

ЗОННАЯ СТРУКТУРА КОРОТКОПЕРИОДИЧНЫХ
(001)-СВЕРХРЕШЕТОК $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$

Полыгалов Ю. И., Поплавной А. С.

По методу эмпирического псевдопотенциала с учетом спин-орбитального взаимодействия проведен расчет зонной структуры (ЗС) (001)-сверхрешеток (СР) $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 12$) в центре $(0, 0, 0)$ и в боковой точке $(2\pi/a, 0, 0)$ зоны Бриллюэна (ЗБ) СР. Показано, что СР $(\text{AlAs})_{12}(\text{GaAs})_{12}$ является прямозонной — дно зоны проводимости и вершина валентной зоны происходят из центра ЗБ GaAs. СР с $n=2, 3, \dots, 11$ являются псевдопрямозонными: вершина валентной зоны происходит из центра ЗБ GaAs, а дно зоны проводимости — из $X_{\xi_x}^e$ -состояния AlAs. Дно зоны проводимости псевдопрямозонных СР в точке $(2\pi/a, 0, 0)$ ЗБ СР, формируемое в основном состояниями $X_{\xi_x}^e$ и $X_{\xi_y}^e$ AlAs, оказывается расположенным выше $X_{\xi_x}^e$ -дна на величину ≤ 0.06 эВ в СР с нечетными n и на величину ≤ 0.14 эВ в СР с четными n . В СР $(\text{AlAs}/\text{GaAs})_1$ дно зоны проводимости оказывается в боковой точке ЗБ СР. При этом расстояние от $X_{\xi_x}^e, y$ до $X_{\xi_x}^e$ -уровня составляет 0.001 эВ. Показано, что в идеальных СР $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ имеет место немонотонная зависимость ширины запрещенной зоны $E_g(n)$ от числа n монослоев. Именно при монотонном убывании $E_g(n)$ в рядах СР $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ с четными либо нечетными n имеют место неравенства $E_g(n) > E_g(n-1)$ при $n=3, 5, 7, 9, 11$. Расчет плотности заряда блоховских состояний, проведенный для вершины валентной зоны и дна зоны проводимости, дает картину преимущественной локализации тяжелых дырок в GaAs-слое, а электронов в AlAs-слое для краевонных СР $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 11$) и в GaAs-слое для прямозонной СР $(\text{AlAs})_{12}(\text{GaAs})_{12}$. В результате расчета ЗС получены энергии дипольных переходов из валентной зоны в зону проводимости и соответствующие им поляризаационные зависимости. Проведено сопоставление с имеющимися экспериментальными данными.

В настоящее время интенсивно исследуются высококачественные полупроводниковые кристаллы, содержащие чередующиеся слои двух различных полупроводников, т. е. сверхрешетки (СР), получаемые методами молекулярно-лучевой эпитаксии. Особый интерес в силу ряда специфических свойств вызывает система AlAs/GaAs [1]. В данной работе представлены результаты расчета зонного спектра (ЗС) короткопериодичных СР $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 12$), где n — число монослоев исходных материалов в направлении (001) — ось роста СР. Расчет ЗС $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ проводился по методу псевдопотенциала с эмпирически определенными в [2] атомными формфакторами псевдопотенциалов AlAs и GaAs. Значения формфакторов для векторов обратной решетки СР находились путем сплайн-интерполяции при соответствующей перенормировке на объем элементарной ячейки СР. При этом атомные формфакторы, отвечающие нулевому вектору обратной решетки, полагались равными $-2/3E_F$ [3], где E_F — энергия ферми-газа валентных электронов.

Экспериментально установлено, что вершина валентной зоны AlAs лежит ниже вершины GaAs на величину ~ 0.40 – 0.56 эВ. В нашем расчете эта величина (разрыв зон), как и в [4], принята равной 0.5 эВ. Для обеспечения этого разрыва введена соответствующая поправка в формфакторы, отвечающие нулевому вектору обратной решетки, что учтено при сплайн-интерполяции. Спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу, предложенному в [5].

Расчет ЗС СР $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ проводился в точках $(0, 0, 0)$ и $(2\pi/a, 0, 0)$, где a — постоянная решетки композитов, составляющих СР, и был реализован

следующим образом [2]. Псевдоволновая функция $\psi_{\mu}^{\text{CP}}(\mathbf{q}, \mathbf{r})$ CP разлагалась по собственным функциям $\varphi_{ns}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r})$ псевдогамильтониана сплава $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$

$$\psi_{\mu}^{\text{CP}}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \sum_{i, n, s} A_{ns}^{\mu}(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}) \varphi_{ns}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}), \quad (1)$$

где \mathbf{q} — волновой вектор зоны Бриллюэна (ЗБ) CP; \mathbf{k}_i — волновой вектор ЗБ сплава $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$, такой, что $\mathbf{k}_i - \mathbf{q}$ является вектором обратной решетки CP; n, s — соответственно зонный и спиновый индексы блоховского состояния сплава; μ — зонный индекс блоховского состояния CP. При вычислении функций $\varphi_{ns}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r})$ учитывалось ~ 100 плосковолновых спинов. Коэффициенты разложения $A_{ns}^{\mu}(\mathbf{k}_i, \mathbf{q})$ и энергии $E_{\mu}^{\text{CP}}(\mathbf{q})$ CP состояний $\psi_{\mu}^{\text{CP}}(\mathbf{q}, \mathbf{r})$ находились путем прямой диагонализации матрицы CP псевдогамильтониана, построенной в базе функций $\varphi_{ns}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r})$. Удовлетворительная точность вычисления уровней вблизи вершины валентной зоны CP и соответствующих им CP состояний достигается путем учета в разложении (1) базисных функций $\varphi_{ns}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r})$, отвечающих зоне тяжелых (HH), легких (LH) дырок и спин-отщепленной (SO) зоне для \mathbf{k}_i вблизи центра ЗБ сплава. Для расчета уровней и соответствующих им CP состояний вблизи дна зоны проводимости CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ оказалось достаточным учесть бесспиновые состояния $\varphi_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r})$, которые в каждой точке \mathbf{k}_i отвечают первым двум уровням зоны проводимости сплава $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$.

В результате расчета получено, что края энергетических зон CP располагаются в точках $(0, 0, 0)$ и $(2\pi/a, 0, 0)$ ЗБ CP и имеют сложное, зависящее от n устройство.

Вершина валентной зоны CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 12$) находится в центре ЗБ CP. Два верхних уровня E_v^{CP} ($v=HH, LH$) валентной зоны аналогичны соответствующим уровням в вершине валентной зоны сплава $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$. Именно уровень E_{HH}^{CP} в вершине валентной зоны в основном формируется состояниями тяжелых дырок (HH-подобный уровень) сплава. Уровень E_{LH}^{CP} , отстоящий от HH-уровня E_{HH}^{CP} на величину ≤ 0.055 эВ, формируется в основном состояниями легких дырок (LH-подобный уровень) сплава. Имеющиеся экспериментальные данные [6] находятся в хорошем согласии с этой величиной [0.05 эВ для $(\text{AlAs})_7(\text{GaAs})_7$ и 0.048 эВ для $(\text{AlAs})_{10}(\text{GaAs})_{10}$]. Следующий уровень E_{SO}^{CP} в CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 6$) формируется в основном состояниями спин-отщепленной зоны сплава (SO-подобный уровень) и находится на расстоянии ~ 0.3 эВ. В CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=7, 8, 9$) между LH- и SO-уровнями появляется HH-подобный уровень, формируемый в основном состояниями зоны тяжелых дырок сплава по линии Δ . В CP с $n=10, 11, 12$ между HH- и SO-уровнями появляется еще один LH-подобный уровень, формируемый в основном состояниями легких дырок сплава по линии Δ . В CP с $n=12$ за SO-уровнем располагаются сильно смешанные (HH+SO)- и (LH+SO)-подобные уровни.

Зона проводимости CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ имеет сложное устройство, обусловленное особенностями ЗС AlAs и GaAs. С учетом разрыва зон трехкратно вырожденный уровень $X_{6x, y, z}^c$ на дне зоны проводимости AlAs оказывается расположенным выше дна зоны проводимости GaAs (уровень Γ_6^c) на величину 0.21 эВ. CP потенциал смешивает в центре ЗБ CP X_{6x}^c с Γ_6^c - и Δ -состояниями сплава при нечетных n и X_{6x}^c с Δ -состояниями сплава при четных n . В точке $(2\pi/a, 0, 0)$ ЗБ CP дно зоны проводимости CP формируется в основном X_{6x}^c - и X_{6y}^c -состояниями сплава и его положение определяется расщеплением уровня $X_{6x, y}^c$ с фалерита CP потенциалом V^{CP} . Величина этого расщепления в CP с нечетными n в основном определяется матричными элементами типа

$$2|\langle X_{6x}^c | V^{\text{CP}} | X_{6y}^c \rangle| \sim \frac{1}{n} \left[\left| \Delta V^{\text{III}} \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0 \right) \right| + \left| \Delta V^{\text{V}} \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0 \right) \right| \right], \quad (2)$$

где ΔV^{III} и ΔV^{V} — разности формфакторов атомных псевдопотенциалов элементов III и V групп в AlAs и GaAs. В CP с четными n за счет структурного фактора матричный элемент (2) равен нулю, и положение $X_{6x, y}^c$ -подобного уровня

Теоретические $E(X_z)$, $E(\Gamma)$ и экспериментальные $E_{\text{эксп}}(X_z)$, $E_{\text{эксп}}(\Gamma)$ значения энергий дипольных переходов (в эВ) из вершины валентной зоны на X_z - и Γ -подобные уровни дна зоны проводимости $CP(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ и соответствующие им квадраты модулей $M_{\text{вс}}^{(\perp, \parallel)}$ оптических матричных элементов (в ат. ед.).

n	$E(X_z)$	$E(\Gamma)$	$E_{\text{эксп}}(X_z)$	$E_{\text{эксп}}(\Gamma)$	$M_{\text{вс}}^{(\perp)}(X_z) \cdot 10^{-4}$	$M_{\text{вс}}^{(\parallel)}(X_z) \cdot 10^{-4}$	$M_{\text{вс}}^{(\perp)}(\Gamma) \cdot 10^{-4}$	$M_{\text{вс}}^{(\parallel)}(\Gamma) \cdot 10^{-4}$
1	2.044 (82.0) 2.313 (72.9)	2.354 (60.3)	1.99 [8] 1.931 [9]	2.06 [8]	286.4 400.6	90.5 111.2	746.3	307.6
2	2.015 (90.4) 2.295 (69.1)	2.187 (62.6)	1.968 [9]	—	28.1 485.0	0.5 9.8	1067.3	20.6
3	2.025 (85.9)	2.227 (13.1) 2.242 (81.0)	2.033 [9] 2.051 [6, 7]	2.12 [6, 7]	46.9	0.0	207.6 1285.3	0.1 0.8
4	1.897 (60.5)	2.017 (23.7) 2.169 (67.2)	1.897 [10] 1.964 [9]	2.07 [10]	5.9	0.0	396.6 1129.7	0.0 0.0
5	1.938 (56.2) 2.064 (40.4)	2.161 (91.9)	—	—	9.4 39.1	0.0	1259.3	0.4
6	1.831 (48.9)	1.892 (9.8) 2.027 (75.6)	1.790 [9]	—	3.4	0.0	167.3 1334.4	0.0 0.4
7	1.880 (45.0) 2.0128 (49.3)	2.062 (22.2) 2.098 (43.9) 2.106 (23.6)	1.880 [6, 7]	1.961 [6, 7]	4.3 41.4	0.0 0.0	336.0 679.0 362.9	0.0 0.1
8	1.789 (44.3)	1.818 (9.0) 1.905 (66.1)	1.80 [11]	1.91 [11]	7.0	0.0	165.3 1301.1	0.0 0.1
9	1.851 (42.2) 1.989 (46.1)	1.944 (2.8) 2.035 (82.9)	—	—	2.5 1.3	0.0 0.0	42.2 1374.1	0.0 0.1
10	1.749 (35.0)	1.761 (14.9) 1.804 (50.3)	—	1.763 [6, 7]	58.9	0.0	310.9 1103.4	0.0 0.0
11	1.822 (41.0)	1.872 (1.4) 1.944 (1.1) 1.957 (11.3) 1.963 (62.4)	—	—	1.9	0.0	23.3 24.5 215.9 1214.7	0.0 0.0 0.0 0.0
12	1.744 (42.1)	1.712 (56.0) 1.759 (4.3)	—	—	29.5	0.0	1390.6 120.7	0.0 0.0

Примечание. В круглых скобках рядом со значениями вычисленных энергий переходов указан вклад (в %) состояний X_{6f} и Γ_6 сплава $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ в X_z - и Γ -подобные состояния дна зоны проводимости $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ соответствующего.

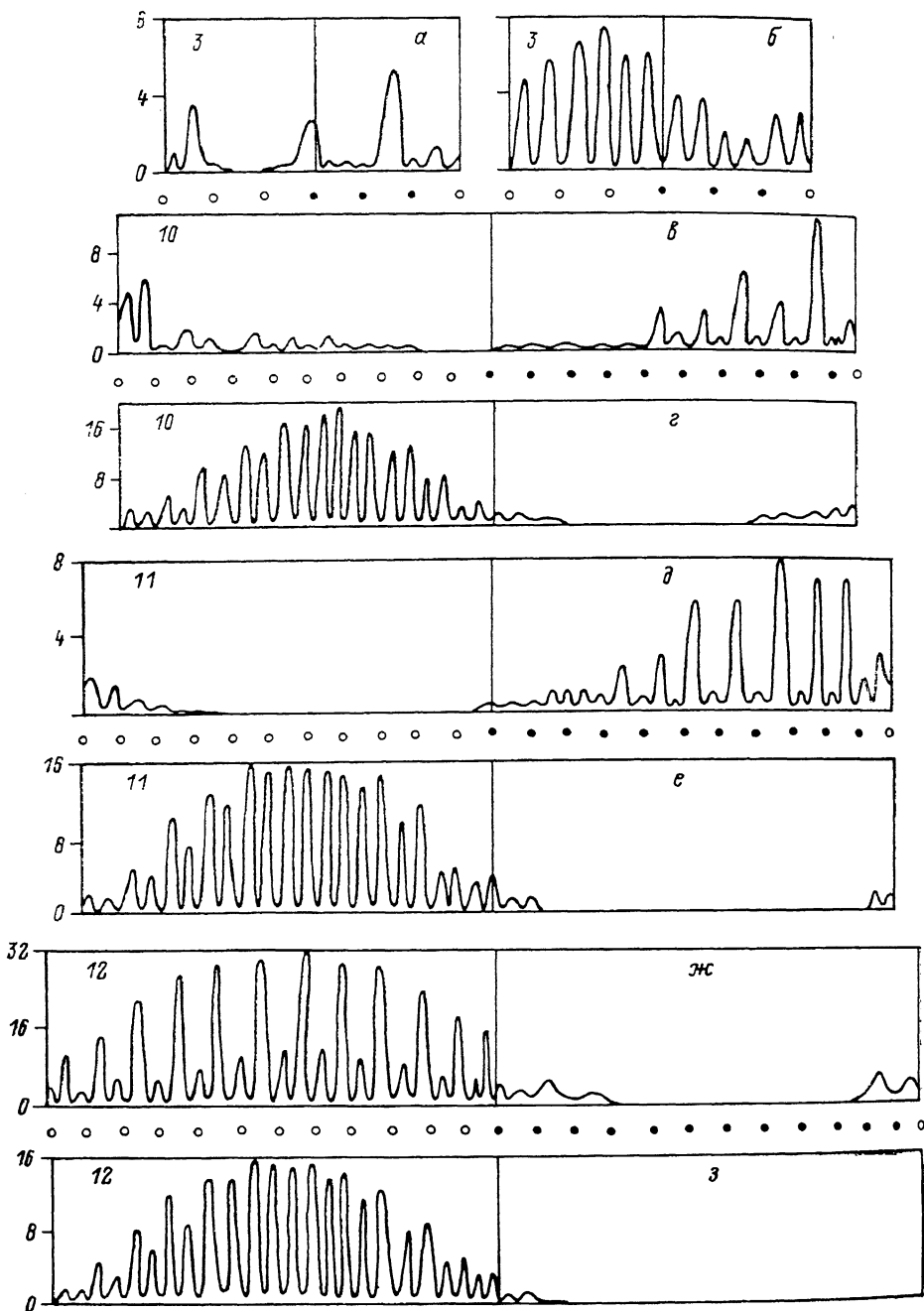
в этом случае определяется смешиванием CP потенциалом $X_{\beta_x, y}^c$ -состояний сплава с состояниями $\varphi_c(\Delta', r)$ по линии $\Delta' = (2\pi/a, 0, 2\pi\mu/a)$ ($0 < \mu < 1$) ЗБ сплава. Используемые в нашем расчете формфакторы на векторе $(2\pi/a, 2\pi/a, 0)$ дают $|\Delta V^{\text{II}}| + |\Delta V^{\text{V}}| \sim 0.09$ эВ. Таким образом, согласно оценке (2), $X_{\beta_x, y}^c$ -уровень фалерпта должен расщепляться на величину $\sim 0.09/n$ эВ. Точные расчеты подтверждают эту оценку.

В случае CP $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_1$ $X_{\beta_x, y}^c$ -подобные уровни оказываются ниже $X_{\beta_x, y}^c$ -уровня на величину порядка 1 мэВ, и, таким образом, расчет дает для этой CP не прямой край поглощения. В [6, 7] по результатам измерения фотолюминесценции делается вывод о том, что край поглощения в CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ ($n=1, 2, \dots, 10$) является непрямым и дно зоны проводимости этих CP находится в точке $(2\pi/a, 0, 0)$ ЗБ CP и является $X_{\beta_x, y}^c$ -подобным. Результаты расчета ЗС $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$ по методу сильной связи [4] также подтверждают этот вывод. Наш расчет согласуется с данными [4, 6, 7] только для случая $n=1$. В CP с $2 \leq n < 12$, согласно нашим результатам, дно зоны проводимости находится в центре ЗБ CP и формируется в основном $X_{\beta_x, y}^c$ - и Δ -состояниями сплава. Таким образом, на краю поглощения имеют место «псевдопрямые» переходы типа $\Gamma \rightarrow X_2, \Delta$ сплава. Для CP с $n=12$ дно зоны проводимости на 53.5 % происходит из уровня Γ_6^c . Таким образом, здесь край поглощения в основном формируется аналогом прямого перехода в сплаве.

Дно зоны проводимости в боковой точке $(2\pi/a, 0, 0)$ ЗБ CP, формируемое в основном $X_{\beta_x, y}^c$ -состояниями сплава, оказывается расположенным выше $X_{\beta_x, y}^c$ -дна на величину ≤ 0.06 эВ в CP с $n=3, 5, 7, 9, 11$ и на величину ≤ 0.14 эВ в CP с четными n . Таким образом, в CP с нечетными n $X_{\beta_x, y}^c$ - и $X_{\beta_x, y}^c$ -уровни оказываются гораздо более близкими, чем в CP с четными n . Причиной этого является отмеченный выше различный характер смешивания CP потенциалом базисных состояний сплава при четных и нечетных n . Эта же причина приводит к немонотонной зависимости ширины запрещенной зоны $E_g(n)$ от числа монослоев в CP $(\text{AlAs})_n(\text{GaAs})_n$. Именно при монотонном убывании $E_g(n)$ в рядах CP с четными либо нечетными n имеют место неравенства $E_g(n) > E_g(n-1)$ при $n=3, 5, 7, 9, 11$. Имеющиеся экспериментальные значения для $E_g^{\text{эксц}}(n)$ подтверждают эту особенность (см. таблицу).

Для выяснения характера оптических переходов в CP нами проведен расчет оптических матричных элементов $M_{v, c}^{\pm, \parallel} = |\langle \psi_{v, c}^{\text{CP}} | P_{\pm, \parallel} | \psi_{v, c}^{\text{CP}} \rangle|^2$ дипольных переходов из верхних уровней валентной зоны на нижние уровни зоны проводимости при параллельной и перпендикулярной поляризациях света по отношению к оси роста CP. В таблице представлены теоретические и экспериментальные значения энергий дипольных переходов из зоны тяжелых дырок на $X_{\beta_x, y}^c$ - и Γ_6^c -уровни зоны проводимости CP и соответствующие им теоретические значения $M_{v, c}^{\pm, \parallel}$. Из таблицы видно, что вычисленные энергии переходов находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными. Переходы из зоны тяжелых дырок на уровни $X_{\beta_x, y}^c$ и Γ_6^c для CP с $n=2-12$ поляризованы преимущественно перпендикулярно оси роста, при этом $M_{v, c}^{\pm, \parallel}$ для переходов на уровень Γ_6^c на 1—2 порядка больше соответствующей величины для переходов на уровень $X_{\beta_x, y}^c$. Переходы с уровней легких дырок на дно зоны проводимости Γ_6^c поляризованы преимущественно параллельно оси роста CP ($M_{v, c}^{\pm, \parallel} / M_{v, c}^{\pm, \perp} \geq \geq 2$). В CP с $n=1$, где имеет место сильное смешивание $X_{\beta_x, y}^c$ - и Γ_6^c -состояний сплава CP потенциалом, переходы не имеют резкой поляризационной зависимости.

Далее нами проведен расчет плотностей заряда $|\psi_{v, c}^{\text{CP}}|^2$ блоховских состояний, отвечающих дну зоны проводимости и вершине валентной зоны CP вдоль связей Ga—As, Al—As, образующих спираль в направлении оси роста CP. Расчет показал, что при $n=1$ электроны и дырки делокализованы по слоям, а при $n=2$ намечается слабая локализация дырок в слое GaAs и электронов в слое AlAs, что находится в соответствии с данными [2]. На рисунке представлены результаты расчета $|\psi_{v, c}^{\text{CP}}|^2$ для $n=3, 10, 11, 12$. Видно, что при $12 > n \geq 3$ имеет место заметная локализация тяжелых дырок в слое GaAs и электронов в слое AlAs. При $n \geq 12$ тяжелые дырки и электроны дна зоны проводимости (в основном Γ_6^c -уровень) локализованы в слое GaAs.



Зарядовые плотности $|\psi_{CP}^2|$ (а, в, д, ж) и $|\psi_{CP}^2|$ (б, г, е, з) (в ед. e/Ω_{CP} , где e — заряд электрона, Ω_{CP} — объем элементарной ячейки (CP), отвечающие состояниям дна зоны проводимости и вершины валентной зоны CP (AlAs)_n(GaAs)_n, соответственно вдоль связей Ga—As, Al—As, образующих спираль в направлении оси роста CP.

Светлые точки — атомы Ga, темные — Al. Цифры слева — значения n .

Список литературы

- [1] Sealy B. J. // J. IERE. 1987. V. 57. N 1. P. S2—S12.
- [2] Gell M. A., Ninno D., Taros M., Herbert D. C. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 4. P. 2416—2427.
- [3] Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М., 1973. 557 с.
- [4] Ihm J. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. N 16. P. 1068—1070.
- [5] Weisz G. // Phys. Rev. 1966. V. 149. N 2. P. 504—518.
- [6] Finkman E., Sturge M. D., Tamargo M. C. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 149. N 19. P. 1299—1301.
- [7] Finkman E., Sturge M. D., Meynadier M. H., Nanory R. E., Tamargo M. C., Hwang D. M., Chang C. C. // J. Luminesc. 1987. V. 39. P. 57—74.
- [8] Van der Ziel J. P., Gossard A. C. // J. Appl. Phys. 1977. V. 48. P. 3018—3023.
- [9] Isu T., Tiang De Sheng, Ploog K. // Appl. Phys. A. 1987. V. 43. P. 75—79.
- [10] Takahashi K., Nayakawa T., Suyama T., Kondo M., Yamamoto S., Mijkata T. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 5. P. 1729—1732.
- [11] Danan G., Etienne B., Mollot F., Planel R., Tean-Louis A. M., Alexandre F., Tusserand B., Le Roux G., Marzin T. X., Savary H., Sermage B. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 12. P. 6207—6212.

Кемеровский государственный университет

Получена 21.06.1989
Принята к печати 16.10.1989