

## РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В МНОГОБАРЬЕРНЫХ СТРУКТУРАХ GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

С. Н. Гриняев, В. Н. Чернышов

Сибирский физико-технический институт им. В. Д. Кузнецова при Томском государственном университете, 634050, Томск, Россия  
(Получена 3.03.1992. Принята к печати 21.05.1992)

Рассмотрена задача о прохождении электронов через многослойные полупроводниковые структуры. Для вычисления коэффициентов прохождения  $P(E)$  на основе метода матрицы рассеяния получены удобные для численных расчетов рекуррентные соотношения. С использованием метода модельного псевдопотенциала проведен расчет  $P(E)$  для двухбарьерных структур GaAs/AlAs и GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As при нормальном к гетерограницам падении электронов для энергий выше  $E_c$  GaAs на величину до 1 эВ. Проведен анализ особенностей в  $P(E)$ . Изучены границы применимости часто используемого для расчета  $P(E)$  приближения эффективной массы. Показано, что для описания туннелирования электронов в GaAs/AlAs при  $E > E_{X1}^{\text{AlAs}}$  необходимо, кроме  $\Gamma_1^{\text{GaAs}}$ -состояний, учитывать  $X_1^{\text{GaAs}}$ - и  $X_3^{\text{GaAs}}$ -состояния.

Теоретическое описание процессов туннелирования в многослойных полупроводниковых структурах в настоящее время в большинстве исследований проводится в рамках метода эффективной массы. Применение такого подхода, оправданное в основном для систем с выделенной в интересующем нас интервале энергий долиной, наталкивается на трудности, связанные с заданием условий сшивания на гетерогранице. До сих пор эта проблема не имеет обоснованного решения. Предпринятые в последнее время попытки моделирования электронных состояний на основе методов псевдопотенциала [1-4] и сильной связи [3-5] показали, что в ряде случаев однодолинное приближение метода эффективной массы дает неправильные результаты.

В настоящей работе приводятся результаты расчетов коэффициентов прохождения  $P(E)$  электронов в структурах GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, выполненных по методу псевдопотенциала в широком энергетическом интервале, где реализуются два канала рассеяния ( $\Gamma$  и  $X$ ). Установлена связь наблюдаемых в  $P(E)$  особенностей с решениями задач для изолированных ям и барьеров. Проведено сравнение с результатами для более простых моделей. Определен минимальный набор состояний, достаточный для адекватного описания процессов туннелирования.

Будем считать, что плоскости  $z = z_n$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ) являются гетерограницами для кристаллов с номерами  $l_n$  (слева от границы  $z = z_n$ ) и  $l_{n+1}$  (справа от границы  $z = z_n$ ), где  $l_n = 1, 2, \dots, L$ ;  $L < N + 1$ . В области  $z < z_1$  находится вещество типа  $l_1$ , в области  $z \geq z_N$  — типа  $l_{N+1}$ . Гамильтониан всей системы  $H$  можно представить в виде суммы гамильтонианов  $H_{l_n}$  отдельных подсистем

$$H = \sum_{n=1}^{N-1} \Theta(z - z_n) \theta(z_{n+1} - z) H_{l_{n+1}} + \Theta(z_1 - z) H_{l_1} + \Theta(z - z_N) H_{l_{N+1}}. \quad (1)$$

В общем случае  $H_{l_n}$  могут отличаться от гамильтонианов для неограниченных веществ типа  $l_n$ . Эти отличия, связанные в основном с изменениями в электростатической части потенциала и со структурными дефектами в окрестности

гетерограниц, наиболее существенны на расстояниях порядка нескольких атомных слоев от гетерограниц. Однако рассматриваемые нами гетероструктуры относятся к тем немногочисленным идеальным системам, в которых эффекты рассогласования решеток и влияние приграничных диполей не играют определяющей роли в потенциале, что подтверждается результатами самосогласованных расчетов зонных спектров сверхрешеток [6]. Кроме того, изучаемые структуры образованы достаточно протяженными подсистемами. Поэтому мы в своей работе используем модель с разрывными на гетерограницах потенциалами, считая, что  $H_{I_n}$  — гамильтониан идеального неограниченного типа  $I_n$ . В выбранной нами модели сохраняется трансляционная симметрия в направлениях, параллельных гетерограницам, поэтому параллельная плоскостям  $z = \text{const}$  компонента волнового вектора  $k_{\parallel}$  будет квантовым числом. Таким образом, все величины в наших дальнейших формулах являются функциями  $k_{\parallel}$  и энергии  $E$ .

Общее решение уравнения Шредингера для  $z_{n-1} \leq z \leq z_n$  можно представить в виде (для  $n = 1$   $z_0 = -\infty$ , для  $n = N + 1$   $z_{N+1} = \infty$ )

$$\psi^{I_n}(\rho, z) = \sum_{\nu} A_{\nu}^{I_n} \psi_{\nu}^{I_n}(\rho, z) + \sum_{\mu} B_{\mu}^{I_n} \psi_{\mu}^{I_n}(\rho, z), \quad (2)$$

где  $\psi_{\nu}^{I_n}(\rho, z)$  и  $\psi_{\mu}^{I_n}(\rho, z)$  — частные решения уравнения Шредингера с гамильтонианом  $H_{I_n}$ :

$$\psi_{\nu}^{I_n}(\rho, z) = \exp(i\mathbf{k}_{\nu}\rho) \exp(ik_z^{\nu}z) U_{k_z^{\nu}}(\rho, z), \quad (3)$$

где  $\rho$  — совокупность координат  $x$  и  $y$ ;  $U(\rho, z)$  — периодические функции. Индекс  $\nu$  нумерует функции с  $\text{Im } k_z = 0$  и групповой скоростью  $v_{\nu} = (\partial E / \partial k_z)_{k_z = k_z^{\nu}} > 0$ , а также функции с  $\text{Im } k_z > 0$ ; индекс  $\mu$  — функции с  $\text{Im } k_z = 0$  и  $v_{\mu} = (\partial E / \partial k_z)_{k_z = k_z^{\mu}} < 0$ , а также  $\text{Im } k_z < 0$ . Ясно, что  $\nu$  соответствует состояниям, распространяющимся на  $\infty$  или затухающим при  $z \rightarrow \infty$ . Такую совокупность волн в дальнейшем будем называть падающими волнами. Индекс  $\mu$  описывает отраженные блоховские волны, т. е. состояния, распространяющиеся на  $-\infty$  или затухающие при  $z \rightarrow -\infty$ .

На гетерограницах  $z = z_n$  для функций  $\psi^{I_n}$ ,  $\psi^{I_{n+1}}$  и их нормальных к границам производных должны выполняться условия сшивания, которые удобно представить в матричном виде

$$\begin{pmatrix} A^n \\ B^n \end{pmatrix} = \left( L^{I_n}(n) \right)^{-1} J(n) L^{I_{n+1}}(n) \begin{pmatrix} A^{n+1} \\ B^{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где  $A^n$  и  $B^n$  — векторы-столбцы с компонентами  $A_{\nu}^n$  и  $B_{\mu}^n$  соответственно,  $L^{I_n}(n)$  и  $J(n)$  — блочные матрицы:

$$L^{I_n}(n) = \begin{pmatrix} L_{11}^{I_n}(n) & 0 \\ 0 & L_{22}^{I_n}(n) \end{pmatrix}, \quad J(n) = \begin{pmatrix} J_{11}(n) & J_{12}(n) \\ J_{21}(n) & J_{22}(n) \end{pmatrix},$$

где

$$[L_{11}^{I_n}(n)]_{\nu(\omega), \nu'(\omega')} = \delta_{\nu(\omega), \nu'(\omega')} \exp(ik_z^{\nu} z_n),$$

$$J_{ij}(n) = (Q_j^{I_n})^{-1} (W_j^{I_n} W_{j-1}^{I_n})^{-1} (W_{j+1}^{I_n} - W_{j-1}^{I_n}) Q_j^{I_{n+1}},$$

$$W_j^{I_n} = D_j^{I_n} (Q_j^{I_n})^{-1},$$

$$[D_{1(2)}^{I_2}]_{\alpha\nu(\mu)} = \sum_s C_{\alpha s \nu}^{I_2(\mu)} \exp(ib_{zs} z_n),$$

$$[Q_{1(2)}^{I_2}]_{\alpha\nu(\mu)} = i \sum_s C_{\alpha s \nu}^{I_2(\mu)} (k_{zs}^{I_2(\mu)} + b_{zs}) \exp(ib_{zs} z_n),$$

$i, j = 1, 2$ ;  $C_{\alpha s \nu}^{I_2(\mu)}$  — коэффициенты разложения периодических частей блоховских функций по плоским волнам  $\exp(ib_{\alpha s} r)$ ,  $b_{\alpha s} = b_{\alpha} + b_{zs}$  ( $b_{\alpha}$  параллельны гетерограницам).

Задачей теории рассеяния является установление связи между амплитудами волн слева от многослойной системы (область  $z \leq z_1$ ) и справа от нее (область  $z \geq z_N$ ), т. е. между коэффициентами  $A^1, B^1$  и  $A^{N+1}, B^{N+1}$ . В широко распространенных простых модельных расчетах такая связь находится с помощью так называемой матрицы переноса  $[T]$ . Однако, как указано, например, в [2], метод матрицы переноса становится непригодным для расчетов реальных трехмерных структур. Для таких расчетов следует использовать метод матрицы рассеяния, в котором связь между вышеуказанными коэффициентами ищется в виде

$$\begin{pmatrix} A^{N+1} \\ B^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}(N) & S_{12}(N) \\ S_{21}(N) & S_{22}(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^1 \\ B^{N+1} \end{pmatrix} = S(N) \begin{pmatrix} A^1 \\ B^{N+1} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где  $S(N)$  — матрица рассеяния. Для определения матриц  $S_{ij}(N)$  ( $i, j = 1, 2$ ) в работе [2] получены рекуррентные соотношения. Однако эти соотношения не очень удобны для численных расчетов, поскольку в них при достаточно больших  $z_n$  и  $|\text{Im } k_z|$  возникают экспоненциально большие величины. Для устранения проблем мы ввели матрицы  $y(n), x(n)$  и  $u(n)$ , связанные с матрицей рассеяния соотношениями

$$\begin{aligned} S_{11}(n) &= [L_1^{n+1}(n+1)]^{-1} y(n), \\ S_{12}(n) &= [L_1^{n+1}(n+1)]^{-1} x(n) L_2^{n+1}(n), \\ S_{22}(n) &= u(n) L_2^{n+1}(n+1). \end{aligned} \quad (6)$$

С использованием (6) рекуррентные соотношения из [2] примут вид

$$\begin{aligned} y(n) &= L_1^{n+1}(n+1) [L_1^{n+1}(n)]^{-1} [J_{11}(n) - x(n-1) J_{21}(n)]^{-1} y(n-1), \\ x(n) &= L_1^{n+1}(n+1) [L_1^{n+1}(n)]^{-1} [J_{11}(n) - x(n-1) J_{21}(n)]^{-1} \times \\ &\quad \times [x(n-1) J_{22}(n) - J_{12}(n)] L_2^{n+1}(n) [L_2^{n+1}(n+1)]^{-1}, \\ u(n) &= u(n-1) \{ J_{21}(n) [J_{11}(n) - x(n-1) J_{21}(n)]^{-1} \times \\ &\quad \times [x(n-1) J_{22}(n) - J_{12}(n)] + J_{22}(n) \} L_2^{n+1}(n) [L_2^{n+1}(n+1)]^{-1}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$S_{21}(n) = S_{21}(n-1) + u(n-1) J_{21}(n) [J_{11}(n) - x(n-1) J_{21}(n)]^{-1} y(n-1),$$

$n = 1, 2, \dots, N$ . Начальными условиями для (7) являются

$$\begin{aligned} x(0) &= S_{21}(0) = 0, \\ y(0) &= L_1^1(1), \quad u(0) = [L_2^1(1)]^{-1}. \end{aligned}$$

Возникающие при вычислениях (6) и (7) значения  $z_{N+1}$  не влияют на  $S_{ij}$ , поэтому могут быть выбраны произвольными, например  $z_{N+1} = 2z_N - z_{N+1}$ .

Из формул (7) видно, что в них не содержатся возрастающие экспоненты, а затухающие члены входят только в комбинации с  $J_{ij}(n)$ , вообще не содержащими экспоненциально возрастающих и затухающих членов. По этим причинам наши рекуррентные соотношения (7) более пригодны для численных расчетов, чем предложенные в [2].

Для полного решения задачи о прохождении электронов через многослойную структуру необходимо также задать граничные условия при  $|z| \rightarrow \infty$ . Будем считать, что в области  $z < z_1$  для больших  $|z|$  имеется заданная падающая блоховская волна с номером  $\nu_0$  и амплитудой  $A_{\nu_0}^1 = 1$ . В области  $z > z_N$  для больших  $z$  не должно быть волн, распространяющихся к границе  $z = z_N$  и неограниченно возрастающих при  $z \rightarrow \infty$  (падающих волн). Следовательно,  $B^{N+1} = 0$ .

Таким образом, из (5) получаем

$$A_{\nu, \nu_0}^{N+1} = (S_{11}(N))_{\nu\nu_0}, \quad (8)$$

$$B_{\mu, \nu_0}^1 = (S_{21}(N))_{\mu\nu_0}. \quad (9)$$

Если нормировать все блоховские функции одинаковым образом, например на единицу, то величины

$$P_{\nu\nu_0} = |A_{\nu, \nu_0}^{N+1}|^2 v_{\nu}^{N+1} (v_{\nu_0}^1)^{-1}, \quad (10)$$

$$R_{\mu\nu_0} = |B_{\mu, \nu_0}^1|^2 v_{\mu}^1 (v_{\nu_0}^1)^{-1} \quad (11)$$

будут коэффициентами прохождения и отражения соответственно.  $P_{\nu\nu_0}$  определяют плотность вероятности обнаружения электрона в блоховском состоянии  $\psi_{\nu}^{N+1}$  при  $z \rightarrow \infty$  при падении на многослойную систему слева от границы  $z < z_1$  блоховской волны  $\psi_{\nu_0}^1$ . Коэффициенты отражения и прохождения должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_{\nu} P_{\nu\nu_0} + \sum_{\mu} R_{\mu\nu_0} = 1 \quad (12)$$

для любых  $\nu_0$ , причем в суммы по  $\nu$  и  $\mu$  входят только вещественные  $k_{z\nu}$  и  $k_{z\mu}$ . Выполнение условия (12) при проведении численных расчетов служит критерием правильности используемых приближений и точности вычислений.

В нашей работе расчет коэффициентов прохождения проведен для двухбарьерных структур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As при  $x$ , равном 0.3 и 1 для границ, перпендикулярных направлению (001), с шириной барьеров  $4a$  и ямы  $8a$  ( $a$  — постоянная решетки). В качестве границ между разными материалами выбрана плоскость из атомов As. Мы рассматривали нормальное к гетерограницам падение электронов ( $k_{\parallel} = 0$ ) для энергий электронов до  $\sim 1$  эВ. Отсчет энергии — от  $E_c$  GaAs.

Для вычисления зависимостей  $k_{z\beta}^{l(\mu)}(E, k_{\parallel})$  и матриц  $J_{ij}(n)$  мы использовали метод модельного псевдопотенциала [8], позволяющий с высокой точностью получать различные параметры зонного спектра твердых растворов алмазоподобных соединений. Проведенные нами исследования показали, что в интересующем нас интервале энергий приемлемый компромисс между требованиями точности и разумным расчетным временем достигается при использовании базиса из 27 плоских волн. Для решения задачи о туннелировании электронов необходимо знать относительное положение зонных спектров компонент гетероперехода. Основной физичес-

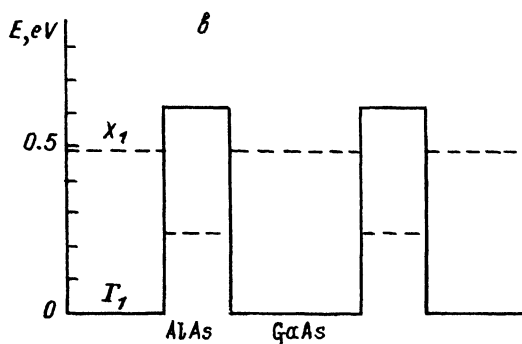
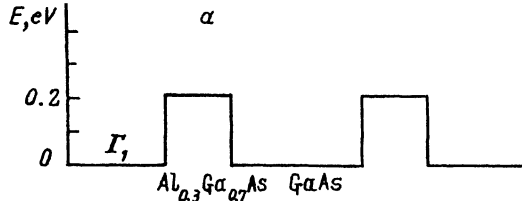


Рис. 1. Разрывы нижних зон проводимости в двухбарьерной структуре GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As при  $x = 0.3$  (а) и  $x=1$  (б).

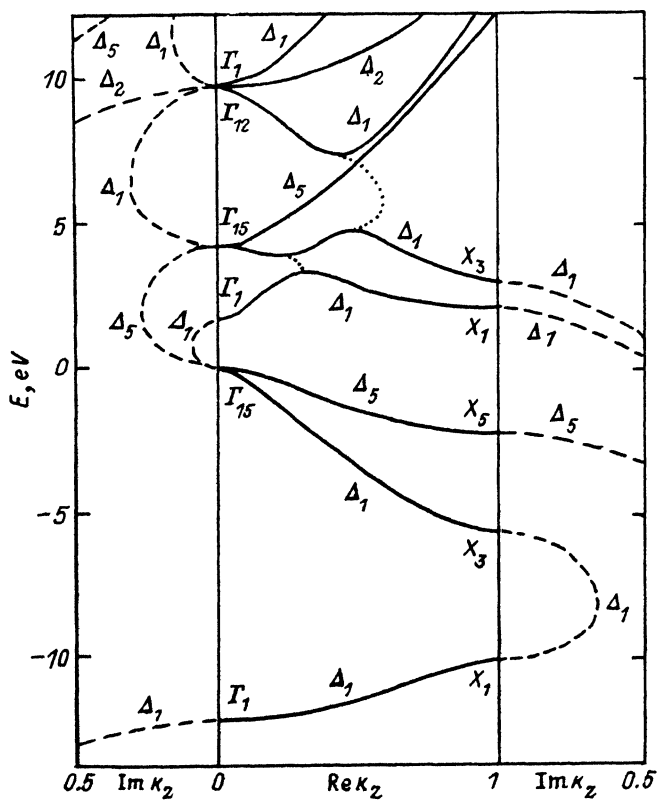


Рис. 2. Комплексная зонная структура GaAs вдоль направления (001). Значения волнового вектора приведены в единицах  $2\pi/a$ .

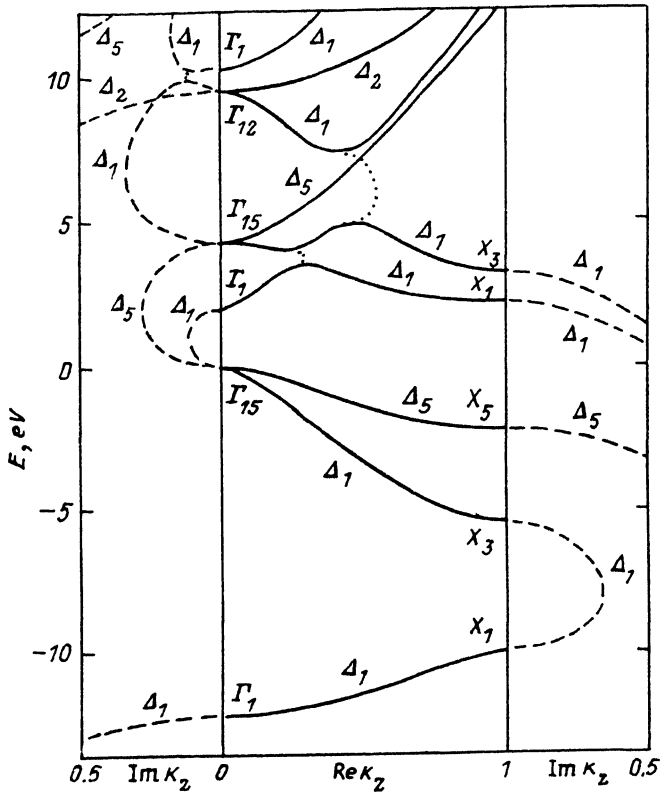


Рис. 3. Комплексная зонная структура  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ .

кой причиной возникновения разрывов зон является различие потенциалов  $v_{\text{Ga}}$  и  $v_{\text{Al}}$ . Поскольку  $\Delta = v_{\text{Ga}} - v_{\text{Al}}$  мало по сравнению с  $v_{\text{Ga}}$  и  $v_{\text{Al}}$ , разрывы зон могут быть найдены в первом порядке теории возмущений к виртуальному кристаллу со средним между компонентами гетероперехода потенциалом. С полученными таким образом разрывами зон и вычисленными энергиями для нижних зон проводимости мы построили профили зон в двухбарьерных структурах  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (рис. 1). Отметим, что при выбранном базисе экстремумы в энергетических зонах в точке  $X$  не получаются, но имеются минимумы в точках  $k_{0z}$  вблизи  $X$  с энергиями  $E(k_{0z})$ , которые для простоты далее обозначены через  $E_x$ . Из рис. 1 видно, что в  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  барьеры и ямы для различных состояний расположены в различных энергетических интервалах, тогда как в  $\text{GaAs}/\text{AlAs}$  профили  $\Gamma_1^-$ - и  $X_1^-$ -состояний перекрываются.

Вычисление  $k_{zg}^{(u)}$  (вещественных линий) и  $\psi_{zg}^{(u)}$  (так называемой комплексной зонной структуры) мы провели с использованием процедуры, предложенной в [9]. Результаты расчета вещественных линий с  $|\text{Im } k_z| < \pi/a$  приведены на рис. 2—4. На этих рисунках, кроме обычного зонного спектра для вещественных  $k_z$ , изображенного сплошными линиями, штриховыми показаны вещественные линии для комплексных  $k_z$ . Слева от  $\Gamma$  приведены зависимости для чисто мнимых  $k_z$ , справа от  $X$  — изменение  $\text{Im } k_z$  при  $\text{Re } k_z = k_{0z}$ . Точечными кривыми изображены вещественные линии, связывающие экстремальные зонные энергии соседних зон одинаковой симметрии. Всего в базисе из 27 плоских волн получается 13 неэквивалентных  $k_{zg}(E)$  и 13 —  $k_{zg}(E)$ , т. е. имеется 13 падающих и 13 отраженных блоховских волн. Вблизи краев зоны проводимости вещественные линии

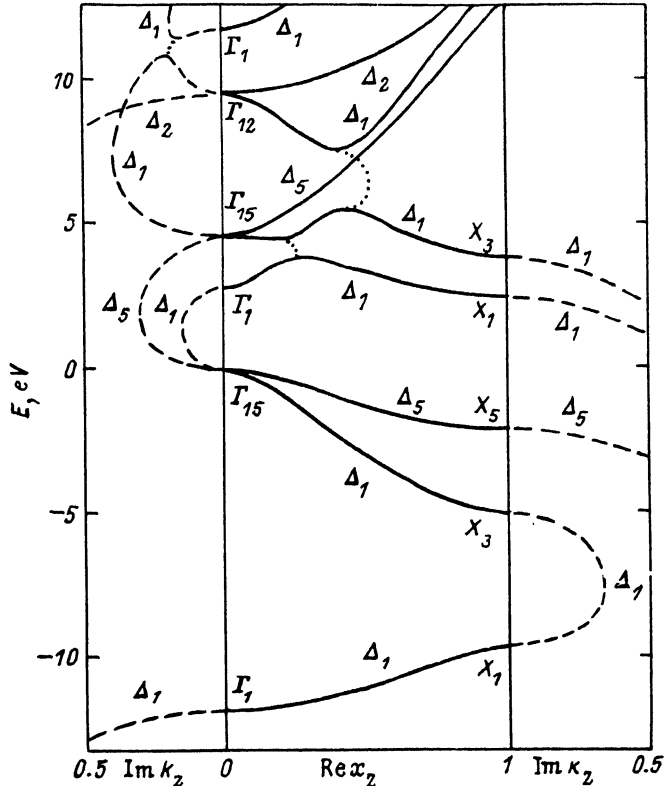


Рис. 4. Комплексная зонная структура AlAs.

симметрии  $\Delta_1$  можно разделить на две группы. В первую входят вещественные линии, соответствующие нижней зоне проводимости (вещественные  $k_2$ ), петли симметрии  $\Delta_1$ , соединяющие  $\Gamma_1^c$  и  $\Gamma_{15}^c$  (чисто мнимые  $k_2$ ), и линии, уходящие на бесконечность из  $E_{X_1^c}$  и  $E_{X_3^c}$ . Длины затухания таких состояний — порядка нескольких ангстрем и более. В другую группу входят вещественные линии, связанные с вышележащими зонами проводимости с длинами затухания  $< 0.1 \text{ \AA}$ . Вещественные линии симметрии  $\Delta_3 + \Delta_4$  мы не рассматриваем, поскольку в нашей задаче падающие волны имеют симметрию  $\Delta_1$ .

Результаты расчета коэффициента прохождения  $P(E)$  приведены на рис. 5, 6. Сплошными линиями изображены результаты, полученные в точном расчете  $P(E)$ . Наряду с этим для изучения роли многозонных эффектов во внутриволновых  $P(E)$  [ $\nu = \nu_0$  в формуле (10)] были проведены также расчеты для независимых  $\Gamma$ - и  $(X_1, X_3)$ -долин в двух модификациях. Первая соответствует стандартному однодолинному ( $\Gamma$  или  $X_1$ ) приближению метода эффективной массы, в котором предполагается идентичность периодических частей блоховских функций компонент гетероперехода. При этом эффективные массы брались равными значениям на дне  $\Gamma$ - и  $X_1$ -долин. Этому варианту на рис. 5, 6 соответствуют точечные кривые. Во второй модификации одна  $\Gamma$ -долина и пара  $(X_1, X_3)$ -долин «расщепляются» между собой и с другими состояниями путем обращения в нуль недиагональных по номерам долин элементов матрицы  $J_{ij}$  на каждой границе. В отличие от первой модификации здесь учитываются эффекты непараболичности закона дисперсии, различия периодических частей функций и связь между  $X_1$ - и  $X_3$ -долинами. Кроме того, при  $E > E_{X_1}$  (GaAs) в системе GaAs/AlAs в этом

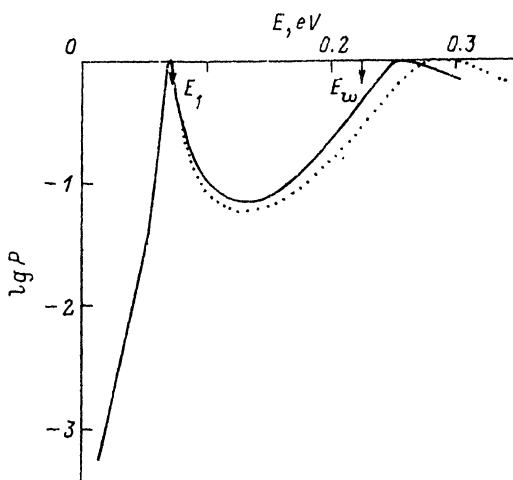


Рис. 5. Коэффициент прохождения  $P(E)$  электронов через двухбарьерную структуру GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As.

варианте появляется еще один канал в  $P(E)$ , соответствующий падающим  $X_1$ -электронам GaAs. Результаты, полученные во второй модификации, показаны на рис. 5, 6 штриховой линией.

Перейдем к качественному анализу зависимостей  $P(E)$ . Наблюдаемые структуры в  $P(E)$  можно достаточно просто соотнести со связанными и резонансными состояниями в изолированных ямах и барьерах. Для системы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As  $P(E)$  имеет достаточно простой вид. Наблюдаемый при  $E = 0.07$  эВ единственный подбарьерный резонанс обусловлен взаимодействием с локализованным в яме GaAs состоянием, для которого из решения задачи о собственных энергиях в одиночной квантовой яме конечной глубины (с учетом зависимости  $m^*$  от энергии и состава) получается энергия, равная 0.073 эВ (показана на рис. 5 стрелкой). Надбарьерный резонанс при  $E = 0.26$  эВ в основном связан с максимумом в  $P(E)$  при  $E_w = 0.224$  эВ для одиночной квантовой ямы GaAs. Результаты многодолинного и однодолинного (во втором варианте) расчетов  $P(E)$  близки и в масштабе рис. 5 неразличимы. Использование приближения эффективной массы дает заметное отличие от этих расчетов, в основном состоящее в сдвиге кривой  $P(E)$  в сторону больших энергий. Большая часть этого сдвига объясняется энергетической зависимостью эффективной массы.

Для двухбарьерной структуры GaAs/AlAs зависимость  $P(E)$  имеет более сложный вид (рис. 6). При  $E < E_{X_1}$  (GaAs) первый (наиболее узкий)  $\Gamma$ -резонанс ( $E = 0.10$  эВ) практически одинаково описывается во всех вариантах расчета. Его положение близко к энергии низшего ( $s$ -подобного) состояния изолированной квантовой ямы ( $E_1^s = 0.102$  эВ), которое несколько завышено за счет конечности ширины барьера. Резонанс при  $E = 0.36$  эВ также связан с  $\Gamma$ -долиной, что видно из сравнения результатов многодолинного расчета с  $P(E)$ , полученной во втором варианте однодолинного расчета. Учет энергетической зависимости  $m_r^*$  в приближении эффективной массы почти полностью устраняет сдвиг  $P(E)$  вправо в этой области энергий. При  $E > E_{X_1}$  (AlAs) взаимодействие падающей волны с состояниями, происходящими из  $X_1$ - и  $X_3$ -долин AlAs, усиливается. При энергиях, близких к уровням связанных состояний, в  $X_1$ -яме AlAs возникают так называемые резонансы Фано [10]. Второй из этих резонансов попадает на  $\Gamma$ -резонанс и приводит к уменьшению высоты и расщеплению последнего. Для ослабления тако-



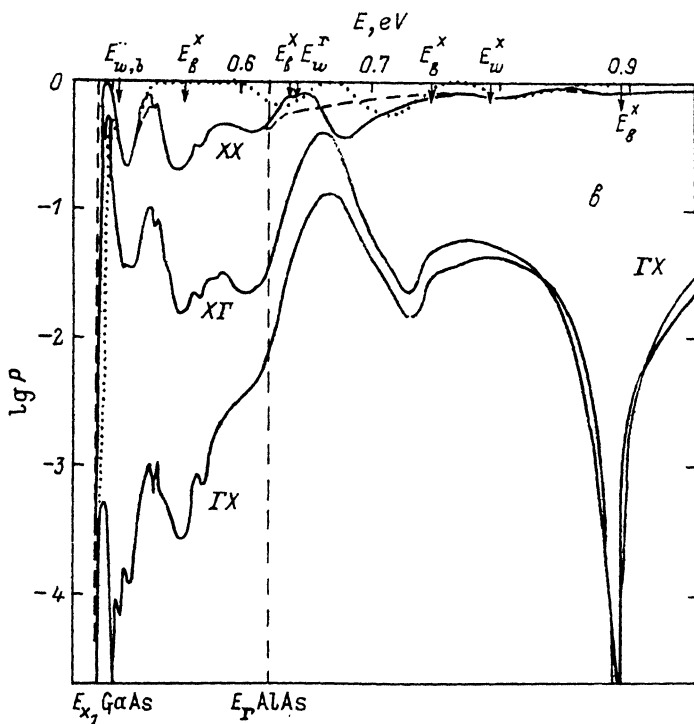
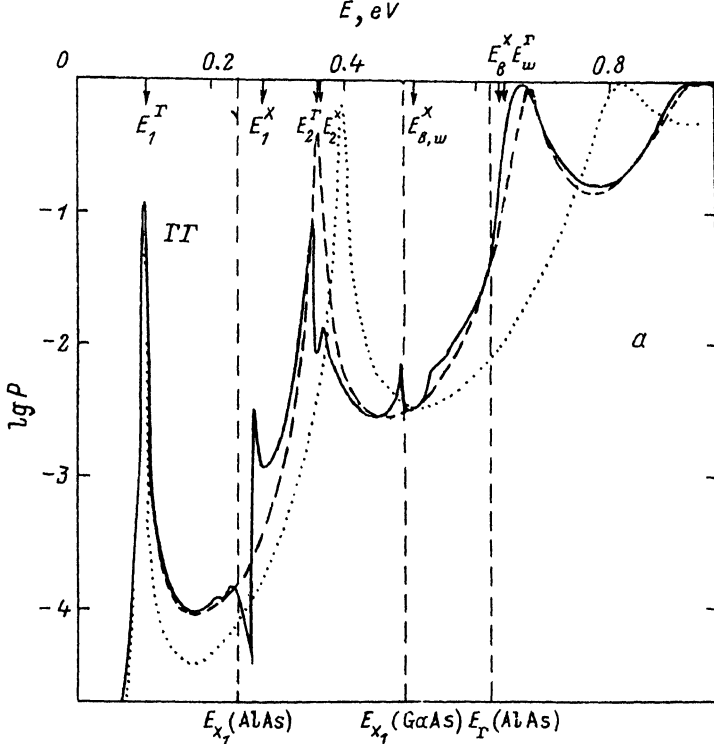


Рис. 6. Коэффициент прохождения электронов через двухбарьерную структуру GaAs/AlAs для различных видов рассеяния: а — ГГ; б — XX, XГ, ГX.

неблагоприятного влияния  $X_1$ -долин AlAs на  $\Gamma$ -резонанс двухбарьерной структуры необходимо изменить ее геометрические размеры (толщины ям или барьеров). При  $E > E_{X_1}$  (GaAs) возможны два падающих и два прошедших  $\Gamma_1^-$ - и  $X_1^c$ -подобных состояний GaAs. Соответствующие им коэффициенты прохождения обозначены на рис. 6 символами ГГ, GX, XX, XГ, где первая буква описывает характер падающей волны, а вторая — прошедшей. Из рис. 6 видно, что «недиагональные» междолинные коэффициенты прохождения (XГ и GX) в основном на порядок меньше «диагональных» внутримолиновых  $P(E)$  (ГГ и XX). Особенности в  $P(E)$  для XX-, XГ- и GX-рассеяний при энергиях 0.49, 0.52 и 0.64 эВ обусловлены взаимодействием с первыми надбарьерными и надъямными  $X_1$ -резонансами изолированных ямы и барьера. Это вытекает из анализа проведенных нами расчетов  $P(E)$  двухъямной ( $X_1$ ) структуры в однодолинном приближении в зависимости от размеров ямы и барьера. Результаты точного и двухдолинного ( $X_1, X_3$ ) расчетов для XX-рассеяния отличаются от однодолинного ( $X_1$ ) приближения в основном из-за энергетической зависимости эффективной массы. Имеется также возмущающее влияние  $X_3$ -долин. В свою очередь двухдолинный и точечный расчеты заметно различаются лишь в области энергий, находящейся около надъямного  $\Gamma$ -резонанса ( $E_w^{\Gamma} = 0.641$  эВ), где взаимодействие X-состояний с  $\Gamma$ -долиной наиболее существенно. Этот одноямный  $\Gamma$ -резонанс проявляется также в надбарьерной структуре (максимуме) в  $P(E)$  для ГГ-рассеяния при  $E \approx 0.67$  эВ, причем ее левое плечо в точном расчете имеет более резкий наклон (по сравнению с однодолинной моделью) вследствие влияния надбарьерного  $X_1$ -резонанса ( $E_b^X = 0.636$  эВ). При  $E > 0.6$  эВ состояния из  $\Gamma_1^-$ - и  $X_1$ -долин GaAs сближаются, в результате чего коэффициенты прохождения GX и XГ становятся почти равными. Другие структуры в  $P(E)$  имеют существенно двухбарьерную или двухъямную природу.

Таким образом, если результаты многодолинного точного расчета для системы GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As достаточно хорошо описываются однодолинной ( $\Gamma$ ) моделью в рассмотренном интервале энергий, то в GaAs/AlAs для  $E > E_{X_1}$  (AlAs) эта модель становится несостоятельной. Основной причиной наблюдающихся расхождений являются существенное усиление роли GX-взаимодействия при перекрывании профилей  $\Gamma_1^-$ - и  $X_1^c$ -состояний. Поэтому для адекватного описания таких систем модель изначально должна включать в себя  $\Gamma$ - и X-состояния одновременно. Для определения минимального набора таких состояний мы провели анализ матриц  $J_{ij}(n)$ . Как оказалось, в них можно выделить блок  $3 \times 3$  из сильно взаимодействующих друг с другом  $\Gamma_1^-$ -,  $X_1^c$ - и  $X_3^c$ -состояний. Матричные элементы, связывающие эти состояния с остальными, малы и резко убывают с ростом мнимой части волнового вектора последних. Выделение такого блока в матрицах  $J_{ij}(n)$  обусловлено ранее отмеченным разделением вещественных линий. Непосредственные расчеты  $P(E)$  структуры GaAs/AlAs, проведенные при условии обращения в нуль всех матричных элементов  $J_{ij}(n)$ , отвечающих взаимодействию  $\Gamma_1^-$ -,  $X_1^c$ - и  $X_3^c$ -состояний с остальными, приводят к результатам, практически совпадающим с точным расчетом  $P(E)$ . Таким образом, мы приходим к трехдолинной модели гетероструктуры GaAs/AlAs как наиболее обоснованному способу приближенного описания процессов туннелирования.

В следующих публикациях мы предполагаем развить трехдолинную модель в рамках метода эффективной массы с использованием граничных условий для огибающих функций, получаемых из рассчитанных матриц  $J_{ij}$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] D. Y. Ko, J. C. Inkson. *Semicond. Sci. Techn.*, **3**, 791 (1988).
- [2] D. Y. Ko, J. C. Inkson. *Phys. Rev. B*, **38**, 9945 (1988).
- [3] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11609 (1989).

- [4] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11619 (1989).
- [5] K. V. Rousseau, K. L. Wang, J. N. Schulman. Appl. Phys. Lett., **54**, 1341 (1989).
- [6] C. G. Van de Walle, R. M. Martin. Phys. Rev. B, **35**, 8154 (1987).
- [7] Туннельные явления в твердых телах (под ред. Э. Бурштейна, С. Лундквиста). М. (1973)
- [8] В. А. Чалдышев, С. Н. Гриняев. Изв. вузов СССР, Физика, **26**, 38 (1983).
- [9] Y. C. Chang, J. N. Schulman. Phys. Rev. B, **25**, 3975 (1982).
- [10] U. Fano. Phys. Rev., **124**, 1866 (1961).

Редактор Л. В. Шаронова

---