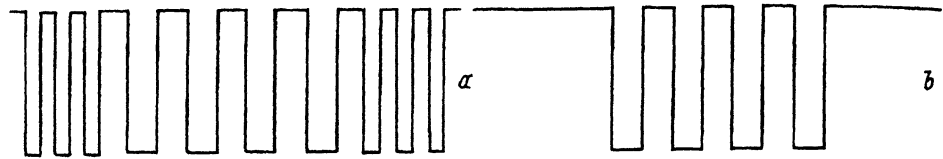


Рис. 6. Энергетические схемы «суперквантовой ямы».

*a* — «суперквантовая яма» с зеркальной симметрией, *b* — цепочка из  $N$  эквидистантных квантовых ям, ограниченная полубесконечными барьерами.

Специфика «суперквантовой ямы» по сравнению с обычной квантовой ямой заключается в том, что здесь локализованные электронные состояния могут реализовываться даже в надбарьерной области. Это связано с тем, что области контакта разрешенных мини-зон ямной сверхрешетки с запрещенными мини-зонами барьерных сверхрешеток существуют также при  $E > V$ . В «суперяме», рассмотренной в этой части, такое состояние реализуется при энергии 1.384 eV, т.е. на 37 meV выше барьера. Заметим, что резонансные надбарьерные состояния в квантовой яме типа II (яма для дырки и барьер для электрона) обсуждались недавно в экспериментальной работе [20]. Однако в [20] речь идет о делокализованных электронных состояниях в сплошном спектре, тогда как мы имеем дело с надбарьерными состояниями, которые действительно локализованы.

II. Цепочка из  $N$  эквидистантных квантовых ям, ограниченная полубесконечными барьерами (рис. 6, *b*).

Такая система является аналогом большинства экспериментально исследуемых структур со сверхрешетками. При интерпретации эксперимента неизменно встает вопрос: можно ли описывать систему из  $N$  ям в модели бесконечной  $CP$ ? С помощью метода матриц переноса на него довольно легко ответить. Для этого получим из уравнений (38), (39) и (41) уравнение для энергии электронного состояния, локализованного в системе из  $N$  ям. Легко видеть, что оно имеет следующий вид:

$$\frac{\xi_{1d} + e^{iQ_1 l N} \xi_{1l}}{e^{-iQ_1 l N} \xi_{2l} - \xi_{1d}} = \frac{\xi_{2d} - \xi_{1l}}{\xi_{2l} - \xi_{2d}}, \quad (51)$$

где индекс  $d$  отвечает левому барьеру, а  $l$ , как всегда, период ограниченной сверхрешетки. На рис. 7 показана энергия нижнего электронного состояния в системе  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$ , ограниченной полубесконечными барьерами AlAs, как функция числа ям  $N$ , вычисленная с помощью уравнения (50). Энергия  $\Delta$ , отложенная по оси ординат, отсчитывается от уровня дна первой разрешенной мини-зоны в бесконечной сверхрешетке  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$ .

При  $N = 1$   $\Delta$  представляет собой разницу между нижним электронным состоянием в обычной квантовой яме и дном первой разрешенной сверхрешеточной мини-зоны. При  $N \rightarrow \infty$   $\Delta \rightarrow 0$ , что характеризует «эффект сверхрешетки» — понижение энергии электрона в квантовой яме за счет его взаимодействия с электронными состояниями в соседних квантовых ямах.

Критерием применимости модели бесконечной сверхрешетки может служить условие  $\Delta/\delta E_1 \ll 1$ , где  $\delta E_1$  — ширина первой разрешенной мини-зоны в бесконечной сверхрешетке. Видно, что в нашем случае это условие можно считать выполненным при  $N > 5$  ( $\delta E_1 = 0.076$  eV).

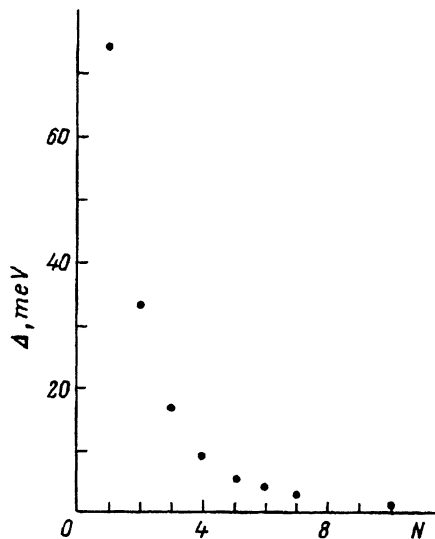


Рис. 7. Зависимость энергии первого уровня в ограниченной сверхрешетке от числа периодов.

Энергия отложена от дна первой мини-зоны в соответствующей бесконечной сверхрешетке.

Интересно также сравнить значение  $\Delta$  при  $N = 4$  с энергией электронного состояния, локализованного в «суперквантовой яме», рассчитанной в пункте а этого подраздела. Как и следовало ожидать,  $\Delta = 9 \text{ meV} > E - E_0 = 7 \text{ meV}$ . Это свидетельствует о понижении уровня энергии локализованного в «суперяме» состояния за счет взаимодействия локализованного в «яме» состояния с электронными состояниями в ограниченных сверхрешетках.

### 3. Отражение и пропускание электронных волн в структурах, содержащих сверхрешетки

1) Расчет коэффициентов отражения и пропускания электронной волны для контакта двух полубесконечных сверхрешеток. Рассмотрим систему из двух полубесконечных сверхрешеток:  $(\text{AlAs})_6 / (\text{GaAs})_6$  слева и  $(\text{AlAs})_5 / (\text{GaAs})_5$  справа. Обсудим для начала подбарьерное отражение и пропускание электронной волны, т.е. тот случай, когда энергия падающего на контакт двух сверхрешеток электрона  $E < V$ . На рис. 8 представлены результаты некоторых расчетов для контакта типа I (яма-барьер). На рис. 8, а и б изображена зависимость коэффициента  $\frac{t_{11} + t_{22}}{2}$  от энергии для правой и левой сверхрешеток соответственно. При расчете использовались формулы (10), (12) и (13). Как показано в разделе 1, области энергий, для которых  $|\frac{t_{11} + t_{22}}{2}| \leq 1$ , образуют разрешенные мини-зоны в сверхрешетке. Таким образом, значения энергии, при которых кривые на рис. 8, а, б пересекают  $\pm 1$ , являются границами разрешенных мини-зон в соответствующей сверхрешетке. У обеих сверхрешеток в подбарьерной области имеется только одна разрешенная мини-зона. Как видно из рис. 8, а, б, область энергий, соответствующая нижней разрешенной мини-зоне, в левой сверхрешетке

$$E \in [0.416 \text{ eV}; 0.575 \text{ eV}], \quad (53)$$

а в правой сверхрешетке

$$E \in [0.374 \text{ eV}; 0.455 \text{ eV}]. \quad (53a)$$

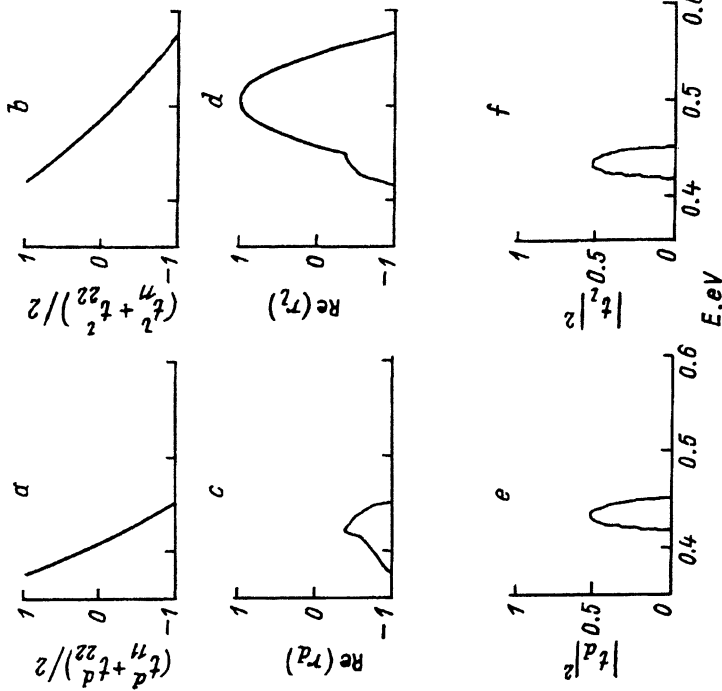


Рис. 9. Контакт сверхрешеток  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_6$  (слева) и  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$  (справа).  
*a, b* — энергетические зависимости полусуммы диагональных элементов матриц переноса в этих сверхрешетках; *c, d* — спектр вещественной части коэффициента отражения при падении слева направо и справа налево; *e, f* — спектр квадрата модуля коэффициента пропускания.

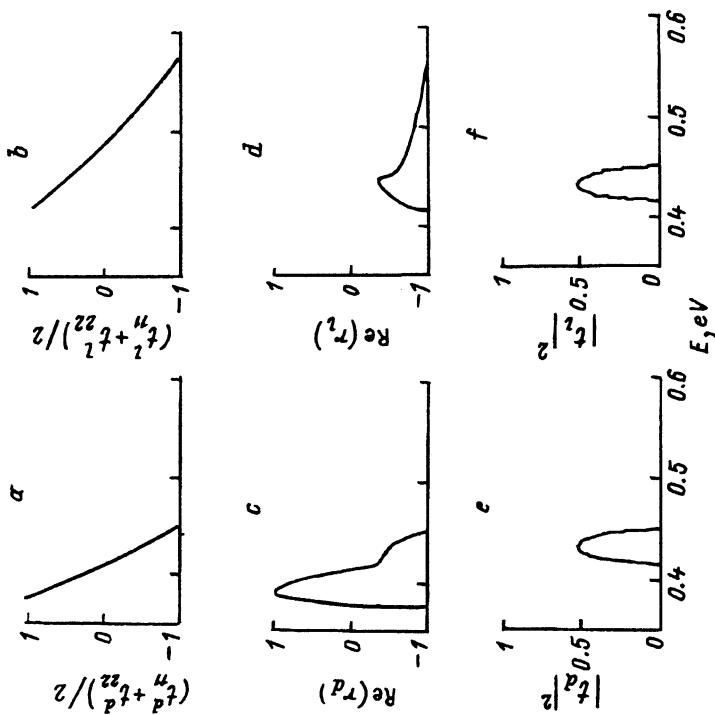


Рис. 8. Контакт сверхрешеток  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_5$  (слева) и  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_6$  (справа).  
*a, b* — энергетические зависимости полусуммы диагональных элементов матриц переноса в этих сверхрешетках; *c, d* — спектр вещественной части коэффициента отражения при падении слева направо и справа налево; *e, f* — спектр квадрата модуля коэффициента пропускания.



Коэффициент отражения электрона с энергией  $E < V$ , падающего справа, имеет смысл только для энергий из области (53), а падающего слева — только для энергий из области (53а). На рис. 8, *c, d* представлена зависимость вещественных частей  $r_d$  и  $r_l$  соответственно от энергии электрона. Видно, что обе зависимости имеют особенность в точках, соответствующих началу (концу) разрешенной мини-зоны соседней сверхрешетки, т.е.  $\text{Re}(r_d)$  имеет особенность при энергии  $E = 0.545$  eV. Интересно отметить, что из рис. 8, *c, d* следует, что коэффициенты отражения справа и слева не суть совпадающие с точностью до знака функции, какими они являются в случае отражения от одиночного гетероперехода. Это различие является следствием различия сверхрешеточных блоховских амплитуд в левой и правой сверхрешетках. Подробнее сходства и различия одиночного гетероперехода и контакта СР будут рассмотрены далее.

Величиной более значимой с точки зрения эксперимента, чем коэффициент отражения, является квадрат модуля коэффициента пропускания  $T \equiv |t|^2$ . Коэффициент пропускания  $t_{d,l}$  связан с коэффициентом отражения  $r_{d,l}$  следующим простым соотношением:

$$|r_{d,l}|^2 + |t_{d,l}|^2 = 1. \quad (54)$$

Зависимости коэффициентов  $|t_d|^2$  и  $|t_l|^2$  от энергии падающего электрона представлены на рис. 8, *e, f* соответственно. Коэффициент пропускания определен, очевидно, в той же области энергий, что и соответствующий коэффициент отражения. Как и следовало ожидать, электронная волна, падающая слева направо с энергией, принадлежащей разрешенной мини-зоне левой сверхрешетки, но запрещенной мини-зоне правой сверхрешетки,

$$E \in [0.374 \text{ eV}; 0.416 \text{ eV}] \quad (55)$$

затухает, пройдя через границу, т.е.  $|t_d|^2 = 0$ . Аналогично электронная волна, падающая справа налево с энергией, принадлежащей разрешенной мини-зоне правой сверхрешетки, но запрещенной мини-зоне левой сверхрешетки,

$$E \in [0.445 \text{ eV}; 0.575 \text{ eV}] \quad (55a)$$

также затухает, пройдя через границу сверхрешеток, т.е.  $|t_l|^2 = 0$ .

Только электрон с энергией в области контакта разрешенных мини-зон правой и левой сверхрешеток свободно распространяется в системе. Видно, что  $|t_d|^2 = |t_l|^2$ . Таким образом, квадрат модуля коэффициента пропускания не зависит от направления, в котором электронная волна проходит через контакт двух сверхрешеток.

Рассмотрим теперь контакт типа II таких сверхрешеток, т.е. контакт барьер-яма. Результаты расчетов, аналогичных описанным выше, но для контакта типа II показаны на рис. 9. Видно, что изменение типа контакта существенно повлияло на поведение амплитудных коэффициентов отражения как справа (рис. 8, *c* и 9, *c*), так и слева (рис. 8, *e* и 9, *e*), а экспериментально измеряемая величина  $T$  не чувствительна

к перемене типа контакта. Это объясняется тем, что амплитудный коэффициент отражения определяется блоховской амплитудой волновой функции в правой и левой сверхрешетках, значение которой на границе сверхрешеток в свою очередь зависит от типа контакта. В то же время квадрат модуля коэффициента отражения  $|r|^2$  и, следовательно, квадрат модуля коэффициента пропускания  $T$  связывают блоховские огибающие падающей и отраженной волн и не зависят от фазы блоховской амплитуды.

Поскольку разрешенные и запрещенные сверхрешеточные мини-зоны продолжают чередоваться и выше барьера, то представляют интерес аналогичные расчеты для коэффициентов  $r_{d,l}$  и  $|t_{d,l}|^2$  во вторых разрешенных мини-зонах обеих сверхрешеток, расположенных выше барьера. Результаты таких расчетов, т.е. зависимости  $\frac{t_{11}^{d,l} + t_{22}^{d,l}}{2}$ ,  $\text{Re}(r_{d,l})$ ,  $|t_{d,l}|^2$  от энергии падающей волны, представлены на рис. 10 для контакта типа I и на рис. 11 для контакта типа II.

Ход этих зависимостей аналогичен ходу зависимостей, изображенных на рис. 8 и 9, сохраняются все описанные в этом подразделе закономерности. Видно, что даже волна с энергией выше высоты барьера может затухать, пройдя через границу сверхрешеток. Различия между подбарьерным и надбарьерным отражением и пропусканием носят количественный характер. В частности, максимальное значение квадрата модуля коэффициента пропускания  $T$  электрона, распространяющегося под барьером, достигает только 0.5, в то время как в случае электрона с энергией  $E > V$  максимальное значение  $T$  близко к единице. Это отражает тот факт, что электрону все же легче распространяться над барьером, чем под барьером.

2) *Прохождение электронной волны через ограниченную сверхрешетку.* В качестве примера будем рассматривать падение электрона слева на две разные системы с ограниченными сверхрешетками: 1) сверхрешетка  $(\text{AlAs})_6(\text{GaAs})_6$ , состоящая из целого числа  $N$  периодов, зажатая справа и слева между двумя полубесконечными сверхрешетками  $(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_5$ ; 2) сверхрешетка  $(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_5$ , состоящая из целого числа  $N$  периодов, зажатая между двумя полубесконечными сверхрешетками  $(\text{AlAs})_6(\text{GaAs})_6$ .

В обоих случаях контакты между сверхрешетками относятся к типу I (яма-барьер).

Коэффициент прохождения через каждую из структур определяется формулами (48) и (54) и определен в каждом случае в области разрешенных мини-зон соответствующей полубесконечной сверхрешетки. На рис. 12 и 13 при различных  $N$  изображены зависимости квадрата модуля коэффициента пропускания  $T$  от энергии падающего электрона в подбарьерной области для первой и второй структур соответственно. Коэффициент прохождения через первую из структур имеет смысл в области энергий (53а), а через вторую — в области (53) соответствующих нижних разрешенных мини-зон. При  $N = 1$ , т.е. когда «суперяма» очень узкая, электрон проходит через нее в большей или в меньшей степени при всех разрешенных энергиях (рис. 12,а и 13,а). Однако уже при  $N = 5$  электрон с энергией в области запрещенной мини-зоны правой сверхрешетки, т.е. в области (55а) в первом случае и (55) во втором случае, почти не распространяется за границу и  $T \approx 0$  (рис. 12,б-д и 13,б-д). Зато при  $N > 1$  прохождение электрона имеет

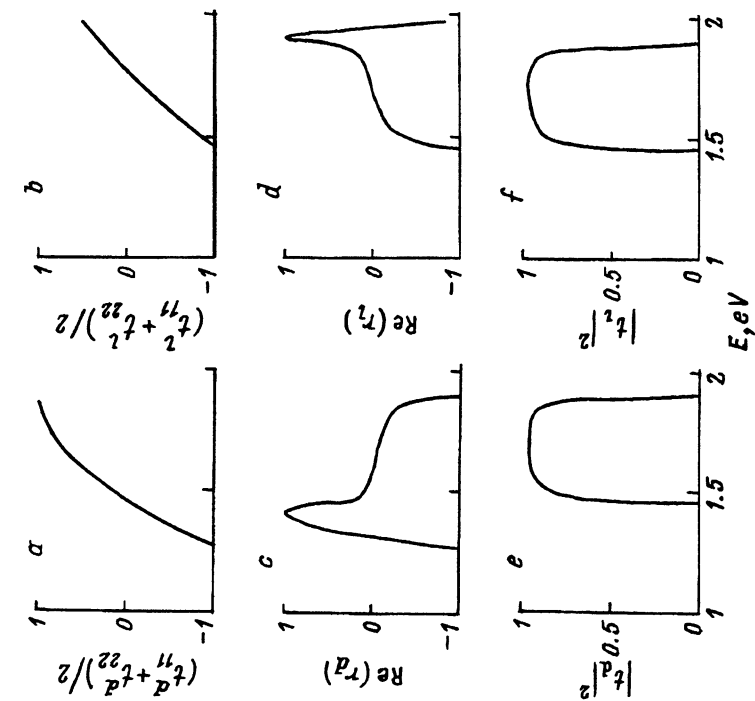


Рис. 10. Надбарьерное распространение электронной волны, контакт сверхрешеток  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$  (слева) и  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$  (справа).

$a, b$  — энергетические зависимости полусуммы диагональных элементов матриц переноса в этих сверхрешетках;  $c, d$  — спектр вещественной части коэффициента отражения при падении слева направо и справа налево;  $e, f$  — спектр квадрата модуля коэффициента пропускания.

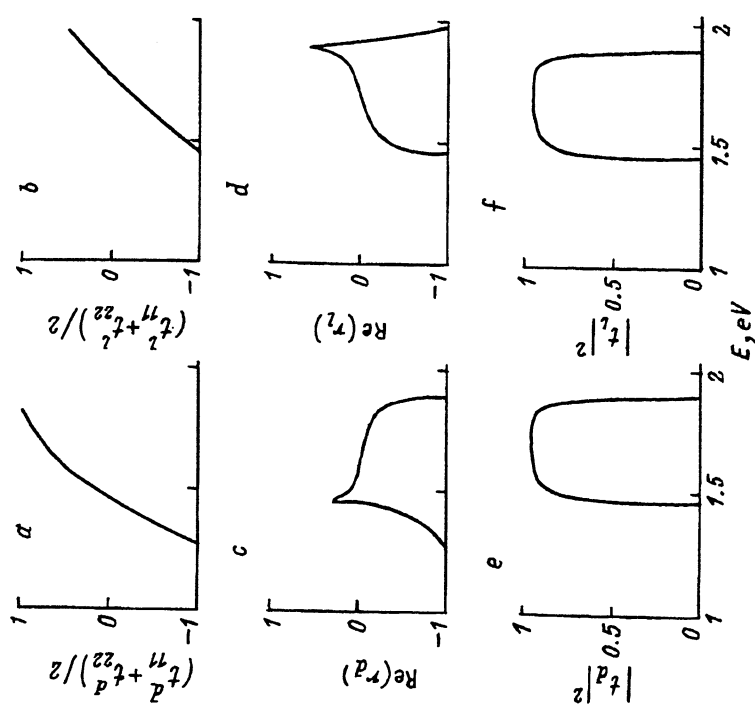


Рис. 11. Надбарьерное распространение электронной волны, контакт сверхрешеток  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$  (слева) и  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$  (справа).

$a, b$  — энергетические зависимости полусуммы диагональных элементов матриц переноса в этих сверхрешетках;  $c, d$  — спектр вещественной части коэффициента отражения при падении слева направо и справа налево;  $e, f$  — спектр квадрата модуля коэффициента пропускания.

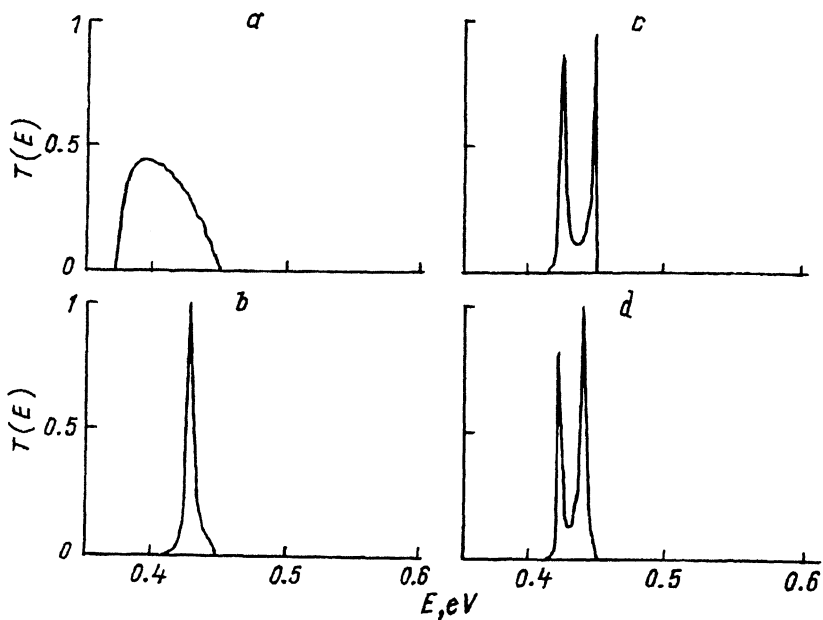


Рис. 12. Спектральная зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания электронной волны через сверхрешетку  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$  из  $N$  периодов, окруженную сверхрешеткой  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$ .  
 $N$ :  $a - 1$ ,  $b - 5$ ,  $c - 6$ ,  $d - 7$ .

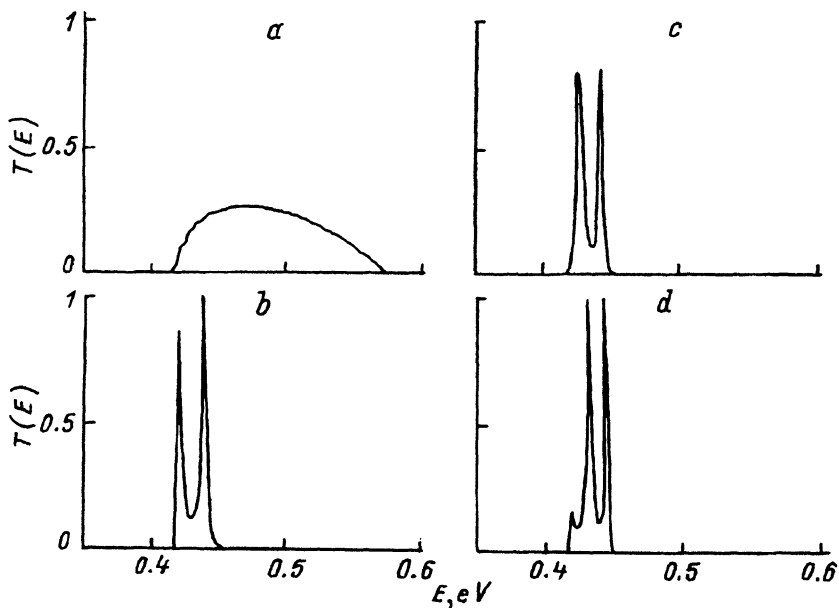


Рис. 13. Спектральная зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания электронной волны через сверхрешетку  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$  из  $N$  периодов, окруженную сверхрешеткой  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$ .  
 $N$ :  $a - 1$ ,  $b - 5$ ,  $c - 6$ ,  $d - 7$ .

существенно резонансный характер. Наличие пиков в коэффициенте прохождения связано с интерференцией волн, отраженных от правой и левой границ между сверхрешетками.

Аналогичным образом выглядит и коэффициент прохождения в надбарьерной области для первой системы (рис. 14) и для второй системы (рис. 15). Мы также видим интерференционные максимумы и минимумы, но они менее ярко выражены; следовательно, электрон, распространяющийся поверх барьера, «слабее чувствует» границы сверхрешеток. Заметим, что для первой структуры коэффициент прохождения отличен от нуля в области второй запрещенной мини-зоны внутренней сверхрешетки. Это связано с тем, что электрону гораздо легче туннелировать через вторую запрещенную мини-зону, чем через первую. Однако, как видно из рис. 14, *d*, при  $N = 40$  равенство  $T = 0$  справедливо и в области второй запрещенной мини-зоны. Форма кривых на рис. 14, *d*, 15, *d* очень напоминает форму зависимости коэффициента прохождения от энергии для контакта двух полубесконечных сверхрешеток (см., например, рис. 10, *e*), но возникают многочисленные интерференционные резонансы в области контакта разрешенных мини-зон двух сверхрешеток. Число резонансов в коэффициенте отражения, естественно, зависит от  $N$ : чем больше ширина «суперямы», тем больше пиков можно наблюдать в коэффициенте прохождения.

В целом, проведенный анализ показывает, что распространение электронных волн в подбарьерной и надбарьерной энергетических областях описывается в рамках одного и того же формализма и характеризуется качественно одинаковыми физическими закономерностями. Все имеющиеся различия носят количественный характер. Фактически, реальные границы зон не оказывают определяющего влияния на распространение электронных волн в сверхрешетках. Коэффициенты отражения и пропускания зависят главным образом от взаимного расположения электронных мини-зон в контактирующих сверхрешетках.

3) *Границы применимости приближенных методов расчета электронных состояний в сверхрешетках.* Так же как и периодический потенциал кристалла, сверхрешеточный потенциал можно описывать в приближении эффективной массы. Для этого нужно аппроксимировать сверхрешеточную мини-зону вблизи ее дна параболой

$$E = \frac{\hbar Q^2}{2m_{\text{eff}}}, \quad (56)$$

где  $m_{\text{eff}}$  — эффективная масса электрона в данной мини-зоне. Определим эффективную массу как

$$m_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2} \left. \frac{\partial Q^2}{\partial E} \right|_{E=E_0}, \quad (57)$$

где  $E_0$  — энергия дна сверхрешеточной мини-зоны, которая для первой разрешенной мини-зоны соответствует  $Q = 0$ . Чтобы теперь найти  $m_{\text{eff}}$  разложим левую часть дисперсионного уравнения (20) ( $\cos Q(d)$ ) по степеням  $Qd$  вблизи  $Qd = 0$ . Тогда из определения (57) получим

$$m_{\text{eff}} = \frac{2}{(a+b)^2} \left. \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial E} (t_{11} + t_{22}) \right|_{E=E_0}. \quad (58)$$

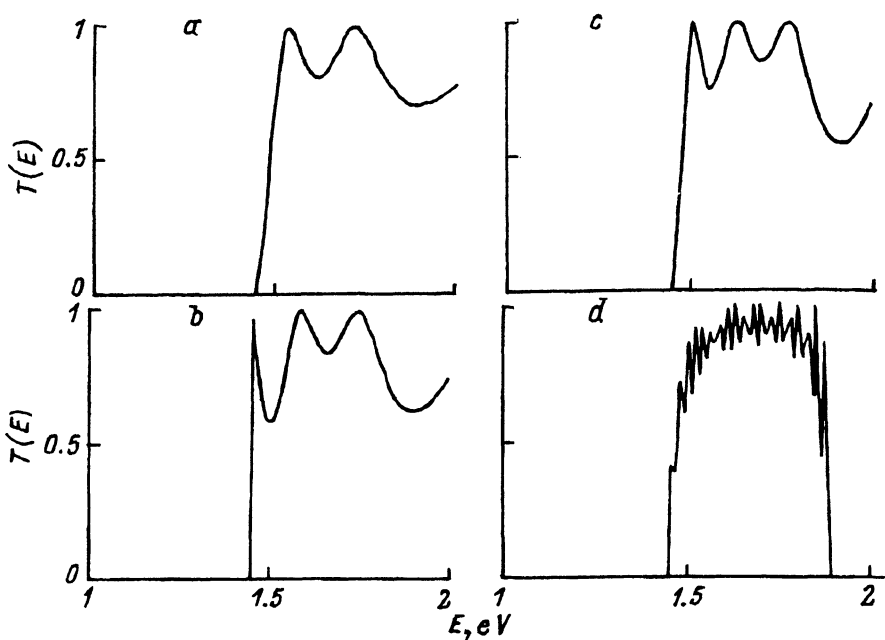


Рис. 14. Надбарьерное прохождение, спектральная зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания электронной волны через сверхрешетку  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$  из  $N$  периодов, окруженную сверхрешеткой  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$ .  
 $N$ :  $a - 5$ ,  $b - 6$ ,  $c - 7$ ,  $d - 40$ .

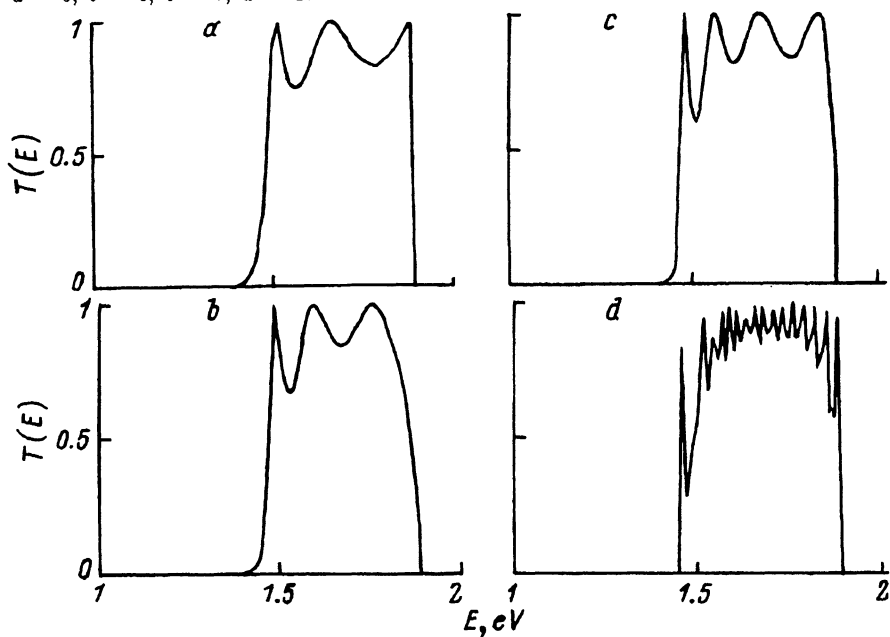


Рис. 15. Надбарьерное прохождение, спектральная зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания электронной волны через сверхрешетку  $(\text{GaAs})_5(\text{AlAs})_5$  из  $N$  периодов, окруженную сверхрешеткой  $(\text{GaAs})_6(\text{AlAs})_6$ .  
 $N$ :  $a - 5$ ,  $b - 6$ ,  $c - 7$ ,  $d - 40$ .

С помощью простых, но громоздких преобразований можно показать [4], что

$$m_{\text{eff}} = m_A \frac{\sin k_B b}{k_A (a+b) C_A^2} \left( \frac{1}{\eta} - \eta \right) \Big|_{E=E_0}, \quad (59)$$

где

$$C_A^2 = \frac{2(a+b)}{a \left( 1 + \frac{\sin k_A a}{k_A a} \right) + b \left( 1 + \frac{\sin k_B b}{k_B b} \right) \frac{1 + \cos k_A a}{1 + \cos k_B b}} \Big|_{E=E_0}.$$

Следующим приближением по полной аналогии с кристаллом является аппроксимация сверхрешеточного гамильтониана (1) эффективным гамильтонианом  $H_{\text{eff}}$

$$H_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (60)$$

Решение уравнения Шредингера с этим гамильтонианом есть

$$\psi = e^{\pm i Q z}, \quad (61)$$

т.е. мы получаем аппроксимацию реальной волновой функции ее блоховской огибающей. Соответствующее выражение для нормированной производной  $\varphi(z)$ , очевидно, имеет следующий вид:

$$\varphi(z) = \frac{m_A}{k_A} \frac{1}{m_{\text{eff}}} (\pm i Q) \psi(z). \quad (61a)$$

Чтобы описывать краевые электронные состояния в сверхрешетках, используя приближение эффективного гамильтониана, необходимо ввести ГУ. Поскольку для реального кристалла мы пользовались ГУ Бастарда (23), потребуем и для сверхрешетки непрерывности волновой функции и ее производной, деленной на эффективную массу, на границе. Приближение эффективного гамильтониана применимо, если ГУ Бастарда, записанные для блоховской огибающей, можно считать близкими к реальным ГУ, учитывающим также амплитуду волновых функций на контакте двух сверхрешеток. Это означает, что  $\varphi(z)$  в виде (61) должно совпадать с  $\varphi(z)$  в виде (26), т.е.

$$\frac{t_{11} = e^{\pm i Q d}}{t_{12}} \approx \frac{m_A}{k_A} \frac{1}{m_{\text{eff}}} (\pm i Q). \quad (62)$$

В рамках приближения параболической мини-зоны, при

$$Qd \ll 1, \quad (63)$$

уравнение (62) распадается на два условия

$$\begin{cases} t_{11} - 1 = 0, \\ t_{12} = \frac{m_{\text{eff}}}{m_A} k_A d. \end{cases} \quad (64)$$

А эти условия в свою очередь выполняются, если имеют место неравенства

$$\begin{cases} k_A a \ll 1, \\ k_B b \ll 1. \end{cases} \quad (65)$$

Таким образом, метод эффективной массы с ГУ Бастарда применим для отыскания краевых состояний только в короткопериодных сверхрешетках вблизи дна первых разрешенных мини-зон обеих контактирующих сверхрешеток. Мы видим, что область применимости приближения эффективной массы в сверхрешетках значительно уже, чем в кристалле. Это связано с тем, что, как правило, сверхрешеточные мини-зоны на порядок уже энергетических зон в кристалле, а период сверхрешетки на порядок больше постоянной кристаллической решетки.

Задача о прохождении через контакт двух сверхрешеток в приближении эффективной массы сводится к задаче о прохождении электрона через одиночный гетеропереход (см. рис. 16, *a* для случая падения электрона слева и рис. 16, *b* для случая падения электрона справа).

Нетрудно видеть, что коэффициент отражения электрона, падающего на гетеропереход слева (справа), можно представить в следующем

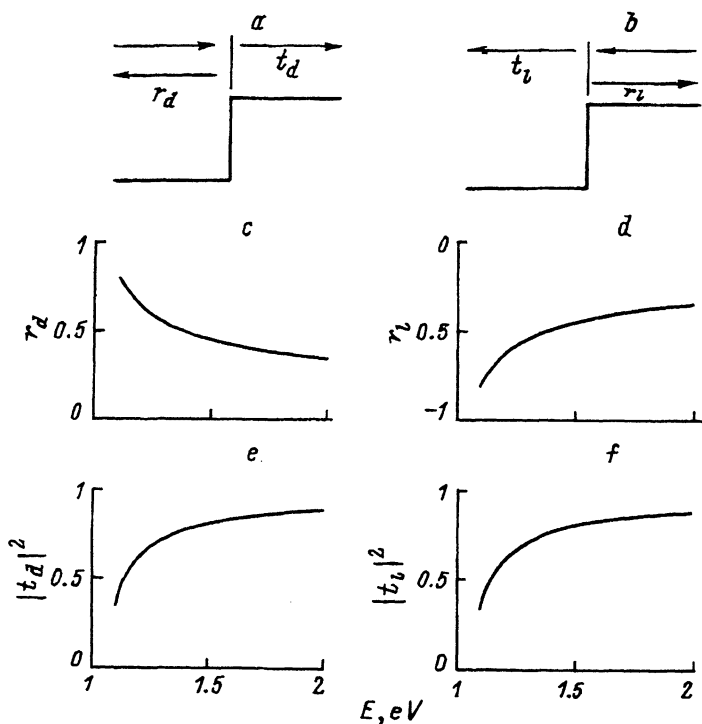


Рис. 16. Отражение электронной волны от одиночного гетероперехода. *a, b* — геометрия отражения; *c, d* — спектральная зависимость амплитудного коэффициента отражения при падении слева и справа соответственно; *e, f* — спектральная зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания электрона при падении справа и слева.



виде:

$$r_d = \frac{1 - \eta}{1 + \eta}, \quad r_l = \frac{\eta - 1}{\eta + 1}, \quad (66)$$

где  $\eta = \frac{k_2 m_1}{k_1 m_2}$ ,  $m_1(m_2)$  — эффективная масса электрона в материале ямы (барьера),  $k_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$ ,  $k_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E-V)}{\hbar^2}}$ . Результаты расчета коэффициента отражения  $r_d$  электронной волны, падающей слева на гетеропереход GaAs/AlAs, показаны на рис. 16,с, а коэффициент отражения волны, падающей слева,  $r_l$ , показан на рис. 16,д. На рис. 16,е,ф представлены зависимости квадратов модулей коэффициентов прохождения электрона через тот же гетеропереход слева и справа соответственно. Во всех четырех случаях изучалось надбарьерное отражение (прохождение) электрона. Видно, что коэффициент отражения монотонно зависит от энергии, причем  $r_l = -r_d$ . Ни того, ни другого мы не наблюдаем в случае контакта двух сверхрешеток (рис. 10,с,д). Квадраты модулей коэффициентов пропускания электронных волн, падающих слева и справа, совпадают,  $|t_d|^2 = |t_l|^2$ , так же как и в случае контакта сверхрешеток. Однако характер зависимости в этом случае иной, а именно монотонность имеет место только в случае гетероперехода.

Различие в коэффициентах отражения и пропускания электронных волн на одиночном гетеропереходе и на границе двух сверхрешеток обусловлено главным образом конечной шириной сверхрешеточных мини-зон. Кроме того, важную роль играют суперблоховские амплитуды в сверхрешетках, определяющие фазы электронных волн. Это и приводит к зависимости амплитудного коэффициента отражения от типа контакта двух сверхрешеток и от направления распространения падающей волны.

В целом, аналогия между контактом двух сверхрешеток и одиночным гетеропереходом имеет смысл только в той узкой энергетической области, где применимо приближение эффективной массы в сверхрешетке.

Полученные в данной работе результаты можно суммировать следующим образом.

1) Рассчитаны коэффициенты отражения и пропускания электронной волны на контакте двух полубесконечных сверхрешеток. Показано, что фаза амплитудного коэффициента отражения зависит от типа контакта и направления распространения волны, в то время как квадраты модулей коэффициентов отражения и пропускания не зависят от этих факторов.

2) Рассчитаны коэффициенты пропускания электрона через конечную сверхрешетку, зажатую между двумя другими сверхрешетками. Показано, что как в подбарьерной, так и в надбарьерной области зависимость квадрата модуля коэффициента пропускания от энергии не монотонна. Ее пики связаны с интерференцией волн, отраженных от первой и второй границ между сверхрешетками.

3) Рассмотрены различные типы локализованных электронных состояний в сверхрешетках: а) таммовские состояния в области контакта запрещенных мини-зон двух сверхрешеток (сверхрешетки и барьера); б) состояния в «суперквантовой яме», т.е. в ограниченной сверхрешетке, зажатой между двумя сверхрешетками или барьерами. Показано,

что локализованные состояния могут возникать при энергиях как ниже, так и выше барьера.

4) Найдены условия применимости приближений: а) бесконечной сверхрешетки для ограниченной сверхрешетки; б) параболической мини-зоны и эффективной массы в мини-зоне. Получен критерий применимости ГУ Бастарда для электронных огибающих на контакте двух сверхрешеток.

Аналитические результаты проиллюстрированы численными расчетами для реальных сверхрешеток GaAs/AlAs.

Работа получила поддержку Фонда Фольксваген по гранту «Теория низкоразмерных систем» и Международного научного фонда по гранту NUB 000.

### Список литературы

- [1] Kronig R. de L., Penney W. Proc. Roy. Soc. **A130**, 499 (1931).
- [2] Сурис Р.А., Казаринов Р. ФТП **6**, 148 (1972).
- [3] Tsu R., Esaki L. Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [4] Гашимзаде Н.Ф., Ивченко Е.Л., Кособукин В.А. ФТП **23**, 839 (1989).
- [5] Suris R.A., Lavallard Ph. Phys. Rev. **B50**, 8875 (1994).
- [6] Trzeciakowski W. Phys. Rev. **B38**, 12493 (1988).
- [7] Sham L.Z., Nakayama M. Phys. Rev. **B20**, 734 (1979).
- [8] White S.R., Sham L.Z. Phys. Rev. Lett. **47**, 879 (1981).
- [9] Schulman Z.N., Yia-Chung Chang. Phys. Rev. **B27**, 2346 (1983).
- [10] Bastard G. Phys. Rev. **B24**, 5693 (1981).
- [11] Hori J. Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices. Oxford (1968).
- [12] Ziman J.M. Models of Disorder: Theoretical Physics of Homogeniously Disordered Systems. Cambridge (1979).
- [13] Кособукин В.А. ФТТ **35**, 4, 884 (1993).
- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М. (1963).
- [15] Bastard G. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Editions de Physique. Paris (1988).
- [16] Смирнов В.И. Курс высшей математики. М. (1974). Т. 2.
- [17] Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology / Ed. O.Madelung, H.Schulz. Berlin, Heidelberg (1987). V. 22.
- [18] Тамм И.Е. Сов. физ. журн. **1**, 733 (1932).
- [19] Ohno H., Mendez E.E., Brum J.A., Hong J.M., Agullo-Rueda F., Chang L.L., Esaki L. Phys. Rev. Lett. **64**, 2555 (1990).
- [20] Zhang C., Uno H., Day N., Samarth N., Dobrovolska M., Furdyna J.K. Phys. Rev. **B47**, 3806 (1993).