К ТЕОРИИ ПОГРАНИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ГЕТЕРОПЕРЕХОДАХ

Шадрин В. Д.

Рассмотрены условия существования пограничных состояний в абсолютной запрещенной энергетической щели резкого гетероперехода, образованного кейновскими полупроводниками. Расчеты проводятся в модели, учитывающей действие микропотенциала границы раздела на огибающие блоховских функций. Показано, что пограничные состояния могут существовать в запрещенной энергетической щели не только инверсного гетероперехода, но и гетероперехода, составленного из гетеропар с нормальной зонной структурой. Рассчитаны вероятность резонансного межзонного туннелирования через пограничные состояния, а также вероятность их фотоионизации.

Пограничные состояния (ПС) в гетеропереходах аналогично таммовским состояниям представляют собой локализованные вблизи границы раздела решения уравнения Шредингера. В гетеропереходах на основе узкозонных полупроводников ПС могут быть описаны на языке огибающих блоховских функций ближайших зон. При таком подходе проблема состоит в задании условий сшивки огибающих на границе раздела. Чаще всего используются условия непрерывности огибающих. Однако такие условия сшивки, хотя и соответствуют сохранению потока частиц через границу, предполагают зеркальную симметрию быстроосциллирующих блоховских функций относительно плоскости раздела гетеропар. Ясно, что в реальных системах это предположение может не выполняться. В частности, это относится к напряженным слоистым структурам с изначально различающимися (до 5 %) постоянными решетки. Условия сшивки, учитывающие различие блоховских функций, выведены в работах [1, 2] в приближении эффективной массы и состоят в том, что действие границы раздела эквивалентно добавлению к макропотенциалу скачка зон в уравнение для огибающих одномерного короткодействующего потенциала типа δ-функции.

В настоящей работе для описания действия границы раздела принята однопараметрическая модель [1, 2], обобщенная на уравнения для огибающих в кейновских полупроводниках. Таким образом, для описания ПС используется модель, аналогичная модели Луковского для расчетов глубоких уровней в полупроводниках. Как и в модели Луковского, «сила» δ-функции должна определяться из сравнения рассчитанных положений зон ПС с экспериментально измеренными. Пограничные состояния в резких гетеропереходах (ГП) на основе узкозонных полупроводников рассчитывались ранее Сурисом [3] с использованием условий непрерывности огибающих. При этом ПС локализованы по энергиям вне абсолютной запрещенной щели ГП, за исключением инверсного ГП, в котором пограничные состояния существуют всегда и лежат в середине запрещенной щели. В настоящей работе показано, что в модели [1, 2] возможно существование ПС и в абсолютной запрещенной щели гетероперехода. Такие ПС, не перекрывающиеся с объемным энергетическим спектром полупроводников, составляющих гетеропары, должны играть важную роль как в статических, так и в кинетических процессах. Здесь рассмотрены два эффекта, связанных с существованием ПС в абсолютной запрещенной щели: межзонное туннелирование через ПС и фотоионизация заполненных электронами ПС.

1. Условия сшивки для огибающих и расчет положений подзон ПС

Исходим из уравнений кейновской модели для огибающих блоховских функций зоны проводимости $u_n(\mathbf{r})$ и трех валентных зон $\mathbf{v}_n(r)$ X-, Y- и Z-типа (рассматриваются полупроводники со слабым спин-орбитальным взаимодействием; индекс $n=1$, 2 нумерует гетеропары; ось Oz перпендикулярна границе раздела)

$$\begin{aligned}&[E-\Delta_n-V_n(z)-2\gamma s\delta(z)]\,u_n(\mathbf{r})-s\hat{\mathbf{k}}\mathbf{v}_n(\mathbf{r})=0,\\&[E+\Delta_n-V_n(z)-2\gamma s\delta(z)]\,\mathbf{v}_n(\mathbf{r})-s\hat{k}u_n(\mathbf{r})=0.\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь Δ_n — полуширина запрещенной зоны каждой из гетеропар ($\Delta_1\leqslant\leqslant|\Delta_2|$), E — энергия, отсчитываемая от середины запрещенной зоны каждого полупроводника, $s=\sqrt{\Delta_1/m_1}=\sqrt{\Delta_2/m_2}$ — межзонный матричный эле-

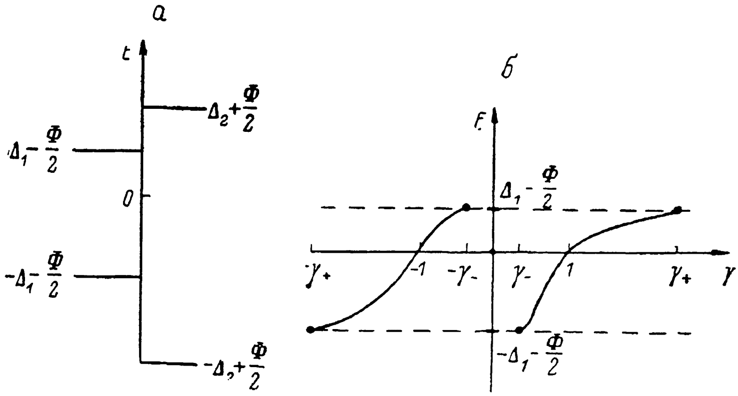

Рис. 1. Энергетическая схема ГП I типа (а) и зависимость энергии ПС от параметра γ (б) $[\gamma_\pm=(\sqrt{2\Delta_2}\pm\sqrt{\Delta_2+\Delta_1-\Phi})/\sqrt{\Delta_2-\Delta_1+\Phi}]$.

мент скорости, m_n — эффективные массы электронов и легких дырок (масса тяжелых дырок $m_H\to\infty$), $\hat{\mathbf{k}}=-i\nabla$ — оператор импульса ($\hbar=1$), $V_n(z)$ — макропотенциал скачка зон, $\delta(z)$ — δ-функция, γ — безразмерный параметр, описывающий действие границы раздела на огибающие.

Полагая $u_n(\mathbf{r})=u_n(z)\exp(i\mathbf{k}_\parallel\rho)$, $\mathbf{v}_n(\mathbf{r})=\mathbf{v}_n(z)\exp(i\mathbf{k}_\parallel\rho)$, где $\rho=(x,\ y)$, $\mathbf{k}_\parallel$ — импульс, параллельный плоскости раздела, и интегрируя (1) в окрестности $z=0$, получим условия сшивки

$$\begin{pmatrix}u_2(0)\\ v_{2z}(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}\\ a_{21}&a_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1(0)\\ v_{1z}(0)\end{pmatrix}. \tag{2}$$

Здесь $a_{11}=a_{22}=[(1-\gamma^2)/(1+\gamma^2)]$, $a_{12}=a_{21}=-[2i\gamma/(1+\gamma^2)]$. Ограничившись далее рассмотрением резких гетеропереходов $[V_1(z)=-\Phi/2,\quad V_2(z)=\Phi/2]$ и используя (1) и (2), получим дисперсионное уравнение для определения спектра пограничных состояний

$$x_1+x_2+\delta(1-x_1x_2)=0, \tag{3}$$

где $x_n=[s^2\mathbf{k}_\parallel^2+\Delta_n^2-(E-V_n)^2]^{1/2}/[\Delta_n+E-V_n]$, $\delta=[2\gamma/(1-\gamma^2)]$.

Как следует из (3), энергии и условия существования ПС зависят от параметра δ, который в свою очередь однозначно определяется величиной γ. Изучим решения (3) для основных типов гетеропереходов.

1) ГП I *типа с вложенными запрещенными зонами*. В такого рода ГП запрещенная зона одной гетеропары вложена в запрещенную зону другой (рис. 1, а) и, следовательно, $|\Phi|\leqslant|\Delta_2-\Delta_1|$. Для $k_\parallel=0$ получим единственное решение (3)

$$E(\mathbf{k}_\parallel=0)=E_s=-\Delta_1-\frac{\Phi}{2}+\frac{2\Delta_1}{1+x_1^2},$$

где

$$x_1=\frac{2\delta\Delta_2+\{(1+\delta^2)\,[\delta^2\,((\Delta_1+\Delta_2)^2-\Phi^2)+(\Delta_2-\Delta_1)^2-\Phi^2]\}^{1/2}}{\delta^2\,(\Delta_2+\Delta_1+\Phi)+(\Delta_2-\Delta_1-\Phi)}.$$

Зависимость энергии E_s дна подзоны пограничных состояний от параметра γ изображена на рис. 1, *б*, из которого следует, что в данной модели в отличие от [3] ПС появляются в абсолютной энергетической щели. Получим также выражение для эффективной массы электронов в подзоне ПС, подставив $E=E_s+(k_{\parallel}^2/$

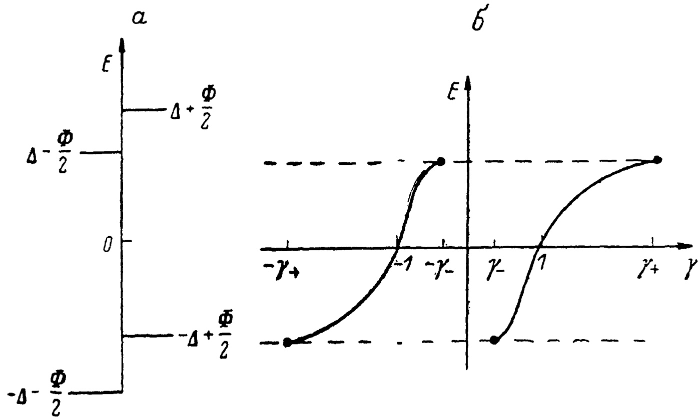

Рис. 2. Энергетическая схема ГП II типа (*а*) и зависимость энергии ПС от параметра γ (*б*) $[\gamma_{\pm}=(\sqrt{2\Delta}\pm\sqrt{2\Delta-|\Phi|})/\sqrt{|\Phi|}]$.

$2m)$ в (3) и разрешив это уравнение относительно m, для симметричного ГП ($\Phi=0$)

$$ms^2=\frac{\Delta_1\,(\Delta_2-E_s)^{3/2}(\Delta_2+E_s)^{1/2}+\Delta_2\,(\Delta_1-E_s)^{3/2}(\Delta_1+E_s)^{1/2}+\delta\,(\Delta_1+\Delta_2)\,(\Delta_1\Delta_2-E_s^2)}{(\Delta_2-E_s)^{3/2}(\Delta_2+E_s)^{1/2}+(\Delta_1-E_s)^{3/2}(\Delta_1+E_s)^{1/2}+\delta\,(\Delta_1^2+\Delta_2^2-2E_s^2)}.$$

В частных случаях: а) $|\gamma|=1$, $E_s=0$, $m=m_1m_2\,[(m_1+m_2)/(m_1^2+m_2^2)]$; б) $\Delta_2\gg\Delta_1$, $m=m_1$; в) $\gamma=0$, $E_s=-\Delta$, $m=m_1$; г) $\Delta_2=\Delta_1$, $m=m_1$.

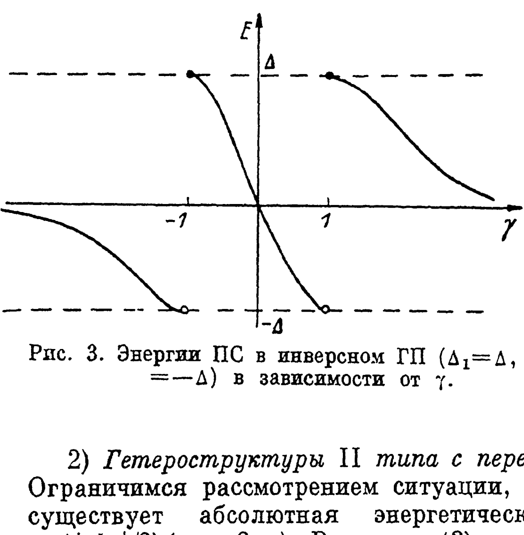

Рис. 3. Энергии ПС в инверсном ГП ($\Delta_1=\Delta$, $\Delta_2=-\Delta$) в зависимости от γ.

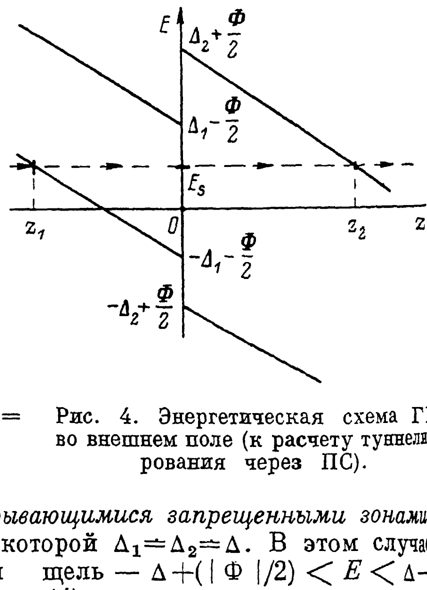

Рис. 4. Энергетическая схема ГП во внешнем поле (к расчету туннелирования через ПС).

2) *Гетероструктуры* II *типа с перекрывающимися запрещенными зонами*. Ограничимся рассмотрением ситуации, в которой $\Delta_1=\Delta_2=\Delta$. В этом случае существует абсолютная энергетическая щель $-\Delta+(|\Phi|/2)<E<\Delta-(|\Phi|/2)$ (рис. 2, *а*). Решением (3) является (4), в котором следует положить $\Delta_1=\Delta_2=\Delta$. Зависимость положения E_s дна подзоны от параметра γ изображена на рис. 2, *б*. Как и для гетеропереходов I типа, существует область значений γ, при которых ПС расположены в абсолютной энергетической щели ГП.

3) *Инверсный симметричный* ГП ($\Delta_1 \doteq \Delta$, $\Delta_2 \doteq -\Delta$). Как известно, в плавном инверсном ГП всегда существуют ПС. В резком гетеропереходе они возникают в середине запрещенной зоны [3] при условиях непрерывности огибающих. В используемом здесь подходе подзона ПС при $|\gamma| \to 1$ смещается из середины запрещенной зоны к ее краям (рис. 3).

Таким образом, основное отличие условий возникновения ПС в рамках нашей модели от модели [3] состоит в возможности существования их при $k_\parallel=0$ в абсолютной запрещенной энергетической щели гетероперехода. Существование таких пограничных состояний должно приводить к ряду эффектов (например, гибридизации ПС и размерно-квантованных состояний в квантовых ямах, туннелированию через ПС, поглощению излучения заполненными пограничными состояниями). Поскольку эффекты гибридизации подробно рассматривались в [4] в применении к размерно-квантованным и таммовским состояниям в тонких пленках, в настоящей работе рассматриваются два эффекта, связанных с существованием ПС в абсолютной энергетической щели гетероперехода, а именно: межзонное туннелирование через ПС и фотоионизация заполненных электронами ПС.

2. Межзонное туннелирование через ПС

Рассмотрим ГП I или II типа в квазиклассическом внешнем электрическом поле (рис. 4). Квазиклассические решения уравнения (1) для огибающих в надбарьерных

$$u_n(z) = [k_n(z)]^{-1/2} \left\{ A_n \exp\left[-i \int_z^{z_n} k_n(z)\, dz \right] + A_n' \exp\left[i \int_z^{z_n} k_n(z)\, dz \right] \right\} \tag{5}$$

и подбарьерных областях

$$u_n(z) = (|k_n(z)|)^{-1/2} \left\{ B_n \exp\left[-\int_{z_n}^{z} |k_n(z)|\, dz \right] + B_n' \exp\left[\int_{z_n}^{z} |k_n(z)|\, dz \right] \right\}; \tag{6}$$

здесь $k_n(z) \doteq s^{-1}[s^2\mathbf{k}_\parallel^2 + \{E+V_n(z)\}^2]^{1/2}$, z_n — координаты точек поворота.

Используя формулы связи, следующие из квазиклассических условий сшивки решений (5) и (6) $A_n = \exp[i(\pi/4)][(B_n/2) - iB_n']$, $A_n' \doteq \exp[-i(\pi/4)][(B_n/2)+iB_n']$, для волны, падающей слева направо ($A_2' \doteq 0$), получим выражение для коэффициента туннельной прозрачности

$$T = 1 - \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{4T_1T_2X_+X_-}{(4T_1X_+ + T_2X_-)^2 + X^2}, \tag{7}$$

где $X_\pm \doteq \delta(1+x_1x_2) \pm (x_2-x_1)$, $X \doteq \delta(1-x_1x_2)+x_1+x_2$. При выводе (7) использованы условия (2) сшивки на гетерогранице; $T_1 = \exp\left(-2\int_{z_1}^{0} |k_1(z)|\, dz \right)$ и $T_2 = \exp\left(-2\int_{0}^{z_2} |k_2(z)|\, dz \right)$ — туннельные прозрачности барьеров в каждой из гетеропар. Учитывая, что $X \doteq 0$ является дисперсионным уравнением (3) для пограничных состояний, получим из (7)

$$T = \frac{4T_1T_2X_+X_-}{4T_1X_+ + T_2X_-} \pi \left| \frac{dE}{dX} \right| \delta[E - E_s(\mathbf{k}_\parallel)]. \tag{8}$$

Из (8) следует, что туннельная прозрачность гетероперехода с ПС определяется барьером с наименьшей прозрачностью. При этом резонансный туннельный ток через ГП, коэффициент прозрачности которого дается выражением (8), существенно превышает компоненту туннельного тока, связанную с нерезонансным межзонным туннелированием $T \doteq 4T_1T_2(X_+X_-/X^2)$. Полученные здесь результаты находятся в качественном соответствии с результатами рассмотрения резонансного туннелирования через примесные состояния, локализованные в барьере [5].

3. Фотоионизация ПС

Вычислим вероятность оптических переходов из подзоны ПС в зону проводимости. Рассмотрим мелкие ПС на границе раздела гетеропар с совпадающими запрещенными зонами $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$. Используя (1) и (2), получим спектроволновые функции электронов в ПС

$$E_s(k_\parallel) = \frac{\xi^2\Delta + \sqrt{\Delta^2 + \mathbf{k}_\parallel^2(1+\xi^2)}}{1+\xi^2},$$
$$u_i(z) = \frac{\sqrt{m\Delta}}{2}\begin{cases} \exp(k_z z), & z < 0, \\ -\operatorname{sgn}\delta \exp(-k_z z), & z \geqslant 0, \end{cases} \tag{9}$$

где

$$\xi = \begin{cases} \frac{1}{\delta}, & \delta > 0, \\ -\delta, & \delta \leqslant 0, \end{cases} \quad k_z = s^{-1}\sqrt{s^2\mathbf{k}_\parallel^2 + \Delta^2 - E_s^2}.$$

Волновые функции конечных состояний в зоне проводимости выбираем в виде (l — нормировочная длина)

$$u_f(z) = \frac{1}{\sqrt{l}}\begin{cases} \exp(ikz) + A\exp(-ikz), & z < 0, \\ B\exp(ikz), & z \geqslant 0, \end{cases} \tag{10}$$

где

$$A = \frac{i\delta(\beta - \beta^{-1})}{1 - \delta^2 + i\delta(\beta + \beta^{-1})}, \quad B = \frac{1+\delta^2}{1 - \delta^2 + i\delta(\beta + \beta^{-1})}.$$

Вероятность фотоионизации состояний в подзоне равна

$$\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k_\parallel, k} |\langle u_f | \hat{\mathscr{H}} | u_i\rangle|^2 f(E_i)[1 - f(E)]\,\delta(E - E_i - \hbar\omega).$$

Здесь $f(E_i)$ и $f(E)$ — функции распределения электронов в начальном и конечном состояниях,

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{e}{mc}\frac{2\Delta}{(\Delta + E)}\left(\frac{2\pi N_\nu \hbar c^2}{V n_r^2 \omega}\right)^{1/2}\exp(iqz)\,\hat{p}_z$$

— гамильтониан взаимодействия электронов с излучением в представлении волновых функций $u_n(\mathbf{r})$ (учитываются лишь переходы, вызванные поляризованным вдоль оси Oz излучением, поглощением света с другой поляризацией, обусловленным слабой непараболичностью зон начальных и конечных состояний, пренебрегаем). В последнем выражении c — скорость света, q и ω — волновой вектор и частота излучения, n_r — показатель преломления среды, N_ν — число фотонов в объеме V, $\hat{p}_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$ — оператор импульса.

Приведем выражение для квадрата матричного элемента импульса, вычисленного на волновых функциях (9) и (10),

$$|\langle u_f | \hat{p}_z | u_i\rangle|^2 = \frac{\sqrt{2m}}{\omega l}\frac{(\Delta - E_s)^{7/2}}{\Delta^{3/2}}T(E_\perp), \tag{11}$$

где $T(E_\perp) = E_\perp/(E_\perp + \Delta - E_s)$ — коэффициент прохождения электронов зоны проводимости через гетерограницу (напомним, что гетеробарьера нет, так как $\Delta_1 = \Delta_2$ и $\Phi = 0$), $E_\perp = E - \Delta - (\hbar^2 k_\parallel^2/2m)$ — кинетическая энергия перпендикулярного границе раздела движения электронов.

Формула для квантового выхода $\eta = (ln_r/cN_\nu\tau)$ процесса фотоионизации пограничных состояний при низких температурах имеет вид

$$\eta = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{E_F E_{ss}^{7/2}\sqrt{\hbar\omega - E_{ss}}}{\Delta^2(\hbar\omega)^3}, \tag{12}$$

где $E_{ss} = \Delta - E_s$, E_F — энергия Ферми электронов, заполняющих подзону ПС. Отметим, что формула (12) в отличие от вероятности фотоионизации электронов в квантовой яме не имеет особенностей [6]. Это связано с плавной зависимостью коэффициента прохождения, фигурирующего в (11), от энергии.

В заключение проанализируем зависимость квантового выхода фотоионизации изотипного гетероперехода от концентрации N_d донорной примеси в гетеропарах, т. е. выразим энергию Ферми E_F через N_d. В приближении истощенного слоя, используя условие электронейтральности, имеем

$$2N_d L = n_{ss} = \frac{m}{\pi\hbar^2} E_F, \tag{13}$$

где $L=(\varepsilon\mathcal{V}/2\pi e^2 N_d)^{1/2}$ — толщина слоя истощения, $\mathcal{V} \doteq E_{ss}-E_F-E_d$ — величина изгиба зон, n_{ss} — поверхностная концентрация электронов в ПС, E_d — энергия ионизации мелких доноров. Разрешив (13) относительно E_F, получим

$$E_F = \left\{\sqrt{E_0\,[E_0+4\,(E_{ss}-E_d)]} - E_0\right\}/2. \tag{14}$$

Здесь $E_0 \doteq 4\pi E_d\,(N_d a_Б^3)$, $a_Б$ — боровский радиус мелкой примеси.

При условии $E_0 \ll E_{ss}-E_d$ получим из (14) $E_F \doteq \sqrt{E_0\,(E_{ss}-E_d)} \backsim \sqrt{N_d}$. При высоких концентрациях легирующей примеси, таких, что выполняется условие $E_0 \gg E_{ss}-E_d$, уровень Ферми «привязан» к уровню примеси и не зависит от ее концентрации: $E_F \doteq E_{ss}-E_d$. Последнее неравенство при $N_d a_Б^3 \ll 1$ может выполняться, если $E_{ss}-E_d \lessgtr E_d$. Очевидно, для глубоких ПС (в смысле выполнения неравенства $E_{ss} \gg E_d$) всегда $\eta \sim \sqrt{N_d}$. Для мелких ПС зависимость $\eta \sim \sqrt{N_d}$ при малых концентрациях примесей и выходит на насыщение с увеличением N_d.

В заключение кратко резюмируем полученные результаты. В использованной здесь модели, которая учитывает различие блоховских функций в контактирующих полупроводниках, т. е. влияние микропотенциала границы раздела на огибающие, пограничные состояния появляются в абсолютной запрещенной щели гетероперехода. Это обстоятельство приводит к появлению ряда эффектов, два из которых рассмотрены в настоящей статье. Экспериментальное наблюдение этих эффектов позволило бы ответить на вопросы, существуют ли в реальных системах пограничные состояния описанного типа и насколько оправдано применение для их описания предложенной здесь простой однопараметрической модели.

Список литературы

[1] Kroemer H., Qi-Gao Zhu // J. Vac. Sci. Techn. 1982. V. 21. N 2. P. 551—552.
[2] Qi-Gao Zhu, Kroemer H. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 6. P. 3519—3527.
[3] Сурис Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2015.
[4] Волков В. А., Пинскер Т. Н. // ЖЭТФ. 1974. Т. 70. В. 6. С. 2268—2278.
[5] Чаплик А. В., Энтин М. В. // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. В. 7. С. 208—218.
[6] Осипов В. В., Серженко Ф. Л., Шадрин В. Д. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 5. С. 809—812.

Получена 22.09.1989
Принята к печати 24.10.1989