

ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ НЕРЕЗКИЙ ГХ-ГЕТЕРОПЕРЕХОД

Грибников З. С., Райчев О. Э.

На примере гетероперехода GaAs/AlAs рассчитана электропроводность нерезких разнодолинных ГХ-гетеропереходов, обусловленная междолинным рассеянием электронов в переходной области и вблизи нее с испусканием или поглощением междолинных фононов, а также на флуктуациях состава сплава, образующегося в указанной переходной области с шириной a .

Показано, что прозрачность таких контактов для электронов определяется их транспортом через треугольный потенциальный барьер, эффективно образующийся в переходной области, и носит либо чисто туннельный (при низких температурах и малых a), либо термотуннельный (при промежуточных температурах и ширинах), либо термоэмиссионный (при высоких температурах и больших a) характер. Поэтому при низких температурах и больших ширинах a электропроводность такого перехода экспоненциально мала и он является эффективным ГХ-изолатором.

С уменьшением ширины a зависимость прозрачности от a имеет немонотонный вид. Наряду с аналитической теорией в работе приведены результаты численных расчетов.

1. В последние годы появилось много теоретических и экспериментальных сообщений о токопереносе через разнодолинные гетеропереходы (в частности ГХ-гетеропереходы) и гетероструктуры, включающие в себя по несколько таких переходов (см., в частности, наши предыдущие работы [1, 2] и списки литературы в них). Примерами ГХ-переходов служат гетеропары GaAs/AlAs, GaSb/AlSb, InAs/AlSb (см. [3]), а также GaAs/Al_xGa_{1-x}As при $x > 0.45$, InAs/Al_xGa_{1-x}As при $x = 0.5$ (см. [4]), InAs/AlSb_xAs_{1-x} при $x = 0.92$ (см. [5]) и др. Далее все численные оценки и качественные соображения относятся к переходу GaAs/AlAs.

Априори возможны два канала переноса электронов через ГХ-гетеропереходы.

Во-первых, при взаимодействии с резкой гетерограницей существует конечная вероятность прямого и обратного динамического (т. е. бездиссипативного) переноса из Г-долины в Г-материале в ту из X-долин в X-материале, которая позволяет сохранить при таком переносе наряду с полной энергией также и проекцию квазимпульса на плоскость гетерограницы (продольный импульс). Для плоскости (100) — это долина с осью вращения вдоль нормали к гетерогранице (далее X₁-долина). Для гетероплоскости (111) таких долин нет.

Во-вторых, за счет затухающих (туннельных) хвостов волновых функций Г-электронов в X-материале и X-электронов в Г-материале вблизи гетерограницы возможно междолинное ГХ-рассеяние, позволяющее электронам сменить вместе с типом долины и полупроводник. Причиной рассеяния могут быть: а) испускание или поглощение междолинного фона ([1]); б) в случае, когда одна или обе стороны гетероперехода являются сплавом, флуктуации состава сплава (сплавное междолинное рассеяние) [6]; в) шероховатости самой гетерограницы. Такое рассеяние формирует диссипативный канал ГХ-переноса (или ГХ-конверсии).

Динамический ГХ-перенос строго может быть рассмотрен только в микроскопической теории; феноменологический подход, совместимый с методом эффективной массы, был предложен Лью [7] и использован в [1, 8, 9]. Диссипативный перенос [1, 6] изучен только в приближении метода эффективной массы. Все эти рассмотрения относились к предельно резким гетеропереходам.

Здесь представлены расчеты диссипативного ГХ-переноса на плавной гетерогранице. Интерес к этой задаче обусловлен тем, что при толщине гетерограницы a , заметно превосходящей постоянную решетки a_0 , динамический канал переноса должен быть исключен, поскольку для его существования на границе должен теряться либо приобретаться импульс, равный $\hbar/2a_0$. Темп убывания динамического канала с ростом a должен даваться экспонентой $\exp(-a/2a_0)$, поэтому в плавных гетеропереходах сохраняется только диссипативный канал.

Далее использованы гипотезы о линейном изменении состава сплава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в переходной области $0 \leq z \leq a$ (т. е. $x = z/a$) и о линейной интерполяции энергий Г- и X-зон в зависимости от состава сплава. Это позволяет изобразить исследуемый ГХ-гетеропереход в виде, показанном на рис. 1. В энергетическом смысле гетеропереход представляет собой потенциальный барьер высотой $\epsilon_1 = -\Delta_g(\Delta_0 + \Delta_x)/(\Delta_g + \Delta_x)$, имеющий асимметричную треугольную форму. При $\Delta_g = 1.04$, $\Delta_0 = 0.18$, $\Delta_0 + \Delta_x = 0.49$ эВ имеем $\epsilon_1 = 0.39$ эВ, причем вершина расположена при $z_1 = a(\Delta_0 + \Delta_x)/(\Delta_g + \Delta_x) = 0.38a$.

Электроны могут преодолевать этот барьер либо посредством термоэмиссии поверх вершины (имея энергию $\epsilon > \epsilon_1$), либо туннельным путем (при $\Delta_0 < \epsilon < \epsilon_1$). Не следует лишь забывать о том, что в обоих случаях им необходимо пройти через ГХ-конверсию, т. е.

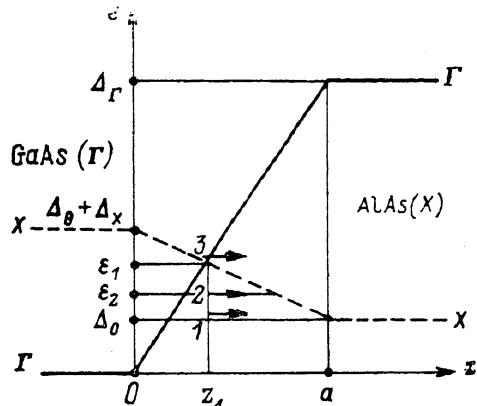


Рис. 1. Ход Г- и X-долин в плавном гетеропереходе.

рассеяться из Г-состояния в X-состояние (или наоборот). Далее рассмотрены отмеченные ранее рассеяния как на междолинных фононах, так и на флуктуациях состава сплава в переходной области. Особо отметим, что появление в плавных гетеропереходах заведомо сплавной переходной области приводит к существованию сплавного междолинного рассеяния и, следовательно, соответствующего канала ГХ-конверсии в тех случаях, когда в резких переходах данный канал принципиально отсутствовал, например в случае GaAs/AlAs-гетероперехода. При этом заранее очевиден характер зависимости обусловленной сплавным рассеянием проводимости такого перехода от толщины переходной области a . При $a=0$ она отсутствует, с ростом a растет пропорционально a , проходит через максимум и далее экспоненциально спадает с падением туннельной прозрачности треугольного барьера (рис. 1). Такая зависимость, разумеется, характерна для достаточно низких температур, когда доля термоэмиссии через указанный барьер несущественна. Максимум тока достигается при $a \approx a_g, a_{X_1}$, где

$$a_g = \hbar/(2m_g^{(+)}V_g)^{1/2}, \quad a_{X_1} = \hbar/(2M_X^{(-)}V_X)^{1/2}, \quad a_{X_2} = \hbar/(2m_X^{(-)}V_X)^{1/2},$$

$m_g^{(+)}$ — масса Г-электронов в X-области, $M_X^{(-)}$ и $m_X^{(-)}$ — поперечная и продольная массы X-электронов в Г-области, a_g и a_{X_1} — характерные длины затухания хвостов волновых функций Г- и X-электронов на сторонах, где они являются неосновными носителями. Расчеты, описанные далее, дадут именно такую зависимость токовой прозрачности гетеробарьера от a .

Для составляющей тока, обусловленной междолинным фононным рассеянием, из-за монотонного уменьшения туннельной прозрачности треугольного барьера с ростом a следовало бы ожидать точно такого же монотонного спада. Однако и здесь расчет дает немонотонный ход зависимости от a с максимумом тока при тех же приближительно значениях a , что и для сплавного рассеяния. При этом ток в максимуме возрастает по сравнению с током при $a=0$ в 1.5—2 раза.

Использовано два «способа» получения расчетных результатов. Центральной частью расчета является вычисление матричного элемента междолинного рассеяния.

В первом способе этот элемент определялся численно после точного решения уравнений Шредингера, однако при этом предполагалась неизменность во всей переходной области эффективных масс как Γ -, так и X -электронов. Результаты этих вычислений представлены в виде графиков в п. 5.

Другой способ, основанный на асимптотическом вычислении матричного элемента, справедлив при

$$a \gg a_{\Gamma}, \quad a_{X_{1,2}}, \quad (1)$$

исходно свободен от предположения о постоянстве масс и позволяет (с определенными упрощениями) представить результаты расчета аналитически. В п. 4 эти результаты приводятся также в предположении неизменных масс.

2. Плотность тока, переносимого через лежащий в плоскости (100) гетеропереход, состоит из трех составляющих, соответствующих трем эквивалентным X -долинам в X -полупроводнике. Полагая составляющие тока, относящиеся к долинам, чьи оси вращения параллельны плоскости перехода, одинаковыми, запишем

$$J = J_{\Gamma X_1} + 2J_{\Gamma X_2}. \quad (2)$$

Каждая из этих составляющих в свою очередь состоит из трех слагаемых, отвечающих рассеянию с поглощением междолинных фононов, с их испусканием и передачей импульса флюктуациям состава сплава:

$$J_{\Gamma X_{1,2}} = J_{\Gamma X_{1,2}}^{(+)} + J_{\Gamma X_{1,2}}^{(-)} + J_{\Gamma X_{1,2}}^{(0)}. \quad (3)$$

Слагаемые из правой части (3) запишем в виде

$$\begin{aligned} J_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)} &= e \sum_{\substack{k_1, k_2; \\ k'_1, k'_2}} \bar{W}_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}(k_1, k_2; k'_1, k'_2) \{ f_{\Gamma}^{(>)}(k_1, k_2) (1 - f_{X_{1,2}}^{(<)}(k'_1, k'_2)) - \\ &- f_{X_{1,2}}^{(>)}(k'_1, k'_2) (1 - f_{\Gamma}^{(<)}(k_1, k_2)) \}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $f_{\Gamma}^{(\gtrless)}(k_1, k_2)$ и $f_{X_{1,2}}^{(\gtrless)}(k'_1, k'_2)$ — функции распределения электронов в Γ - и X -полупроводниках около гетероперехода, причем индекс $(>)$ соответствует электронам, движущимся на своей стороне к гетеропереходу, а $(<)$ — от него (т. е. отраженным), $\bar{W}_{\Gamma X_{1,2}}$ — вероятность рассеяния из Γ -долины (в Γ -материале) в $X_{1,2}$ -долину (в X -материале) или равная ей вероятность обратного процесса. Пропущенные индексы в $J_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}$ и $\bar{W}_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}$ принимают значения «+», «-» или f . В приближении однородной фононной среды (т. е. предполагается отсутствие пространственной зависимости плотности среды ρ , частоты междолинного фона $\omega_{\Gamma X}$ и потенциала электрон-фононного взаимодействия с этим фононом $D_{\Gamma X}$) для вероятностей рассеяния на фонах получим [1]

$$\begin{aligned} \bar{W}_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}(k_1, k_2; k'_1, k'_2) &= \frac{\pi D_{\Gamma X}^2}{\omega_{\Gamma X} L^6} \left(N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{\Gamma}(k_1, k_2) - \varepsilon_{X_{1,2}}(k'_1, k'_2) - \\ &- \Delta_0 \mp h\omega_{\Gamma X}) \int_{-\infty}^{\infty} dz |F_{\Gamma}(k_1, k_2, z)|^2 |F_{X_{1,2}}(k'_1, k'_2, z)|^2, \end{aligned} \quad (5)$$

где $N_{\Gamma X}$ — число междолинных фононов (с частотой $\omega_{\Gamma X}$), определяемое формулой Планка, $\varepsilon_{\Gamma} = \frac{\hbar^2(k_1^2 + k_2^2)}{2m_{\Gamma}^{(-)}}$, $\varepsilon_{X_1} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1'^2}{M_X^{(+)}} + \frac{k_2'^2}{m_X^{(+)}} \right)$, $\varepsilon_{X_2} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1'^2 + k_2'^2}{m_X^{(+)}} + \frac{k_y'^2}{M_X^{(+)}} \right)$, $m_{\Gamma}^{(-)}$ — эффективная масса Γ -электронов в Γ -области, $M_X^{(+)}$ и $m_X^{(+)}$ — продольная и поперечная массы X -электронов в X -области, Δ_0 — показанный на рис. 1 энергетический ΓX -зазор, L — размер нормировочного объема, вынадающий из копечных формул после выполнения суммирования в (4). Фигурирующие в (5)

функции F_Γ и $F_{X_{1,2}}$ определяются выражениями для огибающих волновых функций электронов

$$\Psi_\Gamma(\mathbf{r}, z) = F_\Gamma(\mathbf{k}, k_x, z) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \Psi_{X_{1,2}}(\mathbf{r}, z) = F_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k'_x, z) e^{i(k'_x x + k'_y y)}, \quad (5')$$

$$\mathbf{r} = (x, y).$$

Для вероятности рассеяния на флуктуациях сплава аналогичная (5) формула имеет (см. *Приложение*) вид

$$\tilde{W}_{\Gamma X_{1,2}}^{(j)}(\mathbf{k}, k_z; \mathbf{k}', k'_z) = \frac{2\pi}{\hbar L^6} C_{\Gamma X} \delta(\varepsilon_\Gamma(\mathbf{k}, k_x) - \varepsilon_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k'_x) - \Delta_0) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dz x(z) (1 - x(z)) |F_\Gamma(\mathbf{k}, k_z, z)|^2 |F_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k'_z, z)|^2. \quad (6)$$

От формулы, фактически использованной Прайсом [6], выражение (6) отличается учетом пространственной зависимости $x(z)$ — относительной доли молекул одного типа в бинарном сплаве. В численных оценках принято то же самое значение константы междолинного рассеяния, что и в [6]: $C_{\Gamma X} \approx 0.5 \cdot 10^{-22}$ (эВ)²·см³.

Ввиду малости определяемых формулами (5) и (6) вероятностей рассеяния функции распределения $f(>)$ в (4) практически не отличимы от $f(<)$ (пока речь идет об энергиях, недостаточных для непосредственного перехода по какой-либо из зон без ГХ-конверсии).

Из формул (4)–(6) видно, что задача практически связана с вычислением волновых функций $F_\Gamma(z)$, $F_{X_{1,2}}(z)$ и определяемых ими интегралов в правых частях (5) и (6).

Функция F_Γ задается уравнением

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_\Gamma(z)} \frac{dF_\Gamma}{dz} \right) + \left[\frac{k_z^2}{m_\Gamma^{(-)}} - \frac{2V_\Gamma(z)}{\hbar^2} - k^2 \left(\frac{1}{m_\Gamma(z)} - \frac{1}{m_\Gamma^{(-)}} \right) \right] F_\Gamma = 0, \quad (7)$$

где

$$V_\Gamma(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \Delta_\Gamma z/a, & 0 < z < a, \\ \Delta_\Gamma, & z > a, \end{cases}$$

$m_\Gamma(z) = m_\Gamma^{(-)}$ при $z < 0$, $m_\Gamma^{(+)}$ при $z > a$, и плавно изменяется от $m_\Gamma^{(-)}$ до $m_\Gamma^{(+)}$ в переходной области. При $\frac{k_z^2}{m_\Gamma^{(-)}} < \frac{2\Delta_\Gamma}{\hbar^2} + k^2 \left(\frac{1}{m_\Gamma^{(+)}} - \frac{1}{m_\Gamma^{(-)}} \right)$ нас интересует решение, экспоненциально затухающее при $z \rightarrow \infty$ и являющееся стоячей волной при $z \rightarrow -\infty$.

Функция F_{X_1} определяется из уравнения

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{M_X(z)} \frac{dF_{X_1}}{dz} \right) + \left[\frac{k_z'^2}{M_X^{(+)}} - \frac{2(V_X(z) - \Delta_0)}{\hbar^2} - k'^2 \left(\frac{1}{M_X(z)} - \frac{1}{M_X^{(+)}} \right) \right] F_{X_1} = 0, \quad (8)$$

где

$$V_X(z) = \begin{cases} \Delta_0 + \Delta_X, & z < 0, \\ \Delta_0 + \Delta_X(1 - z/a), & 0 < z < a, \\ \Delta_0, & z > a, \end{cases}$$

а $m_X(z)$ и $M_X(z)$ изменяются от $m_X^{(-)}$ и $M_X^{(-)}$ при $z < 0$ до $m_X^{(+)}$ и $M_X^{(+)}$ при $z > a$. Интерес представляет решение (8), имеющее при $\frac{k_z'^2}{M_X^{(+)}} < \frac{2\Delta_X}{\hbar^2} + k'^2 \left(\frac{1}{m_X^{(-)}} - \frac{1}{m_X^{(+)}} \right)$ вид стоячей волны при $z \rightarrow \infty$ и затухающее при $z \rightarrow -\infty$.

Нетрудно также записать подобное (8) уравнение, определяющее F_{X_2} .

3. В плавных гетеропереходах, где выполнено условие (1), для асимптотического вычисления интегралов в (5) и (6) можно использовать ВКБ приближение.

В этом приближении из (7) следует

$$F_{\Gamma}(z) = 2 \sqrt{\frac{\alpha_{\Gamma}(z) k_z}{k_{\Gamma}(z)}} \sin \left(\int_{z_{\Gamma}}^z k_{\Gamma}(z') dz' + \frac{\pi}{4} \right) \text{ при } z < z_{\Gamma}, \quad (9)$$

$$F_{\Gamma}(z) = \sqrt{\frac{\alpha_{\Gamma}(z) k_z}{|k_{\Gamma}(z)|}} \exp \left(- \int_{z_{\Gamma}}^z |k_{\Gamma}(z')| dz' \right) \text{ при } z > z_{\Gamma}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{\Gamma}(z) &= \frac{m_{\Gamma}(z)}{m_{\Gamma}^{(-)}} , \quad k_{\Gamma}^2(z) = k_z'^2 \alpha_{\Gamma}(z) - \frac{2V_{\Gamma}(z)}{\hbar^2} m_{\Gamma}(z) - \\ &- k^2 (1 - \alpha_{\Gamma}(z)) + \frac{1}{2} \frac{\alpha''_{\Gamma}}{\alpha_{\Gamma}} - \frac{3}{4} \left(\frac{\alpha'_{\Gamma}}{\alpha_{\Gamma}} \right)^2 , \end{aligned}$$

$z_{\Gamma} = z_{\Gamma}(k, k_z)$ — классическая точка поворота, определяемая условием $k_{\Gamma}(z_{\Gamma}) = 0$; решения (9) и (10) естественно отказывают в близкой окрестности z_{Γ} . Аналогично имеем

$$F_{X_{1,2}}(z) = 2 \sqrt{\frac{\alpha_{X_{1,2}}(z) k_z'}{|k_{X_{1,2}}(z)|}} \sin \left(\int_{z_{X_{1,2}}}^z k_{X_{1,2}}(z') dz' + \frac{\pi}{4} \right) \text{ при } z > z_{X_{1,2}}, \quad (9')$$

$$F_{X_{1,2}}(z) = \sqrt{\frac{\alpha_{X_{1,2}}(z) k_z'}{|k_{X_{1,2}}(z)|}} \exp \left(- \int_z^{z_{X_{1,2}}} |k_{X_{1,2}}(z')| dz' \right) \text{ при } z < z_{X_{1,2}}, \quad (10')$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{X_1}(z) &= \frac{M_X(z)}{M_X^{(+)}} , \quad \alpha_{X_2}(z) = \frac{m_X(z)}{m_X^{(+)}} , \quad k_{X_1}^2(z) = k_z'^2 \alpha_{X_1}(z) - \frac{2(V_X(z) - \Delta_0)}{\hbar^2} M_X(z) - \\ &- \frac{M_X(z)}{m_X(z)} k_z'^2 (1 - \alpha_{X_1}(z)) + \frac{1}{2} \frac{\alpha''_{X_1}}{\alpha_{X_1}} - \frac{3}{4} \left(\frac{\alpha'_{X_1}}{\alpha_{X_1}} \right)^2 , \\ k_{X_2}^2(z) &= k_z'^2 \alpha_{X_2}(z) - \frac{2(V_X(z) - \Delta_0)}{\hbar^2} m_X(z) - k_z'^2 (1 - \alpha_{X_2}(z)) - \\ &- \frac{m_X(z)}{M_X(z)} k_z'^2 (1 - \alpha_{X_1}(z)) + \frac{1}{2} \frac{\alpha''_{X_2}}{\alpha_{X_2}} - \frac{3}{4} \left(\frac{\alpha'_{X_2}}{\alpha_{X_2}} \right)^2 ; \end{aligned}$$

положение классических точек поворота $z_{X_{1,2}}(k', k_z')$ определяются условием $k_{X_{1,2}}(z_{X_{1,2}}) = 0$.

При $z_{X_{1,2}} > z_{\Gamma}$ и

$$\left| \int_{z_{\Gamma}}^{z_{X_{1,2}}} |k_{\Gamma, X_{1,2}}| dz \right| \gg 1 \quad (1')$$

[это последнее условие несколько сильнее общего условия (1)] упомянутые интегралы определяются экспоненциально убывающими хвостами функций (10), (10') и могут быть вычислены по методу перевала в точке $z = z_0$, определяемой условием

$$|k_{\Gamma}(z_0)| = |k_{X_{1,2}}(z_0)| = 0.$$

Интеграл из (5) при этом равен

$$S_{\Gamma X_{1,2}} = \frac{\alpha_\Gamma(z_0) \alpha_{X_{1,2}}(z_0)}{|\kappa_\Gamma(z_0)| |\kappa_{X_{1,2}}(z_0)|} k_z k'_z \frac{\pi^{1/2}}{(|\kappa_\Gamma(z_0)|' - |\kappa_{X_{1,2}}(z_0)|')^{1/2}} \times \\ \times \exp \left(-2 \int_{z_\Gamma}^{z_0} |\kappa_\Gamma(z)| dz - 2 \int_{z_0}^{z_{X_{1,2}}} |\kappa_{X_{1,2}}(z)| dz \right). \quad (11)$$

Аналогичный интеграл из (6) равен $X(z_0)(1-X(z_0)) S_{\Gamma X_{1,2}}$.

При $z_{X_{1,2}} < z_\Gamma$ и выполнении (1') можно пренебречь при интегрировании в (5) и (6) областями вне интервала $(z_{X_{1,2}}, z_\Gamma)$ и ограничиться интегрированием только в его пределах, используя (9) и (9'):

$$S_{\Gamma X_{1,2}} \simeq 4 k_z k'_z \int_{z_{X_{1,2}}}^{z_\Gamma} dz \frac{\alpha_\Gamma(z) \alpha_{X_{1,2}}(z)}{|\kappa_\Gamma(z)| |\kappa_{X_{1,2}}(z)|}; \quad (12)$$

при этом пренебрегается вкладом осциллирующих слагаемых из подынтегрального выражения в (5).

Выписанные в данном разделе формулы и дальнейшие выкладки существенно упрощаются при независимости эффективных масс от z , т. е. при $\alpha_\Gamma = \alpha_{X_{1,2}} = 1$. В то же время такое предположение не приводит к заметным качественным потерям в результате, поэтому далее все результаты приведены именно в этом приближении.

При постоянстве масс в области $0 < z < a$ имеем

$$\kappa_\Gamma^2(z) = \frac{2m_\Gamma \Delta_\Gamma}{\hbar^2 a} (z_\Gamma - z), \quad \kappa_{X_1}^2 = \frac{2M_X \Delta_X}{\hbar^2 a} (z - z_{X_1}), \\ \kappa_{X_2}^2 = \frac{2m_X \Delta_X}{\hbar^2 a} (z - z_{X_2}),$$

где

$$z_\Gamma = a \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\Gamma \Delta_\Gamma}, \quad z_{X_1} = a \left(1 - \frac{\hbar^2 k_z'^2}{2M_X \Delta_X} \right), \\ z_{X_2} = a \left(1 - \frac{\hbar^2 k_z'^2}{2m_X \Delta_X} \right).$$

Волновые функции (9), (10), (9') и (10') имеют вид

$$F_\Gamma(z) = \left(\frac{z_\Gamma}{z - z_\Gamma} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{2}{3} \frac{k_z}{z_\Gamma^{1/2}} (z - z_\Gamma)^{3/2} \right) \quad \text{при } z > z_\Gamma, \\ F_\Gamma(z) = 2 \left(\frac{z_\Gamma}{z_\Gamma - z} \right)^{1/4} \sin \left(\frac{2}{3} \frac{k_z}{z_\Gamma^{1/2}} (z_\Gamma - z)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \quad \text{при } 0 < z < z_\Gamma, \\ F_\Gamma(z) = 2 \sin \left(\frac{2}{3} k_z z_\Gamma + \frac{\pi}{4} - k_z z \right) \quad \text{при } z < 0, \quad (10') \\ F_{X_{1,2}}(z) = \left(\frac{a - z_{X_{1,2}}}{z_{X_{1,2}} - z} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{2}{3} \frac{k_z'}{(a - z_{X_{1,2}})^{1/2}} (z - z_{X_{1,2}})^{3/2} \right) \quad \text{при } z < z_{X_{1,2}}, \\ F_{X_{1,2}}(z) = 2 \left(\frac{a - z_{X_{1,2}}}{z - z_{X_{1,2}}} \right)^{1/4} \sin \left(\frac{2}{3} k_z' \frac{(z - z_{X_{1,2}})^{3/2}}{(a - z_{X_{1,2}})^{1/2}} + \frac{\pi}{4} \right) \quad \text{при } z_{X_{1,2}} < z < a, \\ F_{X_{1,2}}(z) = 2 \sin \left(\frac{2}{3} k_z' (a - z_{X_{1,2}}) + \frac{\pi}{4} + k_z' (z - a) \right) \quad \text{при } z > a.$$

Интеграл перекрытия (11) в области $1 > \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\Gamma \Delta_\Gamma} + \frac{\hbar^2 k_z'^2}{2m_X \Delta_X}$ для электронов, переходящих в X_2 -долину, равен

$$S_{\Gamma X_2} = \frac{h^{3/2} \sqrt{\pi a} k_z k'_z (m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X)^{1/4}}{(2m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X)^{1/4} \left(1 - \frac{h^2 k_z^2}{2m_\Gamma \Delta_\Gamma} - \frac{h^2 k'_z^2}{2m_X \Delta_X} \right)^{3/4}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{4a}{3\hbar} \left(\frac{2m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{h^2 k_z^2}{2m_\Gamma \Delta_\Gamma} - \frac{h^2 k'_z^2}{2m_X \Delta_X} \right)^{3/2} \right\}. \quad (11')$$

Соответствующий интеграл для электронов, переходящих в X_1 -долину, $S_{\Gamma X_1}$, получается из $S_{\Gamma X_2}$, посредством замены всюду поперечной массы m_X на продольную M_X . (Следствие такой замены сказывается незамедлительно: тунNELьная экспонента для тяжелых X_1 -электронов при больших a пренебрежимо мала по сравнению с тунNELьной экспонентой для легких X_2 -электронов).

Нормировка функции $F_{X_1,2}(z)$, даваемой формулой (10'), а следовательно, и формула (11'), использующая вид $F_{X_1,2}(z)$, справедливы при достаточно больших k'_z :

$$k_z'^3 \frac{ah^2}{3M_X \Delta_X} \gg 1, \quad k_z'^3 \frac{ah^2}{3m_X \Delta_X} \gg 1. \quad (13)$$

Однако при низких температурах (см. далее) существенным оказывается переход электронов из Γ -долины на самое дно X -долин (и обратно), так что вместо (13) выполняются противоположные по смыслу сильные неравенства. В этом последнем случае вместо (10') следует использовать функцию

$$F_{X_1,2}(z) = \frac{|k'_z(a - z_{X_1,2})|^{1/4}}{C_2 \sqrt{\pi}} \left(\frac{a - z_{X_1,2}}{z_{X_1,2} - z} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{2}{3} k'_z \frac{(z_{X_1,2} - z)^{3/2}}{(a - z_{X_1,2})^{1/2}} \right\}, \quad (10'')$$

где $C_2 = |\text{Ai}'(0)| = 3^{-1/4}/\Gamma(1/3)$, $\text{Ai}(z)$ — функция Эйри, $\text{Ai}'(z) = d\text{Ai}(z)/dz$ (см., например, [10]). При этом в правой части (11') должен быть дописан множитель $[k'_z(a - z_{X_1,2})]^{1/4} \pi C_2^2$.

В области $\frac{h^2 k_z^2}{2m_\Gamma \Delta_\Gamma} + \frac{h^2 k'_z^2}{2m_X \Delta_X} > 1$ для электронов, переходящих в X_2 -долину, из (12) следует

$$S_{\Gamma X_2} = \frac{2\pi h^2 k_z k'_z}{\sqrt{m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}} a. \quad (12')$$

Интеграл $S_{\Gamma X_1}$ получается путем замены в правой части (12') m_X на M_X .

4. Подставляя интегралы (11'), (12') и их аналоги в формулы (5) и (6), а затем вычисленные вероятности $W_{\Gamma X_1}$, — в (4), вычислим парциальные и полные токи носителей через гетеропереход. Функции распределения Γ - и X -электронов полагаем невырожденными с температурой T , равной также температуре решетки. Ток J , определяемый формулой (2), представим в виде, использованном, в частности, в предыдущей работе [11]:

$$J = e(D_{\Gamma} v_{\Gamma} n_{\Gamma} e^{-\Delta_{\Gamma} T} - D_X v_X n_X), \quad (14)$$

где $v_{\Gamma} = \sqrt{3T/m_{\Gamma}}$ — средняя тепловая скорость Γ -электронов, n_{Γ} — их концентрация, v_X , n_X — аналогичные величины для X -электронов, D_{Γ} , D_X — «прозрачности», усредненные по распределению коэффициенты прохождения гетероперехода слева направо и обратно. Прозрачность $D_{\Gamma}(T, a)$ [в соответствии с формулами (2) и (3)] может быть записана в виде

$$D_{\Gamma} = D_{\Gamma X_1}^{(+)} + D_{\Gamma X_1}^{(-)} + D_{\Gamma X_1}^{(\cdot)} + 2(D_{\Gamma X_2}^{(+)} + D_{\Gamma X_2}^{(-)} + D_{\Gamma X_2}^{(\cdot)}); \quad (15)$$

в качестве результатов приведены именно полная прозрачность D_{Γ} и ее составляющие.

При выполнении сильных неравенств (1), а также условия

$$T \ll \Delta_{\Gamma}, \quad \Delta_X \quad (16)$$

возникают три температурных диапазона:

$$1) \quad T < T_{c1}, \quad 2) \quad T_{c1} < T < T_{c2}, \quad 3) \quad T > T_{c2}. \quad (17)$$

Эти диапазоны различны для прозрачностей, обусловленных переходами в X_1 -и X_2 -долины, т. е. критические температуры $T_{c1,2}$ зависят также от индексов X_1 и X_2 .

Первый диапазон характеризуется чисто туннельной ГХ-конверсией электронов, проникающих из одного материала в другой вдоль основания треугольного барьера (стрелка 1 на рис. 1) и имеющих энергию поперечного движения $\hbar^2 k_x^2 / 2m_\Gamma = \Delta'_0$, где $\Delta'_0 = \Delta_0$ для рассеяния на сплаве и $\Delta'_0 = \Delta_0^{(\pm)} = \Delta_0 \pm \hbar\omega_{\Gamma X}$ для фононного рассеяния. В этом диапазоне следует использовать функцию $F_{X_1,2}(z)$, определяемую формулой (10'''').

При $T < T_{c1}$ имеем

$$D_{\Gamma X_2}^{(\pm)} = \frac{1}{64} \frac{3^{5/4} \Gamma^2 \left(\frac{2}{3}\right)^{2^{5/12}}}{\pi^{3/2} \hbar^{5/4} a^{1/8}} \Delta_X \frac{D_{\Gamma X}^2 \left(N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)}{\rho \hbar \omega_{\Gamma X} T^2} (m_X M_X)^{1/2} \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma}{m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \times \\ \times (m_X \Delta_X)^{5/12} \left(1 + \frac{m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma}\right)^{3/4} \left(1 - \frac{\Delta_0^{(\pm)}}{\Delta_1}\right)^{-5/4} \times \\ \times \left[\frac{\Delta_X}{T} - 2 \left(1 + \frac{\Delta_X}{\Delta_\Gamma}\right) \left(1 - \frac{\Delta_0^{(\pm)}}{\Delta_\Gamma}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{2}}{\hbar} a \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \right]^{-5/2} \times \\ \times \exp \left\{ \mp \frac{\hbar \omega_{\Gamma X}}{T} - \frac{4}{3} \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{2}}{\hbar} a \left(1 - \frac{\Delta_0^{(\pm)}}{\Delta_\Gamma}\right)^{3/2} \right\}, \quad (18)$$

$$D_{\Gamma X_2}^{(f)} = \frac{1}{32} \frac{3^{5/4} \Gamma^2 \left(\frac{2}{3}\right)^{2^{5/12}}}{\pi^{3/2} \hbar^{5/4} a^{1/8}} \frac{C_{\Gamma X}}{\hbar^2 T^2} \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_\Gamma} + \frac{m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma}\right) (m_X M_X)^{1/2} \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma}{m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \times \\ \times (m_X \Delta_X)^{5/12} \left(1 + \frac{m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma}\right)^{-3/4} \left(1 - \frac{\Delta_0}{\Delta_\Gamma}\right)^{-1/4} \left[\frac{\Delta_X}{T} - 2 \left(1 + \frac{\Delta_X}{\Delta_\Gamma}\right) \left(1 - \frac{\Delta_0}{\Delta_\Gamma}\right)^{1/2} \right]^{-5/2} \times \\ \times \frac{\sqrt{2}}{\hbar} a \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{4}{3} \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma m_X \Delta_X}{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{2}}{\hbar} a \left(1 - \frac{\Delta_0}{\Delta_\Gamma}\right)^{3/2} \right\}. \quad (19)$$

Аналогичные выражения для $D_{\Gamma X}^{(X)}$, пригодные при $T < T_{c1}^{(X)}$, получаются при замене в правых частях (18), (19) $(m_X M_X)^{1/2}$ на m_X , а во всех остальных позициях — m_X на M_X . Структурная зависимость от ширины перехода a выражается в этих формулах множителем $\exp(-a/a_1)$, причем характеристическая длина затухания $a_1 = 3/4 (1 - \Delta'_0/\Delta_\Gamma)^{-1/2} \sqrt{a_\Gamma^2 + a_{X_1,2}^2}$, где по-прежнему $\Delta'_0 = \Delta_0$ или $\Delta_0^{(\pm)}$. Как указывалось выше, данные результаты справедливы при $a \gg a_1$. Длина a_1 различна для ΓX_1 - и ΓX_2 -конверсий, как видно из ее определения.

Температура T_{c1} , ограничивающая сверху туннельный диапазон, дается формулой

$$T_{c1}^2 = \left(\frac{\hbar}{2a}\right)^2 \left(\frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}{2m_\Gamma m_X}\right) \frac{\Delta_X \Delta_\Gamma}{(\Delta_\Gamma - \Delta'_0)(\Delta_X + \Delta_\Gamma)^2}, \quad (20)$$

причем формула (20) относится к ΓX_2 -переносу, для ΓX_1 -переноса следует заменить m_X на M_X , то же относится к формулам (21), (22), следующим далее.

Второй температурный диапазон, ограниченный температурами $T_{c1,2}^{X_1,2}$ снизу, характеризуется промежуточным типом ГХ-конверсии, носящей здесь термотуннельный характер, ток переносится электронами с энергией вблизи

$$\epsilon_2 = \epsilon'_1 - \frac{\hbar^2 \Delta_X^2 \Delta_\Gamma^2}{8a^2 T^2} \frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}{m_\Gamma m_X (\Delta_\Gamma + \Delta_X)^3}, \quad (21)$$

где $\varepsilon'_1 = \Delta_\Gamma \frac{\Delta_X + \Delta'_0}{\Delta_X + \Delta_\Gamma}$ (т. е. отличается от введенной выше вершины треугольного барьера ε_1 заменой Δ_0 на Δ'_0). Из формулы (21) видно, что ε_2 лежит всегда под эффективной вершиной ε'_1 , т. е. конвертирующие электроны туннелируют сквозь барьер выше его основания Δ'_0 (стрелка 2 на рис. 1). Формула (20) получается из (21) при подстановке $\varepsilon_2 = \Delta'_0$. С ростом температуры T энергия ε_2 приближается к ε'_1 , причем разница этих энергий становится несущественным при $T > T_{c2}$, где T_{c2} определяется формулой

$$T_{c2}^3 = \frac{\Delta_X^2 \Delta_\Gamma^2 \hbar^2}{8a^2 m_\Gamma m_X} \frac{m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X}{(\Delta_\Gamma + \Delta_X)^3}, \quad (22)$$

которую нетрудно получить, используя правую часть (21).

В диапазоне $T_{c1} < T < T_{c2}$ вместо формул (18) и (19) справедливы зависимости

$$D_{\Gamma X_1}^{(\pm)} = \frac{1}{2\sqrt{6}\pi} \frac{m_X (m_\Gamma M_X)^{1/2} D_{\Gamma X}^2}{\hbar^3 \omega_{\Gamma X} (\Delta_\Gamma \Delta_X)^{3/2}} a T (\Delta_\Gamma + \Delta_X)^2 \left(N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \exp \left\{ \mp \frac{i\hbar\omega_{\Gamma X}}{T} - \frac{\Delta_X (\Delta_\Gamma - \Delta_0^{(\pm)})}{(\Delta_\Gamma + \Delta_X) T} + \frac{\hbar^2 \Delta_\Gamma^2 \Delta_X^2 (m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X)}{24 m_\Gamma m_X a^2 T^3 (\Delta_\Gamma + \Delta_X)^3} \right\}, \quad (23)$$

$$D_{\Gamma X_1}^{(J)} = \frac{1}{\sqrt{6}\pi} \frac{m_X (m_\Gamma M_X)^{1/2} C_{\Gamma X}}{\hbar^4 (\Delta_\Gamma \Delta_X)^{3/2}} a T (\Delta_0 + \Delta_X + \Delta_c) (\Delta_\Gamma - \Delta_0 - \Delta_c) \times \\ \times \exp \left\{ - \frac{\Delta_X (\Delta_\Gamma - \Delta_0)}{(\Delta_\Gamma + \Delta_X) T} + \frac{\hbar^2 \Delta_X^2 \Delta_\Gamma^2 (m_\Gamma \Delta_\Gamma + m_X \Delta_X)}{24 m_\Gamma m_X a^2 T^3 (\Delta_\Gamma + \Delta_X)^3} \right\}, \quad (24)$$

где

$$\Delta_c = \frac{m_X - m_\Gamma}{8m_X m_\Gamma} \left[\frac{\hbar \Delta_\Gamma \Delta_X}{a T (\Delta_\Gamma + \Delta_X)} \right]^2.$$

При переходе к $D_{\Gamma X_1}^{(\pm)}$ в формуле (23) сохраняется предэкспоненциальный множитель, но в показателе экспоненты следует заменить m_X на M_X . При переходе к $D_{\Gamma X_1}^{(J)}$ в формуле (24), кроме замены в показателе, следует выполнить замену m_X на M_X и в Δ_c .

Подставив в формулы (23) и (24) значение $T = T_{c1}$, можно убедиться в совпадении при этой температуре экспоненциальных множителей в формулах (18), (19) и соответственно (23), (24). Однако предэкспоненциальные множители в них заметно различаются. Это отсутствие спшивания объясняется тем, что предэкспоненты формул (18), (19) и (23), (24) теряют справедливость в узком интервале температур вокруг T_{c1} [ширина этого интервала много меньше величины T_{c1} при выполнении (1)].

Последние слагаемые в фигурных скобках, заключающих показатели экспонент в (23) и (24), можно записать в виде $1/3 (T_{c2}/T)^3$, т. е. при $T > T_{c2}$ их вклад становится несущественным. Формулы (23) и (24), которые не теряют справедливость при переходе в этот третий температурный диапазон, выражают термоэмиссионный механизм ГХ-конверсии через треугольный потенциальный барьер. С учетом экспоненциального множителя $e^{-\Delta_0/T}$ в формуле (14) ток в этом диапазоне пропорционален $\exp(-\varepsilon'_1/T)$, как при обычной термоэлектронной эмиссии (стрелка 3 на рис. 1). Однако предэкспоненциальный множитель, несущий в себе параметры процесса ГХ-конверсии, существенно мал по сравнению с предэкспонентой в случае обычной термоэмиссии. Особенностью предэкспоненты в (23) и (24) является ее пропорциональность ширине перехода a , обусловленная расширением с ростом a области междолинного рассеяния. Казалось бы, всегда можно указать на такое значение a , при котором ток конверсии превысит ток прямой термоэмиссии, никак не зависящий от a . Однако задолго до того потеряют свою справедливость формулы (23) и (24), полученные в борновском приближении, при малой вероятности ГХ-рассеяния (т. е. при коэффициентах отражения, близких к 1).

Отметим также, что рассмотрение третьего температурного диапазона ($T > T_{c\alpha}$) в конкретной гетеропаре GaAs/AlAs имеет, по-видимому, всего лишь академический интерес, поскольку энергия $\epsilon_1 = 0.39$ эВ лежит несколько выше дна L -долины в GaAs. Поскольку положение L -долины в системе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ слабо зависит от x , в этой долине происходит прямая (или почти прямая) термоэмиссия через любые гетеробарьеры — крутые и плавные. Эта эмиссия (LL -перенос) при достаточно высоких температурах доминирует над исследуемым здесь ГХ-переносом, остающимся главным только при низких температурах (см., в частности, [2]).

5. Полученные выше аналитические зависимости пригодны лишь для широких переходов [условие (1)] и носят фрагментарный характер, затрудняющий получение целостной картины. Поэтому здесь они дополняются результатами численных расчетов, использующих описанную выше процедуру и приближение не зависящих от координаты z эффективных масс.

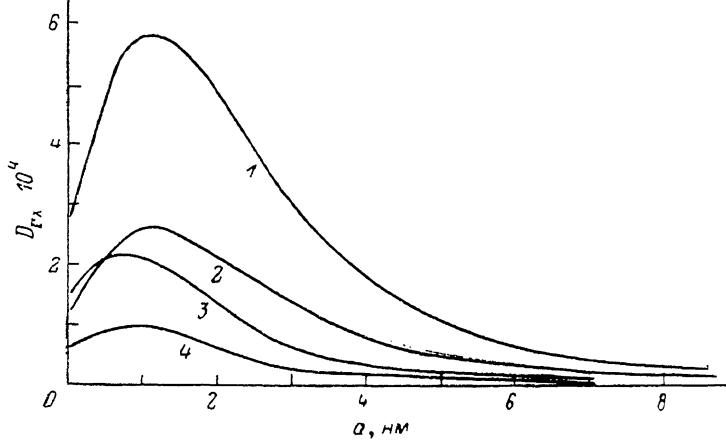


Рис. 2. Зависимости парциальных прозрачностей $D_{\text{GX}}^{(\pm)}$ от ширины a переходной области гетероперехода при $T=300$ К.

$$1 - 2D_{\text{GX}_1}^{(-)}, \quad 2 - 2D_{\text{GX}_2}^{(+)}, \quad 3 - D_{\text{GX}_1}^{(-)}, \quad 4 - D_{\text{GX}_1}^{(+)}$$

На рис. 2 для гетероструктуры GaAs/AlAs построены зависимости прозрачности $D_{\text{GX}}^{(\pm)}$ от ширины гетероперехода a при $T=300$ К. Кроме очевидных свойств этих зависимостей, а именно: 1) $D_{\text{GX}_2}^{(-)} > D_{\text{GX}_2}^{(+)}$ и $D_{\text{GX}_1}^{(-)} > D_{\text{GX}_1}^{(+)}$, 2) $D_{\text{GX}_2}^{(\pm)} \gg D_{\text{GX}_1}^{(\pm)}$, при больших a в области экспоненциального убывания обнаруживается и нетривиальная особенность поведения — немонотонное изменение при малых значениях a . Максимумы $D_{\text{GX}}^{(\pm)}$ достигаются при больших значениях a , чем максимумы $D_{\text{GX}_1}^{(\pm)}$, в соответствии с различием характерных длин a_{X_1} и a_{X_2} ; отношение $(D_{\text{GX}})_{\max}/D_{\text{GX}}(0)$ больше отношения $(D_{\text{GX}_1})_{\max}/D_{\text{GX}_1}(0)$ и достигает 2. Те же особенности прослеживаются на зависимостях $D_{\text{GX}_1}^{(\pm)}(a)$, построенных на рис. 3 при $T=77$ К; прозрачности $D_{\text{GX}_1}^{(+)}$, при этой температуре пренебрежимо малы. При $a \approx 50 \div 70$ Å пренебрежимо малыми по сравнению со значениями при $a=0$ становятся и $D_{\text{GX}_1}^{(\pm)}$, т. е. плавный переход такой толщины становится эффективным изолятором (по данному каналу переноса).

Прозрачности $D_{\text{GX}_1}^{(f)}(a)$ и $D_{\text{GX}_2}^{(f)}(a)$ при 77 и 300 К показаны на рис. 4. Эти зависимости начинаются с 0 (поскольку сплав имеется только в переходном слое), проходят через максимум при $a \sim 15$ Å и выходят на участок экспоненциального затухания при больших a . При выбранных значениях константы C_{GX} междолинное сплавное рассеяние значительно сильнее (в 4—5 раз) рассеяния на междолинных фононах и поэтому доминирует при всех значениях a , за исключением участка, непосредственно прилегающего к $a=0$. Это обстоятельство также показано на рис. 4, где приведены зависимости от a суммарной прозрачности D_f .

Отметим, что в гетеропереходах $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $1 > x > 0.45$ сплавное междолинное рассеяние присутствует, доминируя и при $a=0$, поэтому

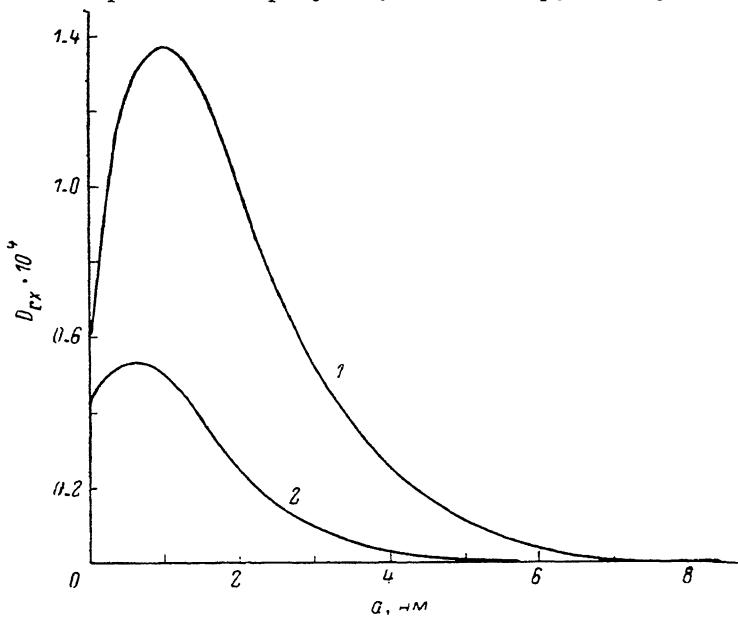


Рис. 3. Зависимости парциальных прозрачностей переноса электронов с поглощением фотонов $D_{\Gamma X_{1,2}}^{(-)}$ от ширины перехода a при $T = 77$ К.

$$1 - 2D_{\Gamma X_2}^{(-)}, \quad 2 - D_{\Gamma X_1}^{(-)}.$$

там не происходит столь сильного относительного «просветления» прозрачности гетероперехода на участке $a \approx a_\Gamma$, $a_{X_{1,2}}$, как в случае GaAs/AlAs .

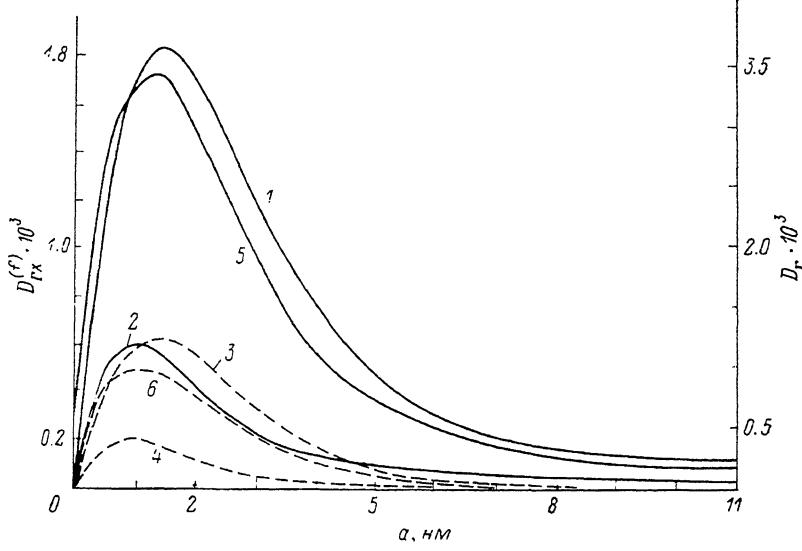


Рис. 4. Зависимости парциальных прозрачностей переноса с рассеянием на флюктуациях состава сплава $D_{\Gamma X_{1,2}}^{(f)}$ и полных прозрачностей D_r от ширины перехода a при $T = 77$ и 300 К.

$$1, 3 - 2D_{\Gamma X_2}^{(f)}, \quad 2, 4 - D_{\Gamma X_1}^{(f)}, \quad 5, 6 - D_r. \quad T, \text{ К: } 1, 2, 5 - 300; 3, 4, 6 - 77.$$

С дальнейшим ростом ширины a переходной области (при $a \gg a_\Gamma, a_{X_{1,2}}$) просветление гетероперехода сменяется резким падением всех прозрачностей (особенно эффективным в случае низких — докомнатных температур). Широ-

кие ΓX -переходы являются хорошими изоляторами, ибо ΓX -конверсия требует туннелирования сквозь барьер большой толщины. Эта особенность нереактивных ΓX -гетеропереходов является главным выводом из настоящей работы.

Доминанта сплавного рассеяния между Γ - и X -долинами, по-видимому, на данном этапе не является доказанным фактом ни в однородных образцах сплава, ни в гетероструктурах. Наличие подходящих корреляций в флюктуациях состава может сильно снизить вероятность междолинного рассеяния на этих флюктуациях. Поэтому измерение вероятностей сплавного междолинного рассеяния представляется весьма актуальным. Последнее может быть выполнено, например, посредством измерения омического сопротивления нереактивного ΓX -гетероперехода при больших прямых смещениях, как предложено в [11].

Приложение

При вычислении вероятности междолинного рассеяния на флюктуациях неупорядоченного тройного сплава $A_xB_{1-x}C$ исходим из модели виртуального кристалла Нордхейма (см., например, [12]). Рассеивающий потенциал имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\tau} c_{\tau} \Delta U(\mathbf{r} - \tau), \quad (\text{П. 1})$$

где ΔU — разность потенциалов атомов А и В, суммирование ведется по точкам, где могут находиться атомы А или В, причем $c_{\tau}=1-x$, если в точке с радиус-вектором τ находится атом А, и $c_{\tau}=-x$, если в точке τ — атом В. Легко убедиться в том, что $\sum_{\tau} c_{\tau} = 0$, $\sum_{\tau} c_{\tau} c_{\tau} = Nx(1-x)$, где N — число элементарных ячеек в кристалле. Последнее равенство можно обобщить в случае хаотически разупорядоченного сплава:

$$\sum_{\tau_1} c_{\tau_1} c_{\tau_1 + \tau} = N \delta_{\tau_1, 0} X (1 - X). \quad (\text{П. 2})$$

Нам необходимо вычислить матричный элемент перехода с рассеянием на потенциале (П. 1) между состояниями, описываемыми волновыми функциями $\Phi_{\Gamma, x}(\mathbf{r}_\perp, z) = u_{\Gamma, x}(\mathbf{r}) \Psi_{\Gamma, x}(\mathbf{r}_\perp, z)$, где $u_{\Gamma, x}$ — блоховские амплитуды, а $\Psi_{\Gamma, x}$ — огибающие (5'). После несложных преобразований, использующих равенство

$$\sum_{\tau_{11}} c_{\tau_{11} + \tau_{1z}} c_{\tau_{11} + \tau_{1z} + \tau_{2z} + \tau_{1z} + \tau_{2z}} = N \delta_{\tau_{11}, 0} \delta_{\tau_{2z}, 0} x(z) (1 - x(z)), \quad (\text{П. 3})$$

которое следует непосредственно из (П. 2) [суммирование здесь в отличие от (П. 2) ведется не по объему, а в пределах одного слоя в плоскости $\perp = (xy)$, N_s — число элементарных ячеек в плоскости], имеем

$$|M_{\Gamma X}|^2 = \left| \int \int dz d\mathbf{r}_\perp \Phi_{\Gamma}^*(\mathbf{r}_\perp, z) U(\mathbf{r}) \Phi_X(\mathbf{r}_\perp, z) \right|^2 = \\ = \frac{C_{\Gamma X}}{L^2} \int dz x(z) (1 - x(z)) |F_X(\mathbf{k}', k_z', z)|^2 |F_{\Gamma}(\mathbf{k}, k_z, z)|^2, \quad (\text{П. 4})$$

где

$$C_{\Gamma X} = \frac{1}{\Omega} \left| \int d^3 \mathbf{r} u_{\Gamma}^*(\bar{\mathbf{r}}) \Delta U_{q_0} e^{i \mathbf{q}_0 \cdot \bar{\mathbf{r}}} u_X(\bar{\mathbf{r}}) \right|^2.$$

Здесь Ω — объем ячейки, \mathbf{q}_0 — междолинный волновой вектор, $\Delta U_{\mathbf{q}}$ — Фурье-компоненты потенциала ΔU . Используя (П. 4), получаем формулу (6). Отметим, что наличие каких-либо корреляций (частичное упорядочение сплава) привело бы к несправедливости формул (П. 2), (П. 3) и вычисление матричного элемента рассеяния существенно усложнилось бы.

Список литературы

- [1] Грибников З. С., Райчев О. Э. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 12. С. 2171—2178.
- [2] Грибников З. С., Райчев О. Э. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 2. С. 346—352. 1990. Т. 24. В. 5. С. 940.

- [3] Luo L. F., Beresford R., Wang W. I. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 53. N 24. P. 2320—2322.
- [4] Beresford R., Luo L. F., Wang W. I. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 19. P. 1899—1901.
- [5] Levi A. F., Chiu T. H. // Sol. St. Electron. 1988. V. 31. N 3/4. P. 625—628.
- [6] Price P. J. // Surf. Sci. 1988. V. 196. P. 394—398.
- [7] Liu H. C. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 13. P. 1019—1021.
- [8] Xue Fang Shi // Semicond. Sci. Techn. 1989. V. 4. N 3. P. 150—154.
- [9] Landheer D., Liu H. C., Buchanan M., Stoner R. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 18. P. 1784—1786.
- [10] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М., 1979. 830 с.
- [11] Грибников З. С., Раичев О. Э. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 7. С. 1221—1226.
- [12] Harrison J. W., Hauser J. P. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 12. P. 5347—5350.

Институт полупроводников АН УССР
Киев

Получена 14.05.1990
Принята к печати 18.06.1990