

Энергетические состояния в короткопериодных симметричных и асимметричных сверхрешетках $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$. Зависимость от граничных условий

© К.Е. Глухов[¶], А.И. Берча, Д.В. Корбутяк*, В.Г. Литовченко*

Ужгородский национальный университет,
88000 Ужгород, Украина

* Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина

(Получена 27 мая 2003 г. Принята к печати 4 июня 2003 г.)

На основании полученных экспериментальных данных по низкотемпературной фотолюминесценции проведено численное моделирование энергетических состояний симметричных и асимметричных короткопериодных сверхрешеток $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ с ориентацией (001). В рамках матричного формализма метода огибающей функции исследованы тенденции поведения минизонного спектра в моделях с различными граничными условиями. Показано, что верную информацию о типе переходов в рассматриваемых материалах можно получить уже при диагональных граничных условиях. Изучено влияние на минизонный спектр поправок, возникающих при учете смешивания состояний долин Γ и X и наличии локализованного на гетерогранице δ -функционального потенциала.

1. Введение

На сегодняшний день по электронным свойствам сверхрешеток (СР) $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ кристаллографической ориентации (001) накоплен богатый экспериментальный материал [1–13], который продолжает пополняться. Поэтому, а также благодаря хорошо изученной энергетической структуре формирующих их исходных объемных материалов, эти СР являются удобным „полигоном“ для теоретического рассмотрения и последующей апробации результатов моделирования. Кроме того, такие гетероструктуры привлекательны с точки зрения принципиальной возможности создания на их основе новых полупроводниковых лазеров, работающих в видимой области спектра.

В последнее время появилась серия работ [14–19], подтверждающих возможность использования метода огибающей функции (ОФ) для описания даже короткопериодных сверхрешеток ($N, M \leq 10$). Действительно, уже предварительные расчеты на основании модели Бассарда [20] показывают, что в рамках метода ОФ можно получить качественное согласие выводов теории относительно типа короткопериодной СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ (001) с экспериментом [21].

Несмотря на то что проводить моделирование энергетических состояний СР и идентифицировать экспериментально полученные энергии переходов между этими состояниями в приближении ОФ оказывается сравнительно просто и удобно, корректное решение задачи требует последовательного рассмотрения зависимости энергетических уровней от граничных условий на гетерограницах, которые не были учтены в предварительном моделировании, проведенном для ряда симметричных и асимметричных короткопериодных СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ [8,10]. Эти СР представляют

значительный интерес, поскольку наряду с тем, что симметричные короткопериодные СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_N$ ($N < 10$) являются непрямозонными, что подтверждается, например, расчетом зонной структуры методом полуэмпирического псевдопотенциала [22], в группе асимметричных короткопериодных СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ относительно недавно был обнаружен эффект прямозонности [8–10]. Обнаруженная прямозонность, а также усиление света (наблюдавшееся, в частности, на СР с отношением монослоев в периоде (N/M), равным (6/3) [23]), возможно, открывают путь к созданию полупроводниковых лазеров для красной области спектра с активной зоной на основе ненапряженных слоев $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$. Следует отметить, что для интервала длин волн 690–730 нм на сегодняшний день промышленность не производит полупроводниковых лазеров. Из сказанного следует, что возникает необходимость в дополнительном как теоретическом, так и экспериментальном изучении эффекта прямозонности для асимметричных СР.

С этой целью в данной работе нами экспериментально исследовались спектры низкотемпературной фотолюминесценции (ФЛ) при различных уровнях возбуждения следующей группы симметричных и асимметричных СР: (10/10), (10/5), (8/4), (6/3). Для этих СР, а также для СР (7/7) и (5/5) в рамках метода ОФ рассчитаны энергетические состояния зоны проводимости с учетом Γ -, X - и L -долин и теоретически проанализирована зависимость энергетических зазоров от диагональных и недиагональных элементов матрицы перехода, а также от силы Γ - X -смешивания для определения наиболее существенной из этих величин.¹

При моделировании энергетических состояний мы опирались на данные о значениях энергий, отвечающих

¹ Первое сообщение об этих исследованиях представлено в работе [10].

[¶] E-mail: kglukhov@issp.univ.uzhgorod.ua

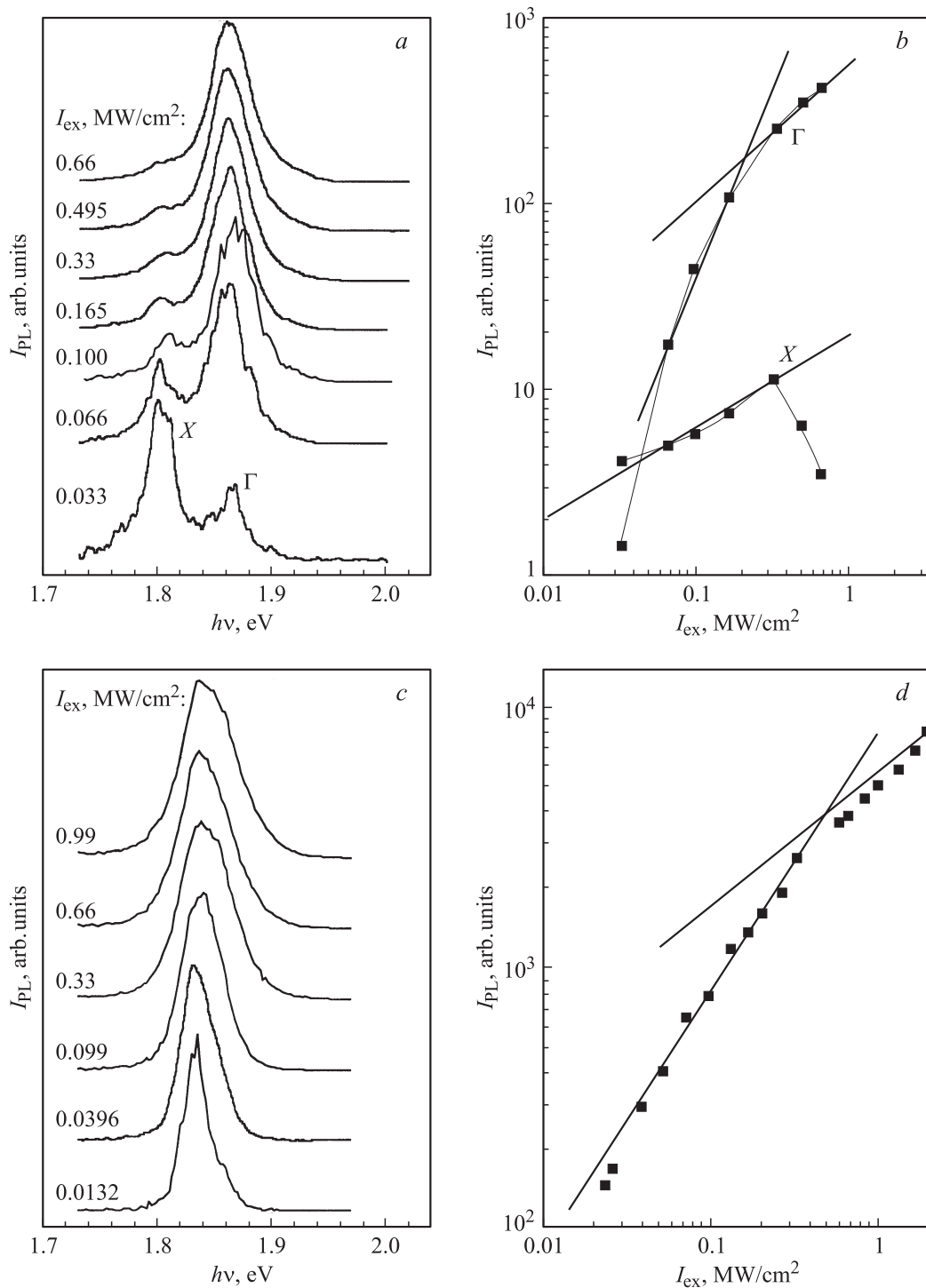


Рис. 1. Спектры низкотемпературной ФЛ при разных уровнях возбуждения (*a, c*) и зависимости интенсивности фотолуминесценции (I_{PL}) от интенсивности возбуждения I_{ex} (*b, d*) для СР (10/10) (*a, b*) и (10/5) (*c, d*).

пикам интенсивности спектров низкотемпературной ФЛ, известные из литературы [1–13], а также на полученные нами ранее в работах [23,24] и в данной работе.

Следует отметить, что экспериментальные значения энергетических зазоров могут несколько отличаться от энергетических расстояний между нижними минимумами, так как обычно в спектре низкотемпературной

фотолуминесценции переходы происходят с участием экситонов. Заметим также, что литературные экспериментальные данные имеют определенный разброс, зависящий в основном от происхождения образцов, что затрудняет сравнение этих данных с расчетными. Кроме того, в энергиях уровней размерного квантования имеются дополнительные отклонения, возникающие из-за

Таблица 1. Результаты расчета величин энергий переходов в диагональном приближении и их сравнение с экспериментальными данными

СР (N/M)	Тип	α^*	$\Delta E_{\Gamma-hh}$		ΔE_{X-hh}	
			расчет	эксперимент	расчет	эксперимент
(10/5)	I	-0.198	1.836	1.836	1.843	—
(8/4)	I	-0.228	1.886	1.890	1.887	—
(6/3)	I	-0.002	1.913	1.913	1.938	—
(10/10)	II	-0.275	1.881	1.880	1.800	1.813
(7/7)	II	-0.040	1.961	1.961	1.857	1.880
(5/5)	II	-0.500	2.297	—	1.944	1.862

Примечание. Значения энергий даны в эВ.

наличия шероховатостей гетерограниц и приводящие к флуктуациям (порядка нескольких монослоев) эффективных положений гетерограницы [25]. Поэтому для определенности при моделировании в данной работе мы будем опираться на результаты собственных экспериментальных исследований.

2. Эксперимент

Нами исследовались спектры низкотемпературной ФЛ короткопериодных СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ со следующими отношениями (N/M) монослоев в периоде: (6/3), (8/4), (10/5) и (10/10).² Все образцы СР были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках полуизолирующего GaAs ориентации (001). Величина периода СР контролировалась при помощи рентгеновской дифрактометрии. Отклонение от номинальной толщины слоев составляло $\sim 1\%$. Измерение спектров низкотемпературной ФЛ проводилось при высоких уровнях возбуждения. Для этого использовалась вторая гармоника импульсного лазера АИГ: Nd^{3+} (длина волны 533 нм). Длительность импульса составляла 7 нс, мощность — до 10 МВт/см². Измерение спектров проводилось при помощи монохроматора МДР-24 и фотоумножителя. Отметим также, что результаты исследований низкотемпературной ФЛ этих же образцов при низких уровнях возбуждения были представлены в работах [7–9].

Спектры низкотемпературной ФЛ $I_{\text{PL}}(h\nu)$ при высоких уровнях возбуждения I_{ex} для СР (10/10) и (10/5) представлены на рис. 1, *a, c*. Спектры остальных перечисленных асимметричных СР аналогичны спектрам СР (10/5). Энергетические положения максимумов излучения представлены в табл. 1. В высокоэнергетической части спектра ФЛ образца (10/10) при увеличении уровня накачки возникает новая полоса. Эта полоса связана с излучательной рекомбинацией электронов, находящихся в Γ -долине, с тяжелыми дырками ($\Gamma \rightarrow hh$) и наблюдалась ранее в работах [11,12]. Другая полоса

(наблюдаемая и при малых уровнях возбуждения [7–9]) связана с непрямыми переходами электронов из непрямой долины зоны проводимости в зону тяжелых дырок ($X \rightarrow hh$) [4,7–9]. Разность в энергиях переходов $\Gamma \rightarrow hh$ ($\Delta E_{\Gamma-hh}$) и $X \rightarrow hh$ (ΔE_{X-hh}) составляет 67 мэВ.

Иная ситуация имеет место для асимметричной СР (10/5) (рис. 1, *c*). При высоких уровнях возбуждения в спектре ФЛ дополнительная полоса на высокоэнергетическом крыле спектра не наблюдается. Этот факт, а также различия в зависимостях интенсивности полос спектра ФЛ от уровня возбуждения (см. рис. 1, *b, d*) указывают на различную природу основного состояния зоны проводимости симметричных и асимметричных СР GaAs/AlAs, что в определенной мере подтверждает заключение работ [7–9] о прямозонности асимметричных короткопериодных СР GaAs/AlAs. Заметим, однако, что для большей достоверности выводов следовало бы провести дополнительные исследования этих же образцов, используя другие экспериментальные методики (время-разрешенная ФЛ, измерение спектров возбуждения фотолюминесценции, низкотемпературная ФЛ под гидростатическим давлением).

3. Моделирование энергетических состояний

Часто при оценочных расчетах энергетических состояний СР методом ОФ *a priori* используется одна из упрощенных моделей — например, Кронига–Пенни или Бассарда. Хорошее согласие результатов вычислений энергетических зазоров с экспериментально определенными и идентифицированными энергиями переходов достигается за счет соответствующего выбора величин разрывов зон на гетерогранице и эффективных масс в рамках точности их экспериментального определения [26], которые могут быть довольно широкими. Несмотря на то что упомянутые модели и являются упрощенными, они не теряют своей значимости при оценочных расчетах [21]. С одной стороны, подобный подход наталкивается на определенные трудности при необходимости описания серии однотипных СР или при наличии нескольких одновременно наблюдаемых пиков

² Образцы СР любезно предоставлены проф. К. Плоогом, Paul-Drude Institute, Берлин.

ФЛ, отвечающих переходам носителей из разных долин, поскольку при переходе от образца к образцу или от долины к долине он требует переопределения некоторых параметров объемных материалов (например, величины разрыва зон), которые не должны зависеть от геометрических характеристик СР. С другой стороны, известно, что на результаты расчетов минизонного спектра СР большое влияние оказывает выбор граничных условий. Это побуждает к детальному изучению возможности получения удовлетворительных расчетных данных путем подбора подходящих граничных условий. Удобным формализмом, позволяющим провести такое изучение, является матричный формализм метода ОФ [27]. При этом задача нахождения минизонного спектра короткопериодной СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ сводится к решению уравнения

$$|\mathbf{S}_w \mathbf{T}_{wb} \mathbf{S}_b \mathbf{T}_{bw} - e^{-i\lambda} \mathbf{I}| = 0, \quad (1)$$

где \mathbf{S}_i — матрицы переноса, связывающие значения ОФ и их первых производных на внутренних границах i -го слоя ($i = w, b$), $\mathbf{T}_{wb} = (\mathbf{T}_{bw})^+$ — интерфейсные матрицы, задающие граничные условия, \mathbf{I} — единичная матрица, а λ — величина, зависящая от волнового вектора, которая в наших расчетах полагалась равной нулю, что соответствует центру зоны Бриллюэна СР. Рассмотрение именно этой точки связано с тем, что в ней расположены минимумы минизонного спектра, используемые для определения энергетических промежутков. Здесь и далее будем полагать величины с индексом w относящимися к слоям GaAs, а с индексом b — к слоям AlAs.

При расчете состояний зоны проводимости рассматриваемых СР необходимо учитывать многодолинный характер энергетического спектра исходных полупроводников, вблизи дна зоны проводимости которых находятся несколько энергетически близких минимумов, расположенных в точках Γ, X и L зоны Бриллюэна. Кроме того, в полупроводниках со структурой цинковой обманки, к которым относятся GaAs и AlAs, потолок валентной зоны сформирован тремя зонами — зоной тяжелых дырок (hh), зоной легких дырок (lh) и спин-орбитально отщепленной зоной (so). Однако, поскольку мы интересуемся только нижними минизонами, определяющими тип СР, а они, как известно, формируются из Γ - и X_z -состояний зоны проводимости и Γ -состояний валентной зоны (hh) объемных материалов, мы в дальнейшем ограничимся рассмотрением лишь этих состояний.

В указанном приближении матрицы переноса имеют блочную форму:

$$\mathbf{S}_i = \begin{bmatrix} S_i^{\Gamma_1} & O & O & O \\ O & S_i^{X_{1z}} & O & O \\ O & O & S_i^{X_{3z}} & O \\ O & O & O & S_i^{hh} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Здесь $O = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, а S_i^v — однозонные матрицы переноса, имеющие вид

$$S_i^v = \begin{bmatrix} \cos(k_i^v d_i) & (m_i^v/k_i^v) \sin(k_i^v d_i) \\ -(k_i^v/m_i^v) \sin(k_i^v d_i) & \cos(k_i^v d_i) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

если i -й слой является потенциальной ямой для носителей v -й долины, и

$$S_i^v = \begin{bmatrix} \text{csh}(k_i^v d_i) & (m_i^v/k_i^v) \text{sh}(k_i^v d_i) \\ (k_i^v/m_i^v) \text{sh}(k_i^v d_i) & \text{csh}(k_i^v d_i) \end{bmatrix} \quad (4)$$

в случае, когда он является барьером. Здесь m_i^v — объемные эффективные массы в i -м слое v -й долины, а k_i^v — соответствующие проекции волнового вектора объемного материала на направление роста СР (мы интересуемся только случаем нормального падения).

Интерфейсная матрица перехода \mathbf{T}_{wb} также имеет блочное строение:

$$\mathbf{T}_{wb} = \begin{bmatrix} T_{wb}^{(\Gamma_1, \Gamma_1)} & T_{wb}^{(\Gamma_1, X_{1z})} & T_{wb}^{(\Gamma_1, X_{3z})} & O \\ T_{wb}^{(X_{1z}, \Gamma_1)} & T_{wb}^{(X_{1z}, X_{1z})} & T_{wb}^{(X_{1z}, X_{3z})} & O \\ T_{wb}^{(X_{3z}, \Gamma_1)} & T_{wb}^{(X_{3z}, X_{1z})} & T_{wb}^{(X_{3z}, X_{3z})} & O \\ O & O & O & T_{wb}^{(hh, hh)} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где $T_{wb}^{(v, \mu)} = (T_{wb}^{(\mu, v)})^+$ — однозонные интерфейсные матрицы, сшивающие ОФ и ее производную, относящиеся к v -й и μ -й долинам. Квазидиагональный вид (5) обусловлен пренебрежением величиной взаимодействия зоны проводимости и валентной зоны.

Недиагональные блоки $T_{wb}^{(v, \mu)}$ с $v \neq \mu$ описывают смешивание v -й и μ -й долин. На структуру этих матриц накладываются определенные ограничения, связанные с симметрией смешиваемых состояний. Однако, как показывают численные расчеты [28,29], в описываемых гетероструктурах существенными оказываются не все из симметрично-допустимых компонент матриц $T_{wb}^{(v, \mu)}$. Так, из проведенных в приближении сильной связи [29] оценок величины матричных элементов следует, что ОФ всех долин сшиваются непосредственно, а их производные могут содержать „примесь“, пропорциональную ОФ той или иной долины (в нашем случае X_{1z} или X_{3z}), в зависимости от четности M .

В нашем предварительном рассмотрении [10] для получения согласия с расчетом энергий переходов, определенных из пиков низкотемпературной ФЛ и идентифицированных как переходы $\Gamma \rightarrow hh$ и $X \rightarrow hh$ для СР (10/10), а также как переход $\Gamma \rightarrow hh$ в СР (10/5), мы использовали обобщенные однопараметрические диагональные граничные условия (диагональное приближение), которым соответствуют диагональные интерфейсные матрицы [30] вида

$$T_{wb}^{v, v} = \begin{bmatrix} (m_b^v/m_w^v)^\alpha & 0 \\ 0 & (m_w^v/m_b^v)^\alpha \end{bmatrix}, \quad (6)$$

и пренебрегали эффектами Γ - X -смешивания (т.е. полагали $T_{wb}^{v, \mu} = O$ при $v \neq \mu$).

Таблица 2. Значения материальных параметров объемных GaAs и AlAs, используемые при моделировании [26]

Параметр	GaAs	AlAs
$a_0, \text{Å}$	5.65330	5.66139
m_e^Γ/m_0	0.067	0.150
$m_e^{X_1}/m_0$	1.300	1.100
$m_e^{X_2}/m_0$	1.578	1.117
m_e^L/m_0	0.210	0.213
m_{hh}^Γ/m_0	0.450	0.500

Примечание. a_0 — постоянная решетки; m_e^v/m_0 , m_{hh}^v/m_0 — относительные эффективные массы электронов и тяжелых дырок в v -й долине.

Численное моделирование в диагональном приближении [10] проводилось при фиксированном выборе параметров исходных материалов СР (см. табл. 2). Величина разрыва валентных зон, которая, как указывалось выше, является важным параметром при моделировании энергетических состояний СР, выбиралась нами равной $\Delta E_v = 0.53$ эВ (или $r \equiv \Delta E_v/\Delta E_g \approx 35\%$, где ΔE_g — разрыв запрещенных зон), что совпадает со значением, использованным в работе [31], и находится в разумном соответствии с экспериментально определенной величиной $r = (34 \pm 2)\%$ [26]. Это позволило получить величины $\alpha = \alpha^*$, при которых расчетные энергетические промежутки достигают оптимальных значений по отношению к экспериментальным данным. Результаты моделирования в выбранном приближении приведены в табл. 1.

Отметим здесь, что энергетические промежутки, полученные с использованием граничных условий (6) при $\alpha = 0$, оказывались в верном качественном согласии с экспериментом в отношении типа СР, а их величины были несколько занижены, в то время как при $\alpha = -1/2$ качественное соответствие нарушалось и величины энергий переходов оказывались больше соответствующих экспериментальных значений.

Укажем, что входящий в граничные условия (6) параметр α происходит из обобщенного выражения для оператора кинетической энергии в случае пространственно-зависимой эффективной массы

$$\hat{T} = \frac{1}{2} m^\alpha \hat{p} \frac{1}{m^{1+2\alpha}} \hat{p} m^\alpha. \quad (7)$$

Выражение типа (7) было предложено в работе [32] и детально исследовалось в серии работ [32–36]. Таким образом, на сегодняшний день приведенная запись оператора кинетической энергии в приближении эффективной массы для материалов с пространственно-зависимыми параметрами является общепринятой [16]. Однако в литературе встречаются различные данные о значениях α . Так, например, авторы [35] находят, что согласие согласие расчетных энергетических зазоров с экспериментальными значениями достигается при $\alpha = 0$, т.е. $\hat{T} = \hat{p}(1/m)\hat{p}$, в то время как в [36] используется значение $\alpha = -1/2$, $\hat{T} = (1/\sqrt{m})\hat{p}^2(1/\sqrt{m})$. В более

поздних работах [16–19] для α приведены сложные выражения, связывающие величину этого параметра с особенностями профиля потенциала одиночного барьера в гетероструктуре. Однако необходимо отметить, что непосредственное использование упомянутых общетеоретических выражений работы [16] для определения численной величины α затруднительно из-за отсутствия значений входящих в них параметров. Кроме того, поскольку в этой работе получены выражения для величины α в однобарьерной гетероструктуре, они, по-видимому, больше подходят для оценки значений α в СР с не слишком малыми периодами. Кстати можно заметить, что случаям $\alpha = 0$ и $\alpha = -1/2$ в [16–18] соответствует весьма специфическое соотношение между величинами матричных элементов импульса и разрывов зон на гетеропереходе, которое, по-видимому, не может реализоваться в СР. Это служит косвенным подтверждением возможности использования при моделировании промежуточных значений α . Поэтому в наших расчетах эта величина рассматривается как подгоночный параметр, принимающий значения из интервала $(-1/2, 0)$.

Полученные нами в [10] положения энергетических уровней, связанные с Γ - и X_z -состояниями зоны проводимости, а также с Γ -состояниями валентной зоны, проявляют различную степень зависимости от α , что связано со значительным различием эффективной массы. Наиболее чувствительными к изменениям α оказываются состояния, происходящие от Γ -состояния зоны проводимости, что наряду с очень слабой соответствующей зависимостью положения уровней X -электронов и Γ -дырок позволяет использовать при моделировании один, общий для всех рассматриваемых состояний, параметр α .

Сравнение с экспериментальными значениями (табл. 1) показывает, что результаты, полученные в рамках диагонального приближения, являются неожиданно хорошо соответствующими СР с не слишком малыми N и M . Ухудшение согласия расчета с экспериментом при малых толщинах слоев, очевидно, является результатом влияния таких неучтенных в этой модели факторов, как смешивание состояний различных долин и увеличение относительной роли скачка периодического потенциала на гетерогранице, которые должны сильнее проявляться при уменьшении толщины барьеров. Выяснению тенденций в поведении минизонного спектра при учете этих эффектов посвящено дальнейшее изложение.

В первую очередь мы остановимся на определении влияния на минизонный спектр недиагональных элементов однозонных интерфейсных матриц $T_{wb}^{(v,v)}$, наличие которых приводит к возникновению линейной связи между ОФ и ее производной на гетерогранице. Соответствующие граничные условия могут быть получены при рассмотрении уравнения для огибающих с оператором кинетической энергии в форме (7) и содержащего на гетерограницах δ -функциональную добавку к потенциалу с мощностью U_δ . Диагональные матрицы $T_{wb}^{(v,\mu)}$ ($v = \mu$) в этом случае приобретают вид

$$T_{wb}^{(v,v)} = \begin{bmatrix} (m_b^v/m_w^v)^\alpha & 0 \\ (U_\delta/\hbar)[1/(m_w^v)^\alpha + 1/(m_b^v)^\alpha] & (m_w^v/m_b^v)^\alpha \end{bmatrix}. \quad (8)$$

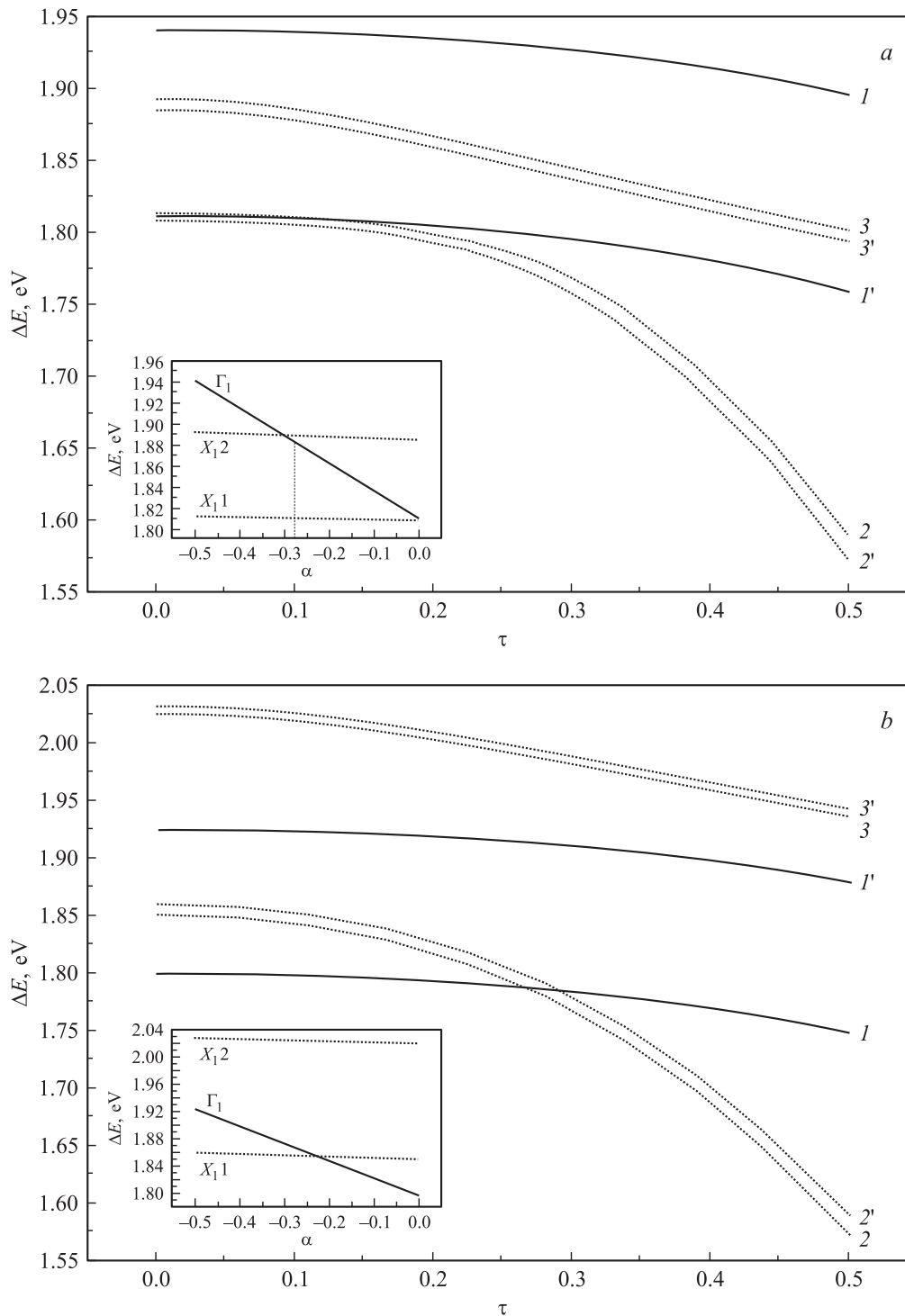


Рис. 2. Зависимости величины энергетических зазоров ΔE от параметра τ при $\alpha = 0$ ($I-3$) и $\alpha = -1/2$ ($I'-3'$) и от α (вставки) для СР (10/10) (а) и (10/5) (б). I, I' — Γ_1 ; $2, 3, 2', 3'$ — X_1 . X_{11} и X_{22} — края 1-й и 2-й минизон, произошедших от X_1 объемного материала.

Причина возникновения упомянутой δ -функциональной добавки кроется в отличии рассеяния блоховской волны на скачке реального периодического потенциала от рассеяния на модельном кусочно-постоянном потенциале [36]. Пропорциональный $\delta(z)$ член в первом приближении корректирует это отличие.

При моделировании энергетических состояний значение α мы полагали фиксированным ($\alpha = 0$ или $\alpha = -1/2$), а параметром рассматриваемой модели выступала величина τ , выражающаяся через U_δ как $\tau = (U_\delta/\hbar)[1/(m_w^v)^\alpha + 1/(m_b^v)^\alpha]$. Удобство такого рассмотрения обусловлено тем, что энергетические состоя-

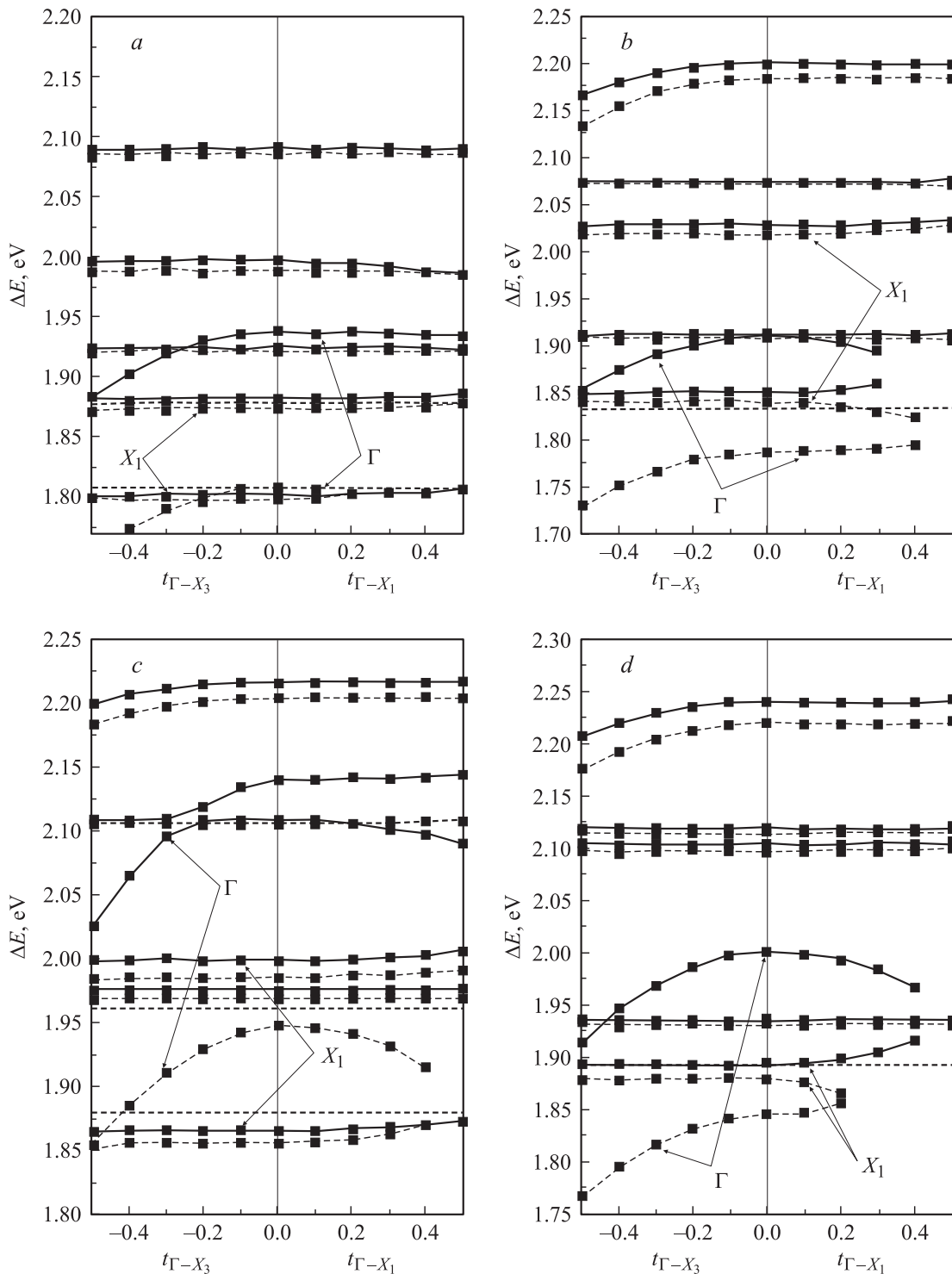


Рис. 3. Зависимости величины энергетических зазоров ΔE от силы Γ - X -смешивания при $\alpha = 0$ (пунктирная линия) и $\alpha = -1/2$ (сплошная) для СР (10/10) (a), (10/5) (b), (7/7) (c) и (8/4) (d).

ния в интервале $\alpha \in (-1/2, 0)$ изменяются практически линейно [10].

Результаты численного расчета зависимостей энергетических зазоров от величины τ для СР (10/10) и (10/5) приведены на рис. 2, из которого видно, что увеличение мощности δ -функционального рассеивателя

приводит в СР к уменьшению значений энергий переходов как $\Gamma \rightarrow hh$, так и $X \rightarrow hh$. Представленная на том же рисунке (см. вставки) зависимость рассматриваемых энергий состояний от параметра α (при $\tau \equiv 0$), с одной стороны, показывает, что, так как при $\alpha = -1/2$ расчетные значения энергетических промежутков оказываются

больше экспериментальных (см. табл. 1), то введение параметра τ приводит к некоторому улучшению согласия расчета с экспериментом. С другой стороны, очевидно, что, так как расчетные энергии переходов, получаемые при $\alpha = 0$, оказываются заниженными, введение величины τ только усиливает их отклонение от экспериментальных значений. Наилучшее приближение расчетных энергетических зазоров к экспериментальным значениям можно получить для промежуточных α и τ , причем τ может быть разным для подгонки энергетических расстояний $\Gamma-hh$ и $X-hh$ при одинаковом α , или, напротив, можно фиксировать τ и изменять α .

Другим фактором, влияющим на структуру минизонного спектра, выступает смешивание состояний Γ - и X_z -долин. Для того чтобы выделить влияние на энергетический спектр этого фактора, в дальнейшем рассмотрим положим $\tau = 0$.

Вопросу о $\Gamma-X$ -смешивании и его зависимости от геометрических характеристик СР посвящено большое число публикаций [16,22,29,37–39], в которых, в частности, дискутируется вопрос о степени влияния $\Gamma-X_1$ - и $\Gamma-X_3$ -смешивания на минизонный спектр. В данной работе для моделирования указанного эффекта мы, как и ранее, пользовались матричным методом.

При этом в расчетах для определения роли каждого из вариантов смешивания $\Gamma-X_1$ и $\Gamma-X_3$ эти эффекты рассматривались нами отдельно. Форма недиагональных блоков $T_{wb}^{(v,\mu)}$ выбиралась в виде

$$T_{wb}^{(\Gamma, X_{1z})} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & t_{\Gamma X_1} \end{bmatrix} \text{ и } T_{wb}^{(\Gamma, X_{3z})} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

при учете $\Gamma-X_1$ -смешивания,

$$T_{wb}^{(\Gamma, X_{1z})} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ и } T_{wb}^{(\Gamma, X_{3z})} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t_{\Gamma X_3} & 0 \end{bmatrix}$$

при учете $\Gamma-X_3$ -смешивания.

Безразмерные параметры $t_{\Gamma X_i}$, $2U_{\Gamma X_i} m_0 a_0^2 / \hbar^2$ ($i = 1, 3$) входят в граничные условия и определяют силу смешивания.

При учете влияния $\Gamma-X$ -смешивания на минизонный спектр существенны два фактора — четность числа M и симметричность-асимметричность рассматриваемой СР. Поэтому при расчетах короткопериодные СР можно разделить на четыре группы в соответствии с указанными признаками. Типичными представителями этих групп, иллюстрирующими основные тенденции в поведении минизонного спектра при учете рассматриваемого эффекта $\Gamma-X$ -смешивания, могут выступать СР с соотношениями (N/M) , равными $(10/10)$, $(10/5)$, $(7/7)$ и $(8/4)$. На рис. 3 приведены зависимости энергетических промежутков между минимумами минизон от параметров $t_{\Gamma X_i}$ при $\alpha = 0$ и $\alpha = -1/2$ для короткопериодных СР. Результаты расчета показывают, что для рассматриваемых СР в случае четного M за счет изменения параметров $\Gamma-X_3$ -смешивания при $\alpha = -1/2$ можно

получить удовлетворительное согласие с экспериментальными значениями с точностью ~ 10 мэВ. Ситуация в случае нечетного числа монослоев M оказывается иной — учет смешивания не приводит к улучшению численного соответствия получаемых энергий их реальным значениям. Здесь было бы уместно заметить, что из теоретического рассмотрения [39] следует, что как $\Gamma-X_1$, так и $\Gamma-X_3$ -смешивание в центре зоны Бриллюэна для идеальной СР с математически резкими гетерограницами при нечетном M отсутствует. Поскольку энергетические промежутки, рассчитываемые в предположении наличия эффекта смешивания состояний в рассматриваемых короткопериодных СР, оказываются в неудовлетворительном согласии с экспериментом, это может служить косвенным подтверждением высокого качества исследуемых СР.

Отметим также тот факт, что при учете совместного влияния как $\Gamma-X$ -смешивания, так и модификации граничных условий за счет изменения параметра α получение хорошего согласия расчетных и экспериментальных данных оказывается возможным для всех типов рассмотренных СР. Действительно, поскольку для всех этих короткопериодных СР имеются свои α^* , которые позволяют получить неплохое соответствие экспериментальных и расчетных данных уже в диагональном приближении, учет небольших поправок, обусловленных $\Gamma-X$ -смешиванием, позволяет улучшить это соответствие. Особенно актуальным это оказывается при необходимости скорректировать положения X -уровней, зависимость которых от α , как это отмечалось выше, слабая.

4. Заключение

Проведенные экспериментальные исследования спектров низкотемпературной ФЛ короткопериодных СР $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ с $(N/M) = (6/3), (8/4), (7/7), (10/10), (10/5), (5/5)$ при высоких степенях возбуждения не противоречат заключению предыдущих работ [9,10] о прямоzonности асимметричных короткопериодных СР $(\text{GaAs})/(\text{AlAs})$. Этот тип рассмотренных асимметричных СР описывается теоретически уже в рамках простейшей модели Кронига–Пенни с использованием параметров исходных материалов. Удовлетворительное количественное согласие расчетных и экспериментальных значений энергетических интервалов между минимумами достигается подходящим выбором параметров объемных материалов и величин скачков зон на гетерогранице в пределах точности их экспериментального определения для каждой СР. Однако в случае рассмотрения серии СР при расчетах энергий переходов более последовательным будет зафиксировать эти параметры и ввести в модель другие физические параметры, естественным образом связанные с граничными условиями.

Проведенное моделирование, параметрами которого выступали граничные условия, показало возможность

получения как верных качественно, так и удовлетворительных количественно расчетных значений энергетических промежутков в исследованных СР. Результаты расчета свидетельствуют о доминирующем влиянии на минизонный спектр короткопериодных СР (GaAs)/(AlAs) диагональных элементов интерфейсной матрицы T_{wb} .

Нами также исследовались тенденции эволюции минизонного спектра при учете лишь эффекта Γ - X -смешивания или присутствия δ -функциональной добавки к потенциалу для фиксированных крайних значений параметра α , модифицирующих диагональную часть граничных условий.

Эти исследования показали, что при $\alpha = 0$ одним лишь учетом Γ - X -смешивания невозможно получить удовлетворительных в количественном отношении значений энергетических интервалов между минизонами в указанных СР. В противоположность описанной ситуации, в случае $\alpha = -1/2$ для СР с четным M такая подгонка возможна.

Полученные численные значения $t_{\Gamma X_1}$ и $t_{\Gamma X_3}$ подтверждают теоретические выводы работы [39] о преобладании механизма Γ - X_3 -смешивания, что служит косвенным свидетельством высокого качества гетерограниц в исследованных СР, поскольку выводы упомянутой работы основаны на модели идеального гетероперехода.

Варьирование значения α в интервале $(-1/2, 0)$ совместно с учетом эффектов смешивания и δ -функциональной добавки к потенциалу на гетерогранице позволяет получить совпадение расчетных и экспериментальных значений энергий переходов с точностью ~ 10 мэВ.

Авторы выражают благодарность А. Зукаускасу и Г. Тамулаитису за помощь в организации измерений спектров низкотемпературной ФЛ при высоких степенях возбуждения.

Список литературы

- [1] J.P. Van der Ziel, A.C. Gossard. *J. Appl. Phys.*, **48**, 3018 (1977).
- [2] T. Isu, Tiang De Sheng, K. Ploog. *Appl. Phys. A*, **43**, 75 (1987).
- [3] E. Finkman, M.D. Struge, M.C. Tamargo. *Appl. Phys. Lett.*, **149** (19), 1299 (1986).
- [4] E. Finkman, M.D. Struge, M.H. Meynadier, R.E. Nanory, M.C. Tamargo, D.M. Hwang, C.C. Chang. *J. Luminesc.*, **39**, 57 (1987).
- [5] K. Takahashi, T. Nayakawa, T. Suyama, M. Kondo, S. Yamamoto, T. Mijkata. *J. Appl. Phys.*, **63** (5), 1729 (1988).
- [6] G. Danan, B. Etienne, F. Mollot, R. Planel, A.M. Tean-Louis, F. Alexandre, B. Tusserand, G.Le Roux, T.X. Marzin, H. Savary, B. Sermage. *Phys. Rev. B*, **35** (12), 6207 (1987).
- [7] V.G. Litovchenko, D.V. Korbutyak, S. Krylyuk, H.T. Grahn, K.H. Ploog. *Phys. Rev. B*, **55** (16), 10 621 (1997).
- [8] Д.В. Корбутяк, С.Г. Крилюк, В.Г. Литовченко, Л. Деверец, Х. Гран, Р. Хей, К. Плог. *УФЖ*, **43** (1), 116 (1998).
- [9] S. Krylyuk, D.V. Korbutyak, V.G. Litovchenko, R. Hey, H.T. Grahn, K.H. Ploog. *Appl. Phys. Lett.*, **74** (18), 2596 (1999).
- [10] A.I. Bercha, D.V. Korbutyak, S. Krylyuk, V.G. Litovchenko, G. Tamulaitis, A. Zukauskas. *Functional Materials*, **6** (3), 545 (1999).
- [11] V.G. Litovchenko, A.I. Bercha, D.V. Korbutyak, V.I. Gavrilenko, K. Ploog. *Thin Sol. Films*, **217**, 62 (1992).
- [12] R. Cigolani, L. Baldassare, M. Ferrara, M. Lugará, K. Ploog. *Phys. Rev. B*, **40**, 6101 (1989).
- [13] R. Cigolani, K. Ploog, G. Scamarcio, L. Tapfer. *Optical and Quant. Electron.*, **22**, 201 (1990).
- [14] Г.Ф. Караваев, Ю.С. Тиходеев. *ФТП*, **25**, 1237 (1991).
- [15] B.A. Foreman. *Phys. Rev. B*, **54**, 1909 (1996).
- [16] Э.Е. Тахтамиров, В.А. Волков. *ЖЭТФ*, **116**, 1843 (1999).
- [17] Э.Е. Тахтамиров, В.А. Волков. *ЖЭТФ*, **117**, 1221 (2000).
- [18] В.А. Волков, Э.Е. Тахтамиров. *УФН*, **167** (10), 1123 (1997).
- [19] E.E. Takhtamirov, V.A. Volkov. *Semicond. Sci. Technol.*, **12**, 77 (1997).
- [20] G. Bastard. *Phys. Rev. B*, **24**, 5693 (1981).
- [21] M. Recio, J.L. Gastano, F. Briohes. *Jap. J. Appl. Phys.*, **27**, 1204 (1988).
- [22] Ю.И. Польшгалов, А.С. Поплавной. *ФТП*, **24**, 328 (1990).
- [23] V.G. Litovchenko, D.V. Korbutyak, A.I. Bercha, Yu.V. Kruchenko, S.G. Krylyuk, H.T. Grahn, R. Hey, K.H. Ploog. *Appl. Phys. Lett.*, **78** (26), 4085 (2001).
- [24] А.И. Берча, В.И. Гавриленко, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *УФЖ*, **35**, 35 (1990).
- [25] В.Л. Альперович, Н.Т. Мошегов, В.В. Попов, А.С. Терехов, В.А. Ткаченко, А.И. Топоров, А.С. Ярошевич. *ФТТ*, **39**, 2085 (1997).
- [26] Sadao Adachi. *Properties of Aluminium Gallium Arsenide* (Gunma University, Japan, 1992).
- [27] Н.Ф. Гашимзаде, Е.Л. Ивченко. *ФТП*, **25**, 323 (1991).
- [28] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11 609 (1989).
- [29] T. Ando, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11 619 (1989).
- [30] E.L. Ivchenko, G. Pikus. *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena* (Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 1995) p. 370.
- [31] Е.Л. Ивченко, А.Ю. Каминский, И.Л. Алайнер. *ЖЭТФ*, **104** (10), 3401 (1993).
- [32] O. von Roos. *Phys. Rev. B*, **27**, 7547 (1983).
- [33] R.A. Morrow, K.R. Brownstein. *Phys. Rev. B*, **30**, 678 (1984).
- [34] R.A. Morrow. *Phys. Rev. B*, **35**, 8074 (1987).
- [35] I. Galbraith, G. Duggan. *Phys. Rev. B*, **38**, 10 057 (1988).
- [36] Q.-G. Zhu, H. Kroemer. *Phys. Rev. B*, **27**, 3519 (1983).
- [37] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. *Phys. Rev. B*, **47**, 13 498 (1993).
- [38] C. Gourdon, D. Martins, P. Lavallard, E.L. Ivchenko. *Acta Phys. Polon. A*, **100** (3), 409 (2001).
- [39] И.Л. Алайнер, Е.Л. Ивченко. *ФТП*, **27**, 594 (1993).

Редактор Л.В. Шаронова

Energy states in short-period symmetrical and asymmetrical superlattices $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$. Boundary conditions dependence

K.E. Glukhov, A.I. Bercha, D.V. Korbutyak, V.G. Litovchenko**

Uzhgorod National University,
88000 Uzhgorod, Ukraine

* Institute of Semiconductors Physics,
Academy of Science of Ukraine,
03028 Kiev, Ukraine

Abstract On the basis of obtained experimental data on low-temperature photoluminescence the numerical modelling of the energy states in symmetrical and asymmetrical short-period superlattices $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ (001) have been carried out. In the framework of the matrix formalism of the envelope function method, in the models with different parameterizations of boundary conditions the tendencies of the miniband spectrum behaviour have been investigated. It has been shown that proper information about transitions types in materials under consideration can be obtained even for diagonal boundary conditions. Γ - X mixing and δ -functional potential at an interface have been taken into account.