

Численный анализ продольного электрического тока при резонансном протекании в сверхрешетке $n\text{-GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с легированными квантовыми ямами

© С.И. Борисенко, Г.Ф. Караваев

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова при Томском государственном университете, 634050 Томск, Россия

(Получена 7 июля 1997 г. Принята к печати 19 ноября 1997 г.)

Проведен численный анализ плотности электрического тока при резонансном переносе электронов вдоль оси сверхрешетки $n\text{-GaAs}/\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$ с легированными квантовыми ямами при низких температурах. Расчет энергетического спектра минизон зоны проводимости проводился в приближениях Кейна и эффективной массы. Плотность тока рассчитывалась по известной формуле, полученной в рамках метода матрицы плотности для однородного электрического поля в пренебрежении разогревом электронного газа. Рассмотрено влияние взаимодействия между минизонами в электрическом поле на электропроводность и межподзонное оптическое поглощение.

Как известно, численный анализ плотности электрического тока, протекающего в сильных электрических полях вдоль оси сверхрешетки (СР) и связанного с переходами электронов между штарковскими лесенками различных минизон, представляет собой сложную задачу, решению которой в последнее время уделяется достаточно большое внимание [1,2]. Сложность задачи состоит в том, что рассматриваемый перенос электронов является чисто квантовым эффектом, а это требует знания неравновесной матрицы плотности. Кроме того решение данной задачи усложняется неоднородностью электрического поля, возникающей в реальных СР в связи с наличием отрицательной дифференциальной проводимости и достаточной концентрации свободных носителей заряда, что приводит к появлению домена сильного поля у анодного контакта [3,4].

Указанные выше проблемы привели к тому, что при анализе продольного токопереноса в СР с легированными квантовыми ямами (КЯ) в сильном электрическом поле к настоящему времени использовались квазиклассические методы [5,6]. Однако в области резонансного токопереноса, когда домен сильного поля охватывает всю СР [7], а также для нелегированных СР [8] электрическое поле можно считать однородным и для расчета плотности тока использовать квантовую теорию переноса [9], если разогрев электронного газа пренебрежимо мал.

Работа посвящена численному анализу плотности резонансного тока и межподзонного оптического поглощения для СР типа $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с легированными донорной примесью КЯ, используемых в качестве ИК фотодетекторов [10–12]. Эти СР имеют две минизоны в КЯ, ширина которых из-за широких барьеров практически равна нулю. Резонансный ток в них определяется электронными переходами из штарковских состояний 1-й минизоны в штарковские состояния 2-й минизоны соседних КЯ. Расчет плотности резонансного тока проводился при низких температурах с учетом рассеяния электронов на ионах примеси по известной формуле, полученной в рамках метода матрицы плотности [9].

1. Методика расчета плотности резонансного тока

Плотность резонансного тока j_r в однородном электрическом поле F , параллельном оси СР, рассчитывалась по известной формуле [9]

$$j_r = en\tau_{\perp} \tilde{d} |\tilde{\Omega}_{12'}|^2, \quad (1)$$

где n — средняя по объему концентрация электронов, τ_{\perp} — усредненное по поперечной энергии электронов время релаксации разности фаз,

$$\tilde{d} = \langle \tilde{w}_{21} | z | \tilde{w}_{21} \rangle - \langle \tilde{w}_{10} | z | \tilde{w}_{10} \rangle \quad (2)$$

— параметр, близкий по величине к периоду СР d ,

$$\hbar \tilde{\Omega}_{12'} = \langle \tilde{w}_{10} | \hat{H}_0 - eFz | \tilde{w}_{21} \rangle \quad (3)$$

— матричный элемент, определяющий вероятность туннелирования электронов между штарковскими состояниями соседних КЯ. В формулах (2) и (3) \tilde{w}_{il} — волновые функции электронов в электрическом поле в приближении огибающих, соответствующие энергии

$$E_{il} = E_i - eFdl, \quad (4)$$

где i — номер состояния в КЯ с номером l , \hat{H}_0 — одночастичный оператор Гамильтона для электронов в СР в отсутствие электрического поля, z — координата вдоль оси СР. Ортонормированные функции \tilde{w}_{il} , рассчитанные в приближении изолированных КЯ, представляют собой линейную комбинацию из ортонормированных функций Ванье

$$\tilde{w}_{il} = \sum_j c_{ji} w_{jl}, \quad (5)$$

где

$$w_{il}(z) = w_i(z - ld) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqld} \psi_{iq}(z) \quad (6)$$

— функция Ванье, соответствующая i -й минизоне в зоне проводимости, локализованная в l -й КЯ, ψ_{iq} — волновые функции электронов блоховского типа с волновым

числом q в приближении огибающих, соответствующие энергии E_{iq} . Значения энергии E_i и коэффициенты c_{ji} , им соответствующие, являются решениями системы линейных уравнений

$$\sum_j [(I_{i0} - E)\delta_{ij} - eFZ_{ij0}]c_j = 0, \quad (7)$$

где

$$I_{i0} = \frac{1}{N} \sum_q E_{iq} \quad (8)$$

— среднее значение энергии в i -й минизоне,

$$Z_{ij0} = \langle \tilde{w}_{i0}|z|\tilde{w}_{j0} \rangle = \int_L w_{i0}^* z w_{j0} dz \quad (9)$$

— матричный элемент оператора координаты, $L = Nd$ — длина СР вдоль оси симметрии. С учетом формулы (5) и ортонормированности функций ψ_{iq} для параметра \tilde{d} и матричного элемента вероятности туннельного перехода получаем

$$\tilde{d} = d + \sum_{ij} (c_{i2}^* c_{j2} - c_{i1}^* c_{j1}) Z_{ij0}, \quad (10)$$

$$\hbar\tilde{\Omega}_{12'} = \sum_{ij} c_{i1}^* c_{j2} (I_{i1} \delta_{ij} - eFZ_{ij1}), \quad (11)$$

где

$$I_{i1} = \frac{1}{N} \sum_q e^{iqd} E_{iq}, \quad (12)$$

$$Z_{ij1} = \langle \tilde{w}_{i0}|z|\tilde{w}_{j1} \rangle. \quad (13)$$

Огибающие ψ_{iq} и значения энергии E_{iq} рассчитывались с учетом кейновской непараболичности для полупроводников $A^{III}B^V$ в трехзонном приближении, которое будем называть кейновским приближением. В этом приближении функции ψ_{iq} представляют собой трехкомпонентные столбцы с компонентами $\psi_{iq\nu}$, удовлетворяющие условию ортонормировки

$$\langle \psi_{iq} | \psi_{jq} \rangle = \sum_{\nu=1}^3 \langle \psi_{iq\nu} | \psi_{jq\nu} \rangle = \delta_{ij}. \quad (14)$$

Согласно [13], функции $\psi_{iq\nu}$ и энергии E_{iq} являются решением системы линейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hat{P}_z \psi_2 + \frac{1}{\sqrt{3}} P \hat{P}_z \psi_3 + V_s(z) \psi_1 &= E \psi_1, \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} P \hat{P}_z \psi_1 + V_p(z) \psi_2 &= (E + E_g) \psi_2, \\ \sqrt{\frac{1}{3}} P \hat{P}_z \psi_1 + V_\delta(z) \psi_3 &= (E + E_g + \Delta) \psi_3, \end{aligned} \quad (15)$$

где \hat{P}_z — z -компонента оператора импульса; E_g и Δ — ширина запрещенной зоны и величина спин-орбитального расщепления вершины валентной зоны

в полупроводнике, в котором расположена КЯ; P — матричный элемент, определяющий взаимодействие края валентной зоны и зоны проводимости в модели Кейна, он считался постоянной величины по всей СР; V_s , V_p и V_δ — функции, описывающие край зоны проводимости, зоны легких дырок и спин-орбитально отщепленной зоны, отсчитанные от края этих зон в КЯ. Эти функции являются периодическими с периодом СР и отличны от нуля в области барьеров, где являются постоянными. Для рассматриваемых нами СР типа GaAs/Al_xGa_{1-x}As с прямоугольными КЯ и барьерами значение этих функций в области барьеров является постоянной величиной, равной

$$V_p = E_g(0) - E_g(x) + V_s, \quad V_\delta = \Delta(0) - \Delta(x) + V_p, \quad (16)$$

где

$$E_g(x) = E_g(1)x + E_g(0)(1-x) - C_g x(1-x),$$

$$\Delta(x) = \Delta(1)x + \Delta(0)(1-x)$$

— ширина запрещенной зоны и величина спин-орбитального расщепления валентной зоны в Al_xGa_{1-x}As.

Согласно [13], система уравнений (15) сводится к решению уравнения типа Кронига–Пенни для функции ψ_1

$$\left\{ \frac{1}{2} \hat{P}_z \frac{1}{m(E, z)} \hat{P}_z + V_s(z) \right\} \psi_1 = E \psi_1 \quad (17)$$

с граничными условиями, вытекающими из непрерывности ψ_1 и $m^{-1}\psi_1'$ на гетерограницах, где

$$\begin{aligned} \frac{1}{m(E, z)} &= \frac{2}{3} P^2 \left(\frac{2}{E + E_g - V_p(z)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{E + E_g + \Delta - V_\delta(z)} \right). \end{aligned} \quad (18)$$

При этом функции ψ_2 и ψ_3 , согласно (15), определяются через ψ_1 по формулам

$$\begin{aligned} \psi_2 &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{P}{E + E_g - V_p(z)} \hat{P}_z \psi_1, \\ \psi_3 &= \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{P}{E + E_g + \Delta - V_\delta(z)} \hat{P}_z \psi_1. \end{aligned} \quad (19)$$

Так как, согласно теории [13], значение матричного элемента P не должно зависеть от координаты, оно определялось как среднее значение этой величины по периоду СР:

$$P^2 = \frac{P^2(x)b + P^2(0)a}{d}, \quad (20)$$

где a , b — ширины КЯ и барьера СР,

$$P^2(x) = \frac{E_g(x)[E_g(x) + \Delta(x)]}{2m_c(x)[E_g(x) + \frac{2}{3}\Delta(x)]},$$

$m_c(x) = xm_c(1) + (1-x)m_c(0)$ — эффективная масса электронов в точке Γ в Al_xGa_{1-x}As.

При $E = 0$ в формуле (18), уравнение (17) переходит в обычное уравнение Шредингера для огибающей функции ψ_{iq} . Данное приближение будем называть приближением эффективной массы.

Учитывая симметрию сверхрешеточного потенциала и выбирая систему координат в центре нулевой КЯ, можно выбрать функции $\psi_{iq}(z)$ и $w_{il}(z)$, удовлетворяющие следующим условиям симметрии:

$$\begin{aligned} \psi_{iq}(-z) &= \psi_{iq}^*(z) = (-1)^{\alpha_i} \psi_{i-q}(z), \\ w_{il}(-z) &= w_{i-l}^*(z) = (-1)^{\alpha_i} w_{i-l}(z), \end{aligned} \quad (21)$$

где $\alpha_i = 0, 1$. Согласно этим условиям четные функции $\psi_{i0}(z)$ и $w_{i0}(z)$ являются вещественными, а нечетные — мнимыми. В дальнейшем минизоны с $\alpha_i = 0$ будем называть четными и наоборот. С учетом формул (6), (14) и (21) для матричного элемента Z_{ijn} получаем

$$Z_{ijn} = \frac{i}{\pi} \sum_{\nu} \int_0^{\pi/d} \left(e^{-iqdn} - (-1)^{\alpha_i + \alpha_j} e^{iqdn} \right) Z_{ijn}(q) dq, \quad (22)$$

где

$$Z_{ijn}(q) = \int_0^{d/2} \left\{ z \operatorname{Im} (\psi_{iq\nu}^* \psi_{jq\nu}) - \operatorname{Re} \left(\psi_{jq\nu} \frac{\partial}{\partial q} \psi_{iq\nu}^* \right) \right\} dz, \quad (23)$$

при этом матричные элементы удовлетворяют условию симметрии

$$Z_{ijn} = -Z_{jin}. \quad (24)$$

Из формулы (22) следует, что матричные элементы Z_{ij0} , определяющие энергетический спектр в электрическом поле в приближении изолированных КЯ, отличны от нуля только между минизонами различной четности, что соответствует правилам отбора для межподзонного оптического поглощения.

2. Используемые значения параметров и анализ результатов расчета

Расчет резонансного значения плотности темнового тока проводился по формуле (1) для сверхрешеток GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As с легированными КЯ шириной 70 Å и толщиной барьера 140 Å. Концентрация легирующей примеси N_D , согласно эксперименту [11], считалась равной $1.4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Для расчета параметров, входящих в систему уравнений (15) и уравнение (17), были использованы следующие формулы и значения независимых

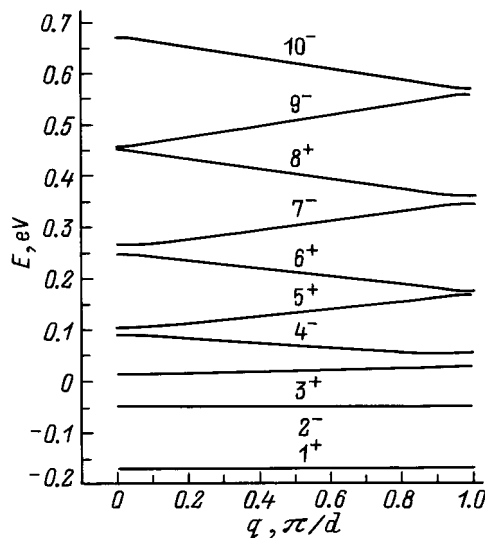


Рис. 1. Энергетический спектр минизон зоны проводимости в окрестности точки Г сверхрешетки GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As.

переменных [14]:

$$E_g = E_g(0) = \left(1.52 - \frac{5.408 \cdot 10^{-4} T^2}{204 + T} \right) \text{ эВ},$$

$$E_g(1) = \left(3.10 - \frac{8.208 \cdot 10^{-4} T^2}{204 + T} \right) \text{ эВ}$$

— ширины запрещенных зон GaAs и AlAs как функции температуры T ;

$$\Delta = \Delta(0) = 0.34 \text{ эВ}, \quad \Delta(1) = 0.28 \text{ эВ}$$

— величины спин-орбитального расщепления вершины валентной зоны в GaAs и AlAs;

$$m_c(0) = 0.067 m_0, \quad m_c(1) = 0.15 m_0$$

— эффективные массы электронов в точке Г в GaAs и AlAs; $C_g = 0.37 \text{ эВ}$ — параметр, учитывающий нелинейный характер изменения ширины запрещенной зоны в сплаве Al_xGa_{1-x}As в зависимости от молярной доли x [15].

На рис. 1 приведен энергетический спектр 10 нижних минизон для рассматриваемой СР при $T = 15 \text{ К}$, рассчитанных из решения уравнения (17) в приближении Кейна. Индексы (+) или (-) у номера минизоны указывают на ее четность или нечетность. Из рисунка следует, что в КЯ находятся две минизоны с незначительной дисперсией, между которыми, согласно правилам отбора, может наблюдаться межподзонное поглощение с энергией $\hbar\omega_0 = I_{20} = I_{10} = 121 \text{ мэВ}$. Рассчитанный спектр получен при эффективной высоте потенциального барьера $V_s = 218 \text{ мэВ}$, величина которого подгонялась для совпадения экспериментальных и расчетных данных по межподзонному оптическому поглощению [11]. Полученное значение V_s ниже разрыва края зоны проводимости на

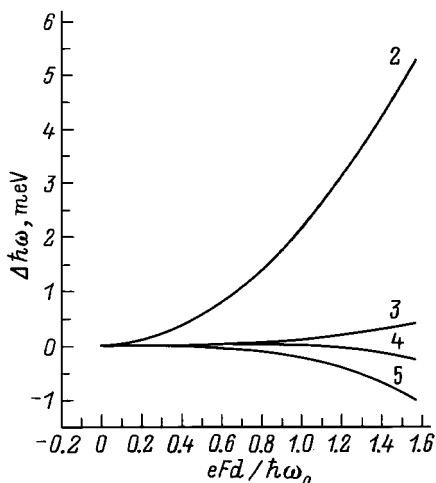


Рис. 5. Зависимость сдвига энергии межподзонного оптического поглощения от напряженности электрического поля в кейновском приближении. Цифрам у кривых соответствует число минизон, учитываемых при расчете данной кривой.

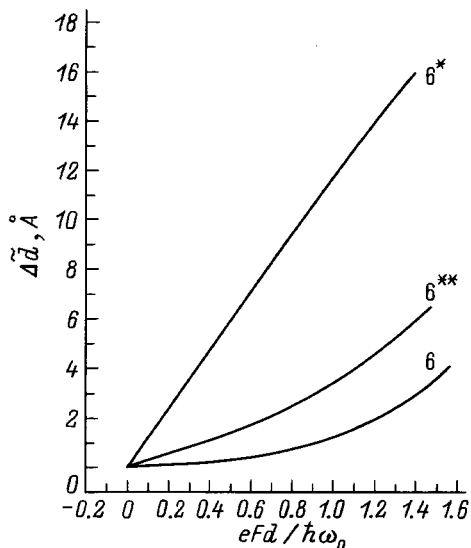


Рис. 6. Зависимость $\Delta\tilde{d}$ (отклонения параметра \tilde{d} от периода сверхрешетки $d = 210 \text{ \AA}$) от напряженности электрического поля. Расчет сделан в приближении 6 минизон.

На рис. 6 приведена рассчитанная по формулам (7), (10), (22) в различных приближениях с учетом 6 минизон зависимость параметра $\Delta\tilde{d} = \tilde{d} - d$ от поля. Согласно рисунку, значение \tilde{d} , рассчитанное в любом приближении, с ростом поля растет. Этот рост можно объяснить более свободным характером движения электронов во 2-й минизоне, чем в 1-й. Однако в приближении малого числа минизон этот параметр с ростом поля может уменьшаться (рис. 7). Увеличение этого параметра в области резонансного значения поля в кейновском приближении оказалось равным примерно 1 \AA , что значительно меньше периода рассматриваемой СР, так что откликом \tilde{d} от d в области рассматриваемых полей можно пренебречь.

С учетом приведенного выше значения матричного элемента вероятности туннельного перехода рассчитанная величина резонансного значения плотности тока j_r получилась равной порядка 1.25 A/cm^2 , что находится в хорошем согласии с экспериментальной величиной 0.9 A/cm^2 , определенной из вольт-амперной зависимости темнового тока при $V = 6 \text{ В}$ [11]. При этом напряжении, согласно [7], электрическое поле в рассматриваемой СР является однородным, т. е. домен сильного поля охватывает всю СР, и при наличии 50 периодов, с учетом того что $\hbar\omega_r \approx 120 \text{ мэВ}$, соответствует резонансному значению. Для расчета j_r были взяты значения концентрации электронов $n = 1.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и времени релаксации разности фаз $\tau_{\perp} = 7.8 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ при $T = 15 \text{ К}$. Величина τ_{\perp} ограничивалась рассеянием на ионах примеси, а взаимодействие электронов с нейтральными атомами учитывалось введением эффективной высоты потенциального барьера для электронов V_s .

Проведенный численный анализ плотности продольного тока при резонансном протекании и межподзонного оптического поглощения в СР со слабо взаимодействующими КЯ показал, что удастся согласовать теоретические и экспериментальные данные по рассматриваемым явлениям в области низких температур, вводя эффективную высоту потенциального барьера на гетерогранице и считая рассеяние на ионах примеси основным механизмом рассеяния. Как показали расчеты, при анализе рассматриваемых оптических и кинетических свойств в области квантовых электрических полей взаимодействие штарковских состояний, лежащих в изолированных КЯ, с возбужденными состояниями является существенным. Пренебрежение этим взаимодействием может изменить численный результат не только количественно, но и

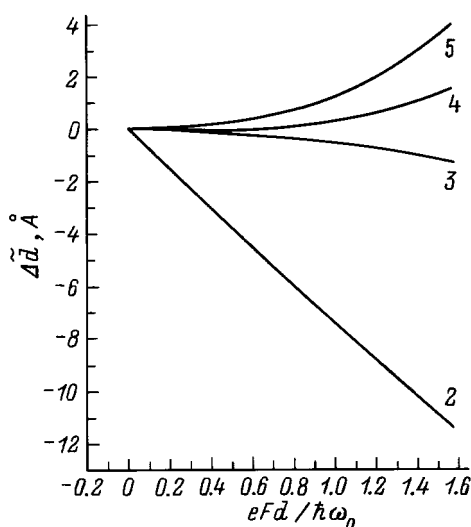


Рис. 7. Зависимость $\Delta\tilde{d}$ (отклонения параметра \tilde{d} от периода сверхрешетки) от напряженности электрического поля. Расчет сделан в кейновском приближении. Цифрам у кривых соответствует число минизон, учитываемых при расчете данной кривой.

качественно. Использование (при расчете энергетического спектра минизон) метода эффективной массы вместо методов, учитывающих непараболичность объемного спектра в области края зоны проводимости, также может привести к качественно неверным результатам при анализе физических свойств рассматриваемых сверхрешеток.

Список литературы

- [1] J. Potvig, Jauho Anti-Pekka, H. Smith. Phys. Rev. Lett., **74**, 1831 (1995).
- [2] H. Grahn, J. Kastrup et al. Japan. J. Appl. Phys., pt. 1, **34**, N 8B, 4526 (1995).
- [3] K.K. Choi, B.F. Levin et al. Phys. Rev. B, **3**, 4172 (1987).
- [4] H.T. Grahn, H. Schider, K. Klitzing. Phys. Rev. B, **41**, 2890 (1990).
- [5] R.E. Kunz, E. Scholl. Phys. Rev. B, **47**, 4337 (1993).
- [6] F. Prengel, A. Wacker, E. Scholl. Phys. Rev. B, **50**, 1705 (1994).
- [7] S.H. Kwok, T.B. Norris et al. Phys. Rev. B, **51**, 10 171 (1995).
- [8] F. Capasso, K. Mohammed, A.Y. Cho. Appl. Phys. Lett., **48**, 478 (1986).
- [9] Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис. ФТП, **6**, 148 (1972).
- [10] B.F. Levine, K.K. Choi et al. Appl. Phys. Lett., **50**, 1092 (1987).
- [11] K.K. Choi, B.F. Levine et al. Appl. Phys. Lett., **50**, 1814 (1987).
- [12] B.F. Levine, C.G. Bethea et al. Appl. Phys. Lett., **53**, 231 (1988).
- [13] *Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры* (М., Наука, 1989).
- [14] Landolt-Börnstein. *Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik*, ed. by O. Madelung (Springer Verlag, N.Y., 1987). Vol. V, III, Part 22A.
- [15] J. Batey, S.L. Wright, Surf. Sci, **174**, 320 (1986).

Редактор Т.А. Полянская

A numerical analysis of the longitudinal electric current under resonant tunnelling in an n -GaAs/Al_xGa_{1-x}As well superlattice with doped quantum

S.I. Borisenko, G.F. Karavaev

Siberian Physicotechnical Institute,
Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract A numerical analysis of the electric current density under low temperature sequential resonant tunnelling in an n -doped GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As quantum well superlattice has been made. Calculations of the conduction miniband energy are based on the Kane and effective mass approximations. The current density was calculated with the use of well-known formula which is based on the density matrix method for a homogeneous electric field and neglects the electron gas warming-up. The effect of the miniband interaction in the electric field on the electric conductivity and intersubband absorption is considered.