

©1995

## СТРУКТУРНЫЙ РЕЗОНАНС ПРОХОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОМ МЕЖКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ГРАНИЦЫ

*Л.С.Брагинский, Д.А.Романов*

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия  
(Поступила в Редакцию 23 декабря 1994 г.)

Исследовано прохождение носителей заряда через границу двух материалов с существенно различной кристаллической структурой. В рамках одномерной модели сильной связи получены условия сшивки огибающих волновых функций. В общем случае эти условия оказываются нелокальными. Показано, что прозрачность границы резонансным образом зависит от определенной комбинации параметров, характеризующих саму границу и граничащие кристаллы. Наличие на границе атома-примеси может приводить к увеличению прозрачности.

Контакт материалов с различной кристаллической структурой и, следовательно, с различными свойствами носителей заряда часто встречается в современной физике твердого тела. Как правило, поведение носителей внутри каждого из материалов достаточно адекватно описывается огибающей волновой функцией (ОВФ). При этом упомянутая разница свойств носителей сводится к разнице их эффективных масс  $m^*$  (и, может быть, положения центра долины). При таком способе описания остается, однако, открытым вопрос о способе сшивки ОВФ на границе материалов. Действительно, по разные стороны границы ОВФ удовлетворяют различным дифференциальным уравнениям (даже разного порядка). Поэтому обычные для уравнения Шредингера требования непрерывности на границе волновой функции и ее производной становятся здесь неприемлемыми. Обычно при описании такой границы ограничиваются феноменологическими требованиями непрерывности ОВФ и нормированной на массу ее производной (последнее обеспечивает сохранение потока). В ряде недавних работ показано, что такое приближение является удовлетворительным не только в случае «размытой» границы [1], но и для атомарно-резких границ в некоторых популярных гетероструктурах [2]. При этом способе описания коэффициент прохождения через границу вертикально падающей на нее электронной волны оказывается равным

$$D = |B|^2 = \left| \frac{2km_r}{km_r + pm_l} \right|^2, \quad (1)$$

где  $m_l, m_r$  — эффективные массы слева и справа от границы (электрон движется слева направо),  $k, p$  — соответствующие волновые векторы. В настоящей работе на примере достаточно простой модели мы получим граничные условия (ГУ) существенно более общего вида. Определяемое ими выражение для  $B$  заметно отличается от (1), демонстрируя критическую зависимость от характерных параметров материалов.

Рассмотрим контакт двух одномерных полубесконечных монокристаллических цепочек (левой и правой), состоящих из атомов разного сорта. Расстояние между атомами правой и левой цепочек равно  $a$  и  $b$  соответственно, расстояние между граничными атомами равно  $c$ . Атомы нумеруются целочисленным индексом  $n$ , причем правой полуцепочки соответствуют значения  $n \geq 0$ . В приближении сильной связи электронные состояния такой системы, соответствующие энергии  $E$ , описываются системой конечно-разностных уравнений

$$\begin{aligned} C_n(E - E_r) - t_r(C_{n+1} + C_{n-1}) &= 0, & n > 0, \\ C_n(E - E_l) - t_l(C_{n+1} + C_{n-1}) &= 0, & n < -1, \\ C_0(E - E_r) - t_r C_1 - t C_{-1} &= 0, \\ C_{-1}(E - E_l) - t_l C_{-2} - t C_0 &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $C_n$  — амплитуда вероятности пребывания электрона на  $n$ -м атоме,  $E_l, E_r$  — энергии электронных состояний на изолированных атомах левой и правой цепочек,  $t_l, t_r$  — соответствующие туннельные интегралы, а  $t$  отвечает переходу электрона между граничными атомами разного сорта.

Введем гладкую функцию  $C(\xi)$ , принимающую в узлах цепочек при  $\xi = n$  значения  $C_n$  [3]. Тогда требования нормировки приводят к следующему определению ОВФ:

$$\psi_l = \frac{1}{\sqrt{b}} C_l \left( \frac{x}{b} \right), \quad \psi_r = \frac{1}{\sqrt{a}} C_r \left( \frac{x}{a} \right), \quad (3)$$

которые внутри цепочек удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} -2t_r \cosh \left( a \frac{d}{dx} \right) \psi_r &= (E - E_r) \psi_r, \\ -2t_l \cosh \left( b \frac{d}{dx} \right) \psi_l &= (E - E_l) \psi_l. \end{aligned} \quad (4)$$

Вторая пара уравнений (2) определяет ГУ на функции  $\psi_l(x), \psi_r(x)$ . С учетом (4) эти условия принимают вид

$$\begin{aligned} \psi_r(-a) &= \frac{t}{t_r} \sqrt{\frac{b}{a}} \psi_l(-c), \\ \psi_r(0) &= \frac{t_l}{t} \sqrt{\frac{b}{a}} \psi_l(b - c). \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим существенную нелокальность полученных ГУ, соответствующую формально бесконечному порядку дифференциальных уравнений (4) (в специальном случае  $a = b = c$  условия (5) принимают локальный характер и совпадают с применявшимися в [4] для вычисления поправок к энергетическим уровням в прямоугольной квантовой яме). Однако количество ГУ остается равным двум. Это связано с тем, что общее решение исходного уравнения Шредингера для электрона в одномерной системе содержит лишь две произвольные константы.

Если  $\psi_l(x)$ ,  $\psi_r(x)$  слабо изменяются на масштабах постоянных решетки, уравнения (4) в главном приближении превращаются в обычные одномерные уравнения Шредингера с эффективными массами

$$m_r = \frac{1}{2t_r a^2}, \quad m_l = \frac{1}{2t_l b^2},$$

а ГУ (5) приобретают вид

$$\begin{pmatrix} \psi_r \\ \psi_r' \end{pmatrix}_0 = \hat{T} \begin{pmatrix} \psi_l \\ \psi_l' \end{pmatrix}_0,$$

$$\hat{T} = \sqrt{\frac{t_l b}{t_r a}} \begin{pmatrix} \alpha & (b-c)\alpha \\ \frac{1}{a} \left( \alpha - \frac{1}{\alpha} \right) & \frac{b-c}{a} \alpha + \frac{c}{a\alpha} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где определяющий параметр

$$\alpha = \frac{\sqrt{t_l t_r}}{t}. \quad (7)$$

Как видно, в общем случае условия (6) существенно отличаются от вышеупомянутого обычного приближения. Они обеспечивают разрыв не только производной, но и самой ОВФ, причем наличие обоих недиагональных членов делает неприменимым модельные представления типа  $\delta$ -потенциала на границе [4]. Характерной чертой матрицы  $\hat{T}$  является также малость наддиагонального члена, компенсирующая большой величиной поддиагонального.

Любопытно проследить эволюцию матрицы  $\hat{T}$  при упрощающем ее изменении параметров. Так, при  $\alpha = 1$  и  $b = c$  матрица становится диагональной и приобретает вид

$$\hat{T} = \sqrt{\frac{m_r}{m_l}} \begin{pmatrix} \sqrt{a/b} & 0 \\ 0 & \sqrt{b/a} \end{pmatrix}.$$

Однако разрыв ОВФ все еще сохраняется. Он устраняется лишь при условии  $m_r a = m_l b$ , которое нам кажется более чем экзотическим.

Характерные особенности ГУ (5), (6) непосредственно сказываются на форме коэффициента прохождения. Действительно, из (4), (5) для амплитуды прошедшей волны получается выражение

$$B = \frac{2i\sqrt{b/at}t_l \sin kbe^{-ikc}}{t^2 - t_r t_l e^{-ikb-ipa}}. \quad (8)$$

Напомним, что здесь

$$|p| = \frac{1}{a} \arccos \left( \frac{E - E_r}{2t_r} \right), \quad |k| = \frac{1}{b} \arccos \left( \frac{E - E_l}{2t_l} \right).$$

В обсуждаемом предельном случае ( $kb \ll 1$ ,  $pa \ll 1$ ,  $kc \ll 1$ ) для коэффициента прохождения из (8) получается

$$D = |B|^2 \simeq \frac{m_r}{m_l} \frac{4\alpha^2 k^2 ab}{(1 - \alpha^2)^2 + \alpha^4 (kb + pa)^2}. \quad (9)$$

Отметим явно резонансный характер, существенно отличающий (9) от (1). При  $\alpha \neq 1$   $D$  мало по параметру  $k^2 ab \ll 1$ . Наличие этой малости связано с отмеченной выше большой величиной поддиагонального матричного элемента в (6). Качественно это можно интерпретировать как проявление потенциального  $\delta$ -барьера на границе. При  $\alpha = 1$  малый параметр отсутствует, но и в этом случае выражение для  $D$  отличается от (1). Таким образом, вопреки распространенному мнению эффективность прохождения носителей через границу материалов ограничивается не только (и не столько) малостью  $m_r/m_l$ , но и другими характеристиками материалов и их границы, определяющими величину  $\alpha$ . Механизмы, аналогичные определяемым формулой (9), могут быть одной из причин аномально сильной зависимости контактных вольт-амперных характеристик гетероструктур от давления в экспериментах [5].

Естественно, ГУ (5), (6) не исчерпывают всего многообразия возможностей, предоставляемых микроскопической структурой границы. Непосредственно в рамках используемой модели можно рассмотреть модификацию ГУ, вызываемую наличием на границе атома-примеси, отличающегося от атомов правой и левой полуполупроводников.

Пусть «примесь» с собственной энергией  $E_0$  занимает положение  $n = 0$ , отделена от ближайших атомов справа и слева расстояниями  $c_+$ ,  $c_-$  и связана с ними туннельными интегралами  $t_+$ ,  $t_-$  соответственно. ГУ, получаемые аналогично выражениям (5), теперь имеют вид

$$\begin{aligned} t_l \psi_l(b - c_-) - \frac{t_-^2}{E - E_0} \psi_l(-c_-) &= \frac{t_- t_+}{E - E_0} \sqrt{\frac{a}{b}} \psi_r(c_+), \\ t_r \psi_r(c_+ - a) - \frac{t_+^2}{E - E_0} \psi_r(c_+) &= \frac{t_- t_+}{E - E_0} \sqrt{\frac{b}{a}} \psi_l(-c_-). \end{aligned} \quad (10)$$

Возникающая в них явная зависимость от энергии физически отвечает рассмотренной далее возможности резонанса (в принципе такая зависимость может быть и устранена из ГУ ценой приведения их к нелинейному виду). Коэффициент прохождения через границу, полученный с использованием (10), имеет вид

$$D = \frac{4 \frac{b}{a} \frac{t_+^2 t_-^2}{t_r^2} \sin^2 kb}{\left| E - E_0 - \frac{t_+^2}{t_r} e^{ipa} - \frac{t_-^2}{t_l} e^{ikb} \right|^2}. \quad (11)$$

Изменяя различные параметры, входящие в (11), можно проследить эволюцию зависимости  $D(E)$  от обычного «котелка» (при  $t_{\pm} \sim t_r, t_l$ ) до узкого резонансного колокола (при  $t_{\pm} \ll t_r, t_l$ ,  $E_0$  на фоне перекрывающихся зон) с различными степенями асимметрии этих кривых. Таким образом, наличие примеси может не только ухудшить, но и улучшить электрофизические характеристики поверхности. Такое «просветление» аналогично эффектам резонансного туннелирования через континуальные барьеры [6].

В заключение остановимся еще раз на вопросах реальной применимости полученных результатов и их возможных обобщениях. Мы рассмотрели одномерные модели, однако основные выводы справедливы и для широкого класса трехмерных задач, в которых движение вдоль границы исключается из рассмотрения (например, в вопросах туннелирования). Если при этом в зонном энергетическом спектре отсутствуют боковые долины, то можно ограничиться двухконстантными решениями, аналогичными вышерассмотренным (при наличии же боковых долин число граничных условий увеличивается; анализ матрицы  $\hat{T}$  для этого случая будет предметом отдельного рассмотрения). Кроме того, после соответствующих предельных переходов формулы (10), (11) могут быть применены и к описанию эмиссии электронов в вакуум через монослойные и субмонослойные покрытия [7] и установлению микроскопических физических ограничений величины квантового выхода.

Установление связи между поведением ОВФ и микроскопическими характеристиками границы открывает возможности как для исследования последних в явлениях вертикального транспорта, так и для целенаправленного воздействия на эти явления.

Авторы благодарны В.А. Волкову за полезные советы и Э.М. Баскину за многочисленные дискуссии.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 93-02-15715) и International Science Foundation (grant N U85000).

#### Список литературы

- [1] Baskin E.M., Braginskii L.S. Phys. Rev. **B**, in press.
- [2] Ando T., Wakahara S., Akera H. Phys. Rev. **B40**, 11609 (1989).
- [3] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. (1978). С. 615.
- [4] Qi-Gao Zhu, Herbert Kroemer. Phys. Rev. **B27**, 3519 (1983).
- [5] Lu S.S., Natan M.I. J. Appl. Phys. **60**, 525 (1991).
- [6] Чаплик А.В., Энтин М.В. ЖЭТФ **67**, 208 (1974).
- [7] Мусатов А.Л., Коротких В.Л., Шадрин В.Д. ФТТ **23**, 3, 929 (1981); Нолле Е.Л. ФТТ **31**, 11, 225 (1989).