

# Туннелирование и токовые характеристики в двуминизонных сверхрешетках

© Ю.Ю. Романова<sup>¶</sup>, М.Л. Орлов, Ю.А. Романов

Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 25 апреля 2012 г. Принята к печати 25 апреля 2012 г.)

В двуминизонном приближении исследовано туннелирование электрона в полупроводниковых сверхрешетках с несимметричными элементарными ячейками. Показано, что в слабых электрических полях в условиях „антикроссинга“ ванье-штарковских лестниц вероятность межминизонного туннелирования на одном периоде сверхрешетки не зависит от начального квазиимпульса и может принимать минимальные значения. В тех же полях значения тока — максимальны. Предсказаны зависимости вероятности межминизонного туннелирования и тока от направления поля. Выявлена роль диагональных элементов оператора координаты.

## 1. Введение

В сверхрешетках (СР) с относительно узкими разрешенными и запрещенными энергетическими мини-зонами туннелирование электрона не мало даже в сравнительно слабых электрических полях ( $10^2 - 10^4$  В/см) и, как правило, происходит в значительной области квазиимпульсного пространства, а не только в окрестности точки максимальной близости мини-зон. Это приводит к существенной немонотонной зависимости вероятности туннелирования  $R^2$  от начального и конечного значений квазиимпульса электрона и к осцилляторной зависимости вероятности его межминизонного туннелирования от поля и времени при однократном прохождении им мини-зоны Бриллюэна, что было замечено, например, в [1–3], однако до конца не было изучено. Аналогичные осцилляции возникают и в ландау-зинеровских переходах [1,4]. Немонотонная зависимость вероятности туннелирования от начального и конечного значений квазиимпульса существует и для межподзонного туннелирования дырок в однородных полупроводниках с вырожденной валентной зоной типа Ge и GaAs [5].

Неэкспоненциальная осциллирующая с полем поправка к зинеровской формуле туннелирования впервые была найдена в [3]. Авторы использовали модельный гамильтониан с постоянным (независящим от квазиимпульса электрона) коэффициентом связи между мини-зонами (недиагональным матричным элементом координаты) и синусоидальные законы дисперсии мини-зон. Поэтому полученные в [3] результаты даже качественно справедливы лишь для узкого класса СР. В [1,2] приведены результаты численного моделирования вероятности межминизонного туннелирования для двух СР с конкретными параметрами, обнаружены осцилляции вероятности туннелирования от поля. Механизмы их возникновения исследованы в [6,7]. В настоящей работе мы изучим влияние величины начального квазиимпульса на вероятность туннелирования.

Ранее [8,9] мы аналитически показали, что сверхрешетки со сложной элементарной ячейкой и негармоническим законом дисперсии наиболее перспективны для создания источников терагерцового излучения на блоховских осцилляциях. При этом даже в отсутствие рассеяния на оптических фононах в СР с параболическим и сверхпараболическим законом дисперсии удастся разнести области низкочастотной доменной и высокочастотной неустойчивостей. Такой закон дисперсии может быть сформирован, например, в нижней мини-зоне системы, содержащей несколько близкорасположенных мини-зон ( $\varepsilon_g \leq 0.02$  эВ), что реализуется в СР со сложной элементарной ячейкой [6,10]. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) двуминизонных сверхрешеток с квазигармоническим законом дисперсии в  $\tau$ -приближении исследовались, например, в [11,12]. Здесь же мы рассмотрим конкретные СР с законом дисперсии, близким к параболическому, и учтем влияние рассеяния на оптических фононах на вольт-амперные характеристики.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 описаны характерные особенности рассматриваемых сверхрешеток. В разд. 3 приведены основные уравнения, позволяющие описать туннелирование и ванье-штарковские уровни в различных СР. В разд. 4 анализируются осцилляции вероятности туннелирования от времени (волнового вектора) и статического поля для различных начальных значений квазиволнового вектора. Разд. 5 посвящен анализу статических вольт-амперных характеристик СР с негармоническим законом дисперсии. В разд. 6 суммируется роль диагональных матричных элементов координаты в формировании ванье-штарковских лестниц, межминизонного туннелирования и ВАХ. В Заключении подведены основные результаты работы.

## 2. Моделируемые объекты

Мы рассмотрели СР двух типов, составленные из слоев  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Обе СР имеют сложную асимметричную элементарную ячейку, состоящую из двух ям и двух барьеров, их параметры приведены в таблице, модули

<sup>¶</sup> E-mail: jul@ipm.sci-nnov.ru

Параметры рассматриваемых СР

СР	Размеры слоев СР, $d_i/d_{ml}$					Доля алюминия в слоях СР $Al_{x_i}Ga_{1-x_i}As$				$\varepsilon_g$ , мэВ	$\varepsilon_{21}$ , мэВ	$\Delta_1$ , мэВ	$\Delta_2$ , мэВ	$\frac{x_{22}-x_{11}}{d}$
	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d$ , Å	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$					
C	9	8	11	7	99.5	0	0.35	0.05	0.35	9.73	69.7	36.03	67.52	-0.78
D	16	4	18	3	116.03	0	1	0.05	1	18.69	32.27	10.06	14.87	-0.664

матричных элементов координаты — на рис. 1. Ширина монослоя в GaAs  $d_{ml} = 2.83 \text{ \AA}$ . СР отличаются друг от друга: соотношением между ширинами разрешенных ( $\Delta_{1,2}$ ) и запрещенной ( $\varepsilon_g$ ) мини-зон; соотношением между ширинами разрешенных мини-зон и энергией оптического фонона  $\hbar\omega_{op} = 0.036 \text{ эВ}$ . СР C — это СР с широкими сильно связанными мини-зонами:  $\varepsilon_g \ll \Delta_{1,2}$ , туннелирование в областях сближения мини-зон преобладает (рис. 1), возможно внутриминизонное испускание оптических фононов ( $\Delta_{1,2} \geq \hbar\omega_{op}$ ); D — СР со слабо связанными узкими разрешенными мини-зонами:  $\varepsilon_g > \Delta_{1,2}$ , электрон с малой вероятностью туннелирует по всей мини-зоне Бриллюэна. Испускание оптического фонона сопровождается туннелированием в нижнюю мини-зону ( $\Delta_{1,2} < \hbar\omega_{op}$ ).

### 3. Основные соотношения

Для исследования особенностей туннелирования в СР с несимметричной элементарной ячейкой воспользуемся результатами работы [7]. Вероятность туннелирования  $R^2$  и ванье-штарковские уровни электрона определялись из решения уравнения Шредингера в квазиимпульсном представлении

$$\left[ \varepsilon_n(k, E) - ieE \frac{\partial}{\partial k} \right] \Psi_n(k, t) - eE \sum_{m \neq n} x_{nm}(k) \Psi_m(k, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(k, t), \quad (1)$$

где  $\Psi_n(k, t)$  — компонента волновой функции в  $n$ -й мини-зоне,  $E$  — напряженность электрического поля. Взаимодействие между мини-зонами учитывалось с помощью оператора координаты  $\mathbf{r} = i\delta_{mn} \frac{\partial}{\partial k} + \mathbf{x}$ , компоненты которого равны

$$x_{mn}(k) = x_{nm}^*(k) = \frac{2\pi}{d} i \int_0^d u_{mk}^*(x) \frac{\partial u_{nk}(x)}{\partial k} dx, \quad (2)$$

$u_{mk}(x)$  — периодическая в координатном пространстве амплитуда блоховской функции, нормированная условием  $\frac{2\pi}{d} \int_0^d u_{nk}^*(x) u_{mk}(x) dx = \delta_{nm}$ ,  $\delta_{nm}$  — символ Кронекера,  $k$  — квазиволновой вектор электрона,  $d$  — период СР.

$$\varepsilon_n(k, E) = \varepsilon_n(k) + eE(x_0 - x_{nm}(k)) \quad (3)$$

— перенормированная энергия электрона. Это название носит условный характер, так как матричные элементы

$x_{nm}(k)$  определены неоднозначно. Во многих литературных источниках матричный элемент  $x_{nm}(k)$  опускается. В общем случае это недопустимо. В несимметричных СР наличие диагональных матричных элементов приводит к асимметрии их электрических характеристик, в симметричных их можно убрать с помощью унитарного преобразования, но лишь при одновременном изменении недиагональных элементов  $x_{nm}(k)$ . В естественных кристаллах, в силу малости их периода, такое преобразование приводит к небольшим поправкам, а в СР оно необходимо. Представим  $\Psi_n(k, t)$  в виде

$$\psi_n(k, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[ \varepsilon t + \frac{d}{\Omega_c} \int^k [\varepsilon_n(k, E) - \varepsilon] dk \right] \right\} C_n(k) \quad (4)$$

с условием периодичности  $\Psi_n(k + K_0, t) = \Psi_n(k, t)$ ,  $K_0 = 2\pi/d$ ,  $\Omega_c = eEd/\hbar$  — частота Ванье-Штарка (или блоховская). Тогда система уравнений для  $C_n$  имеет вид

$$\frac{dC_n(k)}{dk} - i \sum_{m \neq n} \exp \left\{ i \frac{d}{\hbar\Omega_c} \int_{k_i}^k [\varepsilon_n(k, E) - \varepsilon_m(k, E)] dk \right\} \times x_{nm}(k) C_m(k) = 0 \quad (5)$$

с начальными условиями  $C_1(k_i) = \delta_{1n}$ ,  $\hbar k_{i,f}$  — начальный и конечный квазиимпульс электрона. Эта система уравнений позволяет определить вероятно-

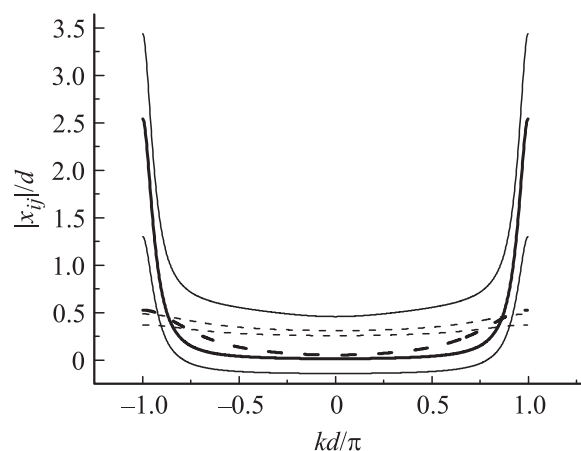


Рис. 1. Зависимость модулей матричных элементов координаты  $x_{ij}$  от квазиволнового вектора. Сплошные линии — СР C, штриховые — СР D. Тонкие кривые — диагональные, толстые — недиагональные компоненты.

сти туннелирования электрона в верхнюю мини-зону  $R^2(k_i, k_f, E) = |C_2(k_f)|^2$ , а также положение ванье-штарковских уровней. В стационарном случае и в пренебрежении межминизонным туннелированием ( $C_n(k) = \text{const}$ ) спектр энергий электрона состоит из двух независимых одноминизонных ванье-штарковских лестниц:

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_v^{(1,2)} = \varepsilon_0^{(1,2)} + v\hbar\Omega_c, \quad v = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (6)$$

$$\varepsilon_0^{(n)} = eE(x_0 - \bar{x}_{nm}) + \bar{\varepsilon}_n, \quad n = 1, 2,$$

сдвинутых относительно друг друга на величину

$$\varepsilon_0^{(2)} - \varepsilon_0^{(1)} = \bar{\Omega}_{21}(E) \equiv \bar{\varepsilon}_{21} - eE(\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11}),$$

$$\bar{\varepsilon}_{21} = \frac{1}{K_0} \int_0^{K_0} [\varepsilon_2(k) - \varepsilon_1(k)] dk = \bar{\varepsilon}_2 - \bar{\varepsilon}_1. \quad (7)$$

В полях  $E_n$ , определяемых эквидистантными значениями обратной величины,

$$|E_n/\bar{\varepsilon}_{21}|^{-1} = e[nd + (\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11}) \text{sign}(E_n)], \quad n=0, 1, 2, \dots, \quad (8)$$

уровни различных одноминизонных ванье-штарковских лестниц попарно пересекаются. При этом величина  $[nd + (\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11}) \text{sign}(E_n)]$  есть эффективное расстояние между „центрами“ одноминизонных волновых функций ванье-штарковских состояний, находящихся в резонансе друг с другом.

Учтем межминизонное туннелирование. Тогда получим единую энергетическую лестницу уровней Ванье-Штарка с двойными ступеньками:

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_n^{(1,2)} = \frac{\bar{\varepsilon}_1 + \bar{\varepsilon}_2 - eE(\bar{x}_{11} + \bar{x}_{22})}{2} + \hbar\Omega_c \left( n \mp \frac{\phi(E)}{2\pi} \right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

Здесь

$$\phi(E) = \arccos \left[ D(k_i, k_i + K_0, E) \times \cos \left( \varphi(k_i, k_i + K_0, E) + \pi \frac{\bar{\Omega}_{21}(E)}{\hbar\Omega_c} \right) \right], \quad 0 < \phi(E) < \pi. \quad (10)$$

$D$  и  $\varphi$  определены так, что  $C_1(k_i, k_f, E) = D(k_i, k_f, E) \times \exp[i\varphi(k_i, k_f, E)]$ , где  $D^2(k_i, k_i + K_0, E) = 1 - R^2(k_i, k_i + K_0, E)$  — вероятность электрона остаться в первой мини-зоне при прохождении им периода обратной СР. В результате взаимодействия уровни сместятся, и координаты „антипересечений“ (или, как их еще называют, „антикроссингов“) будут несколько отличаться от выражения (8). Величина расщепления в этих точках равна

$$\delta\varepsilon(E) = (\hbar\Omega_c/\pi) \min(\phi(E), \pi - \phi(E)) < \hbar\Omega_c/2. \quad (11)$$

При слабом межминизонном туннелировании ( $R(E) \ll 1$ ,  $|\varphi| \ll 1$ ), например, в кроссинге ( $\bar{\Omega}_{21}(E) = n\hbar\Omega_c$ ) имеем  $\delta\varepsilon(E) \approx (\hbar\Omega_c/\pi) \sqrt{R^2(E) + \varphi^2(E)}$ .

#### 4. Механизмы временных и полевых осцилляций вероятности туннелирования в двуминизонной сверхрешетке

На рис. 2, 3 приведены полученные из решения системы уравнений (5) зависимости функций  $R^2(k_i, k_i + K_0, E)$  для разных  $k_i = 0$  (а) и ванье-штарковских лестниц (б) от электрического поля для СР С и D соответственно. Для сравнения показаны вольт-амперные характеристики (жирная кривая в верхней половине рисунка). Пунктирными линиями отмечены положения нескольких „антипересечений“ ванье-штарковских лестниц. Видно, что вероятность туннелирования  $R^2(E)$  (так же, как и коэффициент прохождения  $D^2(E)$ ) сильно зависит от начального значения квазиимпульса  $\hbar k_i$ . На это указывалось, в частности, в [1]. Зависит от него и фаза  $\varphi(E)$ , которая в [1] не учитывалась. В результате фаза  $\varphi(E)$  (10), которая определяет ванье-штарковские уровни (9) и их расщепление (11), как и должно быть, от начального значения квазиимпульса не зависит. В полях, соответствующих „антипересечениям“ ванье-

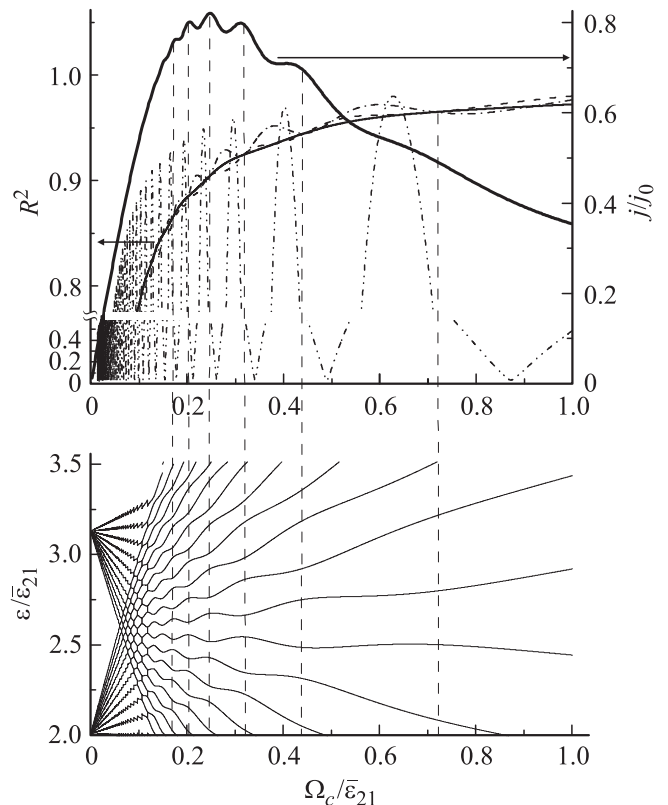


Рис. 2. СР С: а — зависимость вероятности туннелирования электрона во вторую мини-зону от величины поля для различных начальных значений квазиимпульса  $k_0$ .  $k_0d = 0$  — сплошная кривая,  $-\pi/2$  — штриховая,  $-2/3\pi$  — штрихпунктирная,  $-\pi$  — штрих-две точки; б — двуминизонные лестницы Ванье-Штарка; на (а) толстой линией изображена вольт-амперная характеристика СР.

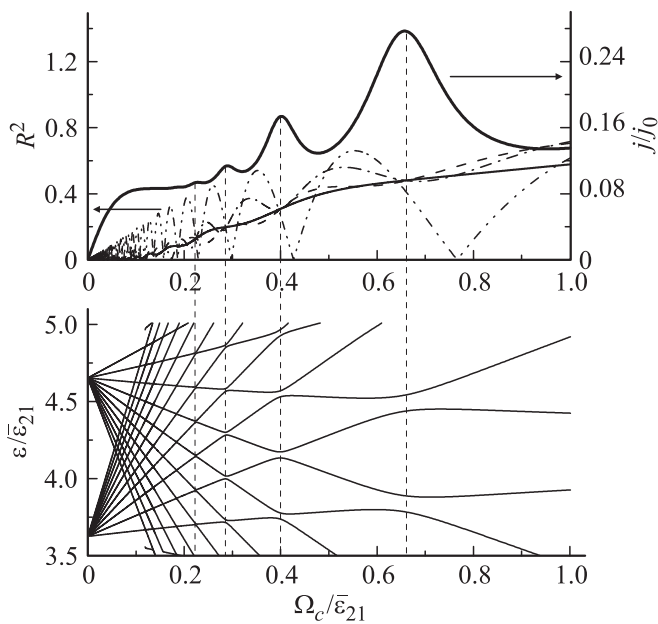


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но для CP D.

штарковских уровней, не зависят от  $\hbar k_i$  (вплоть до величин порядка ширины запрещенной мини-зоны CP) и вероятности туннелирования на периоде обратной решетки  $K_0$ , образуя узлы на зависимости  $R^2(E)$  (рис. 2, 3, a). В больших полях ( $\Omega_c > \epsilon_g$ ) эта особенность нарушается для  $k_i d = \pm\pi \pm \delta$ ,  $\delta \ll 1$ . Поясним это далее.

В первом порядке теории возмущений (т.е.  $C_1(k) \approx 1$ ) вероятность туннелирования определяется формулой [7,13]

$$R^2(k_i, k_f, E) \approx \left| \int_{k_i}^{k_f} \exp \left\{ i \frac{d}{\Omega_c} \int_{k_i}^k \Omega_{21}(k, E) dk \right\} x_{21}(k) dk \right|^2, \tag{12}$$

$\hbar\Omega_{21}(k, E) = \epsilon_2(k, E) - \epsilon_1(k, E)$ . Интегрируя (12) по частям, получим

$$R^2(k_i, k_f, E) = \left( \frac{\Omega_c}{d} \right)^2 \left| \frac{x_{21}(k_f)}{\Omega_{21}(k_f, E)} \times \exp \left( i \frac{d}{\Omega_c} \int_{k_i}^{k_f} \Omega_{21}(k', E) dk' \right) - \frac{x_{21}(k_i)}{\Omega_{21}(k_i, E)} - \int_{k_i}^{k_f} \frac{d}{dk} \left[ \frac{x_{21}(k)}{\Omega_{21}(k, E)} \right] \exp \left( i \frac{d}{\Omega_c} \int_{k_i}^k \Omega_{21}(k', E) dk' \right) \right|^2 dk. \tag{13}$$

Первое слагаемое описывает быстрые осцилляции вероятности туннелирования электрона при прохождении им мини-зоны, последнее — зинеровское туннелирование в точках сближения ванье-штарковских уровней. Разложение последнего в ряд Фурье даже при гармоническом

законе дисперсии приводит к довольно сложным выражениям, описывающим колебания электронов на частотах  $\nu\Omega_c \pm \bar{\epsilon}_{21}$  и их субгармониках. Если запрещенная мини-зона — широкая, матричные элементы — плавно меняющиеся функции  $k$ , а поля невелики,  $\bar{\Omega}_{21}(E) \gg \Omega_c$ , то последним членом можно пренебречь. Если также положить для простоты  $x_{21}(k) = \text{const}$ , то получим

$$R^2(k_i, k_f, E) \approx \left( \frac{\Omega_c |x_{21}|}{d} \right)^2 \left( \frac{1}{\Omega_{21}(k_f, E)^2} + \frac{1}{\Omega_{21}(k_i, E)^2} - \frac{2}{\Omega_{21}(k_f, E)\Omega_{21}(k_i, E)} \cos \left[ \frac{d}{\Omega_c} \int_{k_i}^{k_f} \Omega_{21}(k', E) dk' \right] \right). \tag{14}$$

Таким образом, если ширина запрещенной мини-зоны мала по сравнению с разрешенными, так что вдали от точки сближения мини-зон  $\Omega_{21}(k_1) \gg \Delta_g$ , то в основной области мини-зоны Бриллюэна главным является первое слагаемое, а осциллирующее слагаемое относительно мало. Если же разрешенные мини-зоны узкие по сравнению с запрещенной, так что  $\hbar\Omega_{21}(k, E) \approx \bar{\epsilon}_{21} = \text{const}$ , то (для определенности  $k_i = 0$ )

$$R^2(0, k_f, E) \approx 4 \left( \frac{\hbar\Omega_c}{\Omega_{21}(E)} \right)^2 \frac{|\bar{x}_{21}|^2}{d^2} \sin^2 \left( \frac{\bar{\Omega}_{21}(E)}{2\hbar\Omega_c} k(t)d \right) \times \sin^2 \left( \frac{\bar{\Omega}_{21}(E)}{2\hbar} t \right). \tag{15}$$

В последнем соотношении использовано равенство  $k = eEt$ . Таким образом, двигаясь по мини-зоне Бриллюэна, электрон осциллирует с „межминизонной“ частотой  $\omega = \bar{\Omega}_{21}/\hbar$ , зависящей от величины и направления поля. При увеличении расстояния между мини-зонами частота осцилляций растет, а их амплитуда падает. Учет зависимости  $\Omega_{21}$  от  $k$  приводит к изменению частоты осцилляции электрона при движении его внутри мини-зоны. Частота меньше в областях максимального сближения мини-зон (точках  $\pm\pi/d$  в нашем случае). Пренебрежение последним членом в (13) даже в отсутствие предположений о виде  $x_{ij}$  позволяет получить для туннелирования на периоде

$$R^2(k_i, k_i + K_0, E) = 4 \left| \frac{\Omega_c}{\Omega_{21}(k_i, E)} \frac{x_{21}(k_i)}{d} \right|^2 \times \sin^2 \left( \pi \frac{\bar{\Omega}_{21}(E)}{\hbar\Omega_c} \right). \tag{16}$$

Это выражение качественно верно учитывает зависимость  $R^2$  от направления поля и неоднородность матричных элементов  $x_{ij}$  по  $k$ , для CP с узкими разрешенными мини-зонами и (или) в слабых полях — и количественно. Видно, что диагональные матричные элементы координаты влияют на „частоту“ колебаний по напряжению поля (и определяют положения „антикроссингов“), а

недиагональные элементы и значение начального квазиимпульса  $k_i$  определяют амплитуду этих колебаний.

Итак, согласно (15), (16), хотя частота межминизонных переходов электрона изменяется при прохождении им периода обратной СР, в полях, соответствующих „антикроссингам“ (8), электрон за период обратной СР совершает целое число колебаний (с точностью до фазы  $\varphi$ , которая в слабых полях  $\varphi < \pi\delta\varepsilon/\hbar\Omega_c \ll 1$ ). Поэтому вероятность туннелирования и не зависит от начального квазиимпульса (рис. 2, 3). Поскольку формула (16) не учитывает медленных ванье-зинеровских осцилляций (последнее слагаемое в (13)), вероятность обращается в 0. Это справедливо, пока поля  $\hbar\Omega_c < \varepsilon_g$ . Для СР  $D$  это примерно  $6 \cdot 10^3$  В/см, для СР  $C$  — меньше. В больших полях  $R^2$  конечна.

Вблизи „антикроссинга“ СР ведет себя подобно двухуровневой системе [13]. Действительно, вероятность того, что если в начальный момент времени  $t = 0$  система находилась в невозмущенном состоянии с энергией  $\varepsilon_1$ , то в дальнейший момент времени  $t$  она будет находиться в состоянии с энергией  $\varepsilon_2$ , есть

$$W_{12}(t) = \frac{4|V_{12}|^2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2} \sin^2 \left[ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2\hbar} t \right] \propto \sin^2 \left[ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2\hbar} t \right], \quad (17)$$

где  $V_{i,j}$  — матричные элементы оператора возмущения  $\hat{V}$  по невозмущенным состояниям двухуровневой системы. Мы видим, что вероятность нахождения системы на втором невозмущенном уровне колеблется с частотой  $\omega_{12} = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$ , определяемой разностью энергий возмущенных состояний. В симметричных системах ( $V_{11} = V_{22}$ ) с вырожденным уровнем ( $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ) амплитуда осцилляций равна единице, в несимметричных — меньше единицы. Во всех случаях через период  $T = 2\pi/\omega_{12}$  система полностью возвращается в исходное состояние. Это хорошо известный результат. В случае СР  $\hat{V} = eEx$ ,  $k = eEt$ ,  $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2(t) - \varepsilon_1(t)$ , поэтому формулы (15) и (17) эквивалентны.

Формулу (17) можно использовать и для переходов между ванье-штарковскими состояниями. Например, вблизи кроссинга одноминизонных ванье-штарковских уровней („антикроссинга“ двуминизонных). Учитывая только переходы между двумя соответствующими резонансными состояниями, из (17) получим

$$R^2(E, t) = [1 - (\delta\varepsilon_0/\delta\varepsilon)^2] \sin^2 \left( \frac{\delta\varepsilon}{\hbar} t \right), \quad (18)$$

где  $\delta\varepsilon_0$  ( $\delta\varepsilon$ ) — расстояние между ближайшими одноминизонными (двуминизонными) ванье-штарковскими уровнями вблизи пересечений („антипересечений“). Таким образом, электрон совершает относительно медленные осцилляции с частотой  $\delta\varepsilon/\hbar$ . Эти осцилляции мы называем ванье-зинеровскими. (В литературе их часто называют осцилляциями Раби.) В „кроссинге“ (резонансе)  $\delta\varepsilon_0 = 0$ , поэтому амплитуда осцилляций (18) равна единице, вдали от „антикроссинга“ она мала. Переходы между

остальными (нерезонансными) состояниями, слагаемые с существенно более высокими частотами  $\sim n\Omega_c \pm \delta\varepsilon/\hbar$ , „накладываются“ на колебания (18) и частично с ними интерферируют. Вклад нерезонансных переходов в вероятность туннелирования при однократном прохождении электроном мини-зоны Бриллюэна есть

$$R^2(0, K_0, E) \approx Q \sin^2 \left( 2\pi \frac{\delta\varepsilon}{\hbar\Omega_c} \right). \quad (19)$$

Амплитуда  $Q$  не может быть определена из (18), так как для ее расчета двухуровневое приближение не работает. Конечно, вблизи резонанса  $Q \ll 1$ , так как амплитуда резонансного слагаемого уже порядка единицы.

Существенно, что в резонансе из-за неравенства  $\delta\varepsilon \ll \hbar\Omega_c$  вероятности (18), (19) при однократном прохождении электроном зоны Бриллюэна (одного периода блоховских осцилляций) малы, но отличны от нуля. При отступлении от резонанса из-за изменения поля  $\delta\varepsilon$  быстро растет, двухуровневое приближение становится неприменимым, и следует пользоваться формулой (16), которая указывает на рост вероятности  $R^2(0, K_0, E)$ . При приближении к следующему резонансу картина повторяется, что и приводит к осцилляторной зависимости вероятности  $R^2(0, K_0, E)$  от величины поля.

В сильных полях с  $\hbar\Omega_c/\bar{\Delta}_{21}(E) > 1$  электрон сильно локализуется в пространстве и поэтому совершает межминизонные переходы только в пределах одной элементарной ячейки. При этом осцилляции вероятности туннелирования  $R^2(k_0, k_0 + K_0, E)$  в зависимости от поля исчезают (рис. 2, 3).

Таким образом, вероятности и фазы ( $\varphi$ ) внутриминизонного прохождения и туннелирования при прохождении электроном периода обратной СР сильно зависят от начального значения его квазиимпульса, однако в точках „антипересечений“ ванье-штарковских лестниц они совпадают, пока  $R^2 \ll 1$ . Это совпадение связано с тем, что в этих полях над всеми процессами преобладает туннелирование между ближайшими ванье-штарковскими уровнями, а переходы внутри одной ячейки происходят с частотой, кратной блоховской. Этот результат был приведен на рисунках работы [2] для СР с простой симметричной элементарной ячейкой и значений  $k_0 = 0$ ,  $\pi/d$ , но там не анализировался. „Отщепление“ зависимостей с  $k_0d \approx \pm\pi$  связано с повышенной интенсивностью межминизонного туннелирования вблизи максимального сближения энергетических мини-зон, которые электрон с  $k_0d \approx \pm\pi$  проходит на периоде обратной СР дважды. Как мы уже отмечали в [7], в СР с узкими разрешенными мини-зонами ( $D$ ) в слабых полях „антипересечениям“ соответствуют нули вероятности туннелирования (вместо максимумов, как естественно было бы ожидать). И это связано не с отсутствием туннелирования, а, наоборот, с активным туннелированием, происходящим во всей мини-зоне Бриллюэна, а не только в точках максимального сближения энергетических мини-зон.

### 5. Вольт-амперные характеристики в условиях межминизонного туннелирования

Расчет токов проводился с помощью уравнений для матрицы плотности  $\rho(k)$  в  $\tau$ -приближении [11]:

$$ieE \frac{\partial \rho_{nm}}{\partial k} - eE(-1)^n [x_{12}\rho_{12}^* - x_{12}^*\rho_{12}] = \frac{\rho_{nm} - \rho_{nm}^0}{\tau_{nm}},$$

$$n = 1, 2, \tag{20}$$

$$ieE \frac{\partial \rho_{12}}{\partial k} + \rho_{12} [\Delta \varepsilon_{21}(k) + eE \Delta x_{12}] + eE x_{12} \Delta \rho_{21} = \frac{\rho_{12}}{\tau_{12}},$$

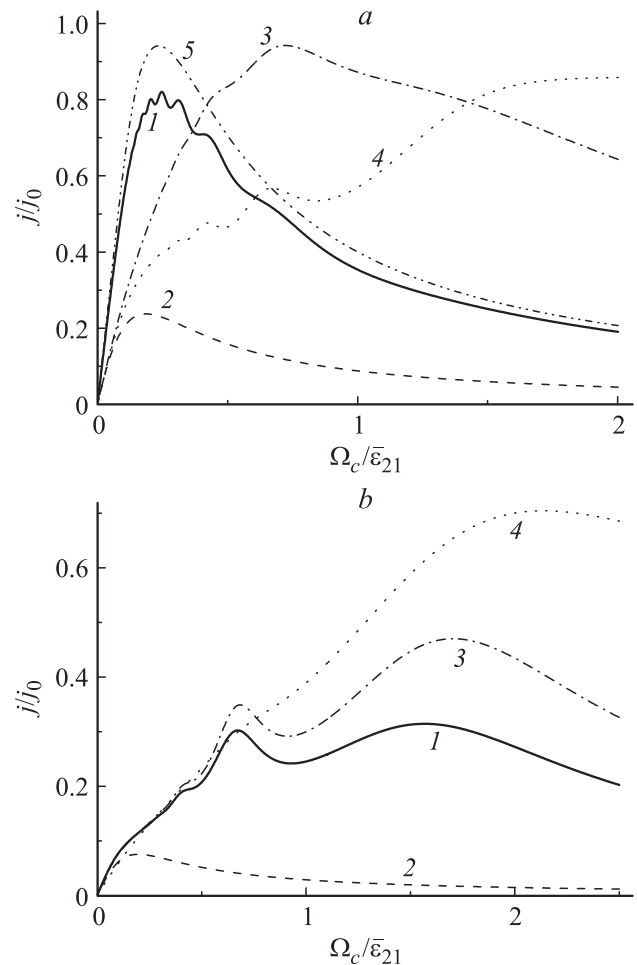
$$\Delta x_{12} = x_{11}(k) - x_{22}(k), \tag{21}$$

$$j/j_0 = Sp\{\hat{v}\hat{\rho}\}, \quad \hat{v} = \dot{r},$$

$$v_{mn} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_m}{\partial k} \delta_{mn} + i(\Delta \varepsilon_{21}(k))x_{mn}(k). \tag{22}$$

Рассеяние электронов из верхней мини-зоны в нижнюю с испусканием оптических фононов учитывалось при достижении ими энергии оптического фонона относительно дна первой мини-зоны дополнительным членом в интеграле столкновений (правая часть уравнений (20) с характерным временем  $\tau_{op}$ ):  $\partial \rho_{nm} / \partial t|_{op} = -(-1)^n \theta(\varepsilon_2(k) - \varepsilon_1(0) - \hbar \omega_{op}) \rho_{22}(k) / \tau_{op}$ . Для внутриминизонных переходов (существенных в СР С), аналогично тому, как это делается в работах по „стриммингу“ [14,15], полагалось, что электрон, достигший энергии оптического фонона, испускает его и переходит в область вблизи минимума соответствующей мини-зоны [8]. Характерное время —  $\tau_{op}$ . На рис. 4, *a, b* приведены рассчитанные таким образом вольт-амперные характеристики:  $\bar{\varepsilon}_{21}\tau = 5$ ,  $\tau_{mn} = \tau_{nn} = \tau$ . Прослеживается характер изменения тока и областей ОДП при переходе от одноминизонной к двуминизонной модели и при изменении интенсивности рассеяния на оптических фононах.

ВАХ представляют собой совокупность максимумов и минимумов тока, более ярко выраженных для СР с широкой запрещенной мини-зоной (рис. 4, *b*). Первый по напряжению пик тока при  $\Omega_c \tau \approx 1$  связан с внутризонными процессами рассеяния и брэгговских отражений. В СР с сильно связанными мини-зонами он может существенно размываться межминизонными переходами и даже исчезать, что затрудняет определение характерного времени  $\tau$  по положению первого пика экспериментальных ВАХ для таких СР и может давать заниженное значение. Следующие максимумы тока определяются межминизонным рассеянием и соответствуют „антикроссингам“ ванье-штарковских лестниц (в противоположность вероятности туннелирования, которая в зависимости от типа СР принимает малые, иногда даже нулевые значения). На рис. 2, 3 „антикроссинги“ показаны пунктиром. Формирование максимумов тока в этих полях связано с тем, что 1) столкновения нарушают



**Рис. 4.** ВАХ СР С (*a*) и D (*b*). 1, 3, 4 — двуминизонное приближение, 2 — одноминизонное приближение; 1, 2 — без учета рассеяния на оптических фононах; 3 —  $\tau_{op}/\tau = 1$ ; 4 —  $\tau_{op}/\tau = 0.1$ . *a*: ВАХ СР с модельным параболическим законом дисперсии [16].

периодичность высокочастотных межминизонных колебаний электронов, высокая же вероятность межминизонного туннелирования остается, 2) движение электронов не ограничено одним периодом обратной СР. Поэтому на ВАХ мы и наблюдаем всплески тока, несмотря на то что средняя вероятность туннелирования отдельного электрона за период обратной СР близка к 0.

Учет второй мини-зоны в обеих СР увеличивает ток и сдвигает область статической ОДП к большим полям. Как и в вероятностях туннелирования, для СР с сильно связанными мини-зонами (С) пики тока менее выражены. Сильное рассеяние на оптических фононах препятствует отражению электронов от границ мини-зон, и ВАХ выходит на насыщение. В СР С, в которой  $\Delta_1 \approx \hbar \omega_{op}$ , при интенсивном испускании оптических фононов ярче проявляются пики межминизонного туннелирования, т.е. появляются дополнительные области положительной и отрицательной статических дифференциальных проводимостей.

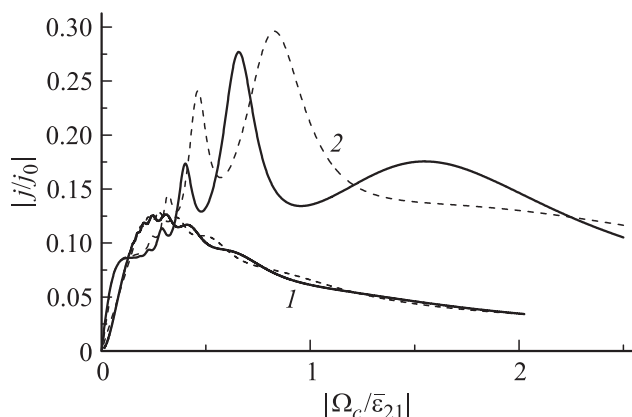


Рис. 5. ВАХ СР С — 1 и СР D — 2 для разных направлений поля.  $E_c > 0$  — сплошные кривые,  $E_c < 0$  — штриховые.

Смена направления поля ведет к изменению поведения ванье-штарковских лестниц в СР с несимметричной элементарной ячейкой и, как следствие, ВАХ перестает быть нечетной функцией поля (рис. 5).

Оптические фононы „загоняют“ электроны в нижнюю мини-зону, в которой из-за близости следующей мини-зоны закон дисперсии электронов сильно отличается от гармонического. Для СР С он наиболее близок к параболическому, для сравнения на рис. 4, а показана ВАХ СР с модельным параболическим законом дисперсии (кривая 5, рассчитана по формулам [8,16]). Прослеживается качественное соответствие кривых 1 и 5, а по напряжению — и количественное. В такой ситуации, как предсказывалось в [8,9], можно ожидать высокочастотной генерации на четных гармониках блоховской частоты при положительной статической проводимости. Для дальнейшего исследования перспективности использования таких СР для создания высокочастотных генераторов необходим расчет динамических характеристик реальных СР с учетом различных механизмов рассеяния.

## 6. О роли диагональных матричных элементов оператора координаты

Подводя итоги, скажем несколько слов о диагональных матричных элементах оператора координаты, неучет которых может привести к существенным ошибкам при моделировании сверхрешеток со сложной элементарной ячейкой. Как уже отмечалось, диагональные матричные элементы координаты определены неоднозначно, что связано с выбором начала системы отсчета (для  $x_{ij}$  на рис. 1 начало отсчета выбиралось на правой границе первого барьера). Однако для физически измеряемых величин („антипересечений“ ванье-штарковских уровней, положения максимумов тока...) важна не их абсолютная величина, а разность средних значений:  $(\bar{x}_{11} - \bar{x}_{22})$ . Для СР с простой элементарной ячейкой  $\bar{x}_{11} = \bar{x}_{22}$  (и может быть положено равным 0

в соответствующей системе координат), в СР с симметричной элементарной ячейкой, содержащей 2 пары барьер-яма,  $\bar{x}_{11} - \bar{x}_{22} = \pm d/2$ , а с несимметричной —  $|\bar{x}_{11} - \bar{x}_{22}| < d$ . Отметим основные особенности приведенных результатов.

1. В СР с симметричной элементарной ячейкой ( $\bar{x}_{11} = \bar{x}_{22}$ )  $R(k_i, k_f, E) = R(-k_i, -k_f, -E)$ ,  $j(E) = -j(-E)$ , т.е. вероятность межминизонного туннелирования является четной, а токи — нечетными функциями поля. В СР с несимметричной элементарной ячейкой ( $\bar{x}_{11} \neq \bar{x}_{22}$ ); как видно из рис. 5, эти соотношения не выполняются.

2. Характер ванье-штарковских лестниц в СР с симметричной и несимметричной элементарными ячейками также различен. В СР с симметричной элементарной ячейкой в области  $\hbar\Omega_c \leq \bar{\Delta}_{21}$  величина расщепления ванье-штарковских уровней осциллирует, а в „антикроссинге“ монотонно растет с ростом поля одинаковым образом для обоих его направлений. Положение „антикроссинга“ определяется соотношениями (8), (9) с  $n \neq 0$ . В области  $\bar{\Delta}_{21} < \hbar\Omega_c \ll \bar{\Delta}_{32}$  ( $\bar{\Delta}_{32}$  — среднее расстояние между третьей и второй мини-зонами) „антикроссинг“ не возникает (что следует и из энергетических соображений), расстояние между ближайшими ступеньками ванье-штарковской лестницы слабо меняется вблизи значения  $\bar{\Delta}_{21}$  и обусловлено деформацией элементарной ячейки и межминизонными переходами внутри нее. При очень больших полях необходимо учитывать третью и следующие мини-зоны, что выходит за рамки настоящей работы. В СР с несимметричной элементарной ячейкой структура ванье-штарковских уровней зависит от направления электрического поля, точнее от знака величины  $\eta = eE(\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11})$ . При  $\eta < 0$  эволюция ванье-штарковской лестницы качественно такая же, что и в СР с симметричной элементарной ячейкой. При  $\eta > 0$  возникает дополнительный „антикроссинг“ с  $n = 0$ , т.е. в значительных полях  $E = \bar{\Delta}_{21}/e|\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11}|$ , если  $|\bar{x}_{22} - \bar{x}_{11}| \ll d$ . Этот дополнительный „антикроссинг“ обусловлен искажением полем сверхрешеточного потенциала внутри элементарной ячейки, относительным смещением под действием сильного электрического поля уровней одноминизонных ванье-штарковских состояний, центрированных в разных ямах элементарной ячейки, и межминизонными переходами между ними. Заметим, что эти переходы возникают и в СР со сложной симметричной элементарной ячейкой, но величина соответствующего поля не будет зависеть от его направления.

## 7. Заключение

Исследованы двуминизонные сверхрешетки с несимметричной элементарной ячейкой и негармоническим законом дисперсии мини-зон. Показано, что в полях, соответствующих „антипересечению“ ванье-штарковских уровней, вероятность межминизонного туннелирования

не зависит от начального значения квазиимпульса и в СР с узкими разрешенными мини-зонами принимает минимальные (а не максимальные!) значения (вплоть до существенных полей). На ВАХ при этом наблюдаются максимумы тока.

Показано, что в СР с несимметричной элементарной ячейкой как вероятность туннелирования, так и ток зависят от направления поля.

Выявлена роль диагональных матричных элементов оператора координаты, особенно существенная для СР с несимметричной элементарной ячейкой.

Рассчитаны ВАХ СР с негармоническим законом дисперсии с учетом межминизонного туннелирования и продемонстрировано влияние на них рассеяния на оптических фононах.

Авторы выражают благодарность Е.В. Демидову за полезное обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-97057-р\_поволжье\_а) и программы президиума РАН.

## Список литературы

- [1] M. Holthaus. *J. Opt. B: Quant. Semiclass. Opt.*, **2**, 589 (2000).
- [2] S. Glutsch. *Phys. Rev. B*, **69**, 235 317 (2004).
- [3] P. Ao, J. Rammer. *Phys. Rev. B*, **44**, 11 494 (1991).
- [4] K. Drese, M. Holthaus. *Eur. Phys. J. D*, **3**, 73 (1998).
- [5] В.Я. Алешкин, Ю.А. Романов. *ЖЭТФ*, **87**, 1857 (1984); *ФТП*, **20**, 281 (1986).
- [6] Ю.Ю. Романова, Е.В. Демидов, Ю.А. Романов. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **74** (1), 106 (2010).
- [7] J.Yu. Romanova, E.V. Demidov, L.G. Mourkh, Yu.A. Romanov. *J. Phys.: Condens. Matter*, **23**, 305 801 (2011).
- [8] Ю.А. Романов, Ю.Ю. Романова. *ФТТ*, **46**, 162 (2004).
- [9] Y.A. Romanov, J.Y. Romanova. *Int. J. Nanosci.*, **3**, 177 (2004).
- [10] Ю.А. Романов. *Тез. докл. 8-й Росс. конф. по физике полупроводников* (Екатеринбург, Россия, 2007) с. 168; Ю.Ю. Романова. *Тез. докл. 8-й Росс. конф. по физике полупроводников* (Екатеринбург, Россия, 2007), с. 135.
- [11] Л.К. Орлов, Ю.А. Романов. *ФТП*, **19**, 1877 (1985).
- [12] Л.К. Орлов, Ю.А. Романов. *Изв. вузов. Радиофизика*, **32**, 282 (1989).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989) с. 26.
- [14] G.A. Varaff. *Phys. Rev.*, **133**, 26 (1964).
- [15] W.E. Pinson. A. Bray. *Phys. Rev.*, **136**, 11 449 (1964).
- [16] Ю.А. Романов. *ФТТ*, **45** (3), 529 (2003).

Редактор Л.В. Беляков

## Tunneling and current characteristics of two-miniband superlattices

Yu.Yu. Romanova, M.L. Orlov, Yu.A. Romanov

Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Sciences,  
603950, GSP-105, Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** Electron tunneling in semiconductor superlattices with asymmetric unit cells is investigated in the two miniband approximation. It is shown that in the weak fields corresponding to the anticrossing of Wannier–Stark levels, the probability of inter-miniband transitions after the electron has been transferred through the period of the reciprocal superlattice does not depend on initial quasi-wavevector magnitude and can have a minimal value. A value of the current is maximal in the same fields. The dependence of current and the electron tunneling probability on the field direction is predicted. The role of diagonal coordinate matrix elements is revealed.