Письма в ЖТФ, том 19, вып. 9 12 мая 1993 г.

05.2; 06.2

ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ИЗ МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В.С. Кузнецов

У большинства полупроводниковых материалов, используемых для получения гетероструктур, зависимость энергии носителей тока E от квазиволнового вектора k имеет довольно сложный вид; изоэнергетические поверхности не являются сферически симметричными. Как известно, изоэнергетические поверхности свободных электронов в зоне проводимости для германия имеют вид восьми полуэллипсоидов с центром в точках симметрии L_1, а для кремния – шести эллипсоидов вращения, расположенных на осях симметрии Δ_1. Изоэнергетические поверхности для свободных дырок – гофрированные сферы с центром в точке $k = 0$. В соединениях $InSb$, $InAs$, $GaAs$, $GaSb$ и InP самый низкий минимум зоны проводимости расположен при $k = 0$, но в некоторых из них ($GaSb$, $GaAs$) более высокие экстремумы в точках X и L настолько близки по энергии к минимуму в Г, что играют важную роль в явлениях переноса. Как было показано Рашба [1], Шека [2] и Кейном [3] в структуре цинковой обманки экстремумы энергии достигаются не в изолированных точках X_1, L_1 или в ряде дискретных точек зоны проводимости Δ_1, Λ_1, а на целых кривых – петлях экстремумов [4].

Отклонение изоэнергетической поверхности от сферически симметричной не позволяет сводить в общем случае задачу о туннелировании частиц в гетероструктурах к одномерному движению. Коэффициент прозрачности структуры будет зависеть как от нормальной к барьеру проекции квазиимпульса, так и от параллельной.

Ради простоты рассмотрим идеализированную электронную двухбарьерную полупроводниковую гетероструктуру типа $Ge-Si-Ge-Si-Ge$, выращенную в направлении {111}. Пусть потенциальные барьеры имеют ширину b и высоту $-V$, ширина квантовой ямы равна a. Изоэнергетические поверхности свободных электронов как в первой полупроводниковой структуре, так и во второй представляют собой эллипсоиды вращения, центры которых смещены вдоль оси вращения из центра зоны Бриллюэна на величину K_1 или K_2. Направим ось координат OZ нормально к гетероструктуре, ось OY – параллельно одной из главных полуосей эллипсоида, и пусть эллипсоиды повернуты в плоскости XOZ вокруг этой полуоси на угол α_1 относительно оси OZ в первой структуре, и на угол α_2 во второй.

Гамильтониан имеет вид

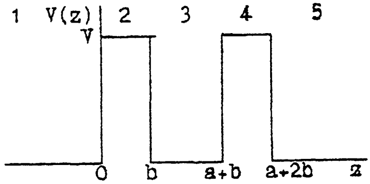

Рис. 1. Потенциальная энергия электрона.

$$H(x,y,z)=-\frac{\hbar^2}{2}\Big\{\big[\sin^2(\alpha_j)/m^*_{\parallel j}+\cos^2(\alpha_j)/m^*_{\perp j}\big]\frac{d^2}{dx^2}+(1/m^*_{\perp j})\frac{d^2}{dy^2}+$$
$$+\big[\cos^2(\alpha_j)/m^*_{\parallel j}+\sin^2(\alpha_j)/m^*_{\perp j}\big]\frac{d^2}{dz^2}+\sin(2\alpha_j)\big[1/m^*_{\parallel j}$$
$$-1/m^*_{\perp j}\big]\frac{d^2}{dx\,dz}-2iK_j\Big(\cos(\alpha_1)\frac{d}{dz}+ \qquad (1)$$
$$+\sin(\alpha_j)\frac{d}{dx}\Big)/m^*_{\parallel j}-K_j^2/m^*_{\parallel j}\Big\}+V_j\,.$$

Здесь $j = 1$ для первой, третьей и пятой области пространства, $j = 2$ для второй и четвертой области. $V_1 = 0$ и $V_2 = V$, $\hbar$ – постоянная Планка, $m^*_{\parallel j}$ и $m^*_{\perp j}$ – продольная и поперечная эффективная масса свободного электрона в зоне проводимости.

Волновая функция электрона в первой подобласти $z < 0$ имеет вид:

$$\varphi_1(x,y,z)=\big\{\exp(i(\varkappa_1-\beta_1)z)+A\exp(-i(\varkappa_1+\beta_1)z)\big\}\exp\big(i(k_x x+k_y y)\big)\,. \qquad (2)$$

Первое слагаемое в (2) соответствует падающей на барьер электронной волне, а второе слагаемое с множителем А – отраженной от барьера волне.

Волновая функция электрона в области первого барьера (вторая область) может быть представлена в виде.

$$\varphi_2(x,y,z)=\big\{B_1\exp(i\varkappa_2 z)+B_2\exp(-i\varkappa_2 z)\big\}\exp\big(i(k_x x+k_y y-\beta_2 z)\big)\,, \qquad (3)$$

а в области после барьеров (пятая область) в виде

$$\varphi_3(x,y,z)=C\exp\big(i(k_x x+k_y y+(\varkappa_1-\beta_1)(z-2b-a))\big)\,. \qquad (4)$$

Здесь

$$\beta_j = \left\{ \sin(\alpha_j)\left[1/m^*_{\parallel j} - 1/m^*_{\perp j}\right]k_x - K_j/m^*_{\parallel j} \right\} \mu_j \cos(\alpha_j), \tag{5}$$

$$\text{æ}_j = \mu_j \left\{ 2(E - V'_j)/(\hbar^2 \mu_j) - (k_x - K_j \sin(\alpha_j))^2/m^*_{\parallel j} m^*_{\perp j} \right\}^{1/2}, \tag{6}$$

$$\mu_j^{-1} = \cos^2(\alpha_j)/m^*_{\parallel j} + \sin^2(\alpha_j)/m^*_{\perp j}, \tag{7}$$

$$V'_j = V_j + \hbar^2 k_y^2 / 2m^*_{\perp j}. \tag{8}$$

Из (2), (5) и (6) следует, что из-за поворотов эллипсоидов относительно нормали ($\alpha_1 \neq \pi n/2$) и смещения по нормали центров эллипсоидов из центра зоны Бриллюэна ($K_1 \cos(\alpha_1) \neq 0$) при одинаковых значениях энергии E и равных проекциях k_x и k_y нормальные проекции квазиволнового вектора $k_z = (\text{æ}_1 - \beta)$ у падающих на барьер электронов и $\text{æ}_1 + \beta_1$ у отраженных от барьера электронов будут различны. Необходимо отметить также, что в общем случае волновые функции должны быть линейными комбинациями волновых функций типа (3) от всех эллипсоидов [5], что соответствует возможности прохождения электронов через гетероструктуру по нескольким каналам. Однако учет этих эффектов значительно усложняет задачу, хотя не приводит к качественно новым результатам.

Условия сшивания волновых функций на границе раздела структур, например, в точке $z = 0$, имеют вид:

$$\left.\begin{aligned} \psi_1(x,y,0) &= \psi_2(x,y,0) \\ P\psi_1(x,y,0) &= P\psi_2(x,y,0) \end{aligned}\right\}, \tag{9}$$

где $P\psi_j = \mu_j d\psi_j/dz + \sin(\alpha_j)\cos(\alpha_j)(1/m^*_{\parallel j} - 1/m^*_{\perp j}) d\psi_j/dx - iK_j \cos(\alpha_j)\psi_j/m^*_{\perp j}$.
Из условий сшивания волновых функций в точках $z = 0$, $z = b$, $z = a+b$ и $z = a+2b$ находим значение C:

$$C = 4\left\{\left[2\cos(\text{æ}_2 b) - i(\omega + \omega^{-1})\sin(\text{æ}_2 b)\right]^2 \exp(i\text{æ}_1 a) - (\omega - \omega^{-1})^2 \sin^2(\text{æ}_2 b)\right.$$
$$\left.\exp(-i\text{æ}_1 a)\right\}^{-1} \exp(-i(\beta_1 a + 2\beta_2 b)), \tag{10}$$

где $\omega = \text{æ}_1 \mu_2 / \text{æ}_2 \mu_1$.

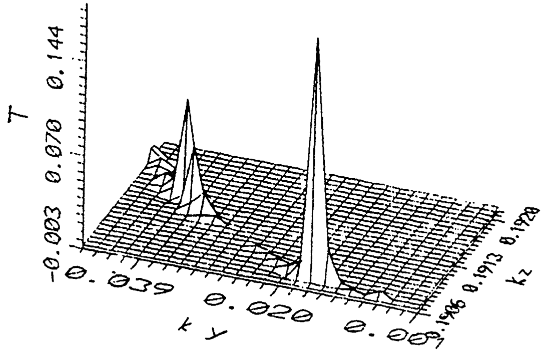

Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения Т от k_y и k_z при $k_x = K_1 \sin(\alpha_1)$.

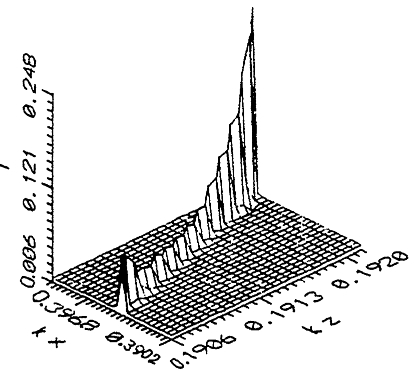

Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения Т от k_x и k_z при $k_y = 0$.

Поскольку $æ_2$ и ω являются функциями от k_x, k_y, k_z, а $æ_1$ – функция от k_x, k_z, то коэффициент туннельного прохождения электрона $T = |C|^2$ зависит от всех проекций квазиволнового вектора. При $æ_2 = \pi n/b$ и при ω = 1 коэффициент прохождения Т равен единице. Зависимость $æ_2$ и ω от k_y определяется изменением эффективной высоты барьера V^*:

$$V^* = V + \hbar^2 k_y^2 \left(1/m^*_{\perp 2} - 1/m^*_{\perp 1}\right)/2 + \varphi(k_x, k_z),$$

где $\varphi(k_x, k_z)$ – некоторая функция k_x и k_z. При $m^*_{\perp 1} < m^*_{\perp 2}$ высота барьера с ростом $|k_y|$ будет убывать. Вместо барьеров при

$k_y^2 > 2(V+\varphi)/(\hbar^2(1/m^*_{\perp 1} - 1/m^*_{\perp 2}))$ возникнут квантовые ямы. На рис. 2 представлена зависимость коэффициента прохождения от k_z и k_{oz} для энергий E меньше высоты барьера V при $K_1 = 0.481$ рад/Å, $K_2 = 0.491$ рад/Å, $m^*_{\parallel 1} = 1.54 m_0$, $m^*_{\perp 1} = 0.082 m_0$, $m^*_{\parallel 2} = 0.98 m_0$, $m^*_{\perp 2} = 0.19 m_0$, $V = 0.2$ эВ, $a = 200$ Å, $b = 50$ Å, $\alpha_1 = \arcsin(2\sqrt{2/3})$, $\alpha_2 = \arcsin(\sqrt{2/3})$ и $k_x = K_1 \sin(\alpha_1)$, m_0 – масса покоя свободного электрона.

Зависимость T от k_x носит более сложный характер, меняется высота эффективного барьера и передаваемый квазиимпульс при отражении от барьера. На рис. 3 представлена зависимость коэффициента прохождения T от k_x и k_z при $k_y = 0$ и при тех же значениях остальных параметров.

Список литературы

[1] Шека В.И. // ФТТ. 1960. Т. 2. С. 1211-1219.

[2] Рашба Э.И. // ФТТ. 1960. Т. 2. С. 1224-1238.

[3] Kane E. Semiconductors and semimetals. V. 1. N.Y.: Akad. Press, 1966. P. 75-100.

[4] Цидильковский И.М. Зонная структура полупроводников. М.: Наука, 1978. 328 с.

[5] Стоунхэм Ф.М. Теория дефектов в твердых телах. Т. 1, 2. М.: Мир, 1978. 569, 355 с.

Ярославский государственный университет

Поступило в Редакцию 10 марта 1993 г.