

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ДИАГРАММЕ КЛАССИЧЕСКИХ ВАРИЗОННЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

В. Г. Савицкий, Б. С. Соколовский

Львовский государственный университет им. Ивана Франко, Львов, Украина
(Получено 29 октября 1992 г. Принято к печати 5 июля 1993 г.)

Ряд специфических свойств, присущих варизонным сверхрешеткам (ВЗС) (переходная электрическая поляризация, резкая асимметрия процессов лавинного умножения электронов и дырок и др. [1,2]), выдвинули ВЗС в число структур, перспективных для приборных применений, в частности для создания быстродействующих приемников электромагнитного излучения. Известно [3], что различные свойства варизонных полупроводников и структур на их основе, в том числе ВЗС, существенным образом зависят от формы их энергетической диаграммы (ЭД). Поэтому исследование закономерностей формирования ЭД ВЗС представляет интерес не только для физики варизонных полупроводников, но имеет важное значение и при разработке приборов на основе ВЗС.

В данной работе теоретически изучены особенности ЭД классических сверхрешеток¹ на основе варизонных полупроводников с собственным типом проводимости. Расчеты проводились применительно к симметричным структурам, состоящим из чередующихся слоев толщиной d , в которых ширина запрещенной зоны E_g линейно зависит от координаты x (рис. 1, а).

Для построения ЭД рассматриваемых ВЗС необходимо решить на отрезке $[0, d]$ уравнение Пуассона, которое в предположении отсутствия вырождения носителей заряда имеет вид

$$\nu^2 \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} = \exp\left(-\frac{\alpha \xi}{2}\right) \operatorname{sh}\left[\varphi + \left(\beta + \frac{\alpha}{2}\right) \xi\right], \quad (1)$$

где φ — безразмерный (в единицах kT/e) электростатический потенциал; $\xi = x/d$; $\alpha = (d/kT) dE_g/dx$; $\beta = (d/kT) d\chi/dx$ (электронное сродство, координатная зависимость которого в ВЗС берется в виде кусочно-линейной функции); $\nu = L_0/d$; $L_0 = \sqrt{\epsilon\epsilon_0 kT/2e^2 n_i(0)}$ — дебаевская длина экранирования в собственном полупроводнике с концентрацией носителей $n_i(0)$, ϵ_0 ; ϵ — диэлектрические проницаемости вакуума и полупроводника (принимается, что ϵ , а также эффективные плотности состояний в зоне проводимости N_c и валентной зоне N_v не зависят от координаты). В выражении (1) предполагается,

¹ Под классическими сверхрешетками подразумеваются [4] периодические структуры с толщинами слоев, намного превышающими длину свободного пробега носителей заряда, т. е. в таких сверхрешетках не проявляется мини-зонный характер спектра носителей.

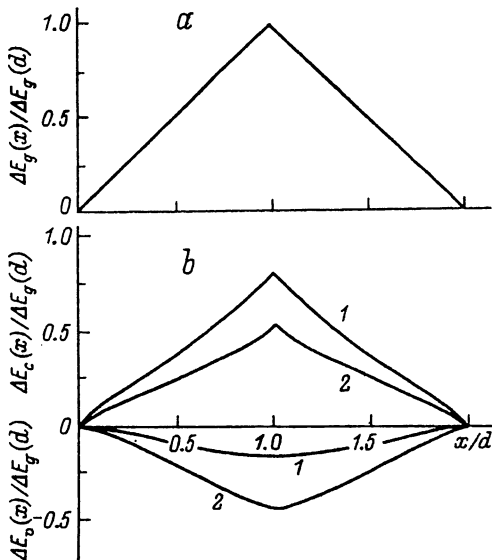


Рис 1. Координатные зависимости ширины запрещенной зоны (а), краев зоны проводимости (b) и валентной зоны (с) при $\alpha = 5$. d/L_0 : 1 — 5, 2 — 50.

что φ отсчитывается от нулевого уровня, который выбран совпадающим с локальным уровнем вакуума [5] в точке $x = 0$.²

Уравнение (1) необходимо дополнить граничными условиями

$$\left. \frac{d\varphi}{d\xi} \right|_{\xi=0} = \left. \frac{d\varphi}{d\xi} \right|_{\xi=1} = 0, \quad (2)$$

которые следуют из симметрии задачи и условия непрерывности индукции электростатического поля.

Уравнение (1) с граничными условиями (2) аналитически решить в общем случае не представляется возможным. Поэтому сначала рассмотрим некоторые частные случаи, когда существенно упрощается аналитическое решение данной задачи.

В случае малых перепадов E_g и χ [$\Delta E_g(d) \equiv E_g(d) - E_g(0) \ll kT$, $|\Delta \chi(d)| \equiv |\chi(d) - \chi(0)| \ll kT$] решение уравнения (1) имеет вид

$$\varphi(\xi) = \left(\beta + \frac{\alpha}{2} \right) \left[\nu \operatorname{sh} \left(\frac{2\xi - 1}{2\nu} \right) / \operatorname{ch} \frac{1}{2\nu} - \xi \right]. \quad (3)$$

Из (3) следует, что при $d \gg L_0$ зависимость $\varphi(\xi)$ линейна практически во всем объеме структуры. Таким же свойством обладает координатная зависимость дна зоны проводимости $E_c(\xi)$ ($E_c = -\chi - kT\varphi$) и потолка валентной зоны $E_v(\xi)$ ($E_v = E_c - E_g$). Отклонение от линейного профиля имеет место в окрестностях поверхностей $\xi = n$ ($n = 0, \pm 1, \dots$) протяженностью порядка дебаевской длины экранирования. Заряды Q_0, Q_1 , накапливающиеся у поверхностей $\xi = 2n, \xi = 2n + 1$ ($n = 0, \pm 1, \dots$), равны

² Следует заметить, что при таком способе отсчета потенциала $\varphi(0)$ в общем случае отлично от нуля и, как и значения φ в других точках, подлежит определению из уравнения Пуассона.

$$Q_{0,1} = \pm \frac{kT\epsilon\epsilon_0}{e d} \left(\beta + \frac{\alpha}{2} \right), \quad (4)$$

т. е., как и следовало ожидать, отрицательный заряд образуется в областях, где термоэлектронная работа выхода $\Phi = \chi + E_g/2 - (kT/2) \ln(N_i N_v)$ принимает максимальное значение.

При $d \leq L_0$ пространственный заряд охватывает весь объем ВЗС, а на зависимости $\varphi(\xi)$ отсутствуют линейные участки (при $\nu \gg 1$ $\varphi(\xi) \sim (2\xi - 1)^3/\nu^2$). С уменьшением толщины ВЗС электростатический потенциал вследствие его малости сказывается на пространственных профилях $E_c(\xi)$, $E_v(\xi)$ все слабее (аналогичная ситуация имеет место и в резких гетеропереходах [6]) и при $\nu \gg 1$ $E_c(\xi) \approx -\chi(\xi)$, $E_v(\xi) = -\chi(\xi) - E_g(\xi)$.

Амплитуды сверхрешеточных потенциалов для зоны проводимости Δ_c и валентной зоны Δ_v в случае малых перепадов E_g, χ определяются формулами

$$\Delta_{c,v} \equiv \frac{|E_{c,v}(d) - E_{c,v}(0)|}{2kT} = \left| \nu \left(\beta + \frac{\alpha}{2} \right) \operatorname{th} \frac{1}{2\nu} \mp \frac{\alpha}{4} \right|. \quad (5)$$

Здесь, как и в предыдущих формулах, α и β — безразмерные $\nabla_x E_g$ и $\nabla_x \chi$ на участке $0 < x < d$, причем, согласно принятой модели, ВЗС (рис. 1, а) $\alpha > 0$.

Как следует из (3) и (5), при $d \gg L_0$ ЭД ВЗС имеет симметричную форму, характеризующуюся контравариантной модуляцией краев зон E_c, E_v [$\operatorname{sign}(dE_c/dx) = -\operatorname{sign}(dE_v/dx)$] и равенством амплитуд сверхрешеточных потенциалов $\Delta_c = \Delta_v = \alpha/4$. В случае ВЗС с малым периодом ($d \leq L_0$) на координатные профили E_c, E_v помимо ∇E_g существенно влияет $\nabla \chi$, причем ЭД может принадлежать как контравариантному, так и ковариантному [$\operatorname{sign}(dE_c/dx) = \operatorname{sign}(dE_v/dx)$] типу. В ВЗС с очень тонкими слоями ($d \ll L_0$) контравариантность ЭД реализуется при $-\alpha < \beta < 0$, а ковариантность возможна при $\beta > -\alpha$.

В представляющем наибольший практический интерес случае больших по сравнению с kT перепадов E_g и χ аналитическое выражение для $\varphi(\xi)$ можно получить при $d \gg L_0$ ($\nu \ll 1$), т. е. когда (1) принимает характер сингулярно возмущенного дифференциального уравнения. Для его решения можно применить метод пограничных функций [7], представив искомое решение в виде суммы регулярной части $\varphi(\xi, \nu)$ и пограничных функций

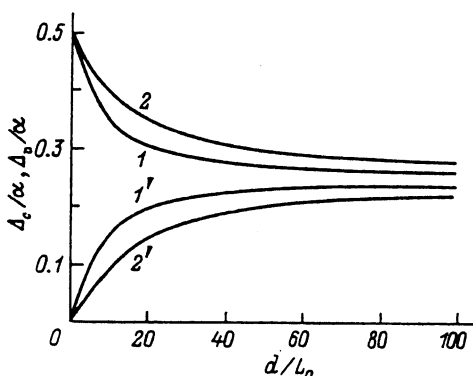


Рис. 2. Зависимости амплитуд сверхрешеточных потенциалов для зоны проводимости (1, 2) и валентной зоны (1', 2') от d/L_0 при α : 1, 1' — 5; 2, 2' — 10.

$Q(\xi, \nu)$, $R(\eta, \nu)$, локализованных у поверхностей $\xi = 0$ и $\xi = 1$ [$\xi = \xi/\nu$, $\eta = (1-\xi)/\nu$ — пограничные переменные]. Выражение для $\varphi(\xi)$ на отрезке $[0, 1]$ в первом по ν приближении можно записать в следующем виде

$$\varphi(\xi) = \left(\beta + \frac{\alpha}{2}\right) \left[\nu' \exp \frac{\xi - 1}{\nu'} - \nu \exp \left(-\frac{\xi}{\nu}\right) - \xi \right], \quad (6)$$

где $\nu' = \nu [n_i(0)/n_i(d)]^{1/2} = L_1/d \ll 1$.

По своей структуре выражение (6) аналогично формуле (3) с тем отличием, что отклонение $\varphi(\xi)$ от линейной зависимости происходит у поверхности $\xi = 1$ на дебаевской длине экранирования, соответствующей локальной концентрации носителей $n_i(d)$. Это свойство координатного профиля $\varphi(\xi)$ не проявлялось в рассмотренном ранее случае ($\Delta E_g(d) \ll kT$) ввиду незначительного отличия $n_i(0)$ от $n_i(d)$. Таким образом, из решения сингулярно возмущенного уравнения Пуассона для ВЗС следует естественный вывод о том, что слой объемного заряда имеет меньшую протяженность возле узкозонной границы раздела.

Если $\Delta E_g(d) (|\Delta \chi(d)|) > kT$ и $d \leq \min(L_0, L_1)$, то для построения ЭД ВЗС необходимо прибегать к численному расчету. В качестве примера приведем результаты расчета ЭД ВЗС для случая, когда фотоэлектронная работа выхода $\Phi' = \chi + E_g$ не зависит от координаты (последнее условие приближенно выполняется для ряда варизонных твердых растворов на основе соединений A_2B_6 и A_3B_5 с общим анионом [8]). Уравнение (1) с граничными условиями (2) решалось по трехточечной разностной схеме с привлечением метода квазилинеаризации. Приведенные на рис. 1, б, с и на рис. 2 графики свидетельствуют о существенном влиянии на форму ЭД отношения толщины варизонных слоев к дебаевской длине экранирования. При росте последнего ЭД принимает более симметричный вид. Таким образом, качественные особенности формирования ЭД ВЗС, установленные выше при упрощающих предположениях, сохраняются и в более общем случае.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] В. Т. Цанг. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетеропереходы. Под ред. Л. Ченга и К. Плога, 462. М. (1989).
- [2] А. П. Силин. УФН, 147, 485 (1985).
- [3] Г. П. Пека, В. Ф. Коваленко, А. Н. Смоляр. Варизонные полупроводники. Киев (1989).
- [4] Ю. А. Козловский, Л. Н. Неустроев, В. В. Осипов. ФТП, 24, 497 (1990).
- [5] А. Н. Marshak, К. М. Vliet. Sol. St. Electron. 21, 417 (1978).
- [6] А. Я. Вуль, А. М. Кечиянц, Л. В. Шаронова, А. Я. Шию, Ю. В. Шмарцев. ФТП, 10, 1790 (1976).
- [7] А. Б. Васильева, В. Ф. Бутузов. Асимптотическое разложение решений сингулярно возмущенных уравнений. М. (1973).
- [8] J. O. McCaldin, T. C. McGill, C. A. Mead. Phys. Rev. Lett., 36, 56, (1976).

Редактор В. В. Чалдышев