

©1994 г.

## МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛН С ГЕТЕРОГРАНИЦАМИ В GaAs/AlAs (001)

*С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваяев, В.Н.Чернышов*

Сибирский физико-технический институт им. В.Д.Кузнецова,  
634050, Томск, Россия

(Получена 16 декабря 1993 г. Принята к печати 1 марта 1994 г.)

На основе результатов многозонного расчета матриц сшивания  $J_{ij}$  ( $i, j$  — номера долин) на гетерогранице GaAs/AlAs (001) и коэффициентов прохождения через двухбарьерную структуру GaAs/AlAs(4a)/GaAs(8a)/AlAs(4a)/GaAs ( $a$  — постоянная решетки) методом псевдопотенциала разработана трехдолинная модель гетероструктуры GaAs/AlAs, пригодная для адекватного описания электронных процессов вблизи гетерограницы. В этой модели в матрице  $J_{ij}$  учитываются наиболее существенные элементы, отвечающие взаимодействию состояний, происходящих из долин  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$  нижней зоны проводимости. Волновые функции электронов в слоях GaAs и AlAs аппроксимированы в ограниченном базисе из состояний, отвечающих экстремумам зоны проводимости и валентной зоны. Получены параметрические выражения для матричных элементов  $J_{ij}$ , сохраняющие все особенности их энергетической зависимости, присущие точным выражениям.

### 1. Введение

Проблеме описания рассеяния электронов на гетерогранице GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (001) уделяется большое внимание [1–8]. Однако до сих пор задача построения простой модели, адекватно описывающей это рассеяние, в особенности процессы ГХ-рассеяния, до конца не решена. В наиболее разработанном виде такая задача представлена в статье [7], где были получены условия сшивания огибающих функций для долин  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$  зоны проводимости. Однако найденные в [7] условия не вполне удовлетворительны, поскольку получены в простом приближении метода сильной связи с ограниченным набором базисных функций, что приводит к недостаточно точному описанию зонной структуры, в частности к неверному расположению уровней  $X_1$  и  $X_3$  в AlAs. Поэтому представляется интересным изучить этот вопрос на основе более точных методов. В работах [3,4,8] проведено изучение

рассеяния электронов в структуре GaAs/AlAs на основе метода псевдопотенциала, однако никакой модели ГХ-взаимодействия предложено не было.

Мы обнаружили [9], что в точных матрицах сшивания явно выделяется блок размером  $6 \times 6$ , описывающий ГГ-, ГХ- и ХХ-рассеяние электронов. Это позволило предложить трехдолинную модель гетероструктуры GaAs/AlAs (001). Кроме того, в [9,10] были рассчитаны коэффициенты прохождения электрона через двухбарьерные структуры и выявлены особенности, связанные с ГГ- и ГХ-процессами туннелирования.

В данной работе мы продолжаем эти исследования на основе более точного расчета комплексной зонной структуры, более детально анализируем энергетическую зависимость элементов матрицы сшивания и предлагаем аппроксимационные формулы для описания этой зависимости.

## 2. Расчет методом псевдопотенциала

Процесс распространения электронной волны через многобарьерную гетероструктуру GaAs/AlAs во многом определяется взаимодействием этой волны с одной гетерограницей, которое описывается матрицей сшивания общих решений уравнения Шредингера для компонент гетероперехода. В связи с этим точность получаемых волновых функций непосредственно влияет на точность описания вероятностей туннелирования и временных характеристик. В предыдущей работе [9] использованного нами базиса оказалось недостаточно для качественно правильного описания спектра и волновых функций электронов вблизи точки Х зоны Бриллюэна, хотя основные особенности процесса туннелирования были описаны. Поэтому в данной работе нами разработана усовершенствованная методика, позволяющая достичь существенно более правильного описания спектра без заметного усложнения расчета. Прежде всего, для того чтобы обеспечить строгое сохранение свойств симметрии функций вблизи экстремумов нижней зоны проводимости, область изменения волнового вектора вдоль оси [001] была разбита на три участка —  $(-2\pi/a, -\pi/a)$ ,  $(-\pi/a, \pi/a)$ ,  $(\pi/a, 2\pi/a)$  ( $a$  — постоянная решетки), в каждом из которых набор плоских волн с одним и тем же числом проекций на гетерограницу строился вокруг экстремальной точки так, чтобы образовывались заполненные слои с одинаковыми модулями векторов. Кроме того, были дополнительно учтены плоские волны с большими модулями векторов по методу Левдина. При этом в добавке к матрице псевдопотенциала, учтенной по теории возмущений, величина волнового вектора бралась равной его значению в экстремуме. Фактически для участков около точек Г и Х было учтено соответственно 27 и 32 волны точно и около 100 волн — по теории возмущений. В этом базисе формируется 13 падающих и 13 отраженных волн. Для того чтобы добиться полного согласия с экспериментом по зонным энергиям GaAs и AlAs, параметры псевдопотенциалов были несколько изменены по сравнению с [9]. Для них были найдены следующие значения (в атомных единицах):  $v_0(\text{Ga}) = -0.5$ ,  $v_0(\text{Al}) = -0.2$ ,  $v_0(\text{As}) = -3.2$ ,  $R_m(\text{Ga}) = 3.22$ ,  $R_m(\text{Al}) = 3.66$ ,  $R_m(\text{As}) = 3.25$ . Разрыв зон проводимости на гетерогранице GaAs/AlAs был принят равным экспериментальному значению

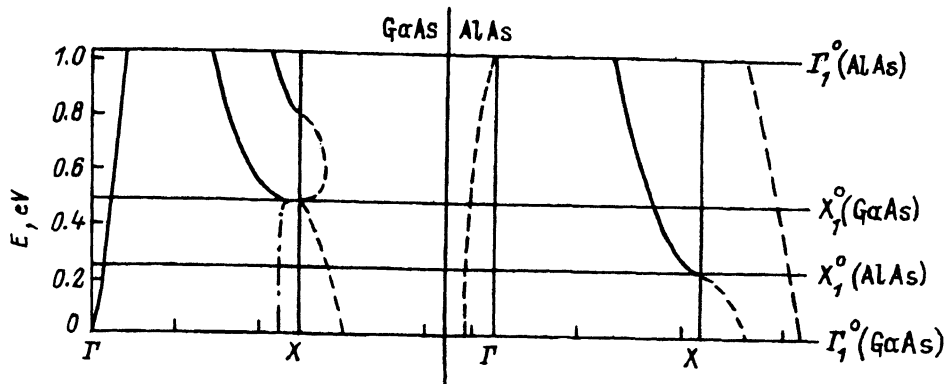


Рис. 1. Комплексная зонная структура GaAs и AlAs при  $k_{||} = 0$ .

Начало отсчета энергии — дно зоны проводимости GaAs. Вещественные  $k_z$  показаны между  $\Gamma$  и  $X$  (сплошная линия), чисто мнимые  $k_z$  — слева от  $\Gamma$  (штриховая),  $\text{Im } k_z$  для  $k_z$  с  $\text{Re } k_z = 2\pi/a$  — справа от  $X$  (штриховая); показаны также для других  $k_z$   $\text{Re } k_z$  (штрихпунктирная линия) и  $\text{Im } k_z$ , построенные относительно  $\text{Re } k_z$  (штриховая).

1.03 эВ [11]. Фрагмент комплексной зонной структуры вдоль линии  $\Delta$  для GaAs и AlAs, полученный в результате расчета, показан на рис. 1. При выбранных параметрах псевдопотенциала оказалось, что в GaAs дополнительный минимум на линии  $\Delta$  локализован в точке  $2\pi/a$  (0.95, 0, 0) и по энергии на 0.0016 эВ ниже состояния  $X_1$ . В AlAs минимум боковой долины локализован точно в точке  $X$ . Затухающие состояния, происходящие из экстремумов долин  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$ , вблизи краев зоны проводимости имеют длины затухания не меньше постоянной решетки. Другие состояния симметрии  $\Delta_1$ , связанные с вышележащими зонами (на рис. 1 они не показаны), затухают значительно сильнее и имеют длину затухания  $\sim 0.1\text{Å}$ . Такое разделение решений, как мы увидим далее, определяет минимальный набор базисных функций, достаточный для описания процессов рассеяния гетерограницей.

Изучение прохождения электронов через двухбарьерную структуру с толщинами слоев GaAs и AlAs, равными  $8a$  и  $4a$  соответственно, было проведено методом матрицы рассеяния. Детальное описание алгоритма расчета приведено в [9,10]. На рис. 2 изображены результаты расчета коэффициентов прохождения  $P_{\Gamma\Gamma}$ ,  $P_{\Gamma X}$ ,  $P_{X\Gamma}$  и  $P_{XX}$  (первый символ характеризует падающую волну, а второй — прошедшую), полученные при нормальном к гетерогранице движении электронов ( $k_{||} = 0$ ). Анализ особенностей на этих кривых показывает, что они в основном соответствуют связанным и резонансным состояниям в одиночных ямах и барьерах.

Повышение точности функций привело к некоторым отличиям от результатов [9]. Прежде всего было достигнуто практически полное выполнение условия нормировки, накладываемого на коэффициенты прохождения и отражения. Резонансы типа резонансов Фано в  $P_{\Gamma\Gamma}$  при энергиях 0.28 и 0.38 эВ, происходящие от взаимодействия со связанными состояниями в  $X$ -ямах AlAs, в данном расчете получились столь же сильно выраженными, как и особенности при 0.12, 0.42 и 0.81 эВ, обусловленные взаимодействием со связанными в  $\Gamma$ -яме GaAs состояниями. Отметим также заметное понижение  $P_{\Gamma\Gamma}$  в области энергий

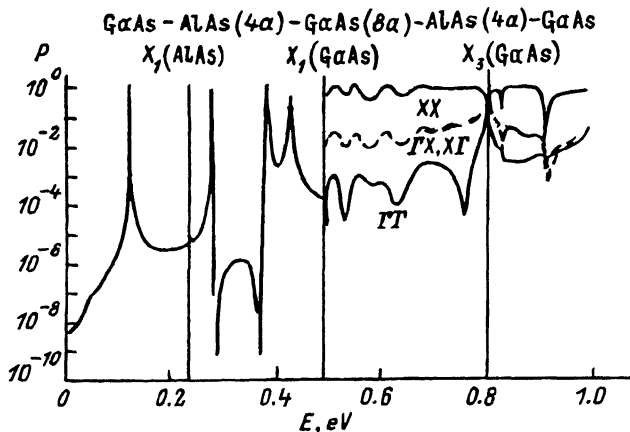


Рис. 2. Коэффициенты прохождения для электронов в двухбарьерной структуре GaAs/AlAs.

между двумя резонансами Фано. Мы выполнили также расчет коэффициентов прохождения при условии, что в матрицах шивания оставлены лишь элементы, отвечающие взаимодействию состояний  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$ . Оказалось, что они полностью совпадают с точным расчетом. Этот результат, обусловленный ранее отмеченным разделением вещественных линий в комплексной зонной структуре, открывает возможность для развития трехдолинной модели как наиболее обоснованному способу приближенного описания процессов туннелирования в гетероструктуре GaAs/AlAs (001).

### 3. Трехдолинная модель

Для интерпретации результатов точного расчета рассмотрим упрощенную модель, позволяющую в ограниченном базисе аппроксимировать волновые функции электронов в слоях GaAs и AlAs. Заметим, что ранее [9] мы провели аналогичный анализ при приближенном представлении волновых функций в виде ряда теории возмущений. Этот подход позволил выяснить некоторые качественные вопросы, но оказался не в состоянии правильно описать все особенности энергетической зависимости элементов матрицы шивания.

Выберем в качестве базиса функции  $U_{\Gamma_1}$  и  $U_{\Gamma_{15}}$ , отвечающие экстремумам зоны проводимости ( $\Gamma_1$ ) и валентной зоны ( $\Gamma_{15}$ ) в центре зоны Бриллюэна, а также функции  $U_{X_1}$  и  $U_{X_3}$ , отвечающие дополнительным экстремумам  $X_1$  и  $X_3$  зоны проводимости. Тогда общее решение уравнения Шредингера в одном из слоев структуры представим в виде

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^3 C(k_{\nu}) \left\{ A_{\nu} e^{i k_{\nu} z} [\Psi_{\nu} + \eta(k_{\nu}) \Phi_{\nu}] + B_{\nu} e^{-i k_{\nu} z} [\Psi_{\nu} + \eta(-k_{\nu}) \Phi_{\nu}] \right\}. \quad (1)$$

Здесь подразумевается  $\Psi_1 = U_{\Gamma_1}$ ,  $\Phi_1 = U_{\Gamma_{15}}$ ,  $\Psi_2 = \Psi_3 = U_{X_1}$ ,  $\Phi_2 = \Phi_3 = U_{X_3}$ , коэффициенты  $C(k_{\nu})$  находятся из условия нормировки,

а волновые векторы  $k_\nu$  и числа  $\eta(k_\nu)$  определяются из решения следующих систем уравнений, записанных в атомной системе единиц:

$$\begin{pmatrix} k_1^2 - E & 2ik_1 P_\Gamma \\ -2ik_1 P_\Gamma & k_1^2 - E_g - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta(k_1) \end{pmatrix} = 0, \quad (2)$$

$$\begin{pmatrix} k_\nu^2/m - E' & 2ik_\nu P_X \\ -2ik_\nu P_X & k_\nu^2/m + \Delta - E' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta(k_\nu) \end{pmatrix} = 0, \quad (\nu = 2, 3). \quad (3)$$

Непараболический закон дисперсии вблизи минимума  $\Gamma_1$ , а также связанные с этим минимумом возрастающие и затухающие решения определяются из системы (2)

$$k_1^2 = E + E_\Gamma - \sqrt{4P_\Gamma^2 E + E_\Gamma^2}, \quad E_\Gamma = \frac{4P_\Gamma^2 + E_g}{2}, \quad (4)$$

$$\eta(k_1) = \frac{E - k_1^2}{2ik_1 P_\Gamma} = -\frac{2ik_1 P_\Gamma}{E + E_g - k_1^2} = ik_1 \left[ \frac{1 - (2m_\Gamma)^{-1}}{k_1^2 [1 - (2m_\Gamma)^{-1}] - E_g} \right]^{1/2}. \quad (5)$$

Аналогично комплексная зонная структура в окрестности энергий  $X_1$  и  $X_3$  зоны проводимости находится из решения системы (3):

$$\frac{k_\nu^2}{m} = E' - E_X \pm \sqrt{4P_X^2 E' + E_X^2}, \quad E_X = \frac{-4P_X^2 m + \Delta}{2}, \quad (6)$$

$$\eta(k_\nu) = \frac{E' - \frac{k_\nu^2}{m}}{2ik_\nu P_X} = -\frac{2ik_\nu P_X}{E' - \Delta - \frac{k_\nu^2}{m}}, \quad (\nu = 2, 3). \quad (7)$$

В формулах (2)–(7) приняты обозначения:  $E$  и  $E'$  — энергии электрона, отсчитываемые от уровней  $\Gamma_1$  и  $X_1$  соответственно;  $iP_\Gamma$  и  $iP_X$  — матричные элементы оператора импульса между функциями  $U_{\Gamma_1}$ ,  $U_{\Gamma_3}$  и функциями  $U_{X_1}$ ,  $U_{X_3}$  соответственно;  $m_\Gamma = k_1^2/2E$  — зависящая от энергии эффективная масса в долине  $\Gamma$ ;  $m$  — эффективная масса в боковых долинах  $X_1$  и  $X_3$ , рассчитанная в пренебрежении прямым взаимодействием между ними. Мы считаем, что  $\text{Re } k_\nu \geq 0$  и  $\text{Im } k_\nu \geq 0$  в (4) и (6), так что  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  описывают падающие волны, а  $-k_1$ ,  $-k_2$ ,  $-k_3$  — отраженные. Выбирая значения  $P_\Gamma$ ,  $P_X$ ,  $m$ , можно с помощью формул (4), (6) достаточно хорошо воспроизвести комплексную зонную структуру, полученную в результате многозонного численного расчета. Таким образом, общее решение  $\Psi$  содержит в каждом слое 6 неизвестных констант  $A_\nu$ ,  $B_\nu$  ( $\nu = 1, 2, 3$ ), которые должны быть определены из граничных условий. На гетерограницах мы должны потребовать непрерывности самой волновой функции  $\Psi$  и ее производной  $\Psi' = \partial\Psi/\partial z$ . Эти условия непрерывности должны выполняться в каждой точке границы раздела слоев. Мы имеем всего 6 неизвестных констант. Поэтому два условия непрерывности необходимо спроектировать на подпространство трех независимых функций  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_3$ , определенных на плоскости  $z = \text{const}$ . Вопрос выбора этих функций является весьма существенным для дальнейшего изложения. Поэтому мы обсудим его подробнее.

Проведем границу между двумя слоями GaAs и AlAs по обшчим для обоих слоев атомам мышьяка. Для упрощения формул будем считать, что начало координат нашей системы помещено в один из атомов на гетерогранице. Обсудим свойства симметрии выбранных нами функций  $U_{\Gamma_1}$ ,  $U_{\Gamma_{15}}$ ,  $U_{X_1}$  и  $U_{X_3}$  в плоскости  $z = 0$ . Они являются следствием объемных свойств симметрии этих функций. Легко можно показать, что  $U_{\Gamma_1}(x, y, 0)$  и  $U_{X_1}(x, y, 0)$  полностью симметричны относительно перестановок координат  $x$  и  $y$  и относительно замены знаков  $x \rightarrow -x$  или  $y \rightarrow -y$ . В то же время функции  $U_{\Gamma_{15}}$  и  $U_{X_3}$  в плоскости  $z = 0$  симметричны относительно перестановок  $x \rightleftharpoons y$  и антисимметричны относительно замены знаков  $x \rightarrow -x$  или  $y \rightarrow -y$ . Поскольку мы интересуемся состояниями, принадлежащими в основном зоне проводимости, выберем в качестве  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  и  $\varphi_3$  функции, близкие к  $U_{\Gamma_1}(x, y, 0)$ ,  $U_{X_1}(x, y, 0)$  и  $U_{X_3}(x, y, 0)$ . В дальнейшем все величины, относящиеся к левой части структуры (GaAs), мы будем обозначать обычными символами, а все величины, относящиеся к правой части структуры (AlAs), будем описывать соответствующими символами с тильдой. Умножая уравнения  $\Psi|_{z=0} = \tilde{\Psi}|_{z=0}$  и  $\Psi'|_{z=0} = \tilde{\Psi}'|_{z=0}$  на  $\varphi_\mu^*$  ( $\mu = 1, 2, 3$ ) и интегрируя по поверхностной элементарной ячейке, получаем систему уравнений для коэффициентов  $A_\nu$ ,  $B_\nu$ ,  $\tilde{A}_\nu$  и  $\tilde{B}_\nu$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu=1}^3 C(k_\nu) \left[ (A_\nu + B_\nu)(\varphi_\mu, \Psi_\nu) + (A_\nu - B_\nu)(\varphi_\mu, \Phi_\nu) \eta(k_\nu) \right] = \\ & = \sum_{\nu=1}^3 \tilde{C}(\tilde{k}_\nu) \left[ (\tilde{A}_\nu + \tilde{B}_\nu)(\varphi_\mu, \tilde{\Psi}_\nu) + (\tilde{A}_\nu - \tilde{B}_\nu)(\varphi_\mu, \tilde{\Phi}_\nu) \eta(\tilde{k}_\nu) \right], \quad (8) \\ & \sum_{\nu=1}^3 C(k_\nu) \left\{ (A_\nu + B_\nu) \left[ ik_\nu \eta(k_\nu)(\varphi_\mu, \Phi_\nu) + (\varphi_\mu, \Psi'_\nu) \right] + \right. \\ & \quad \left. + (A_\nu - B_\nu) \left[ ik_\nu (\varphi_\mu, \Psi_\nu) + \eta(k_\nu)(\varphi_\mu, \Phi'_\nu) \right] \right\} = \\ & = \sum_{\nu=1}^3 \tilde{C}(\tilde{k}_\nu) \left\{ (\tilde{A}_\nu + \tilde{B}_\nu) \left[ i\tilde{k}_\nu \tilde{\eta}(\tilde{k}_\nu)(\varphi_\mu, \tilde{\Phi}_\nu) + (\varphi_\mu, \tilde{\Psi}'_\nu) \right] + \right. \\ & \quad \left. + (\tilde{A}_\nu - \tilde{B}_\nu) \left[ i\tilde{k}_\nu (\varphi_\mu, \tilde{\Psi}_\nu) + \tilde{\eta}(\tilde{k}_\nu)(\varphi_\mu, \tilde{\Phi}'_\nu) \right] \right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

где  $(\varphi_\mu, U)$  — интеграл перекрытия,

$$(\varphi_\mu, U) = \frac{1}{Q} \iint_{(Q)} dx dy \varphi_\mu^*(x, y) U(x, y), \quad (10)$$

$Q$  — площадь элементарной ячейки в плоской решетке. В силу свойств симметрии базисных функций  $\Psi_\nu$ ,  $\Phi_\nu$ ,  $\tilde{\Psi}_\nu$ ,  $\tilde{\Phi}_\nu$  и функций  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_3$  уравнения для коэффициентов  $A_\nu$ ,  $B_\nu$ ,  $\tilde{A}_\nu$ ,  $\tilde{B}_\nu$  разбиваются на две подсистемы: для сумм  $(A_\nu + B_\nu)$  и для разностей  $(A_\nu - B_\nu)$ . Простые, но довольно громоздкие вычисления позволяют получить явные выражения

для элементов матрицы шивания, определяемых уравнениями [9]

$$A_\mu = \sum_{\nu=1}^3 \left[ J_{11}(\mu, \nu) \tilde{A}_\nu + J_{12}(\mu, \nu) \tilde{B}_\nu \right], \quad (11)$$

$$B_\mu = \sum_{\nu=1}^3 \left[ J_{21}(\mu, \nu) \tilde{A}_\nu + J_{22}(\mu, \nu) \tilde{B}_\nu \right], \quad (12)$$

где справедливы соотношения  $J_{11} = J_{22}$ ,  $J_{12} = J_{21}$ . Интегралы перекрытия, входящие в (8) и (9), формируют в конечных выражениях для  $J_{ij}$  константы  $\alpha$  и  $\beta$ , которые мы считаем подгруппочными. Приведем приближенные формулы для всех элементов матриц шивания [из знаков ( $\pm$ ) верхний выбирается для  $J_{11}$ , нижний — для  $J_{12}$ ]: для  $\nu = 1, \mu = 1, 2, 3$  и  $\nu = 2, 3, \mu = 1, 2$

$$J_{11,12}(\nu, \mu) = F(\nu, \mu) \left\{ \alpha(\nu, \mu) + \beta(\nu, \mu) [S_2(\nu, \mu) \pm S_1(\nu, \mu)] \right\}; \quad (13a)$$

для  $\nu = 2, 3, \mu = 3$

$$J_{11,12}(\nu, \mu) = \pm F(\nu, \mu) \left\{ \alpha(\nu, \mu) + \beta(\nu, \mu) [S_2(\nu, \mu) \pm S_1(\nu, \mu)] \right\}. \quad (13b)$$

Здесь

$$F(1, 1) = \tilde{C}(\tilde{k}_1)/C(k_1), \quad F(1, 2) = F(1, 3) = 1/C(k_1),$$

$$F(\nu, 1) = \tilde{C}(\tilde{k}_1) \left[ C(k_\nu)(E - E_0)^{1/2} \right]^{-1}, \quad (\nu = 2, 3),$$

$$F_{\nu,\mu} = [\eta(k_\nu)]^{-\delta_{\nu 3} + (-1)^{\nu+1}|\nu-\mu|} \left[ C(k_\nu)(E - E_0)^{1/2} \right]^{-1}, \quad (\nu, \mu = 2, 3),$$

$$C(k_\nu) = [1 - \eta^2(k_\nu)]^{-1/2},$$

$$S_2(1, 1) = S_2(1, 2) = S_2(1, 3) = S_2(2, 1) = S_2(3, 1) = 0,$$

$$S_2(2, 2) = k_3 \eta(k_3), \quad S_2(2, 3) = k_3 \eta^{-1}(k_3),$$

$$S_2(3, 2) = k_2 \eta(k_2), \quad S_2(3, 3) = k_2 \eta^{-1}(k_2),$$

$$S_1(1, 1) = \tilde{k}_1 m_\Gamma (k_1 \tilde{m}_\Gamma)^{-1}, \quad S_1(1, 2) = \tilde{k}_2 m_\Gamma (k_1)^{-1}, \quad S_1(1, 3) = m_\Gamma (k_1)^{-1},$$

$$S_1(\nu, 1) = [k_\nu \eta^{-1}(k_\nu) + iP_x] \tilde{\eta}(\tilde{k}_1) \eta^{-1}(k_\nu), \quad (\nu = 2, 3),$$

$$S_1(\nu, 2) = \tilde{k}_2 \eta^{-1}(k_\nu), \quad S_1(\nu, 3) = \tilde{k}_3 \eta(k_\nu), \quad (\nu = 2, 3).$$

В приближенных выражениях для матричных элементов  $J_{ij}(\nu, \mu)$  мы сохранили все особенности, присущие точным (в рамках предложенной трехдолинной модели) выражениям. Эти особенности связаны с появлением величин  $k_\nu$  и  $\eta(k_\nu)$  в знаменателе некоторых слагаемых, а для матричных элементов, связывающих состояния, происходящие из точки  $X$  GaAs, с любыми состояниями из AlAs. Имеется, кроме того, еще одна особая точка, содержащаяся в общем для всех слагаемых

$\nu, \mu$	$\alpha$	$\beta$	Область энергий
1, 1	$0.5228 + i0.0000$	$0.5316 + i0.0000$	
1, 2	$-0.0220 + i0.0000$	$-0.2652 - i0.0005$	
1, 3	$-0.0253 - i0.0001$	$0.0000 - i0.1287$	
2, 1	$0.0272 - i0.0039$	$-0.0864 + i0.1430$	$E_{\Gamma_1}(\text{GaAs}) < E < E_{\Gamma_1}(\text{AlAs})$
3, 1	$-0.0272 - i0.0039$	$-0.0864 - i0.1429$	
2, 2	$0.0214 + i0.0000$	$-0.0001 - i0.2290$	
3, 2	$-0.0137 + i0.0040$	$-0.0007 + i0.1983$	
2, 3	$0.0253 - i0.0113$	$0.0903 + i0.2250$	$E_{\Gamma_1}(\text{GaAs}) < E < E_{X_1}(\text{GaAs})$
3, 3	$-0.0253 - i0.0113$	$0.0901 - i0.2250$	
2, 3	$0.0260 + i0.0000$	$0.0002 + i0.2145$	$E_{X_1}(\text{GaAs}) < E < E_{\Gamma_1}(\text{AlAs})$
3, 3	$-0.0320 + i0.0001$	$-0.0007 - i0.2535$	

знаменателе  $\sqrt{E - E_0}$ , где  $E_0 = -\frac{E_X^2}{4mP_X^2}$  — энергия, при которой достигается минимум зоны проводимости вблизи экстремума  $X_1$  GaAs. Кроме того, мы пренебрегли взаимодействием состояний  $X_1$  и  $X_3$  в AlAs и принимали во внимание неравенства  $m_{\Gamma} \ll 1$  и  $\tilde{m}_{\Gamma} \ll 1$ .

Приближенные формулы, как показывает расчет с параметрами, приведенными в таблице, хорошо аппроксимируют полученные в точном расчете энергетические зависимости различных элементов матрицы сшивания. Для матричных элементов  $J_{11}(1, 1)$ ,  $J_{11}(2, 2)$ ,  $J_{11}(1, 2)$  это видно из рис. 3.

Отметим, что обычно используемые условия сшивания для огибающих [1], в которых  $\alpha = \beta = 0.5$ ,  $S_2(\nu, \nu) = 0$ ,  $F(\nu, \nu) = 1$ , а  $S_1(\nu, \nu) = \tilde{k}_{\mu} m_{\nu} / k_{\nu} \tilde{m}_{\mu}$ , выполняются лишь в однодолинном приближении, которое в данном гетеропереходе справедливо вблизи дна  $\Gamma$ -долины GaAs для элементов  $J_{11}(1, 1)$ ,  $J_{12}(1, 1)$ , описывающих  $\Gamma\Gamma$ -взаимодействие. Для элементов  $J_{11}(2, 2)$ ,  $J_{12}(2, 2)$  за счет существенной связи долин  $X_1$  и  $X_3$  и специфического поведения комплексной зонной структуры в окрестности точки  $X$  эти условия выполняются с меньшей точностью. Недиагональные по номерам долин элементы подобной моделью, естественно, вообще не описываются. Прямое сравнение наших результатов с результатами работы [7] затруднено из-за того, что мы представляем матрицы сшивания для амплитуд падающих и отраженных волн, а в работе [7] даны условия сшивания для огибающих, а также из-за разницы в нормировках функций. Подобное сравнение будет детально проведено в другой работе. Здесь можно отметить лишь, что качественные особенности энергетической зависимости элементов наших матриц сшивания содержатся и в условиях сшивания для огибающих, введенных в [7], но количественные различия имеют место. В частности, мы учли энергетическую зависимость эффективных масс  $m_{\Gamma}$  и  $\tilde{m}_{\Gamma}$ , а в работе [7] она отсутствует. В работе [8] было высказано утверждение, что условия сшивания для первых производных от огибающих функций существенно отличаются от обычно используемых



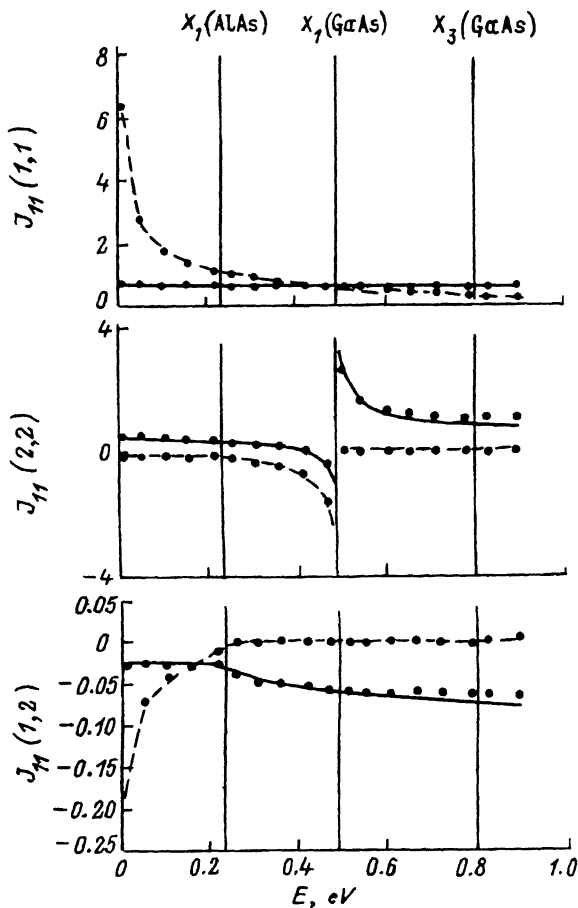


Рис. 3. Энергетические зависимости матричных элементов  $J_{11}(1,1)$ ,  $J_{11}(2,2)$  и  $J_{11}(1,2)$ : сплошные линии —  $\text{Re}J_{11}(\nu, \mu)$ , штриховые —  $\text{Im}J_{11}(\nu, \mu)$ , точки — результаты точных расчетов методом псевдопотенциала.

[1] даже для огибающих в  $\Gamma$ -долинах. Наши результаты показывают, что это отличие не принципиально, надо лишь учесть энергетическую зависимость эффективных масс  $m_{\Gamma}$  и  $\tilde{m}_{\Gamma}$ , отношение нормировочных констант  $\tilde{C}_1(\vec{k}_1)/C_1(k_1)$  и различие базисных функций GaAs и AlAs, проявившееся в том, что наши параметры  $\alpha$  и  $\beta$  несколько отличаются от 0.5.

Напомним, что в нашем выводе мы предполагали, что  $m_{\Gamma} \ll 1$  и  $\tilde{m}_{\Gamma} \ll 1$ . При нарушении этих неравенств условия сшивания огибающих и их производных становятся сложнее.

#### 4. Заключение

Мы провели исследование взаимодействия электронов зоны проводимости с гетерограницей GaAs/AlAs (001) и установили, что происходящие на гетерогранице ГХ-процессы могут быть описаны в рамках трехдолинной модели. Ее суть состоит в том, что, находясь внутри слоя, электрон независимо движется как в  $\Gamma$ -, так и в X-зонах. Для описания такого движения можно использовать непараболическое приближение (2) и (3). На гетерогранице ГХ-взаимодействие описывается

ся условиями (8) и (9), которые хорошо аппроксимируются матрицами сшивания  $J_{11}$  и  $J_{12}$  — (13а), (13б). Мы рассмотрели выше случай движения электрона в перпендикулярном к гетерогранице направлении ( $k_{\parallel} = 0$ ). В точном описании в рамках метода псевдопотенциала отказ от ограничения  $k_{\parallel} = 0$  требует дополнительных значительных затрат машинного времени. В рамках трехдолинной модели это сделать значительно проще. На основе трехдолинной модели можно также поставить задачу о распространении волнового пакета через структуру, содержащую несколько гетерограниц, и проанализировать временные характеристики ГХ-процессов. Последнее представляется важным в связи с разработкой быстродействующих приборов. Наконец, трехдолинная модель может быть использована в структурах с гетерограницами GaAs/AlAs (001) во внешних полях и во многих других задачах.

### Список литературы

- [1] М. Херман. *Полупроводниковые сверхрешетки* (М., Мир, 1989).
- [2] H.C. Liu. *Superlatt. Microstruct.*, **7**, 35 (1990).
- [3] D.Y.K. Ko, J.C. Inkson. *Phys. Rev. B*, **38**, 9945 (1988).
- [4] D.Y.K. Ko, J.C. Inkson. *Semicond. Sci. Techn.*, **3**, 791 (1988).
- [5] K.V. Rousseean, K.L. Wang, J.N. Schulman. *Appl. Phys. Lett.*, **54**, 1391 (1989).
- [6] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 14609 (1989).
- [7] T. Ando, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11618 (1989).
- [8] J.P. Cuypers, W.J. van Haeringen. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **4**, 2587 (1992).
- [9] Г.Ф. Карavaев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. *Изв. вузов. Физика*, **35**, вып. 9, 64 (1992).
- [10] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. *ФТП*, **26**, 2057 (1992).
- [11] G. Danan, B. Etienne, F. Mollot, R. Planel, A.M. Jean-Louis, F. Alexandre, B. Jusserand, G. Le Roux, J.Y. Marzin, H. Savari, B. Sermage. *Phys. Rev. B*, **35**, 6207 (1987).

Редактор Л.В. Шаронова

## A Model for Describing Interactions of Electron Waves with Heteroboundaries in GaAs/AlAs (001)

*S.N. Grinyaev, G.F. Karavaev, and V.N. Chernyshov*

V.D. Kusnetzov Physical-Technical Institute in Siberia 634050, Tomsk, Russia

