

„Сверхрешеточная“ модель плавной гетерограницы GaAs/AlAs (001)

© Г.Ф. Карavaев, С.Н. Гриняев

Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова при Томском государственном университете, 634050 Томск, Россия

E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 25 июля 2005 г.)

На основе метода псевдопотенциала исследовано влияние плавного интерфейсного потенциала на электронные состояния в структурах GaAs/AlAs (001). В предложенном подходе переходная область между GaAs и AlAs представлена слоем из половины периода сверхрешетки $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$, потенциал которого близок к истинному потенциалу вблизи гетерограницы. В этом случае междолинное смешивание происходит не на одной границе, как в модели с резко оборванным потенциалом, а на двух границах и в области переходного слоя. Показано, что учет плавного потенциала приводит к заметным изменениям при туннелировании электронов в структурах с тонкими слоями, причем особенно существенным в том случае, когда они происходят при участии коротковолновых X -состояний. Для одной границы GaAs/AlAs (001) переходный слой выступает в роли квантовой ямы, локализуя зарядовую плотность смешанного Γ - X -состояния вблизи границы. В структурах с толщиной слоев менее 2 nm отличия в энергиях резонансов, полученных в моделях с плавной и резкой гетерограницей, достигают величины ~ 0.1 eV. Проведен анализ огибающих волновых функций, связанных с $\Gamma_1^{(1)}$, $\Gamma_1^{(2)}$, $\Gamma_3^{(1)}$ долинами сверхрешетки и Γ_1 , X_1 , X_3 долинами GaAs и AlAs. Показано, что матрицы сшивания огибающих функций на границах $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$ и $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2/\text{AlAs}$ слабо зависят от энергии в окрестности дна зоны проводимости, а вычисленные с ними плотности вероятности согласуются с результатами многозонного расчета, что позволяет использовать их для развития модели плавного интерфейсного потенциала в рамках метода эффективной массы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-02-17508-а).

PACS: 73.21.Cd, 73.21.Fg, 73.20.At

1. Введение

Структурными элементами современной электроники все чаще выступают активные области, состоящие из небольшого числа монослоев полупроводниковых материалов. Объемные и интерфейсные свойства таких элементов неразрывно связаны между собой и поэтому должны описываться в рамках единого микроскопического подхода, учитывающего непрерывный кристаллический потенциал во всей структуре. Вместе с тем в большинстве исследований электронных свойств наноструктур используется модель с разрывным на границах потенциалом, в которой кристаллический потенциал меняется скачком от потенциала одного объемного материала к потенциалу другого, соседнего материала. Такая модель удовлетворительно описывает электронные состояния структур с достаточно толстыми слоями (> 10 nm), в которых влияние относительно узкой интерфейсной области (несколько монослоев) обычно оказывается несущественным. С уменьшением толщины слоев разделение на объемную и поверхностную области становится все более условным, а выбор гетерограниц — менее однозначным. Поэтому модель резкой границы для тонкослойных структур должна быть каким-то образом модифицирована.

Для учета плавного интерфейсного потенциала предпочтение отдается фундаментальным методам расчета электронной структуры кристаллов (методы псевдопотенциала, присоединенных плоских волн и т.д.), позволяющим находить все необходимые для решения задачи характеристики. Однако их применение к

непериодическим структурам сопряжено с вычислительными трудностями. Поэтому развитие получили более простые, полуэмпирические методы [1–4]. В [1] интерфейсный потенциал учтен путем параметризации элементов матрицы гамильтониана \mathbf{k} -метода на основе псевдопотенциального расчета сверхрешеток. В [2] дано аналитическое описание междолинного смешивания на гетерограницах в первом порядке теории возмущений по экранированному интерфейсному потенциалу. В [3,4] из зависимости электронных состояний от внешних полей в области антипересечения долин установлено, что интенсивность Γ - X -смешивания в сверхрешетках $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_m(001)$ уменьшается с ростом толщины слоев и шероховатости границ. В [5] предложен формализм для описания гетероструктур с плавными гетерограницами, опирающийся на моделирование интерфейсного потенциала с помощью функции одной переменной.

Найденные в [1–4] константы междолинного смешивания выражаются через матричные элементы интерфейсного потенциала в огибающих волновых функциях. В то же время при описании процессов рассеяния электронов междолинное смешивание характеризуется элементами матриц сшивания волновых функций компонент на гетерограницах. В таких матрицах плавный интерфейсный потенциал до сих пор учитывался лишь приближенно с помощью некоторых, достаточно произвольно выбранных функций [6,7], не имеющих непосредственной связи с реальным самосогласованным потенциалом.

В работе [8] нами был предложен метод, позволяющий с необходимой точностью учитывать плавный интер-

фейсный потенциал. В этом методе переходная область между компонентами структуры рассматривается как фрагмент сверхрешетки, потенциал и волновые функции которой почти непрерывно переходят в потенциалы и функции компонент. В таком случае вместо одной гетерограницы имеются две, но на каждой из них скачок кристаллического потенциала существенно меньше, чем в модели с одной гетерограницей, а поэтому за счет использования разрывного потенциала тоже оказывается меньше. Расчет вероятностей туннелирования электронов через тонкий барьер толщиной в одну постоянную решетки GaAs/AlAs(*a*)/GaAs (001) показал [8], что учет плавного потенциала вблизи гетерограниц особенно важен при описании коротковолновых электронных состояний в области междолинного смешивания.

В настоящей работе „сверхрешеточный“ подход и метод псевдопотенциала применены для изучения влияния плавного интерфейсного потенциала на прохождение электронов через одну гетерограницу и барьерные структуры GaAs/AlAs (001) с различной толщиной слоев. Проведен анализ возможности описания процессов рассеяния с использованием огибающих волновых функций.

2. Кристаллический потенциал вблизи гетерограницы GaAs/AlAs (001)

Для выяснения отличий реального потенциала в структуре с одной гетерограницей GaAs/AlAs (001) от модели разрывного потенциала был проведен анализ усредненного в плоскости гетерограницы кристаллического потенциала в направлении тетрагональной оси структуры. Кристаллический потенциал строился с использованием псевдопотенциалов [9], определенных на основе экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов зонной структуры бинарных кристаллов и сверхрешеток. При этом учитывалась зависимость псевдопотенциала мышьяка [9] от ближайшего окружения из атомов галлия и алюминия. Профиль интерфейсного потенциала получался из расчета потенциалов достаточно толстых сверхрешеток $(\text{AlAs})_m(\text{GaAs})_m$. Было найдено, что при числе монослоев $m \geq 8$ потенциал вблизи идеальной геометрической границы из среднего слоя атомов As_{av} , окруженных двумя атомами Ga и двумя атомами Al, практически не меняется с ростом m . Поэтому потенциал сверхрешетки $(\text{AlAs})_8(\text{GaAs})_8$ в этой области можно рассматривать как истинный интерфейсный потенциал V_r . Переходная область, в которой кристаллический потенциал GaAs непрерывно переходит в кристаллический потенциал AlAs, ограничена в основном пределами одного монослоя с каждой стороны от границы, что позволяет моделировать интерфейсный потенциал с помощью потенциалов более тонких сверхрешеток. На рис. 1, *a* показан потенциал структуры GaAs/AlAs, полученный как составной из потенциалов GaAs, сверхрешетки $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$ (далее *SL*) и AlAs. В этом случае переходная область составляет половину

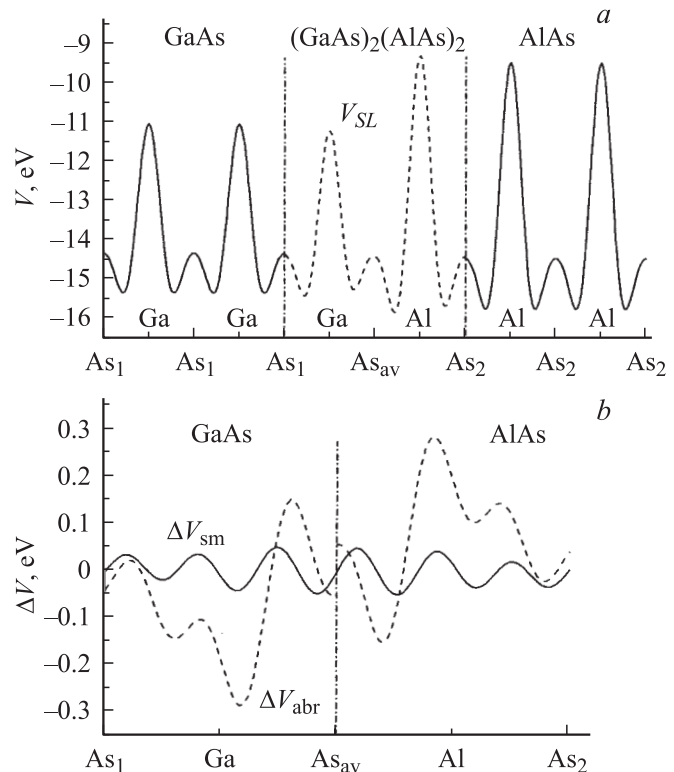


Рис. 1. Усредненный в плоскости гетерограницы (x, y) плавный (smooth) кристаллический потенциал V_{sm} структуры GaAs/AlAs (001) с переходным слоем из фрагмента сверхрешетки $(\text{AlAs})_2(\text{GaAs})_2$ (штриховая линия) (*a*) и его разность с реальным потенциалом $\Delta V_{\text{sm}} = V_r - V_{\text{sm}}$ (*b*). На части *b* штриховой линией показано отличие резко оборванного (abrupt) потенциала V_{abr} от реального потенциала $\Delta V_{\text{abr}} = V_r - V_{\text{abr}}$. Вертикальными линиями обозначены положения „плавных“ гетерограниц на атомах As_1 и As_2 (*a*) и резкой границы на атомах As_{av} (*b*).

периода *SL* толщиной в одну постоянную решетки ($a = 5.65215 \text{ \AA}$). Ее две границы расположены на слоях из атомов As_1 и As_2 , являющихся общими с кристаллами GaAs и AlAs соответственно. Использование такого переходного слоя позволяет описать реальный потенциал вблизи гетерограницы GaAs/AlAs (001) с точностью не хуже 0.05 eV (рис. 1, *b*). Отметим, что потенциалы двух кристаллов переходят друг в друга в области *SL* непрерывно, но не монотонно. В стандартной модели с одной резкой границей расхождения с реальным потенциалом почти на порядок больше; максимальные отличия, наблюдаемые вблизи атомов Ga и Al, достигают величины $\sim 0.3 \text{ eV}$ (рис. 1, *b*). Это значение много меньше амплитуды кристаллического потенциала, что в целом оправдывает применение модели с резко оборванным на границе потенциалом. С другой стороны, оно сравнимо с типичными энергиями размерного квантования в ямах, поэтому учет плавного потенциала должен приводить к существенным изменениям электронных состояний, волновые функции которых локализованы в интерфейсной области.

3. Метод расчета электронных состояний

Частные решения уравнения Шредингера $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, \nu(\mu)}^{\alpha, n}(\mathbf{r})$, отвечающие волнам, движущимся (затухающим) направо (ν) и движущимся (затухающим) налево (μ) в n -м слое, определялись из расчета комплексной зонной структуры (КЗС) в базе из симметризованных комбинаций плоских волн (СКПВ) аналогично [8]. Здесь \mathbf{k}_{\parallel} — проекция волнового вектора на границу, индекс $\alpha \equiv (s, f)$ означает, что волновая функция преобразуется по s -й строке f -го малого неприводимого представления группы симметрии гетероструктуры. Суперпозиции из частных решений образуют общие решения уравнения Шредингера $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha, n}(\mathbf{r})$

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha, n}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha, n} \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, \nu}^{\alpha, n}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha, n} \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mu}^{\alpha, n}(\mathbf{r}),$$

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, \nu(\mu)}^{\alpha, n}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp, \nu(\mu)}^n}^{\alpha, n}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_{\parallel} \boldsymbol{\rho} + k_{\perp, \nu(\mu)}^n z)), \quad (1)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{e}k_{\perp, \nu(\mu)}^n$, \mathbf{e} — орт вдоль тетрагональной оси z , $\boldsymbol{\rho}$ — проекция радиус-вектора \mathbf{r} на плоскость границы (x, y) , $U_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp, \nu(\mu)}^n}^{\alpha, n}(\mathbf{r})$ — периодические части волновых функций. Коэффициенты разложения $A_{\nu}^{\alpha, n}$, $B_{\mu}^{\alpha, n}$ определялись из начальных условий и условий сшивания общих решений на границах слоев по методу матрицы рассеяния [8]. Электронные состояния во всех слоях находились с применением одной и той же расширенной элементарной ячейки SL при нормальном падении электронов на границу ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$). В настоящей работе мы уточнили методику расчета волновых функций [8]. Необходимость этого связана с тем, что используемые эмпирические псевдопотенциалы [9] были определены в базе из сравнительно небольшого числа плоских волн (~ 30 – 40 волн на один атом), который, вообще говоря, не обеспечивает необходимой точности описания волновых функций. В задаче о рассеянии электронов это проявляется в нарушении непрерывности плотности потока вероятности и нормировочного условия $P + R = 1$ (P — коэффициент прохождения, R — коэффициент отражения), расхождения вероятностей туннелирования электронов „вперед“ и „назад“ и т.д. Поэтому для более точного описания волновой функции в ее разложении по СКПВ, построенным вокруг опорной точки Γ зоны Бриллюэна SL , было дополнительно учтено еще около 90 плоских волн (в расчете на один атом) по теории возмущений Левдина, в результате число СКПВ было увеличено с 98 до 328. В то же время при расчете КЗС использовали прежние условия обрыва базиса из плоских волн и формфакторов псевдопотенциалов, согласно [9], что влияние более коротких волн эффективно учтено за счет перенормировки матрицы гамильтониана при подгонке псевдопотенциалов. Поэтому при расчете КЗС базис не расширялся.

В таком приближении число симметризованных поверхностных плоских волн q увеличивается с 8 до 20, в то время как число движущихся вправо (влево) волн λ остается равным прежнему значению 8. Поэтому

при вычислении матриц сшивания $J_{ij}^{\alpha}(n)$ ($i, j = 1, 2$) с помощью определенных в [8] матриц P и D

$$J_{ij}^{\alpha}(n) = [(P_{3-i}^{an})^{-1} P_i^{an} - (D_{3-i}^{an})^{-1} D_i^{an}]^{-1} \times [(P_{3-i}^{an})^{-1} P_j^{\alpha(n+1)} - (D_{3-i}^{an})^{-1} D_j^{\alpha(n+1)}] \quad (2)$$

возникает проблема обращения прямоугольных матриц 20×8 с элементами $D_{q\lambda}$ и $P_{q\lambda}$, выражающимися через коэффициенты разложения блоховских функций по симметризованным комбинациям плоских волн. Для их нахождения мы воспользовались методом Гревилля [10], согласно которому наилучшим приближенным решением матричного уравнения $QY = I$ (I — единичная матрица, Y — искомая матрица) является псевдообратная матрица Q^+ , минимизирующая норму матрицы $\|I - QQ^+\|$ (в нашем случае матрица Q равна матрицам P или D).

4. Комплексная зонная структура

Основные особенности КЗС GaAs, AlAs и SL рассмотрены в [8]. Здесь обратим внимание лишь на наличие вблизи дна зоны проводимости SL структуры, аналогичной двугорбой (ДГ) структуре GaAs. Соответствующий экстремум наблюдается при энергии E_{ex} ,

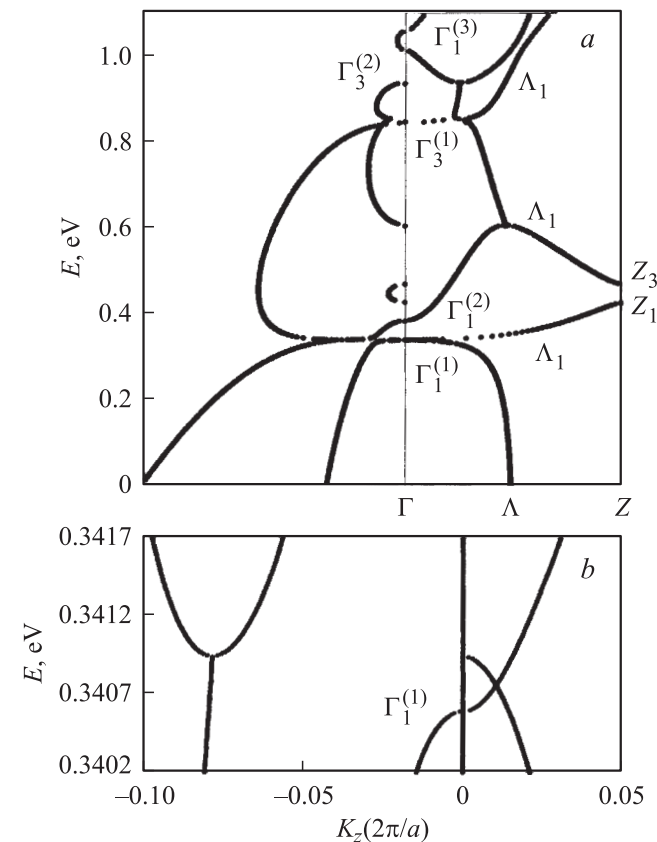


Рис. 2. Комплексная зонная структура сверхрешетки $(AlAs)_2(GaAs)_2$ вдоль линии $\Lambda(001)$ тетрагональной зоны Бриллюэна (a) и фрагмент КЗС вблизи дна зоны проводимости $\Gamma_1^{(1)}$ (b). Влево от точки Γ отложены мнимые части волновых векторов, вправо — вещественные.

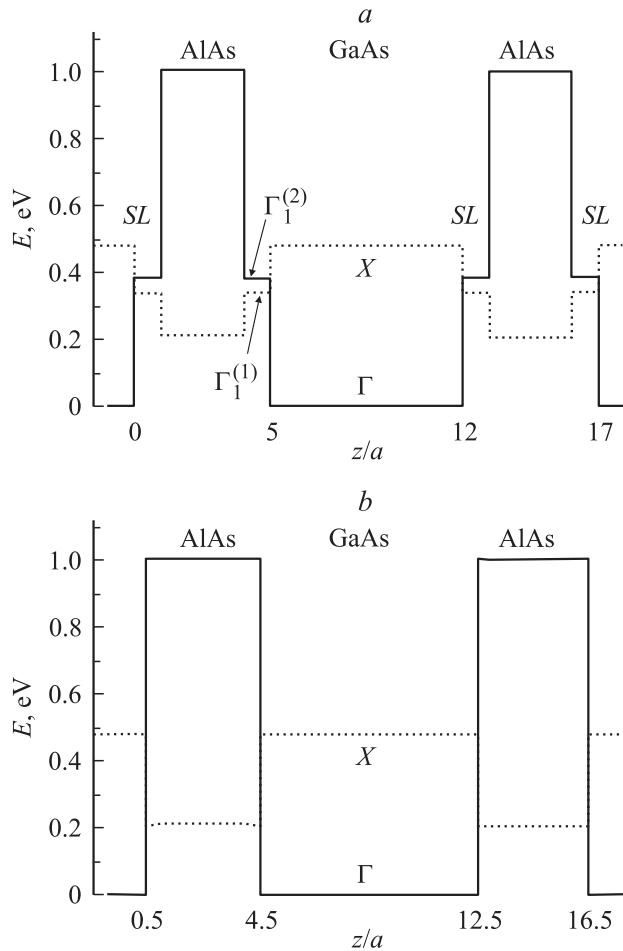


Рис. 3. Профиль эффективного потенциала в двухбарьерной структуре GaAs/AlAs(4a)/GaAs(8a)/AlAs(4a)/GaAs: *a* — в модели с переходным слоем из фрагмента сверхрешетки, *b* — в стандартной модели с резко оборванным на одной границе потенциалом.

которая только на 0.0003 eV выше энергии нижнего уровня $\Gamma_1^{(1)}(X_1)$ ($E = 0.3406$ eV) в зоне проводимости SL (рис. 2, *a*). Энергии отсчитаны относительно дна зоны проводимости GaAs. В скобках указано происхождение сверхрешеточного состояния из сфалеритных состояний виртуального кристалла, отмечен только главный вклад. На рис. 2, *b* показан фрагмент КЗС вблизи экстремума, возникающего за счет гибридизации состояний долин Γ и X_z бинарных кристаллов. В его окрестности поведение ветвей КЗС, исходящих из долин $\Gamma_1^{(1)}$ и $\Gamma_1^{(2)}(\Gamma_1)$ ($E = 0.3864$ eV) с одинаковой симметрией, имеет характерный вид „антипересечения“. Петле, связывающей состояния X_1 и X_3 в зоне проводимости КЗС бинарных кристаллов, в SL соответствует петля, связывающая состояния $\Gamma_1^{(2)}$ и $\Gamma_1^{(1)}(X_3)$ ($E = 0.8452$ eV). При этом в отличие от ДГ структуры GaAs экстремум в SL находится в области чисто мнимых значений проекции волнового вектора k_z , поэтому состояния затухающих вправо (влево) волн при энергии E_{ex} оказываются вырожденными.

Использование базиса из плоских волн, построенных вокруг опорной точки Γ , обеспечивает хорошую точность описания зонных состояний SL во всей зоне Бриллюэна. Так, энергии нижних зон проводимости в боковой точке Z в этом базисе равны $E(Z_1) = 0.428$ eV, $E(Z_3) = 0.47$ eV, а в точном расчете (в базисе из волн, центрированных около точки Z) соответственно $E(Z_1) = 0.447$ eV, $E(Z_3) = 0.484$ eV. В других точках линии Λ результаты двух расчетов еще ближе.

На рис. 3 приведена схема разрывов зон для двухбарьерной структуры GaAs/AlAs(4a)/GaAs(8a)/AlAs(4a)/GaAs в моделях с плавной и резкой границами. Сфалеритные состояния X_3 и сверхрешеточные состояния $\Gamma_3^{(1)}$ и Λ_1 для простоты опущены. Как отмечалось в [8], за счет смешивания состояний Γ и X_z не только на гетерограницах, как в модели с разрывным на одной границе потенциалом, но и в переходной области SL соединение линий, отвечающих состояниям бинарных соединений и SL, носит, вообще говоря, условный характер. Более того, при использовании сверхрешетки (AlAs)₂(GaAs)₂ в переходной области помимо Γ – X смешивания наблюдается также смешивание, Γ – Δ и X – Δ , поскольку в волновые функции SL с волновым вектором $\mathbf{k} = 0$ дополнительный вклад вносят сфалеритные состояния с середины линии Δ зоны Бриллюэна ГЦК решетки. На рис. 3 экстремумы зон соединены с учетом того, что состояния зоны проводимости сверхрешетки $\Gamma_1^{(1)}$ и $\Gamma_1^{(2)}$ построены преимущественно из сфалеритных состояний X_1 и Γ_1 соответственно.

5. Прохождение электронов через одну гетерограницу GaAs/AlAs (001)

Результаты расчета коэффициента прохождения $P(E)$ электронов из Γ -долины GaAs через одну гетерограницу GaAs/AlAs (001) приведены на рис. 4. При энергиях в интервале от дна Γ -долины GaAs до дна X -долины в

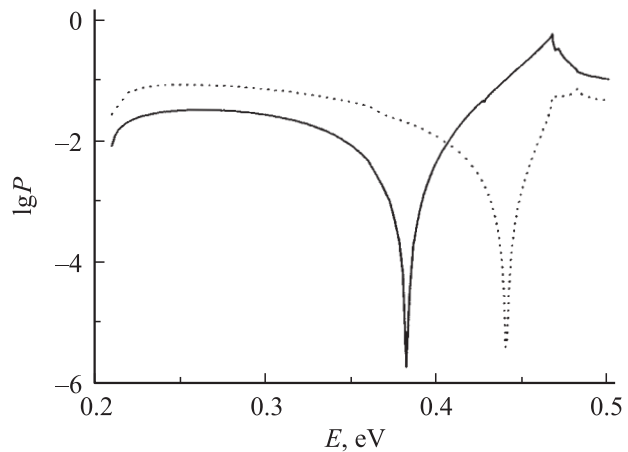


Рис. 4. Коэффициент прохождения электронов $P(E)$ из Γ -долины GaAs в X -долину AlAs через одну гетерограницу GaAs/AlAs (001) с плавным (сплошная линия) и резким (штриховая линия) потенциалом.

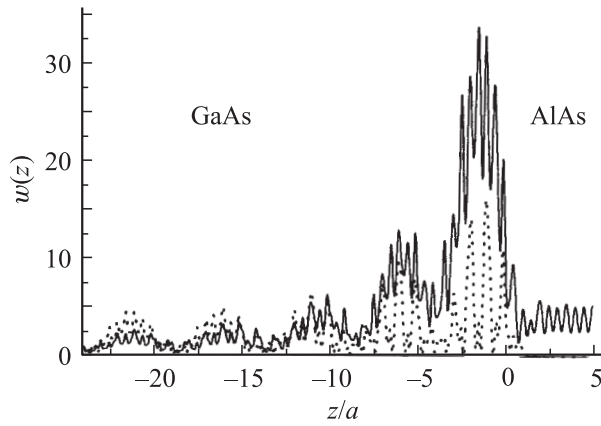


Рис. 5. Усредненная в плоскости границы плотность вероятности $w(z)$ электронного состояния, отвечающего пику коэффициента прохождения через одну границу ($E = E_p$). Сплошная линия — расчет в модели с плавной границей, штриховая линия — с резкой границей. Положению резкой границы отвечает $z = 0$.

AlAs прохождение электронов запрещено, поскольку в слое AlAs распространяющиеся состояния отсутствуют. Однако полное отражение Γ -волны наблюдается также и при некоторой характерной энергии E_d , большей $E_X(\text{AlAs})$, несмотря на наличие Γ - X -смешивания на гетерогранице.

В расчете с одной резкой границей провал $P(E)$ возникает при энергии $E_d = 0.44$ eV, которая несколько меньше энергии экстремума ДГ структуры GaAs. Состоянию с энергией E_d отвечает вещественная волновая функция, описывающая стоячую волну с равными модулями коэффициентов при двух X -волнах, одинаковым образом затухающих в глубь GaAs. Анализ электронных состояний в области провала $P(E)$ в рамках трехдолинной модели Γ_1 - X_1 - X_3 показал [11], что возникновение деструктивной интерференции налетающей Γ_1 -и отраженной Γ_1 -волн в области GaAs обеспечивается наличием ДГ структуры в GaAs и определенным сочетанием параметров зонного спектра обоих материалов, прежде всего величиной параметров смешивания Γ - X и X - X на границе. Результаты настоящей работы близки к нашему прежнему псевдопотенциальному расчету [8], выполненному с одной резкой границей, но с учетом только двух опорных точек Γ и X структуры сфалерита. Это говорит о слабом влиянии состояний с середины линии Δ на рассеяние электронов с энергиями $E < 1$ eV.

При учете плавного интерфейсного потенциала в коэффициенте прохождения происходят существенные изменения. Наиболее чувствительным к новому профилю эффективного потенциала и параметрам матрицы шивания оказался провал коэффициента прохождения $P(E_d) = 0$, энергетическое положение которого ($E_d = 0.38$ eV) сдвинулось под дно второй зоны проводимости сверхрешетки $\Gamma_1^{(2)}$. Уменьшение вероятности туннелирования низкоэнергетических электронов можно

объяснить тем, что переходный слой из SL выступает для них в роли дополнительного барьера. С ростом энергии электронов наблюдается заметный рост $P(E)$ в окрестности ДГ структуры GaAs, его величина в пике ($E_p = 0.4672$ eV) достигает значения 0.8. На рис. 5 приведена усредненная в плоскости границ плотность вероятности $w(z) = \int |\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha,n}(\rho, z)|^2 d\rho$ (интеграл берется по поверхностной элементарной ячейке) состояния с энергией E_p около гетерограницы GaAs/AlAs (001). Волновая функция нормирована так, что коэффициент при падающей слева волне равен единице. Максимум плотности находится вблизи границы в слое GaAs. Частные осцилляции $w(z)$ отвечают изменению периодической части волновой функции, плавные осцилляции — изменению огибающей функции с длиной волны $\lambda \approx 10a$. При учете плавного потенциала плотность становится более локализованной вблизи гетерограницы, ее максимум возрастает вдвое. Это является результатом смешивания Γ , X и Δ сфалеритных состояний на двух гетерограницах и внутри переходного слоя из SL , выступающего в роли эффективной квантовой ямы для специфического состояния, происходящего в области GaAs из Γ -долины, а в области AlAs — из X -долины. Данное состояние расположено внутри щели сверхрешетки Z_1 - Z_3 , поэтому усиление локализации функции возникает за счет гибридизации состояний компонент с затухающими состояниями этой щели. Анализ матрицы рассеяния в комплексной области энергии показал однако, что у нее отсутствует полюсная особенность вблизи E_p . Поэтому пику $P(E)$, как и ранее в [8], не отвечает сформировавшееся резонансное состояние, хотя диаграмма Арганда для элемента матрицы рассеяния $(S_{11})_{X\Gamma}$ в расчете с плавной границей и напоминает значительную часть круга. Вместе с тем подобное резонансное состояние возникает при некотором изменении параметров расчета, в частности при использовании укороченного базиса из плоских волн. Поэтому вопрос о существовании интерфейсного состояния на границе GaAs/AlAs (001) требует дальнейших исследований с применением более точных *ab initio* псевдопотенциалов.

6. Туннелирование электронов в барьерных структурах

Было изучено влияние плавного потенциала на прохождение электронов через одиночные барьеры GaAs/AlAs(na)/GaAs и двухбарьерные структуры GaAs/AlAs(na)/GaAs($2na$)/AlAs(na)/GaAs. Барьер толщиной в одну постоянную решетки ($n = 1$) моделировался подобно [8] периодом SL , сшивание волновых функций проводилось на слоях из атомов мышьяка, окруженных атомами галлия. В структурах с более толстыми барьерами интерфейсный потенциал учитывался путем введения переходной области из половины периода SL , как и в случае с одной гетерограницей GaAs/AlAs (001). При этом учитывалась зависимость

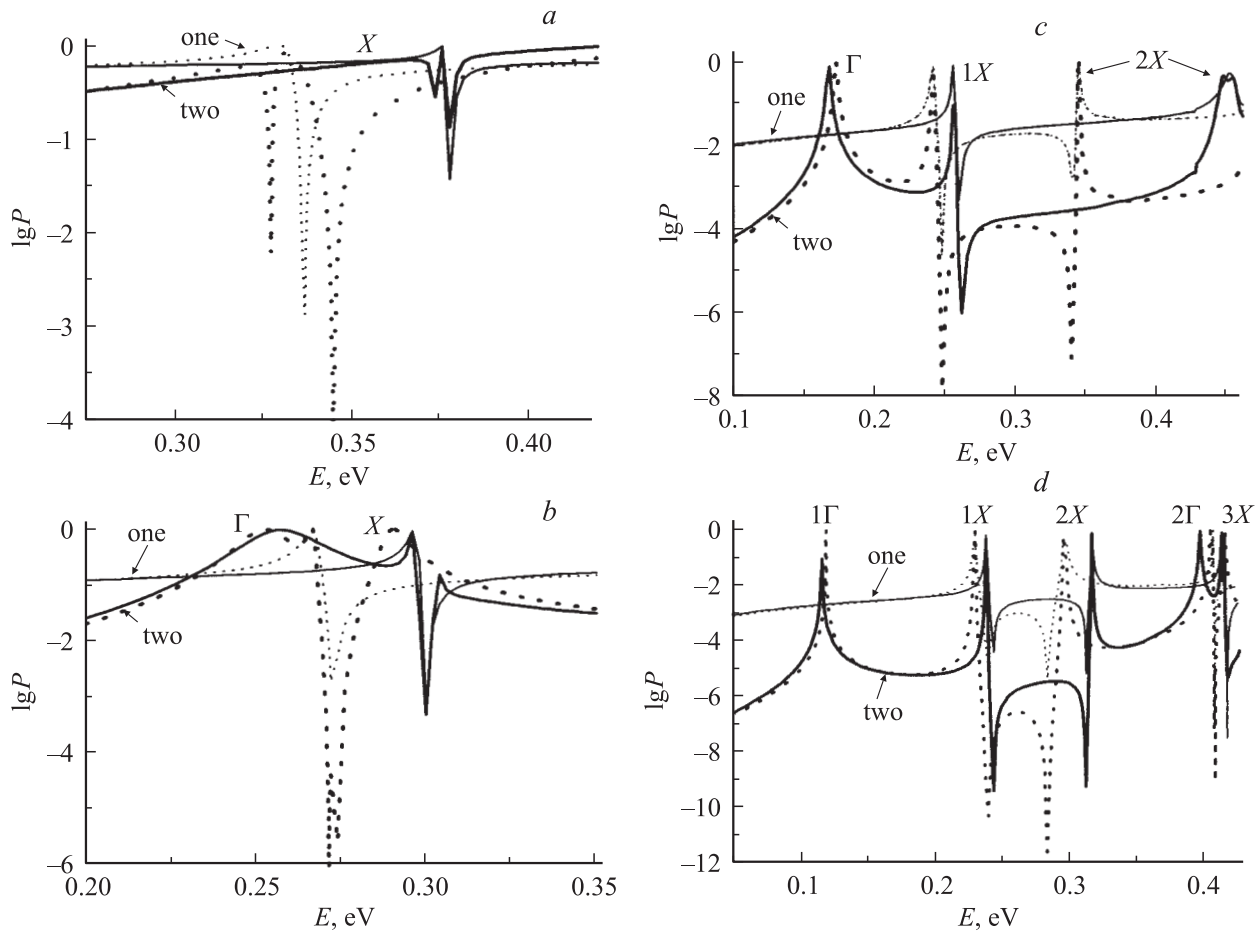


Рис. 6. Коэффициенты прохождения электронов $P(E)$ через одиночные (one) барьеры $\text{AlAs}(na)$ (тонкие линии) и двухбарьерные (two) структуры $\text{GaAs}/\text{AlAs}(na)/\text{GaAs}(2na)/\text{AlAs}(na)/\text{GaAs}$ (жирные линии): $n = 1$ (a), 2 (b), 3 (c) и 4 (d). Сплошные линии — расчет с плавным потенциалом, штриховые — с резко оборванным потенциалом.

чередования слоев из атомов Ga и Al в переходных областях от места их положения в структуре. Результаты расчета $P(E)$ в структурах с разной толщиной слоев приведены на рис. 6, их особенности связаны с резонансными состояниями Γ и X . В тонком слое AlAs толщиной в одну постоянную решетки в области энергий, меньших ДГ структуры GaAs , в расчете с плавным (резким) потенциалом возникает один X -резонанс при энергии 0.376 (0.329) eV (рис. 6, a). Выталкивание резонанса при учете плавного потенциала объясняется зауужением X -ям вблизи ее дна (рис. 3). Положение резонанса зависит также от эффективных масс состояний в переходной области. В двухбарьерной структуре перекрытие волновых функций из соседних X -ям приводит к расщеплению резонансного уровня. В модели с плавным потенциалом за счет усиления локализации функции резонансного состояния в области ям [8] величина расщепления уменьшается. С ростом толщины слоев появляются новые Γ и X -резонансы (рис. 6, b-d). При этом для нижних Γ -резонансов энергии в двух моделях заметно ближе друг к другу, чем для нижних X -резонансов. Это связано с тем, что на коротковолновое X -состояние, локализованное в более

узкой X -яме, потенциал интерфейсной области оказывает относительно большее влияние, чем на менее локализованное Γ -состояние в более широкой Γ -яме. Изменение потенциала сильнее проявляется в возбужденных состояниях, электронная плотность которых локализована вблизи гетерограницы. Вследствие этого в X -яме шириной $3a$ второй резонанс ($2X$) при учете плавного потенциала сдвигается на 0.1 eV в сторону ДГ структуры GaAs . С ростом толщины слоев результаты двух моделей сближаются для всех резонансов. Так, в структуре с барьерами AlAs толщиной $4a$ и ямой GaAs толщиной $8a$ энергии резонансов в модели с плавной (резкой) границей равны (рис. 6, d): 1Γ — 0.116 (0.119) eV, $1X$ — 0.238 (0.230) eV, $2X$ — 0.317 (0.296) eV, 2Γ — 0.399 (0.416) eV и $3X$ — 0.414; 0.416 (0.405; 0.407) eV. Пик $3X$ двойной за счет перекрытия „хвостов“ функций из соседних X -ям. Более существенное отличие (~ 0.02 eV) для антисимметричных состояний $2X$ и 2Γ связано с большой амплитудой их волновых функций в области интерфейса. Взаимное расположение резонансов 2Γ и $3X$ в двух расчетах обратное, поскольку при учете плавного потенциала они сдвигаются в разные стороны.

7. Анализ огибающих волновых функций

Рассмотрение матриц шивания волновых функций $J_{ij}^{\alpha,n}$ показало, что в окрестности дна зоны проводимости в них выделяется блок 3×3 сильно связанных друг с другом состояний, происходящих из экстремумов $\Gamma_1^{(1)}$, $\Gamma_1^{(2)}$, $\Gamma_3^{(1)}$, Z_1 , Z_3 сверхрешетки и Γ_1 , X_1 , X_3 долин GaAs и AlAs. Исключение „взаимодействия“ этих состояний со всеми другими состояниями практически не меняет коэффициента прохождения электронов, что указывает на возможность построения модели с плавной границей, являющейся аналогом трехдолинной модели $\Gamma_1-X_1-X_3$ с резкой границей [12]. Основными параметрами этих моделей выступают матрицы шивания огибающих волновых функций на гетерограницах. Для их нахождения сначала из расчета КЗС методом псевдопотенциала с использованием многозонного **кп**-метода в базисе из симметризованных периодических функций в точке Γ зоны Бриллюэна сверхрешетки $U_{\lambda}^{\alpha,n}$ были определены частные периодические решения уравнения Шредингера

$$U_{k_{\perp\nu}^n}^{\alpha,n} = \sum_{\lambda} C_{\lambda,k_{\perp\nu}^n}^{\alpha,n} U_{\lambda}^{\alpha,n}. \quad (3)$$

В таком расчете применялось преобразование **кп**-гамильтониана, аналогичное [13], а в матрице оператора импульса учитывалось 98 нижних состояний опорной точки в расширенном по методу Левдина базисе из 328 СКПВ, чтобы обеспечить наилучшее согласие с результатами псевдопотенциального расчета в базисе из плоских волн. После этого общее решение представлялось в виде разложения

$$\Psi_{k_{\parallel}}^{\alpha,n}(\rho, z) = \sum_{\lambda} F_{\lambda}^{\alpha,n}(z) U_{\lambda}^{\alpha,n}(\rho, z), \quad (4)$$

коэффициенты которого $F_{\lambda}^{\alpha,n}$ являются „точными“ огибающими волновыми функциями. Из сравнения (4) с формулой (1) получаем

$$F_{\lambda}^{\alpha,n}(z) = \sum_{\nu} \exp(ik_{\perp\nu}^n z) A_{\nu}^{\alpha,n} C_{\lambda,k_{\perp\nu}^n}^{\alpha,n} + \sum_{\mu} \exp(ik_{\perp\mu}^n z) B_{\mu}^{\alpha,n} C_{\lambda,k_{\perp\mu}^n}^{\alpha,n}. \quad (5)$$

В выражении (5) все величины известны из расчета КЗС и условий для всех открытых слева и справа каналов от рассеяния, что позволяет определить матрицу шивания T огибающих волновых функций

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}^{\alpha,n+1} \\ a \frac{\partial \mathbf{F}^{\alpha,n+1}}{\partial z} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \mathbf{F}^{\alpha,n} \\ a \frac{\partial \mathbf{F}^{\alpha,n}}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где $\mathbf{F}^{\alpha,n}$ — вектор-столбец, содержащий набор огибающих волновых функций $F_{\lambda}^{\alpha,n}$. При решении системы уравнений (6) были учтены каналы рассеяния, связанные с тремя

($\lambda = 1, 2, 3$) экстремумами $\Gamma_1^{(1)}$, $\Gamma_3^{(1)}$, $\Gamma_1^{(2)}$ сверхрешетки и тремя экстремумами X_1 , Γ_1 , X_3 кристаллов GaAs и AlAs. Соответствующие им состояния были выбраны из непрерывно переходящих друг в друга ветвей КЗС в схеме расширенных зон, что обеспечило слабую зависимость элементов матрицы шивания на гетерограницах GaAs/AlAs, GaAs/SL, SL/AlAs от энергии вплоть до Z_1 экстремума сверхрешетки ($E < 0.4$ eV). При энергии электрона $E = 0.34$ eV матрицы шивания имеют вид

a) на резкой границе GaAs/AlAs ($\mathbf{F}^{\text{AlAs}} = T^{\text{GaAs/AlAs}} \mathbf{F}^{\text{GaAs}}$)

$$T^{\text{GaAs/AlAs}} = \begin{pmatrix} 1.03 & -0.05 & 0 & 0 & 0 & -0.02 \\ 0 & 1.00 & 0 & 0 & 0 & 0.02 \\ 0 & 0 & 0.99 & 0 & 0.19 & 0 \\ 0 & 0 & -0.08 & 1.04 & 0.24 & 0 \\ 0 & 0 & 0.29 & -0.03 & 1.27 & 0 \\ -0.31 & 1.91 & 0 & 0 & 0 & 1.23 \end{pmatrix},$$

b) на границе GaAs/SL ($\mathbf{F}^{\text{SL}} = T^{\text{GaAs/SL}} \mathbf{F}^{\text{GaAs}}$)

$$T^{\text{GaAs/SL}} = \begin{pmatrix} 1.01 & -0.09 & 0 & 0 & 0 & -0.08 \\ -0.17 & 1.08 & 0 & 0 & 0 & 0.09 \\ 0 & 0 & 0.94 & -0.03 & 0.20 & 0 \\ 0 & 0 & 0.22 & 0.86 & 0.90 & 0 \\ 0 & 0 & 0.15 & -0.22 & 1.24 & 0 \\ 0.08 & 1.04 & 0 & 0 & 0 & 1.23 \end{pmatrix},$$

c) на границе SL/AlAs ($\mathbf{F}^{\text{AlAs}} = T^{\text{SL/AlAs}} \mathbf{F}^{\text{SL}}$)

$$T^{\text{SL/AlAs}} = \begin{pmatrix} 0.97 & -0.40 & 0 & 0 & 0 & -0.07 \\ 0.14 & 0.84 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.06 & 0 & 0.37 & 0 \\ 0 & 0 & 0.15 & 0.91 & 0.37 & 0 \\ 0 & 0 & -0.17 & 0.32 & 1.04 & 0 \\ 0.22 & 1.87 & 0 & 0 & 0 & 1.19 \end{pmatrix}.$$

Полученные значения элементов матрицы для резкой границы GaAs/AlAs в целом согласуются с данными расчетов [14,15]. Все матрицы имеют блочный вид. Можно отметить, что по сравнению с резкой границей на границах сверхрешетки с бинарными кристаллами смешивание ГХ усиливается вследствие большего подобия состояний контактирующих материалов. При этом более существенные изменения происходят на границе SL/AlAs. Кроме того, из-за отличия в положении границ элементы матриц $T^{\text{GaAs/SL}}$ и $T^{\text{SL/AlAs}}$, содержащие нечетное число X -подобных состояний, отличаются на знак от соответствующих элементов матрицы $T^{\text{GaAs/AlAs}}$. Переход от модели плавной границы к модели резкой границы можно осуществить, устремляя толщину переходного

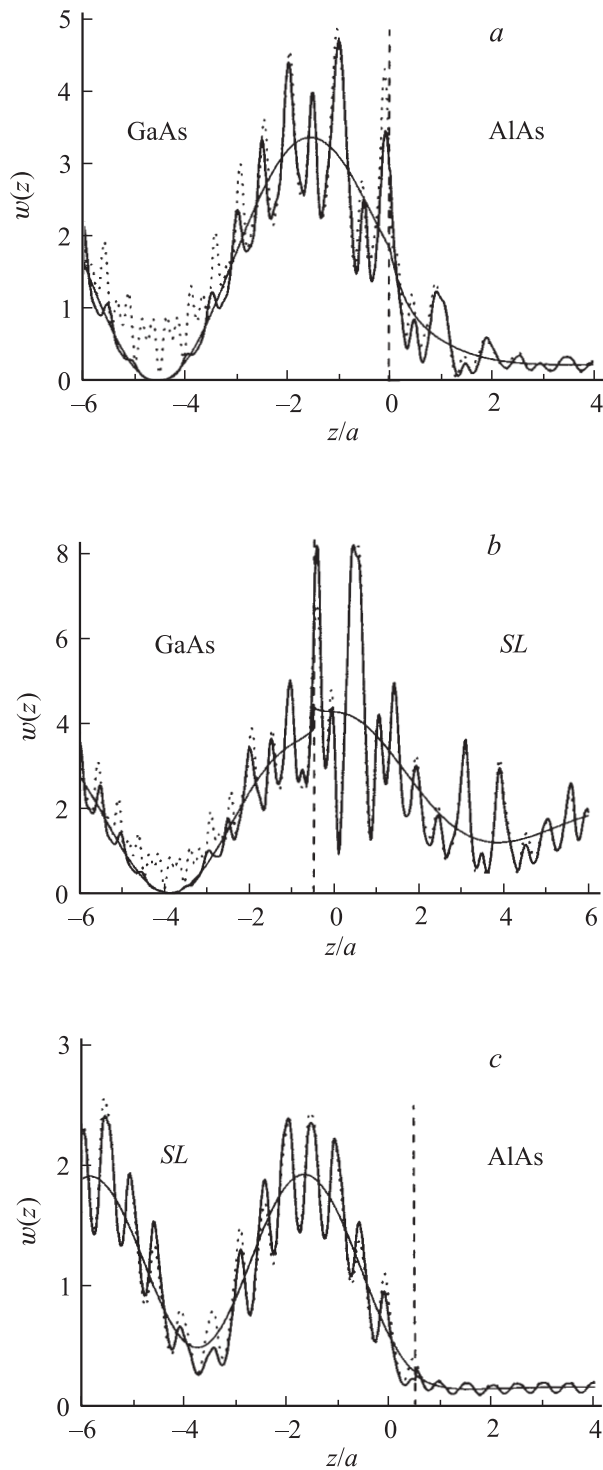


Рис. 7. Усредненные в плоскости границ плотности вероятности $w(z)$ состояний при энергии 0.355 eV для гетероструктур: GaAs/AlAs (a), GaAs/SL (b), SL/AlAs (c). Жирная сплошная линия — расчет с учетом трех нижних долин $\Gamma_1^{(1)}$, $\Gamma_1^{(2)}$, $\Gamma_3^{(1)}$ зоны проводимости сверхрешетки и трех долин Γ_1 , X_1 , X_3 бинарных кристаллов, штриховая линия — многозонный расчет с учетом всех состояний, тонкая сплошная линия — усредненная плотность от трех огибающих функций, равная $\sum_{\lambda} |F_{\lambda}^{\alpha,n}(z)|^2$. Вертикальными штриховыми линиями показано положение границ.

слоя из SL к нулю. Такому переходу отвечает соотношение между матрицами $T^{\text{GaAs/AlAs}} = \tilde{T}^{\text{GaAs/SL}} \tilde{T}^{\text{SL/AlAs}}$, где $\tilde{T}^{\text{GaAs/SL}}$ и $\tilde{T}^{\text{SL/GaAs}}$ — матрицы, вычисленные, например, на одной и той же „плавной“ гетерогранице ($z = \pm a$) и „транслированные“ затем на положение резкой гетерограницы путем изменения знаков у X-подобных состояний. В ограниченном базисе это соотношение может выполняться лишь приближенно. В нашем случае оно выполняется с удовлетворительной точностью ~ 0.02 , характеризующей приемлемую полноту использованного базиса из трех огибающих функций.

На рис. 7 приведены усредненные в плоскости границ плотности вероятности $w(z)$ вблизи гетерограниц GaAs/AlAs, GaAs/SL, SL/AlAs при характерной энергии $E = 0.355$ eV. В структуре GaAs/AlAs и GaAs/SL электрон при этой энергии налетает из Γ_1 -долины GaAs, в структуре SL/AlAs — из $\Gamma_1^{(1)}$ -долины SL. Плотности, построенные с учетом в формуле (4) всех состояний, непрерывны на границе. Уменьшение числа учтенных состояний приводит к разрыву $w(z)$ на границе. Наибольший разрыв $w(z)$ наблюдается на границе GaAs/SL, вблизи которой плотность максимальна. Влияние высших состояний проявляется также в увеличении плотности в области ее минимумов. Из сравнения следует, что учет трех долин позволяет удовлетворительно описать распределение плотности вероятности в гетероструктурах. Это показывает, что выбранные огибающие волновые функции могут быть использованы для построения трехдолинной модели электронных состояний с плавным интерфейсным потенциалом на границах GaAs/AlAs(001).

8. Заключение

Полученные результаты в целом можно рассматривать как некоторое обоснование использования модели резкой гетерограницы в структурах GaAs/AlAs (001) с толстыми слоями (> 2 nm). Учет плавного потенциала вблизи гетерограниц необходим для достижения более точного описания квантовых процессов в короткопериодических структурах, происходящих, прежде всего, при участии состояний, электронная плотность которых локализована в интерфейсной области, а длины волн де-Бройля сопоставимы с размерами этой области (~ 1 nm). В предложенной модели плавный интерфейсный потенциал учтен как потенциал переходной области из фрагмента тонкой сверхрешетки (AlAs)₂(GaAs)₂ (001). При необходимости период сверхрешетки может быть изменен для получения более точного или более простого описания. Подобный же подход может быть применен для моделирования электронных состояний в структурах с другой ориентацией границ, другим химическим составом или кристаллической решеткой.

Список литературы

- [1] L.-W. Wang, A. Zunger. Phys. Rev. B **54**, 16, 11 417 (1996).
- [2] B.A. Foreman. Phys. Rev. Lett. **81**, 2, 425 (1998).
- [3] L.-W. Wang, A. Franceschetti, A. Zunger. Phys. Rev. Lett. **78**, 14, 2819 (1997).
- [4] L.-W. Wang, A. Zunger. Phys. Rev. B **56**, 19, 12 395 (1997).
- [5] Э.Е. Тахтамиров, В.А. Волков. ЖЭТФ **117**, 6, 1221 (2000).
- [6] D.F. Nelson, R.C. Miller, C.W. Tu, S.K. Sputz. Phys. Rev. B **36**, 15, 8063 (1987).
- [7] B.A. Foreman. Phys. Rev. Lett. **80**, 17, 3823 (1998).
- [8] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев. ФТП **42**, 4, 752 (2000).
- [9] K.A. Mader, A. Zunger. Phys. Rev. B **50**, 23, 17 393 (1994).
- [10] Ф.Р. Гантмахер. Теория матриц. Наука, М. (1966). 576 с.
- [11] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП **37**, 4, 435 (2003).
- [12] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП **28**, 8, 1393 (1994).
- [13] Y.C. Chang, J.N. Schulman. Phys. Rev. B **25**, 6, 3975 (1982).
- [14] J.P. Cuypers, W. van Haeringen. Phys. Rev. B **48**, 15, 11 469 (1993).
- [15] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B **40**, 17, 11 619 (1989).