

Минизонные спектры в сверхрешетках $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$

© Г.Ф. Караваев[¶], В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 8 мая 2001 г. Принята к печати 30 октября 2001 г.)

Рассмотрены электронные состояния для энергий в зоне проводимости сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ с $M \geq N$ ($N < 10$). Свойства таких сверхрешеток в основном определяются электронами X -долин в AlAs и L -долин в GaAs . Расчеты проведены на основе предложенной ранее модели сшивания огибающих функций. Найдены и проанализированы минизонные спектры, симметрия и локализация волновых функций, а также вероятности межминизонного инфракрасного поглощения. Показано, что последние имеют значительную величину не только при поляризации света в направлении оси роста сверхрешетки, но также и при нормальном к поверхности структуры падении световой волны. Проведенный анализ показал, что важную роль при рассмотрении инфракрасного поглощения играет учет в волновых функциях X_5 -состояний валентной зоны.

1. Введение

Энергетические спектры сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ на основе метода эмпирического псевдопотенциала исследовались в работах [1,2]. Отметим, что прямые псевдопотенциальные расчеты являются весьма трудоемкими и потому не получили широкого распространения. В [2] рассмотрены лишь короткопериодные сверхрешетки, а в [1] изучено положение только двух низших уровней в зоне проводимости (типа Γ и X , L) и верхнего Γ -уровня в валентной зоне в зависимости от чисел N и M , а также проанализирован вклад Γ -, X - и L -долин в формирование соответствующих состояний. Главная трудность в описании сверхрешеток связана с анализом рассеяния электронов на гетерогранице, а поведение электронов внутри слоев можно описать, опираясь на известные объемные модели. Ранее были построены упрощенные модели для описания Γ - L - и X - L -рассеяния электронов зоны проводимости гетерограницей $\text{AlAs}/\text{GaAs}(111)$ [3,4]. Эти модели позволяют проводить анализ электронных характеристик различных наноструктур, построенных на основе $\text{AlAs}/\text{GaAs}(111)$.

Электронные свойства сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ для энергий в зоне проводимости в основном определяются электронами X -, Γ - и L -долин в GaAs и AlAs . В литературе имеются различные данные об энергетическом положении $\delta_{\Gamma X}$ уровня X_1 в зоне проводимости AlAs относительно положения уровня Γ_1 в GaAs от ~ 0.12 до ~ 0.3 эВ (см., например, [1,5]). Вклад Γ -, X - и L -долин в формирование нижней части минизонного спектра зависит от этой величины и от числа монослоев N в GaAs . Из наших расчетов методом псевдопотенциала, где $\delta_{\Gamma X} = 0.208$ эВ, с потенциалами как в [4], следует, что для $N < 9$ резонансные энергии, соответствующие Γ -состояниям, оказываются по энергии выше X_1 -состояний AlAs , при $N = 9$ Γ -уровень ниже X_1 -состояния в AlAs

на ~ 0.01 эВ. Поэтому для $N < 10$ учет X - L -рассеяния очень важен. Отметим, что Γ - L - и X - L -рассеяния электронов при ориентации гетерограниц (111) имеют место при различных значениях параллельных границе компонентов волнового вектора. В настоящей работе мы рассматриваем вклад X - и L -долин AlAs и GaAs в минизонный спектр в зоне проводимости с $M \geq N$ ($N < 10$).

2. Методика расчета

Рассмотрим твердотельную систему с N_0 гетерограницами, проходящими по плоскостям $z' = z'_n$ (мы выбираем ось z' вдоль направления роста гетероструктуры). У гетероструктур с плоской гетерограницей имеется сохраняющееся квантовое число — параллельная границе компонента волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} . В приближении с разрывным на гетерогранице потенциалом общее решение уравнения Шредингера Ψ^n в любом слое n для определенного значения энергии E и вектора \mathbf{k}_{\parallel} может быть представлено в виде

$$\Psi^n = \sum_{\nu} A_{\nu}^n \Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^n + \sum_{\mu} B_{\mu}^n \Psi_{\mathbf{k}_{\mu}}^n, \quad (1)$$

где $\Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^n$ и $\Psi_{\mathbf{k}_{\mu}}^n$ — частные решения для заданных значений \mathbf{k}_{\parallel} и E , $\mathbf{k}_{\nu(\mu)} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp \nu(\mu)}^n$, $\mathbf{k}_{\perp \nu(\mu)}^n$ — перпендикулярные гетерогранице компоненты волновых векторов в слое n . Индекс ν соответствует так называемым падающим состояниям, μ — отраженным. Процедура разбиения состояний на падающие и отраженные такая же, как в работах [6–8]. Коэффициенты A_{ν}^n и B_{μ}^n находятся из условий сшивания на гетерограницах, условий на бесконечности для конечных систем или условий, следующих из теоремы Блоха для сверхрешеток.

Общепринятым подходом при решении таких задач является метод матрицы рассеяния [6–8]. В этом методе матрицей рассеяния $S(N_0)$ связываются падающие на границы системы с N_0 гетерограницами состояния с

[¶] E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru
Fax: (3822) 233015

состояниями, рассеянными системой,

$$\begin{pmatrix} A^{N_0+1} \\ B^1 \end{pmatrix} = S(N_0) \begin{pmatrix} A^1 \\ B^{N_0+1} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где A^n, B^n — векторы-столбцы с компонентами A_v^n, B_μ^n соответственно.

Матрица рассеяния содержит всю информацию о системе, и после ее вычисления можно получить решение различных квантово-механических задач, в том числе найти электронные состояния в сверхрешетках и квантовых ямах. Для определения электронного спектра в квантовой яме (в слое 2) необходимо в (2) положить $A^1 = B^3 = 0$ (это условия отсутствия падающих на систему состояний из сред в слоях 1 и 3). Тогда из условия разрешимости системы (2)

$$\det(S^{-1}(2)) = 0 \quad (3)$$

находится спектр $\varepsilon_j(\mathbf{k}_\parallel)$ квантовой ямы.

Можно показать, используя теорему Блоха для сверхрешеток, период которых состоит из слоев с номерами 1 и 2 (среды в слоях с номерами 1 и 3 одинаковы), что их электронные состояния определяются системой уравнений [9]

$$[S(2) - P] \begin{pmatrix} A^1 \\ B^3 \end{pmatrix} = 0, \quad (4)$$

где матрица P имеет вид

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & 0 \\ 0 & P_{22} \end{pmatrix},$$

$$(P_{11})_{vv'} = \delta_{vv'} \exp[-i(k_{\perp v}^1 - s)d],$$

$$(P_{22})_{\mu\mu'} = \delta_{\mu\mu'} \exp[ii(k_{\perp \mu}^1 - s)d], \quad (5)$$

где d — проекция основного вектора сверхрешетки на ось z' ; s — z' -компонента волнового вектора сверхрешетки. Электронный спектр сверхрешетки находится из условия разрешимости системы (4).

Мы выполнили расчеты энергетических спектров в квантовых ямах согласно (3) и в сверхрешетках согласно (4) и нашли, что полученные результаты хорошо согласуются с расчетами в приближении огибающих функций. Последние изложены далее.

В данной работе мы используем предложенную в [4] упрощенную модель для описания состояний в гетероструктурах GaAs/AlAs (111). Кратко сформулируем основные принципы, лежащие в основе этой модели. Общее решение (1) можно представить в виде

$$\Psi^n = \exp(i\mathbf{q}_\parallel \rho) \sum_m F_m^n(z') |K_{v_0}^n m\rangle, \quad (6)$$

где $\mathbf{q}_{v(\mu)} = \mathbf{k}_{v(\mu)} - \mathbf{k}_{v_0}$, ρ — вектор в плоскости границы, $|K_{v_0 m}^n\rangle$ — система блоховских функций в точке \mathbf{k}_{v_0} .

Точки \mathbf{k}_{v_0} в разложении (6) удобно выбирать на дне долин, актуальных при решении конкретной задачи. Функции $F_m^n(z')$ имеют смысл огибающих функций, и их можно представить в виде

$$F_m^n(z') = \sum_v A_v^n D_m^n(\mathbf{k}_v) \exp(iq_{\perp v} z')$$

$$+ \sum_\mu B_\mu^n D_m^n(\mathbf{k}_\mu) \exp(iq_{\perp \mu} z'), \quad (7)$$

где коэффициенты разложения $D_m^n(\mathbf{k}_{v(\mu)})$ находятся из системы алгебраических уравнений, полученной при подстановке для данного \mathbf{k}_{v_0} частных решений $\sim \exp(iq_{\perp} z)$ в стандартную систему уравнений **кр**-метода.

Согласно [4] условия сшивания огибающих функций на гетерогранице $z' = z'_n$ между левой (n) и правой ($n+1$) средами имеют вид

$$F^n(z'_n) = T(z'_n) F^{n+1}(z'_n), \quad T(z'_n) = \Phi^n I(z'_n) (\Phi^{n+1})^{-1}. \quad (8)$$

Здесь $I(z'_n)$ ($n = 1, 2, \dots, N_0$) — матрицы сшивания функций (1) на гетерограницах $z' = z'_n$ (между слоями с номерами n и $n+1$); $F(z')$ — вектор-столбец с компонентами $F_m(z')$ и $F'_m(z')$ (F'_m — производная функции по z'), Φ — матрица с элементами, равными $D_m(\mathbf{k}_\gamma) \exp(iq_{\perp \gamma} z')$ и $i q_{\perp \gamma} D_m(\mathbf{k}_\gamma) \exp(iq_{\perp \gamma} z')$, где $\gamma = v, \mu$. Порядок квадратных матриц I, Φ, T должен совпадать с общим числом произвольных констант A_v, B_μ в (1), поэтому число долин, принимаемых во внимание в условиях сшивания, должно быть в 2 раза меньше. В конкретных случаях эти числа определяются существом решаемой задачи.

Как уже было отмечено, мы рассматриваем систему, для которых существенно $X-L$ -рассеяние. Точки $\mathbf{k}_X = (00\bar{1})2\pi/a$ и $\mathbf{k}_L = (11\bar{1})\pi/a$ зоны Бриллюэна объемного кристалла (a — постоянная решетки) попадают в одну точку поверхностной зоны Бриллюэна, поэтому на границах возможно $X-L$ -рассеяние. Для нашей системы оказалось достаточным использование трехдолинного описания рассеяния электронов на гетерогранице — это X_1^-, X_3^-, L_1 -долины зоны проводимости, относящиеся к данным точкам. Матрица сшивания огибающих функций в таком приближении имеет размерность 6×6 . В отличие от $I(z'_n)$ матрицы $T(z'_n)$ практически не зависят от энергии и \mathbf{k}_\parallel . Для того чтобы подчеркнуть независимость условий сшивания (8) от порядка расположения (слева, справа) веществ AlAs (1) и GaAs (2), они были представлены в симметричном виде

$$T_1 F^1 = T_2 F^2, \quad (9)$$

где матричные элементы T_k ($k = 1, 2$) приведены в [4].

3. Электронные состояния в сверхрешетках $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$

Перейдем к рассмотрению электронных состояний в сверхрешетках $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$. Мы принимаем, что $(\text{AlAs})_M$ образует слой с номером 1 толщиной d_1 , а $(\text{GaAs})_N$ — слой 2 толщиной d_2 , так что период сверхрешетки вдоль оси z' равен $d = d_1 + d_2$. Вид элементарной ячейки сверхрешетки зависит от того, делится или нет на 3 число молекулярных слоев $N + M$, приходящихся на один ее период. В случае, когда $N + M$ кратно трем, имеется вектор прямой решетки (период сверхрешетки), параллельный оси z' . В случае, когда число $N + M$ не кратно трем, истинным периодом сверхрешетки является вектор, содержащий большую компоненту (равную d) вдоль оси z' и малую компоненту в перпендикулярном к ней направлении. Это различие проявляется в различной форме зон Бриллюэна соответствующих сверхрешеток. Зоны Бриллюэна для этих случаев можно найти в книге [10], они были приведены в статье [1] и с небольшими уточнениями воспроизведены нами на рис. 1. В случае, когда общее число монослоев в периоде сверхрешетки $N + M$ является четным, точки X и L зоны Бриллюэна объемного кристалла сворачиваются в одну и ту же точку зоны Бриллюэна сверхрешетки (точки D или M на рис. 1). При нечетном $N + M$ точки X и L попадают в разные точки зоны Бриллюэна (точки D и A или M и \bar{L} на рис. 1). Как уже было отмечено, Γ - L - и X - L -рассеяние имеет место в различных точках зоны Бриллюэна. Γ - L -взаимодействие существенно вдоль линии ΓA (или ΓZ), X - L -рассеяние — вдоль $M\bar{L}$ (или DA).

При решении уравнения Шредингера в каждом из слоев можно отдельно рассматривать состояния, связанные с точками \mathbf{k}_X и \mathbf{k}_L . Учет в условиях сшивания искомой волновой функции вкладов только шести слагаемых, связанных с тремя долинами X_3 , X_1 , L_1 , однако, не означает, что в разложении (6) должно быть представлено только три слагаемых, поскольку функции $\Psi_{\mathbf{k}_v(\mu)}^n$ и функции $|K_{v_0 m}^n\rangle$ относятся к разным значениям энергии (и волновых чисел $\mathbf{k}_v(\mu)$). В выражении (6) может присутствовать более трех членов, но только три огибающих функции могут считаться независимыми и быть приняты во внимание при получении условий сшивания для огибающих, а остальные огибающие через них выражаются. Учет этих остальных вкладов необходим для более точного определения энергетического спектра и волновых функций.

В окрестности точки \mathbf{k}_X мы оставляем в разложении (6) функции, соответствующие состояниям X_3 , X_1 зоны проводимости и X_{5x} , X_{5y} валентной зоны, а в окрестности точки \mathbf{k}_L — только три функции, соответствующие состояниям L_1 зоны проводимости и ближайшим по энергии состояниям L_3 валентной зоны и зоны проводимости. Таким образом, искомую волновую

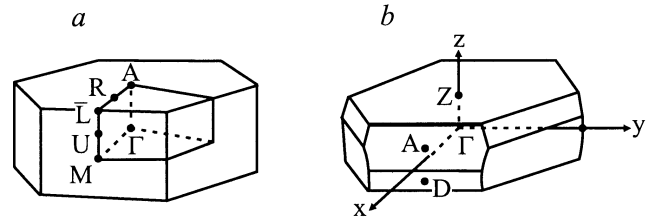


Рис. 1. Зоны Бриллюэна сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$: a — $(M + N)/3$ — целое число; b — $(M + N)/3$ — нецелое число.

функцию (6) при $\mathbf{q}_{\parallel} = 0$ представляем в виде

$$\Psi = F_{X_3}|X_3\rangle + F_{X_1}|X_1\rangle + F_{X_{5x}}|X_{5x}\rangle + F_{X_{5y}}|X_{5y}\rangle + F_{L_1}|L_1\rangle + F_{L_{3c}}|L_{3c}\rangle + F_{L_{3v}}|L_{3v}\rangle. \quad (10)$$

Внутри каждого слоя огибающие функции удовлетворяют зацепляющейся системе обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Частное решение такой системы разыскивается в виде вектора-столбца $D \propto \exp(iq_{\perp} z')$. После подстановки эти уравнения превращаются в систему алгебраических уравнений:

$$\begin{pmatrix} E_{X_3} + E_0 w^2 - E & -iE_0 R_1^X w & iE_0 R_3^X w & iE_0 R_3^X w \\ iE_0 R_1^X w & E_{X_1} + E_0 w^2 - E & iE_0 R_2^X w & iE_0 R_2^X w \\ -iE_0 R_3^X w & -iE_0 R_2^X w & E_{X_5} + E_0 w^2 - E & 0 \\ -iE_0 R_3^X w & -iE_0 R_2^X w & 0 & E_{X_5} + E_0 w^2 - E \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} D_{X_3} \\ D_{X_1} \\ D_{X_{5x}} \\ D_{X_{5y}} \end{pmatrix} = 0 \quad (11)$$

для огибающих X -функций и

$$\begin{pmatrix} E_{L_1} + E_0 w^2 - E & iE_0 R_1^L w & -iE_0 R_2^L w \\ -iE_0 R_1^L w & E_{L_3} + E_0 w^2 - E & iE_0 R_3^L w \\ iE_0 R_2^L w & -iE_0 R_3^L w & E_{L_3} + E_0 w^2 - E \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} D_{L_1} \\ D_{L_3} \\ D_{L_3^v} \end{pmatrix} = 0 \quad (12)$$

для огибающих L -функций. Здесь $w = q_{\perp} a$, $E_0 = \hbar^2/2m_0 a^2$, \hbar — постоянная Планка, m_0 — масса покоя свободного электрона, остальные константы указаны в табл. 1, 2.

Из условий разрешимости систем алгебраических уравнений (11), (12) находятся корни $w_j(E)$. При этом учитываются не все полученные корни, а только те, которые согласуются с условиями применимости уравнений (11), (12). Таких корней оказывается четыре, если мы рассматриваем огибающие X -функций, и два в случае L -функций. Выбранные таким образом корни $w_j(E)$ оказываются очень близки к найденным при изучении

Таблица 1. Значения энергий в точках X и L для AlAs и GaAs

Полупроводник	X_1	X_3	X_5	L_1	L_3^v	L_3^c
AlAs	0.2082	1.1830	-4.2429	0.8617	-2.8814	3.0654
GaAs	0.4688	0.9068	-3.8421	0.2908	-2.4515	3.3600

Примечание. Значения даны в эВ.

Таблица 2. Значения постоянных, входящих в уравнения (12), (13)

Полупроводник	R_1^X	R_2^X	R_3^X	R_1^L	R_2^L	R_3^L
AlAs	1.3308	6.0788	6.6154	0.1653	12.0022	8.8785
GaAs	1.4124	6.1004	6.5499	0.2593	11.9609	8.9620

комплексной зонной структуры методом псевдопотенциала. Затем строится общее решение в форме линейной комбинации экспоненциальных частных решений. У всех огибающих X -функций число произвольных коэффициентов равно четырем, а у огибающих L -функций — двум. В итоге в каждом слое общее решение зависит от шести произвольных коэффициентов. Для удобства расчетов в каждом слое выбираем начало отсчета по оси z' в середине слоя. При сделанном выборе системы координат и нумерации слоев шесть условий сшивания огибающих функций на каждой гетерогранице запишутся в виде

$$T_1 F^1 \left(\frac{d_1}{2} \right) = T_2 F^2 \left(-\frac{d_2}{2} \right);$$

$$T_1 U(N) F^3 \left(-\frac{d_1}{2} \right) = T_2 U(N) F^2 \left(\frac{d_2}{2} \right), \quad (13)$$

где $F^i(z')$ — столбец $\{F_{X_3}^i(z'), F_{X_1}^i(z'), F_{X_3}'^i(z'), F_{X_1}'^i(z'), F_{L_1}'^i(z'), F_{L_1}''^i(z')\}$, $i = 1, 2, 3$ — номер слоя; $U(N)$ — диагональная матрица 6-го порядка, отличающаяся от единичной двумя последними членами на главной диагонали, которые равны $(-1)^N$ вследствие того, что бловские функции X_j и L_j имеют разные периоды. Для определения всех огибающих функций, т. е. 18 коэффициентов (по 6 в каждом слое), необходимо наложить еще 6 дополнительных условий. В нашем случае бесконечной сверхрешетки в соответствии с теоремой Блоха при сдвиге на целый вектор сверхрешетки (в основном вдоль оси ее роста на период $d = d_1 + d_2$) решение должно изменяться на фазовый множитель. Запишем эти условия в виде

$$F^1 \left(-\frac{d_1}{2} \right) = e^{-iQd} U(M+N) F^3 \left(-\frac{d_1}{2} \right), \quad (14)$$

где Q — компонента сверхрешеточного волнового вектора в направлении (111) (вдоль линий $M\bar{L}$ или DA), отсчитанная от точки M (или D), в которую сворачивается точка $X = (00\bar{1})2\pi/a$. Уравнения (13) вместе с (14)

составляют замкнутую систему линейных уравнений для коэффициентов разложения общего решения по частным.

При численном решении поставленной задачи необходимо для каждого выбранного значения энергии E совместно решить системы уравнений (11)–(14), используя упомянутый выше метод матриц рассеяния. Система шести уравнений типа (4) была приведена к виду, учитывающему специальный выбор системы координат в каждом слое. В этом случае выражения для матриц $S(2)$ и P , за исключением размерности, несущественно отличаются от записанных в (4), (5). Условие разрешимости системы (11)–(14) в виде $\det[S(2) - P] = 0$ определяет спектр допустимых энергий. Из решения уравнений (4) с учетом (13) определяются коэффициенты A и B для каждого слоя, строятся огибающие функции (7) и находится общее решение задачи в виде (10).

4. Анализ спектра и волновых функций

В работе был проделан расчет для структур $(AlAs)_M(GaAs)_N$, обозначаемых далее (M, N) , где $N = 7-9$, $M = 7-11$. Отметим, что энергетическое положение минизон хорошо коррелирует с уровнями соответствующих квантовых ям. На рис. 2, 3 показаны энергетические спектры для сверхрешеток (9, 9) и (7, 7), поскольку их спектральные зависимости качественно различны. Спектр сверхрешетки (8, 8) подобен спектру (7, 7), а все остальные спектры подобны (9, 9). Различие заключается лишь в значении энергий (энергии уровней при $Q = 0$ для первых двух минизон и происхождение этих уровней приведены в табл. 3). Первый и второй энергетические уровни, в волновые функции которых основной вклад вносят состояния X_1 -долины в AlAs, снижаются по энергии при увеличении толщины слоя AlAs. При увеличении толщины слоя GaAs снижается энергия третьего уровня, свя-

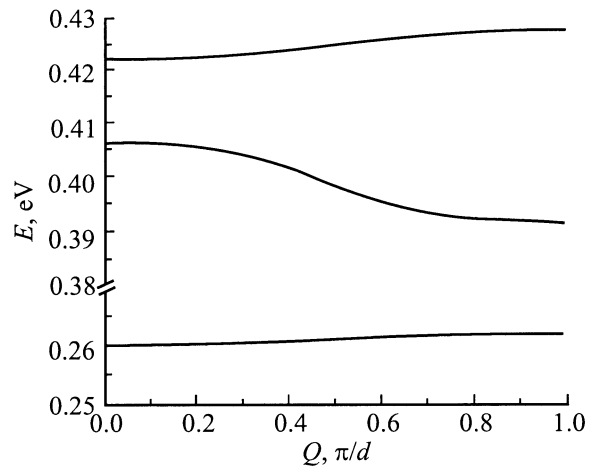


Рис. 2. Спектр первых трех минизон в сверхрешетке $(AlAs)_9(GaAs)_9$ (111).

Таблица 3. Значения энергий E и процентные вклады в полную электронную плотность для первого и второго уровней при $Q = 0$

(M, N)	$E, \text{эВ}$	Слой	X_3	X_1	L_1	(M, N)	$E, \text{эВ}$	Слой	X_3	X_1	L_1
(9, 9)	0.260	AlAs	0.3	90.7	0.0	(7, 8)	0.278	AlAs	0.4	85.7	0.0
		GaAs	0.4	8.0	0.0			GaAs	0.5	12.7	0.1
(8, 8)	0.406	AlAs	1.9	61.4	0.9	(10, 9)	2.254	AlAs	0.3	92.4	0.0
		GaAs	0.9	20.2	13.1			GaAs	0.3	6.5	0.0
(7, 7)	0.268	AlAs	0.3	88.7	0.0	(10, 8)	0.253	AlAs	0.3	92.6	0.0
		GaAs	0.5	9.9	0.1			GaAs	0.3	6.3	0.1
(9, 8)	0.437	AlAs	2.8	67.9	0.0	(11, 9)	0.249	AlAs	0.3	93.7	0.0
		GaAs	1.4	25.6	0.3			GaAs	0.3	5.3	0.0
(8, 7)	0.277	AlAs	0.4	85.4	0.0	(11, 8)	0.354	AlAs	1.8	82.2	0.0
		GaAs	0.5	13.2	0.0			GaAs	0.7	13.6	0.0
(8, 9)	0.462	AlAs	0.0	0.3	14.9						
		GaAs	0.0	0.0	84.7						
(9, 8)	0.260	AlAs	0.3	90.9	0.0						
		GaAs	0.4	7.8	0.1						
(8, 7)	0.409	AlAs	2.4	74.3	0.0						
		GaAs	1.1	20.3	0.1						
(8, 9)	0.267	AlAs	0.3	88.4	0.0						
		GaAs	0.4	10.3	0.0						
(8, 9)	0.442	AlAs	2.8	66.0	0.3						
		GaAs	1.6	22.2	5.1						
(8, 9)	0.269	AlAs	0.3	88.4	0.0						
		GaAs	0.5	10.1	0.1						
(8, 9)	0.430	AlAs	1.0	26.7	3.6						
		GaAs	0.5	12.0	55.5						

занного в основном с вкладом от L_1 -долины в GaAs, поэтому в сверхрешетке (8, 9) вторая минizona обусловлена именно этой долиной. Помимо положения уровней при $Q = 0$, различие обнаруживается и в наклоне третьей минизоны, что связано с четностью количества монослоев в периоде сверхрешетки (напомним, что при четном $N + M$ точки X и L сворачиваются в одну точку зоны Бриллюэна сверхрешетки, а при нечетном — в разные). В сверхрешетке (7, 7) обнаруживается немонотонный ход минизон в зависимости от величины Q . Это связано с тем, что в этом случае минизоны X_1 и L_1 „пересекаются“ (штриховые линии), если пренебречь $X-L$ -смешиванием на гетерогранице. Учет смешивания приводит к устранению этого пересечения и в результате минизоны принимают вид, изображенный на рис. 3.

На рис. 4 для структуры (9, 9) представлена усредненная по элементарной ячейке объемного кристалла полная электронная плотность (электронная плотность, вычисленная с помощью огибающих функций) при $Q = 0$ для двух нижних уровней. Видно, что электронная плотность в основном сосредоточена в слое AlAs. Аналогичное поведение наблюдается и для большинства других исследованных структур, а в структуре (7, 7) электронная плотность для первого уровня локализована в слое AlAs, для второго уровня — в

слое GaAs. На границе слоев наблюдается небольшой разрыв усредненной по элементарной ячейке объемного кристалла электронной плотности, что не противоречит условию непрерывности тока через гетерограницу, так как ток (разумеется, удовлетворяющий условию непрерывности) определяется точными волновыми функция-

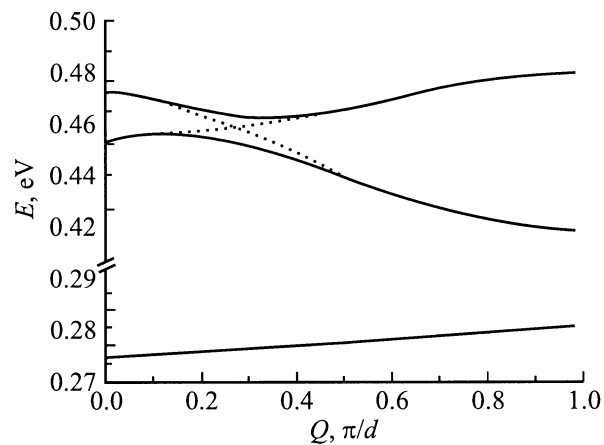
**Рис. 3.** Спектр первых трех минизон в сверхрешетке $(\text{AlAs})_7(\text{GaAs})_7(111)$.

Таблица 4. Значения оптического параметра Σ при разных направлениях падения световой волны

(M, N)	Направление	Q = 0	Q = $\pi/2$	Q = π	(M, N)	Направление	Q = 0	Q = $\pi/2$	Q = π
(9, 9)	Нормальное	0.22	0.35	0.42	(8, 9)	Нормальное	0.12	0.17	0.48
	Боковое	0.68	0.97	1.11		Боковое	0.36	0.46	1.24
(8, 8)	Нормальное	0.26	0.38	0.51	(10, 8)	Нормальное	0.24	0.29	0.40
	Боковое	0.80	1.02	1.30		Боковое	0.70	0.82	1.05
(7, 7)	Нормальное	0.00	0.36	0.63	(10, 7)	Нормальное	0.21	0.30	0.43
	Боковое	0.00	0.98	1.59		Боковое	0.65	0.84	1.13
(9, 8)	Нормальное	0.25	0.31	0.45	(11, 9)	Нормальное	0.24	0.28	0.33
	Боковое	0.75	0.87	1.17		Боковое	0.70	0.79	0.91
(8, 7)	Нормальное	0.21	0.38	0.56	(11, 8)	Нормальное	0.23	0.28	0.36
	Боковое	0.69	1.04	1.43		Боковое	0.67	0.80	0.96

ми (6), а не входящими в них огибающими функциями. Разрыв огибающих волновых функций связан с различием блоховских волновых функций в AlAs и GaAs. Из анализа парциальных вкладов в электронную плотность в структурах следует, что, хотя нижние по энергии минизоны в основном сформированы X_1 -состояниями AlAs, существенными также являются вклады уровней X_1 и L_1 в GaAs. Для структуры (7,7) электронная плотность второго уровня главным образом обусловлена L_1 -состояниями GaAs и потому суммарная плотность сосредоточена в основном в слое GaAs. Вклады в электронную плотность остальных уровней, включая X_5 , незначительны (рис. 5).

минизон, рассчитанный в единицах \hbar/a , \mathbf{e} — вектор поляризации световой волны, который выбирался так, чтобы величина Σ была максимальной, индексы в скобках нумеруют один из трех возможных вариантов выбора точек \mathbf{k}_X и \mathbf{k}_L , получающихся из выбранных ранее поворотах на 120° вокруг оси (111). Эта величина характеризует способность сверхрешетки к поглощению инфракрасного излучения. Расчет показал, что структуры (AlAs)_M(GaAs)_N (111) способны достаточно эффективно поглощать нормально падающий свет (см. табл. 4). Из полученных результатов видно, что величина Σ для нормального падения света приблизительно в 3 раза меньше значения этой величины при боковом падении света на структуру. Поскольку нормальное падение света способно задействовать площадь облучаемой поверхности, на несколько порядков большую, чем при боковом падении, полученные результаты являются вполне приемлемыми. Сделанный вывод представляет интерес и требует качественного объяснения своего происхождения. Мы провели анализ, который показал, что важную роль

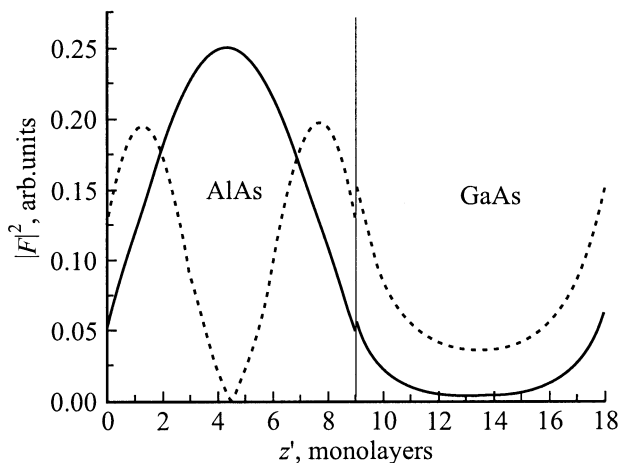


Рис. 4. Распределение суммарной электронной плотности $|F|^2$ по периоду сверхрешетки (AlAs)₉(GaAs)₉ (111). Сплошная кривая — первая минизона, штриховая — вторая.

Для всех вышперечисленных сверхрешеток был проведен расчет величины

$$\Sigma = |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(1)}^2 + |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(2)}^2 + |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|_{(3)}^2.$$

Здесь $\mathbf{P}_{12} = \langle \Psi_1(r) | \mathbf{P} | \Psi_2(r) \rangle$ — матричный элемент импульса между волновыми функциями первой и второй

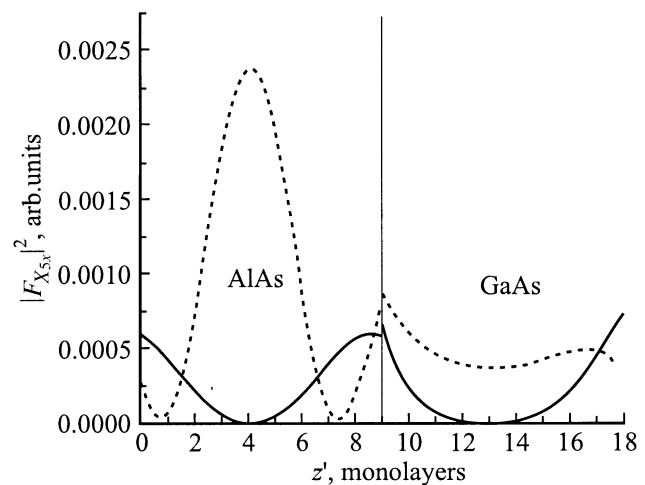


Рис. 5. Распределение парциальной электронной плотности $|F_{Xst}|^2$ по периоду сверхрешетки (AlAs)₉(GaAs)₉ (111). Сплошная кривая — первая минизона, штриховая — вторая.

играет учет в волновых функциях тех малых добавок, которые связаны с X_5 -состояниями. Вклад этих состояний в электронную плотность представлен на рис. 5. По сравнению с полной электронной плотностью этот вклад на 2 порядка меньше, а амплитуда соответствующей волновой функции меньше на порядок. Когда поляризация световой волны \mathbf{e} перпендикулярна оси (111), основной вклад в матричный элемент импульса вносят слагаемые типа $\langle F_{X_{5x}}(z') | F_{X_1}(z') \rangle \langle X_{5x} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} | X_1 \rangle$. Оказалось, что эти вклады существенны благодаря большой величине матричных элементов $\langle X_1 | \mathbf{P} | X_5 \rangle$ и $\langle X_3 | \mathbf{P} | X_5 \rangle$. По оценкам величина $\langle F_{X_{5x}}(z') | F_{X_1}(z') \rangle$ порядка 0.1, а матричный элемент $\langle F_{X_{5x}} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} | X_1 \rangle$ порядка 6 (в безразмерных единицах). Поэтому величина Σ при нормальном падении света оказывается столь значительной. Относительно малые значения величины Σ в структуре (7,7) при $Q = 0$ и при любом значении Q в структуре (8,9) объясняются тем, что в этих сверхрешетках первый и второй энергетические уровни образовались под влиянием различных долин.

5. Заключение

Мы провели исследование минизонных спектров и электронных состояний в зоне проводимости сверхрешеток $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ с числом монослоев M и N в интервале от 7 до 11. Анализ проведен в рамках разработанной ранее модели X - L -смешивания состояний на гетерограницах. В случае $M > N$ показано, что две нижних минизоны происходят из X_1 -долины зонного спектра AlAs и разделены энергетическим зазором 0.12–0.2 эВ. То обстоятельство, что волновые функции двух первых минизон локализованы в основном в одном слое, свидетельствует о перспективности данных сверхрешеток для инфракрасной оптики. Наш расчет показал, что вероятность межминизонного поглощения света имеет значительную величину не только при поляризации света в направлении оси роста сверхрешетки, но также и при нормальном к поверхности структуры падении световой волны. Такие сверхрешетки могут представлять интерес для изучения фотопроводимости при инфракрасном облучении.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 00-02-17996.

Список литературы

- [1] Z. Ikonc, G.P. Srivastava, J.C. Inkson. Phys. Rev. B, **46**, 15 150 (1992).
- [2] S.H. Wei, A. Zunger. J. Appl. Phys., **63**, 5794 (1988).
- [3] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 9, 91 (1998).
- [4] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35**, 105 (2001).
- [5] J.M. Smith, P.C. Klipstein, R. Gray, G. Hill. Phys. Rev. B, **57**, 1740 (1998).
- [6] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9946 (1988).
- [7] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992).

- [8] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 9, 64 (1992).
- [9] G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov, S.N. Grinyaev. Abstracts of Invited Lectures and Contributed Papers. Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology (St. Petersburg, 1994) p. 62.
- [10] О.В. Ковалев. *Неприводимые и индуцированные представления и коопредставления федоровских групп* (М., Наука, 1986).

Редактор Л.В. Шаронова

The miniband spectrum in $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ superlattices

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov, R.M. Egunov

Siberian Physical-Technical Institute
at Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The electron states for energies in the conduction band of $(\text{AlAs})_M(\text{GaAs})_N(111)$ superlattices with $M \geq N$ ($N < 10$) are considered. The properties of such superlattices are mainly determined by X -electrons in AlAs and L -electrons in GaAs. The calculations are carried out on the basis of the envelope-function model of interface band mixing offered in [4]. Defined and analysed are miniband spectra, symmetry and localization of wave functions, and also probabilities of the interminiband infrared absorption. It is shown that the latter have a significant magnitude not only at light polarization along the superlattice growth axis, but also at normal incidence of a light wave to the surface. The analysis has shown the importance of consideration of X_5 -states belonging to the valence band for infrared absorption.