1989 ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ том 23, вып. 12
1989 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 23, N 12

ГX-ПЕРЕНОС В РЕАЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ: ВКЛАД РАССЕЯНИЯ НА МЕЖДОЛИННЫХ ФОНОНАХ

Грибников З. С., Райчев О. Э.

Рассчитан коэффициент прохождения Г-электронов, падающих на резкую гетерограницу, пройдя которую они становятся X-электронами. Этот переход может быть как бесфононным, так и с приграничным поглощением или испусканием междолинного фонона. В последних случаях расчет может быть выполнен в рамках метода эффективной массы; результаты такого расчета показывают, что вклад этого процесса как качественно (энергетические и температурные зависимости), так и количественно близок к бесфононному вкладу. Бесфононный вклад учтен на основе полуфеноменологической модели, удовлетворительно подтверждаемой микротеорией. ГX-переход в реальном пространстве может быть эффективен в приборах с N-ОДП. Обсуждены способы экспериментального разделения вкладов от указанных выше механизмов ГX-переноса.

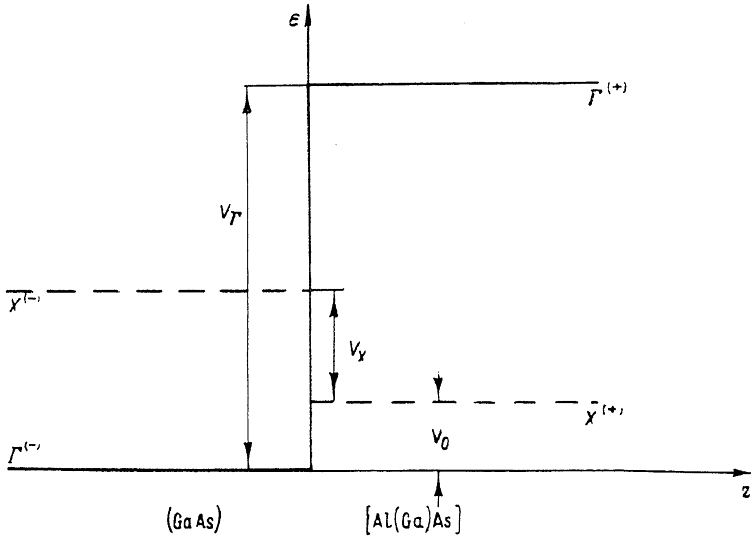
1. Начиная с первых работ [1, 2] перенос электронов в реальном пространстве рассматривался всегда с сохранением типа долины: Г-электроны при переносе через гетеропереход оставались Г-электронами, а X-электроны оставались X-электронами. Такое описание адекватно в тех случаях, когда последовательность расположения долин на энергетической шкале слева и справа от гетероперехода одна и та же, что отвечает, например, случаю $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$-перехода при $x < 0.45$. Однако при $x > 0.45$ эта последовательность в данной гетеропаре нарушается, и по мере роста x все настоятельнее необходимо учитывать переходы с изменением типа долины на самой поверхности гетероперехода.

Отметим, что при практическом использовании переноса в реальном пространстве для получения N-образных ВАХ и приборов типа ганновских диодов [1, 2] применение гетеропар с ГX-переходом может оказаться существенно эффективнее, поскольку при таком переходе резко — во много раз — увеличивается эффективная масса электрона, так что должно резко увеличиться отношение $I_{\text{peak}}/I_{\text{valley}}$ (максимального и минимального токов на участке N-ОДП). При этом все практические преимущества переноса в реальном пространстве — технологически управляемый подбор параметров ВАХ — сохраняются.

Выделим два типа междолинных переходов на гетерогранице. Первый тип — непосредственные переходы на резкой гетерогранице, связанные с возможностью сколь угодно сильного изменения при взаимодействии с границей поперечного волнового вектора k_z (при неизменной полной энергии и продольном волновом векторе $\mathbf{k}=\mathbf{k}_\parallel$). Такие переходы с недавних пор привлекаются для описания туннельного тока через ГXГ- и ГXГXГ-структуры, в которых в качестве Г-материала обычно выступает GaAs, а в качестве X-материала либо AlAs, либо $Al_xGa_{1-x}As$ при $x > 0.45$ (см., например, [3–5]). Вероятности этих переходов, как правило, рассчитываются численно с применением метода псевдопотенциала. Подобные расчеты [3] указывают на существенную величину вклада ГX-переходов.

Второй тип междолинных переходов на границе — приповерхностное междолинное рассеяние с испусканием или поглощением междолинного фонона. Этот вклад может быть рассчитан с использованием метода эффективной массы и объемных значений константы взаимодействия электрона с междолинным фононом. На возможную роль этого вклада указал, в частности, Прайс [6]. Цель настоящей работы — сравнение вкладов этих двух типов. Учет вклада первого типа (бесфононного) выполнен на основе полуэмпирической модели[7], дающей удовлетворительное согласие с псевдопотенциальными расчетами. Сравниваются значения коэффициентов прохождения электронов через одиночные гетерограницы. Сделан вывод о возможном существенном вкладе фононного рассеяния (которым авторы большинства работ пренебрегают). Указаны возможные способы разделения вкладов каждого из типов переходов.

2. При бесфононном переходе через гетерограницу типа (100) условие сохранения **k** оставляет возможными переходы только в ту из трех X-долин, чья ось большой массы нормальна гетерогранице (долина X_1). Следуя работе[7],



Энергетическая диаграмма гетероперехода.

рассмотрим прохождение гетерограницы с помощью следующих уравнений: $z < 0$ (GaAs)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\Gamma^{(-)}}\frac{\partial^2\Psi_\Gamma^{(-)}}{\partial z^2}=\left(\varepsilon-\frac{\hbar^2k^2}{2m_\Gamma^{(-)}}\right)\Psi_\Gamma^{(-)}, \tag{1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M_X^{(-)}}\frac{\partial^2\Psi_X^{(-)}}{\partial z^2}=\left(\varepsilon-V_0-V_X-\frac{\hbar^2k^2}{2m_X^{(-)}}\right)\Psi_X^{(-)}, \tag{2}$$

$z > 0$ (AlGaAs)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\Gamma^{(+)}}\frac{\partial^2\Psi_\Gamma^{(+)}}{\partial z^2}=\left(\varepsilon-V_\Gamma-\frac{\hbar^2k^2}{2m_\Gamma^{(+)}}\right)\Psi_\Gamma^{(+)}, \tag{3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M_X^{(+)}}\frac{\partial^2\Psi_X^{(+)}}{\partial z^2}=\left(\varepsilon-V_0-\frac{\hbar^2k^2}{2m_X^{(+)}}\right)\Psi_X^{(+)}, \tag{4}$$

решаемых с граничными условиями на гетеропереходе

$$\Psi_\Gamma^{(-)}(0)=\Psi_\Gamma^{(+)}(0),\quad \Psi_X^{(-)}(0)=\Psi_X^{(+)}(0), \tag{5}$$

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_\Gamma^{(+)}}\frac{\partial\Psi_\Gamma^{(+)}}{\partial z}\Bigg|_{+0}-\frac{1}{m_\Gamma^{(-)}}\frac{\partial\Psi_\Gamma^{(-)}}{\partial z}\Bigg|_{-0}\right)+\alpha\Psi_X(0)=0;\\&-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{M_X^{(+)}}\frac{\partial\Psi_X^{(+)}}{\partial z}\Bigg|_{+0}-\frac{1}{M_X^{(-)}}\frac{\partial\Psi_X^{(-)}}{\partial z}\Bigg|_{-0}\right)+\alpha\Psi_\Gamma(0)=0.\end{aligned} \tag{6}$$

В этих формулах и далее под X-долиной понимается одна только X_1-долина. В уравнениях (1)—(6) $m_\Gamma^{(\pm)}$ — масса Г-электронов, $m_X^{(\pm)}$ — поперечные массы X-электронов, $M_X^{(\pm)}$ — продольные (тяжелые) массы X-электронов; параметры

V_0, V_Γ, V_X указаны на рисунке. Из микротеории к параметрам метода эффективной массы добавляется один пограничный параметр α, фигурирующий в уравнениях (6). Он дает интенсивность смешивания Г- и X-состояний на границе и зависит от резкости гетерограницы. Его можно определить из сравнения с экспериментом или же с псевдопотенциальными расчетами. По порядку величины $\alpha \simeq (0.1 \div 0.2)$ эВ·Å [7], из этой оценки следует малость вводимой поправки, воспользовавшись которой можно существенно упростить выкладки.

Рассмотрим прохождение электронной волны ($k_z = k_0$) в Г-долине, падающей слева (см. рисунок) на гетерограницу. Такая волна в силу малости α почти целиком отражается при $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_\Gamma^{(-)}} < V_\Gamma + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{1}{m_\Gamma^{(+)}} - \frac{1}{m_\Gamma^{(-)}}\right)$, однако при $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_\Gamma^{(-)}} > V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left(\frac{1}{m_X^{(+)}} - \frac{1}{m_\Gamma^{(-)}}\right)$ имеет место слабое проникновение Г-электронов в X-долину, так что коэффициент отражения несколько меньше единицы, а коэффициент прохождения равен

$$T_{\Gamma X} \equiv T_{\Gamma X_1}(k_z, \mathbf{k}) = 1 - R \simeq \frac{16\alpha^2}{\hbar^4} \frac{k_0 k_0'}{m_\Gamma^{(-)} M_X^{(+)}} \left[\left(\frac{k_0^2}{m_\Gamma^{(-)2}} + \frac{g_0^2}{m_\Gamma^{(+)2}}\right)\left(\frac{k_0'^2}{M_X^{(+)2}} + \frac{g'^2}{M_X^{(-)2}}\right)\right]^{-1}, \quad (7)$$

где

$$g_0^2 = k^2 + \frac{2m_\Gamma^{(+)}}{\hbar^2}(V_\Gamma - \varepsilon_k) > 0, \quad (8)$$

$$k_0'^2 = \frac{2M_X^{(+)}}{\hbar^2}\left(\varepsilon_k - V_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_X^{(+)}}\right) > 0, \quad (9)$$

$$g'^2 = \frac{2M_X^{(-)}}{\hbar^2}\left(V_0 + V_X - \varepsilon_k + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_X^{(-)}}\right) > 0, \quad (10)$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 (k^2 + k_0^2)}{2m_\Gamma^{(-)}}. \quad (11)$$

Очевидно, что та же формула (7) описывает и коэффициент обратного прохождения для электрона из $X^{(+)}$-долины с $k_z = -k_0'$ в $\Gamma^{(-)}$-долину (где прошедший электрон приобретает поперечный волновой вектор k_0).

Обратим здесь внимание на две особенности полученных формул: 1) зависимость $T_{\Gamma X}$ около порога прохождения, определяемого условием (9), имеет вид

$$T_{\Gamma X} \sim \sqrt{\varepsilon_k - V_0 - \hbar^2 k^2 / 2m_X^{(+)}}, \quad (7')$$

2) на пороге прохождения из $\Gamma^{(-)}$-долины в $X^{(+)}$-долину попадают только электроны нормального падения. По мере превышения ε_k над порогом V_0 угол вхождения растет, а при $\varepsilon_k > V_0 \Big/ \left(1 - \frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_X^{(+)}}\right)$ ограничения на угол вылета уже касаются не Г-электронов, а X-электронов, движущихся справа налево (см. рисунок).

Усредняя коэффициент прохождения $T_{\Gamma X}(\mathbf{k}, k_z)$ вблизи порога по поверхности, равной энергии $\varepsilon = \varepsilon_k = \hbar^2(k^2 + k_z^2)/2m_\Gamma^{(-)}$, получим

$$T_{\Gamma X}(\varepsilon) = \frac{\int d^2\mathbf{k} \int_0^\infty dk_z T_{\Gamma X}(\mathbf{k}, k_z)\, k_z \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{\int d^2\mathbf{k} \int_0^\infty dk_z k_z \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)} \simeq A_{\Gamma X}(\varepsilon - V_0)^{3/2}, \quad (12)$$

где

$$A_{\Gamma X} = \frac{16\alpha^2}{3\hbar^2} \frac{M_X^{(-)} m_X^{(+)}}{(M_X^{(+)} m_\Gamma^{(-)})^{1/2}} \Bigg/ \left(V_X V_0^{1/2}\left[V_0 + \frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_\Gamma^{(+)}}(V_\Gamma - V_0)\right]\right). \quad (13)$$

Выражение для введенного аналогичным образом обратного коэффициента прохождения (из $X_1^{(+)}$-долины в $\Gamma^{(-)}$-долину) $T_{X\Gamma}(\varepsilon)$ имеет вид

$$T_{X\Gamma}(\varepsilon)=A_{\Gamma X}\frac{m_{\Gamma}^{(-)}}{m_X^{(+)}}V_0(\varepsilon-V_0)^{1/2}=A_{\Gamma X}\frac{m_{\Gamma}^{(-)}}{m_X^{(+)}}V_0\varepsilon'^{1/2}, \tag{12'}$$

где ε' — энергия, отсчитанная от дна $X^{(+)}$-долины.

Умножая коэффициенты $T_{\Gamma X}(\varepsilon)$ или $T_{X\Gamma}(\varepsilon)$ на стеночные потоки Г- или X-электронов с заданной энергией [соответственно $g_{\Gamma}^{(-)}(\varepsilon)\overline{v_{\Gamma_z}^{(-)}}(\varepsilon)f_{\Gamma}^{(-)}(\varepsilon)$ и $g_X^{(+)}(\varepsilon)\times\overline{v_{X_z}^{(+)}(\varepsilon)}f_X^{(+)}(\varepsilon)$, где $g_{\Gamma,X}(\varepsilon)$ — плотности состояний, $f_{\Gamma,X}(\varepsilon)$ — изотропные составляющие функций распределения, $\overline{v_{\Gamma,X_z}}(\varepsilon)$ — средние z-компоненты скорости электронов при заданной кинетической энергии ε], получим потоки проходящих электронов при заданной ε; интегрируя их с $d\varepsilon$, легко получить полные потоки проходящих электронов (в невырожденном случае). Вырождение также нетрудно учесть.

3. При ΓX-переходах с испусканием или поглощением междолинных фононов полностью остаемся в рамках метода эффективной массы и борновского приближения. При этом в Г-долинах решаем уравнения (1) и (3) с первыми из граничных условий (5) и (6) при $\alpha=0$, а в X_1-долинах — уравнения (2) и (4) со вторыми из условий (5) и (6) при $\alpha=0$. Аналогичные уравнения решаются и для X_2-долин, в которых оси больших масс параллельны гетерогранице, лежащей в плоскости типа (100). Между состояниями в $\Gamma^{(-)}$-долинах и в $X_{1,2}^{(+)}$-долинах могут быть переходы с участием междолинных фононов, вероятности которых определяются формулами

$$W_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}(\mathbf{k},\ k_z;\ \mathbf{k}',\ k_z';\ \mathbf{q},\ q_z)=\frac{\pi D_{\Gamma X}^2}{\rho\omega_{\Gamma X}L^3}\left(N_{\Gamma X}+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)\delta_{\mathbf{k}',\ \mathbf{k}\mp\mathbf{q}}\times$$
$$\times\delta\left(\varepsilon_{\Gamma}(\mathbf{k},\ k_z)-\varepsilon_{X_{1,2}}(\mathbf{k}',\ k_z')-V_0\mp\hbar\omega_{\Gamma X}\right)\frac{1}{L_z^2}\left|I_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}(k_z,\ k;\ k_z',\ k';\ q_z)\right|^2, \tag{14}$$

где $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ отсчитываются от центров своих долин, $\omega_{\Gamma X}$ — частота объемного междолинного фонона, полагаемая приближенно одинаковой по обе стороны от гетерограницы, $(\mathbf{q},\ q_z)$ — волновой вектор фонона за вычетом волнового вектора центра X-долины, $N_{\Gamma X}$ — число междолинных фононов, вычисляемое по формуле Планка, $D_{\Gamma X}$ — константа взаимодействия электрона с междолинным фононом (также равная по обе стороны гетероперехода), L^3 — нормировочный объем фонона, L_z — нормировочная длина электрона,

$$I_{\Gamma X_{1,2}}^{(\pm)}(k_z,\ k;\ k_z',\ k';\ q_z)=\int_{-\infty}^{\infty}dzF_{X_{1,2}}^{*}(z)\,F_{\Gamma}(z)\,e^{\mp iq_zz}, \tag{15}$$

$F_{\Gamma}(z)$ — огибающая волновая функция Г-электрона, из которой вычленен множитель $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ (где $\mathbf{r}$ — двумерный вектор в плоскости гетерограницы), $F_{X_{1,2}}(z)$ — аналогичная функция для $X_{1,2}$-электрона. На самом деле только $F_{\Gamma}(z)$ и $F_{X_1}(z)$ не зависят от направления векторов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ соответственно; функция же $F_{X_2}(z)$, вообще говоря, зависит от направления k', так что и весь интеграл $I_{\Gamma X_2}^{(\pm)}$ зависит от этого направления. Оказывается, однако, что эта зависимость несущественна при вычислении $W_{\Gamma X_2}^{(\pm)}$, если

$$\frac{m_X^{(+)}}{M_X^{(+)}}=\frac{m_X^{(-)}}{M_X^{(-)}}. \tag{16}$$

Для гетеропары GaAs/AlAs равенство (16) приближенно выполняется (см. обзор [8]), хотя и нет видимой причины его достоверности.

Функции $F_{X_{1,2}}(z)$ и $F_{\Gamma}(z)$ в интересующем нас диапазоне энергий имеют вид стоячих волн (в полупространствах $z>0$ и $z<0$ соответственно), экспоненциально затухающих в «чужих» полупространствах. Пространственные периоды осцилляций и длины затухания этих функций определяют величину интегралов (15). В частности, имеем

$$I^{(\pm)}_{\Gamma X_1}=\frac{4k_0k_0'}{m_\Gamma^{(-)}M_X^{(+)}}\left[\left(\frac{k_0'}{M_X^{(+)}}-\frac{ig'}{M_X^{(-)}}\right)\left(\frac{k_0}{m_\Gamma^{(-)}}+\frac{ig_0}{m_\Gamma^{(+)}}\right)\right]^{-1}\times$$
$$\times\left[\frac{g_0\pm iq_z+\dfrac{M_X^{(+)}}{M_X^{(-)}}g'}{(g_0\pm iq_z)^2+k_0'^2}+\frac{g'\mp iq_z+\dfrac{m_\Gamma^{(-)}}{m_\Gamma^{(+)}}g_0}{(g'\mp iq_z)^2+k_0^2}\right],\tag{17}$$

где $k_0=k_z$, $k_0'=k_z'$, g_0 определяется по формуле (8), в которой $\varepsilon_k=\varepsilon_\Gamma(k, k_z)=\hbar^2(k^2+k_z^2)/2m_\Gamma^{(-)}$, а g' определяется с помощью формулы

$$g'^2=M_X^{(-)}\left[\frac{2V_X}{\hbar^2}-\frac{k_z'^2}{M_X^{(+)}}-k'^2\left(\frac{1}{m_X^{(-)}}-\frac{1}{m_X^{(+)}}\right)\right].\tag{10'}$$

Для получения $I^{(\pm)}_{\Gamma X_2}$ можно также использовать правую часть (17), заменив там $M_X^{(\pm)}$ на $m_X^{(\pm)}$; при этом сохраняются обозначения $k_0=k_z$ и $k_0'=k_z'$, а g' получается с помощью формулы

$$g'^2=m_X^{(-)}\left[\frac{2V_X}{\hbar^2}-\frac{k_z'^2}{m_X^{(+)}}+k_x'^2\left(\frac{1}{m_X^{(-)}}-\frac{1}{m_X^{(+)}}\right)+k_y'^2\left(\frac{1}{M_X^{(-)}}-\frac{1}{M_X^{(+)}}\right)\right]\tag{10''}$$

(или такой же формулы с заменой $k_x'\rightleftarrows k_y'$).

Полученные вероятности $W^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\mathbf{k}, k_z; \mathbf{k}', k_z'; \mathbf{q}, q_z)$ имеют размерности обратного времени и могут быть непосредственно использованы для вычисления полных потоков через гетеропереход с помощью формул

$$J^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}=\sum_{\substack{\mathbf{k}, k_z; \mathbf{k}', k_z'\\ \mathbf{q}, q_z}} W^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\mathbf{k}, k_z; \mathbf{k}', k_z'; \mathbf{q}, q_z)\left\{f_\Gamma^{(>)}(\mathbf{k}, k_z)\times\right.$$
$$\left.\times\left(1-f^{(<)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')\right)-f^{(>)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')\left(1-f_\Gamma^{(<)}(\mathbf{k}, k_z)\right)\right\},\tag{18}$$

где $f_\Gamma^{(>)}(\mathbf{k}, k_z)$, $f_\Gamma^{(<)}(\mathbf{k}, k_z)$ — функции распределения Г-электронов, падающих на поверхность гетероперехода и летящих от нее в Г-полупроводнике ($z<0$), $f^{(>)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')$ и $f^{(<)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')$ — функции распределения X_1- или X_2-электронов в X-полупроводнике ($z>0$), летящих к гетеропереходу и от него соответственно. Ввиду принятого выше предположения о малости проходящего тока, обусловленного либо вычисляемым здесь рассеянием, либо описанным в разделе 2 слабым бесфононным переходом, имеем $f_\Gamma(k_z)=f_\Gamma(-k_z)$ и $f_{X_{1,2}}(k_z')=f_{X_{1,2}}(-k_z')$, т. е. обозначения ($\gtrless$) можно опустить. В формуле (18) использованы значения функций распределения на поверхности гетероперехода (слева и справа от него), т. е. предполагается, что пространственное изменение этих функций существенно более плавное, чем затухание волновых функций, определяющее величину $W^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}$.

Выражение для полных потоков удобно записать в виде

$$J^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}=\sum_{\mathbf{k}, k_z} T^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\mathbf{k}, k_z)\,J_\Gamma(\mathbf{k}, k_z)+\sum_{\mathbf{k}', k_z'} T^{(\pm)}_{X_{1,2}\Gamma}(\mathbf{k}', k_z')\,J_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z'),\tag{19}$$

где потоки электронов в долинах определены формулами

$$J_\Gamma(\mathbf{k}, k_z)=\frac{f_\Gamma^{(>)}(\mathbf{k}, k_z)}{L_z}v_z^{(\Gamma)}(\mathbf{k}, k_z);\quad J_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')=\frac{f^{(>)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')}{L_z}v_z^{(X_{1,2})}(\mathbf{k}', k_z').\tag{20}$$

Здесь $v_z^{(\Gamma)}$ и $v_z^{(X_{1,2})}$ — соответствующие z-компоненты групповых скоростей электронов. Сравнение (19) с (18) позволяет ввести коэффициенты прохождения

$$T^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\mathbf{k}, k_z)=\frac{L_z}{\left|v_z^{(\Gamma)}(\mathbf{k}, k_z)\right|}\sum_{\mathbf{k}', k_z'; \mathbf{q}, q_z} W^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}\left(1-f^{(<)}_{X_{1,2}}(\mathbf{k}', k_z')\right),$$
$$T^{(\pm)}_{X_{1,2}\Gamma}(\mathbf{k}, k_z)=\frac{L_z}{\left|v_z^{(X_{1,2})}(\mathbf{k}, k_z)\right|}\sum_{\mathbf{k}, k_z; \mathbf{q}, q_z} W^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}\left(1-f_\Gamma^{(<)}(\mathbf{k}, k_z)\right).\tag{21}$$

Коэффициенты (21) отличаются от коэффициента (7) по определению искусственным введением множителя $(1-f_\Gamma)$ или $(1-f_{X_{1,2}})$, учитывающего возможное статистическое вырождение и не появляющегося в одночастичном приближении раздела 2.

В невырожденном случае имеем

$$T_{\Gamma X_1}^{(\pm)}(\mathbf{k},\ k_z)=\frac{\pi}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{D_{\Gamma X}^2}{\rho\omega_{\Gamma X}}\left(N_{\Gamma X}+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)\frac{m_\Gamma^{(-)}m_X^{(+)}}{k_z}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dq_z\int\limits_0^{k_{z\,\max}^{\prime(\pm)}}dk_z'\,|\,I_{\Gamma X_1}^{(\pm)}|^2, \tag{22}$$

где

$$k_{z\,\max}^{\prime(\pm)^2}=\frac{M_X^{(+)}}{m_\Gamma^{(-)}}(k^2+k_z^2)-\frac{2M_X^{(+)}}{\hbar^2}(V_0\pm\hbar\omega_{\Gamma X}), \tag{23}$$

а вместо формулы (10′) для g'^2 следует использовать выражение

$$g'^2=g_{(\pm)}'^2=\frac{2V_XM_X^{(-)}}{\hbar^2}+\frac{m_X^{(+)}M_X^{(-)}}{m_X^{(-)}M_X^{(+)}}\left(k_{z\max}^{\prime(\pm)^2}-k_z'^2\right)-\frac{M_X^{(-)}}{M_X^{(+)}}k_{z\max}^{\prime(\pm)^2}. \tag{24}$$

Здесь и далее предполагалось, что $V_X,\ V_0>\hbar\omega_{\Gamma X},\ V_\Gamma-V_0>\hbar\omega_{\Gamma X}$. Используя (15), нетрудно убедиться в том, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}dq_z\,|\,I_{\Gamma X_1}^{(\pm)}|^2=2\pi\int\limits_{-\infty}^{\infty}dz\,|\,F_\Gamma(z)\,|^2\,|\,F_{X_1}(z)\,|^2=$$

$$=\left(\frac{8\pi k_0^2k_0'^2}{M_X^{(+)^2}m_\Gamma^{(-)^2}}\right)\left[\left(\frac{k_0'^2}{M_X^{(+)^2}}+\frac{g_{(\pm)}'^2}{M_X^{(-)^2}}\right)\left(\frac{k_0^2}{m_\Gamma^{(-)^2}}+\frac{g_0^2}{m_\Gamma^{(+)^2}}\right)\right]^{-1}\times$$

$$\times\left[\frac{1}{g_{(\pm)}'}+\frac{1}{g_0}+\frac{1}{g_{(\pm)}'}\frac{\left(g_{(\pm)}'+\frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_\Gamma^{(+)}}g_0\right)^2}{g_{(\pm)}'^2+k_0^2}+\frac{1}{g_0}\frac{\left(g_0+\frac{M_X^{(+)}}{M_X^{(-)}}g_{(\pm)}'\right)^2}{g_0^2+k_0'^2}\right]. \tag{25}$$

Прохождение электронов, связанное с контактным междолинным рассеянием, начинается с порогового импульса $\hbar k_{z\max}^{\prime(\pm)}=0$ или с пороговой энергии

$$V_0^{(\pm)}=\frac{\hbar^2}{2m_\Gamma^{(-)}}(k^2+k_z^2)\Big|_{\text{th}}=V_0\pm\hbar\omega_{\Gamma X}. \tag{26}$$

При достаточно низких температурах интерес представляют значения $T_{\Gamma X_1}^{(\pm)}$ вблизи порога, т. е. при достаточно малых превышениях энергии Г-электронов над $V_0^{(\pm)}$. При этом в выражении (25) изменением всех величин, кроме $k_0'^2=$ $=k_z'^2$, в первом сомножителе можно пренебречь; тогда

$$T_{\Gamma X_1}^{(\pm)}(\mathbf{k},\ k_z)\sim\left(\varepsilon_\Gamma(k,\ k_z)-V_0^{(\pm)}\right)^{3/2}. \tag{27}$$

Хотя детальное пороговое поведение (27) заметно отличается от даваемого формулой (7), однако оно совпадает (с точностью до замены V_0 на $V_0^{(\pm)}$) с усредненным поведением (12). Последнее обусловлено тем, что из-за несохранения продольного импульса (с передачей его фонону) в (27) аналогичное усреднение практически выполнено.

Подобное (22) выражение для $T_{\Gamma X_2}^{(\pm)}(\mathbf{k},\ k_z)$ нетрудно написать лишь при принятии условия (16). В этом случае достаточно выполнить замены $m_X^{(+)}$ на $(m_X^{(+)}M_X^{(+)})^{1/2}$ в (22); $M_X^{(+)}$ на $m_X^{(+)}$ и $M_X^{(-)}$ на $m_X^{(-)}$ в (25) и в определениях (23) и (24) величин $k_{z\max}^{\prime(\pm)}$ и $g_{(\pm)}'$. Очевидно, что на пороге $T_{\Gamma X_2}^{(\pm)}$ отличается от $T_{\Gamma X_1}^{(\pm)}$ только опущенным в (27) коэффициентом.

Обратные коэффициенты прохождения $T_{X_{1,2}\Gamma}^{(\pm)}$, также фигурирующие в выражении (19), нетрудно получить аналогичным образом. Их зависимость от энергии X-электрона $\varepsilon'=\varepsilon_{X_{1,2}}^{(-)}$ при малых значениях ε' аналогична зависимости (12′): $T_{X_{1,2}\Gamma}^{(\pm)}\sim\varepsilon'^{1/2}$.

4. Выполняя по аналогии с (12) усреднение полученных выше выражений для $T^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\mathbf{k}, k_z)$ и $T^{(\pm)}_{X_{1,2}\Gamma}(\mathbf{k}', k_z')$ вблизи пороговых значений $\varepsilon_\Gamma^{(-)} \simeq V_0^{(\pm)}$ и $\varepsilon_X^{(+)} \simeq 0$, получим зависимости $T^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\varepsilon)$ и $T^{(\pm)}_{X_{1,2}\Gamma}(\varepsilon)$, причем $T^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}} \simeq A^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}(\varepsilon - V_0^{(\pm)})^{3/2}$ [ср. с (12)]. Коэффициенты $A^{(\pm)}_{\Gamma X_1}$ даются несколько громоздкой формулой

$$A^{(\pm)}_{\Gamma X_1} = \frac{\sqrt{2}\, D^2_{\Gamma X}}{3\pi\hbar^2\rho\omega_{\Gamma X}}\left(N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\frac{1}{V_0^{(\pm)}V_X}\,\frac{M_X^{(-)}m_X^{(+)}}{M_X^{(+)1/2}}\left\{\frac{k_m^{(\pm)}}{\varkappa} + \right.$$
$$+ \frac{2m_\Gamma^{(+)}}{m_\Gamma^{(+)} + m_\Gamma^{(-)}}\arcsin\frac{k_m^{(\pm)}}{k_l^{(\pm)}} + \frac{2m_\Gamma^{(-)}\varkappa}{\left(m_\Gamma^{(+)2} - m_\Gamma^{(-)2}\right)^{1/2}k_l^{(\pm)}}\left[\frac{m_\Gamma^{(+)2}}{m_\Gamma^{(-)2}}\beta_1^{(\pm)} + \frac{M_X^{(+)}}{M_X^{(-)}}\right]\times$$
$$\times \operatorname{arctg}\left[\frac{k_m^{(\pm)}}{k_l^{(\pm)}}\left(\frac{m_\Gamma^{(+)2}}{m_\Gamma^{(-)2}} - 1\right)^{1/2}\right] - \beta_1^{(\pm)}\left[1 + \left(\frac{\varkappa}{k_l^{(\pm)}}\right)^2 + \left(\frac{m_\Gamma^{(+)}\varkappa}{m_\Gamma^{(-)}k_l^{(\pm)}}\right)^2\right]\times$$
$$\times \operatorname{arctg}\frac{k_m^{(\pm)}}{\varkappa} + \frac{M_X^{(+)}}{M_X^{(-)}}\frac{\varkappa}{k_l^{(\pm)}}\ln\left|\frac{k_l^{(\pm)} + k_m^{(\pm)}}{k_l^{(\pm)} + k_m^{(\pm)}}\right| + \beta_2^{(\pm)}\left(\frac{M_X^{(+)}\varkappa}{M_X^{(-)}k_l^{(\pm)}}\right)^2 -$$
$$- 2\beta_1^{(\pm)}\frac{m_\Gamma^{(+)}}{m_\Gamma^{(-)}}\left(\frac{\varkappa}{k_l^{(\pm)}}\right)^2\left(1 + \left(\frac{k_l^{(\pm)}}{\varkappa}\right)^2\right)^{1/2}\operatorname{arctg}\left[\beta_2^{(\pm)}\left(1 + \left(\frac{k_l^{(\pm)}}{\varkappa}\right)^2\right)^{1/2}\right] + \operatorname{arctg}\left(\frac{m_\Gamma^{(+)}}{m_\Gamma^{(-)}}\beta_2^{(\pm)}\right)\times$$
$$\left.\times\left[\frac{2m_\Gamma^{(+)2}}{m_\Gamma^{(+)2} - m_\Gamma^{(-)2}}\left(\beta_1^{(\pm)} - \frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_\Gamma^{(+)}}\right) - \left(\frac{M_X^{(+)}\varkappa}{M_X^{(-)}k_l^{(\pm)}}\right)^2\frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_\Gamma^{(+)}}\right]\right\}, \qquad (28)$$

где

$$k_m^{(\pm)} = m_\Gamma^{(-)}V_0^{(\pm)}, \quad \varkappa^2 = M_X^{(-)}V_X, \quad k_l^{(\pm)2} = m_\Gamma^{(+)}V_\Gamma - \left(m_\Gamma^{(+)} - m_\Gamma^{(-)}\right)V_0^{(\pm)},$$
$$\beta_1^{(\pm)} = \left[1 + \left(\frac{\varkappa}{k_l^{(\pm)}}\right)^2 - \left(\frac{\varkappa m_\Gamma^{(+)}}{k_l^{(\pm)}m_\Gamma^{(-)}}\right)^2\right]^{-1}, \quad \beta_2^{(\pm)} = \left[\left(\frac{k_l^{(\pm)}}{k_m^{(\pm)}}\right)^2 - 1\right]^{-1/2}.$$

Для получения $A^{(\pm)}_{\Gamma X_2}$ [в условиях выполнения равенства (16)] достаточно заменить в фигурной скобке из (28), а также в определениях $\varkappa^2$ и $\beta_1^{(\pm)}$ массы $M_X^{(\pm)}$ на массы $m_X^{(\pm)}$ соответственно.

Обратные коэффициенты прохождения получаются с помощью формул [ср. с (12′)]:

$$T^{(\pm)}_{X_1\Gamma}(\varepsilon') = A^{(\mp)}_{\Gamma X_1}\frac{m_\Gamma^{(-)}}{m_X^{(+)}}V_0^{(\mp)}\frac{N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}}{N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}}\varepsilon'^{1/2},$$
$$T^{(\pm)}_{X_2\Gamma}(\varepsilon') = A^{(\mp)}_{\Gamma X_2}\frac{m_\Gamma^{(-)}}{\left(m_X^{(+)}M_X^{(+)}\right)^{1/2}}V_0^{(\mp)}\frac{N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}}{N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}}\varepsilon'^{1/2}. \qquad (29)$$

В частном предельном случае, когда $V_\Gamma,\ \frac{M_X^{(-)}}{m_\Gamma^{(-)}}V_X \gg V_0$ (что сравнительно неплохо выполняется для реального GaAs/AlAs-гетероперехода, согласно данным [8]), выражение (28) заметно упрощается:

$$A^{(\pm)}_{\Gamma X_1} \simeq \frac{2\sqrt{2}\, D^2_{\Gamma X}}{9\pi\hbar^2\rho\omega_{\Gamma X}}\left(N_{\Gamma X} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right)\frac{m_X^{(+)}M_X^{(-)}m_\Gamma^{(+)}}{\left(M_X^{(+)}m_\Gamma^{(-)}\right)^{1/2}}\frac{V_0^{(\pm)1/2}}{V_\Gamma V_X}\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{\left(V_\Gamma m_\Gamma^{(+)}\right)^{1/2}}\left[1 + \left(\frac{V_X M_X^{(+)2}}{V_\Gamma m_\Gamma^{(+)}M_X^{(-)}}\right)^{1/2} + \frac{V_X M_X^{(+)2}}{2V_\Gamma m_\Gamma^{(+)}M_X^{(-)}}\right] + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{\left(V_X M_X^{(-)}\right)^{1/2}}\left[1 + \left(\frac{V_\Gamma m_\Gamma^{(-)2}}{V_X m_\Gamma^{(+)}M_X^{(-)}}\right)^{1/2} + \frac{V_\Gamma m_\Gamma^{(-)2}}{2V_X m_\Gamma^{(+)}M_X^{(-)}}\right]\right\}. \qquad (28')$$

Сравним $A_{\Gamma X}$, вычисленный по формуле (13), с $A^{(\pm)}_{\Gamma X_1}$, вычисленным по формуле (28′), используя нижеследующие значения параметров гетеропары GaAs/AlAs [7, 8]: $V_\Gamma = 1.04$ эВ, $V_X = 0.29$ эВ, $V_0 = 0.18$ эВ, $m_\Gamma^{(-)} = 0.067\, m_0$, $m_\Gamma^{(+)} = 0.15\, m_0$, $m_X^{(-)} = 0.24\, m_0$, $m_X^{(+)} = 0.19\, m_0$, $M_X^{(-)} = 1.3\, m_0$, $M_X^{(+)} = 1.1\, m_0$, $D_{\Gamma X} =$

$=10^9$ эВ/см, $\hbar\omega_{\Gamma X}=0.03$ эВ, $\rho=5.31$ г/см^3, $\alpha\simeq 0.1\cdot 10^{-8}$ эВ$\cdot$см, m_0 — масса свободного электрона. Полагая $N_{\Gamma X}+{}^1/_2\pm{}^1/_2=1$, имеем $A^{(\pm)}_{\Gamma X_1}/A_{\Gamma X}\simeq 0.36$. Аналогично $A^{(\pm)}_{\Gamma X_2}/A_{\Gamma X}\simeq 0.415$. Отсюда следует, что поток из Г-долины в три X-долины с участием рассеяния на междолинных фононах имеет тот же порядок величины, что и поток за счет бесфононного механизма, направленный только в X_1-долину.

При термоэлектронной эмиссии из легированного GaAs-катода в высокоомный $Al_xGa_{1-x}As$-объем «бесфононная» эмиссия и эмиссия с поглощением фонона при низких температурах ($T\ll\hbar\omega_{\Gamma X}$) описываются идентичными формулами вида

$$J\sim T^{3/2}e^{-V_0/T} \tag{30}$$

и все различие состоит в коэффициентах перед правой частью, которые относятся как $(2A_{\Gamma X_2}+A_{\Gamma X_1})/A_{\Gamma X}$, где $A_{\Gamma X_{1,2}}$ вычислены при $N_{\Gamma X}+{}^1/_2\pm{}^1/_2=1$. При высоких температурах ($T\gtrsim\hbar\omega_{\Gamma X}$) становится сравнимым относительный вклад процессов с испусканием фононов, так что относительная интенсивность фононного канала примерно удваивается. При дальнейшем росте температуры эмиссия за счет фононного канала растет быстрее, чем «бесфононная» эмиссия, ввиду увеличения числа фононов $N_{\Gamma X}$.

При термоэлектронной эмиссии горячих электронов из GaAs в $Al_xGa_{1-x}As$ относительный вклад бесфононного процесса при $T\ll\hbar\omega_{\Gamma X}$ может быть повышен за счет возникновения малого экспоненциального множителя для фононного процесса

$$\exp\left\{-\hbar\omega_{\Gamma X}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_e}\right)\right\},$$

где $T_e>T$, T_e — электронная температура Г-электронов. Если указанный фактор достаточен, чтобы сделать «бесфононную» эмиссию в некотором диапазоне T_e доминирующей, то эксперимент с эмиссией горячих электронов мог бы детерминировать $A_{\Gamma X}$ (и, следовательно, $A^{(\pm)}_{\Gamma X_{1,2}}$).

Другим детерминирующим экспериментом могла бы стать автоэлектронная фаулер-нордхеймовская эмиссия через треугольный $Al_xGa_{1-x}As$-барьер из GaAs-катода, о которой уже говорилось в [6] в связи с иным механизмом междолинного рассеяния электронов. (В [6] вычислен вклад рассеяния на сплаве, которое отсутствует при $x=1$, т. е. в случае гетероперехода GaAs/AlAs. Рассмотренный здесь механизм дает вклад и в этом случае, так что эксперименты при разных x могли бы указать вклад каждого из механизмов). При автоэлектронной эмиссии доминируют процессы с участием междолинного рассеяния в X_2-долины из-за малости поперечной эффективной массы $m_X^{(+)}$ (по сравнению с $M_X^{(+)}$), так что бесфононный процесс подавлен.

Список литературы

[1] Грибников З. С. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 7. С. 1380—1382.
[2] Hess K., Morkoc H., Shichijo H., Streetman B. G. // Appl. Phys. Lett. 1979. V. 35. N 6. P. 469—471.
[3] Marsh A. C. // Sem. Sci. Technol. 1986. V. 1. N 5. P. 320—326.
[4] Mendez E. E., Wang W. I., Galleja E., Goncalves de Silva C. E. T. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. N 18. P. 1263—1265.
[5] Bonnefoi A. R., McGill T. C., Burnham R. D., Anderson G. B. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. N 6. P. 344—346.
[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] Adachi S. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 3. P. R1—R29.

Институт полупроводников АН УССР
Киев

Получена 13.07.1989
Принята к печати 25.07.1989