

Туннелирование электронов через тонкий барьер с плавным потенциалом на гетерограницах GaAs/AlAs(001)

© С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев

Сибирский физико-технический институт,
634050 Томск, Россия

E-mail: kanc@spti.tsu.ru

(Поступила в Редакцию 13 мая 1999 г.
В окончательной редакции 6 сентября 1999 г.)

Методами псевдопотенциала и матрицы рассеяния, факторизованными по неприводимым представлениям группы симметрии гетероструктуры, исследовано влияние реального микроскопического потенциала на характеристики резонансного туннелирования электронов из Γ -долины GaAs через барьер AlAs толщиной в одну постоянную решетки. Переходные области между потенциалами компонент и барьерная область рассматриваются как составные части периода сверхрешетки $\text{Ga}_2\text{Al}_2\text{As}_4$, чтобы обеспечить непрерывность кристаллического потенциала на границах сшивания волновых функций. Показано, что по сравнению с результатами модели с резкой границей при учете реального потенциала меняется число и положение Фано-резонансов, усиливается локализация электронной плотности в барьере резко увеличивается время туннелирования.

Работа выполнена при поддержке программы Миннауки "Поверхностные атомные структуры" (проект № 5.12.99).

В настоящее время методами моc-гидридной и молекулярно-лучевой эпитаксии создаются гетероструктуры с тонкими, атомарно-резкими слоями, в которых переходные области потенциалов соседних слоев сопоставимы с размерами самих слоев. Физические свойства таких гетероструктур могут существенно зависеть от природы интерфейсной области, поэтому описание их электронных состояний необходимо проводить методами, учитывающими реальный микроскопический потенциал. Однако это обстоятельство зачастую игнорируется. В получившем широкое распространение методе эффективной массы потенциал на границах обычно полагается разрывным, что оправдано для структур с достаточно толстыми слоями и для области энергий, где смешивание состояний из разных долин несущественно. В других случаях этот метод может приводить к количественным расхождениям с измеряемыми характеристиками, например, он дает заниженные значения квантовых уровней в узкой квантовой яме GaAs внутри $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ [1] и заниженные времена туннелирования через сверхрешетки GaAs/AlAs с тонкими барьерами и ямами [2]. Для устранения расхождений применяют сглаживание разрывного потенциала некоторыми модельными функциями [1,3], вид которых достаточно произволен. В то же время при последовательном учете интерфейсного потенциала в рамках метода огибающих волновых функций получается многозонная система уравнений с нелокальным взаимодействием [4], что делает его применение менее простым и наглядным. В более точных расчетах по методам сильной связи и псевдопотенциала [5–14] отсутствие трансляционной симметрии вдоль оси гетероструктуры приводит к необходимости использования так называемого приближения плоских зон, в котором пренебрегается "искривлением" зон вблизи гетерограниц и потенциал

в каждом слое полагается равным потенциалу соответствующего идеального объемного материала. Результаты таких расчетов, вообще говоря, зависят от выбора границ, по которым производится сшивание волновых функций компонент, и для структур с тонкими слоями эта проблема становится особенно острой. С другой стороны, самосогласованные расчеты электронных состояний сверхрешеток (CP) указывают [15,16] на наличие вблизи гетерограниц, протяженных на несколько монослоев областей, в которых кристаллические потенциалы соседних веществ непрерывно переходят друг в друга. Возникающие поправки к разрывному потенциалу не являются, вообще говоря, гладкими функциями, имеют более низкую, чем потенциалы компонент, симметрию, и, кроме того, нелокальны, что создает определенные трудности для их учета при описании процессов резонансного туннелирования электронов. Поэтому в работах, где подобные попытки предпринимались, они учитывались упрощенным образом. Например, в [10] поправки к разрывному потенциалу задавались ступеньками с каждой стороны от границы. В таком приближении они приводят к заметному изменению амплитуд вероятностей резонансного туннелирования электронов из GaAs через достаточно толстые барьеры AlAs ($\sim 10a_0$, a_0 — постоянная решетки), особенно в области смешивания состояний из Γ и X долин, но почти не влияют на энергетическое положение резонансов. Очевидно, что с уменьшением толщины барьеров роль интерфейсного потенциала должна возрастать и его необходимо описывать более точно. В рамках приближения плоских зон этого можно достичь, разбивая структуру на такие слои, чтобы они включали переходные области в качестве своих составных частей, например, были фрагментами сверхрешеток, потенциалы которых на границах сшива-

ния волновых функций непрерывно переходили бы друг в друга. В настоящей работе этот подход использован для изучения туннелирования электронов из GaAs через тонкий барьер AlAs толщиной в одну постоянную решетки, для которого влияние интерфейсного потенциала особенно существенно. Резонансы и антирезонансы в коэффициенте прохождения через одиночный барьер связаны с эффектами междолинного Γ -X смешивания. На основе расчетов методами псевдопотенциала и матрицы рассеяния показано, что учет реального микроскопического потенциала вблизи гетерограниц важен для количественного описания таких резонансов, поскольку приводит к изменению их числа, энергий и заметному увеличению времен столкновений и зарядовой плотности электронов в барьере.

1. Метод расчета

Для изучения коэффициента прохождения электронов, как и в [12–14], использовалась модель с разрывным потенциалом, но барьер из слоя AlAs и примыкающих к нему переходных слоев рассматривался как периодическая сверхрешетка. В этом случае можно обеспечить малую величину скачка кристаллического потенциала и волновых функций на границах сшивания. При определении электронных состояний с комплексными значениями волнового вектора в многоатомных сверхрешетках возникают значительные вычислительные трудности, для уменьшения которых целесообразно использовать базис из симметризованных волновых функций. Поэтому здесь мы приводим описание метода матрицы рассеяния для многослойных систем с учетом их симметрии. В структурах с согласованными постоянными решеток компонент точечная группа симметрии G является пересечением точечных групп слоев, состоящим из элементов симметрии в плоскости границы. Дополнительная симметрия, возникающая при определенной конфигурации структуры, здесь не учитывается.

Рассмотрим структуру, у которой вдоль оси роста z имеется N границ с координатами z_n , разделяющими $N + 1$ среду. При заданных значениях энергии и параллельной границе составляющей волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} общее решение уравнения Шредингера в n -й среде $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha n}(\mathbf{r})$, преобразующееся по s -й строке f -го неприводимого представления группы G ($\alpha \equiv (s, f)$), можно записать в виде суперпозиции частных решений $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}\xi}^{\alpha n}(\mathbf{r})$, соответствующих падающим ($\xi = \nu$) и отраженным ($\xi = \mu$) волнам [13]

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha n}(\mathbf{r}) &= \sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha n} \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}\nu}^{\alpha n}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha n} \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}\mu}^{\alpha n}(\mathbf{r}), \\ \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}\xi}^{\alpha n}(\mathbf{r}) &= U_{\mathbf{k}_{\parallel}k_{z\xi}^n}^{\alpha n}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_{\parallel}\boldsymbol{\rho} + k_{z\xi}^n z)), \\ \mathbf{k} &= \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{e}_z k_{z\xi}^n,\end{aligned}\quad (1)$$

где \mathbf{e}_z — орг вдоль оси z , $\boldsymbol{\rho}$ — проекция радиус-вектора \mathbf{r} на плоскость границы, $U_{\mathbf{k}_{\parallel}k_{z\xi}^n}^{\alpha n}(\mathbf{r})$ — периодические вол-

новые функции, разложенные по ортонормированному базису из симметризованных комбинаций плоских волн $\chi_p^{\alpha}(\mathbf{r})$ (СКПВ)

$$\begin{aligned}U_{\mathbf{k}_{\parallel}k_{z\xi}^n}^{\alpha n}(\mathbf{r}) &= (1/\sqrt{V}) \sum_p Q_{p\xi}^{\alpha n} \chi_p^{\alpha}(\mathbf{r}), \\ \chi_p^{\alpha}(\mathbf{r}) &= \sum_m R_{pm}^{\alpha} \exp(i\mathbf{b}_m^p \mathbf{r}),\end{aligned}\quad (2)$$

здесь \mathbf{b}_m^p — трехмерные векторы обратной решетки, p — номер СКПВ, V — объем блока периодичности кристалла. Проектируя $\chi_p^{\alpha}(\mathbf{r})$ на плоскость гетерограницы, получаем ортонормированный базис из симметризованных комбинаций поверхностных плоских волн (СКППВ)

$$\varphi_q^{\alpha}(\boldsymbol{\rho}) = (1/\sqrt{S_0}) \sum_l T_{ql}^{\alpha} \exp(i\mathbf{a}_l^q \boldsymbol{\rho}),$$

где \mathbf{a}_l^q — двумерные векторы обратной решетки, q — номер СКППВ, S_0 — площадь поверхностной элементарной ячейки. Условия сшивания на границах волновых функций $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{\alpha n}(\mathbf{r})$ и их первых производных записываются в виде

$$\begin{aligned}\sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha n} D_{q\nu}^{\alpha n} \exp(ik_{z\nu}^n z_n) + \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha n} D_{q\mu}^{\alpha n} \exp(ik_{z\mu}^n z_n) &= \sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha(n+1)} D_{q\nu}^{\alpha(n+1)} \exp(ik_{z\nu}^{(n+1)} z_n) \\ &+ \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha(n+1)} D_{q\mu}^{\alpha(n+1)} \exp(ik_{z\mu}^{(n+1)} z_n), \\ \sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha n} P_{q\nu}^{\alpha n} \exp(ik_{z\nu}^n z_n) + \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha n} P_{q\mu}^{\alpha n} \exp(ik_{z\mu}^n z_n) &= \sum_{\nu} A_{\nu}^{\alpha(n+1)} P_{q\nu}^{\alpha(n+1)} \exp(ik_{z\nu}^{(n+1)} z_n) \\ &+ \sum_{\mu} B_{\mu}^{\alpha(n+1)} P_{q\mu}^{\alpha(n+1)} \exp(ik_{z\mu}^{(n+1)} z_n), \\ D_{q\xi}^{\alpha n} &= \sqrt{S_0} \sum_p Q_{p\xi}^{\alpha n} C_{qp}^{\alpha n}, \\ C_{qp}^{\alpha n} = \langle \varphi_q^{\alpha} | \chi_p^{\alpha} \rangle &= \sum_{m,l} (T_{ql}^{\alpha})^* R_{pm}^{\alpha} \delta((\mathbf{b}_m^p)_{\parallel} - \mathbf{a}_l^q) \exp(ib_{mz}^p z_n), \\ P_{q\xi}^{\alpha n} &= \sqrt{S_0} \left[\sum_p Q_{p\xi}^{\alpha n} \partial C_{qp}^{\alpha n} / \partial z + ik_{z\xi}^n D_{q\xi}^{\alpha n} \right], \\ \partial C_{qp}^{\alpha n} / \partial z &= i \sum_{m,l} (T_{ql}^{\alpha})^* R_{pm}^{\alpha} \delta((\mathbf{b}_m^p)_{\parallel} - \mathbf{a}_l^q) b_{mz}^p \exp(ib_{mz}^p z_n), \\ b_{mz}^p &= \mathbf{b}_m^p \mathbf{e}_z.\end{aligned}\quad (3)$$

Порядок матриц $D_{q\xi}^{\alpha n}$ и $P_{q\xi}^{\alpha n}$ определяется числом падающих (отраженных) волн, которое равно числу СКППВ. Условия сшивания можно свести к рекуррентным соотношениям для элементов факторизованной матрицы рассеяния $S_{ij}^{\alpha}(n)$ ($i, j = 1, 2$ — значки, нумерующие блоки

для падающих (1) и отраженных (2) волн) на одной ($n = 1$), двух ($n = 2$) и т.д. границах [13]

$$S_{11}^{\alpha}(n) = \left[(L_1^n)^{-1} J_{11}^{\alpha}(n) L_1^{(n+1)} - S_{12}^{\alpha}(n-1) (L_2^n)^{-1} J_{21}^{\alpha}(n) L_1^{(n+1)} \right]^{-1} S_{11}^{\alpha}(n-1),$$

$$S_{12}^{\alpha}(n) = S_{11}^{\alpha}(n) (S_{11}^{\alpha}(n-1))^{-1} \left[S_{12}^{\alpha}(n-1) (L_2^n)^{-1} \times J_{22}^{\alpha}(n) L_2^{(n+1)} - (L_1^n)^{-1} J_{12}^{\alpha}(n) L_2^{(n+1)} \right],$$

$$S_{21}^{\alpha}(n) = S_{21}^{\alpha}(n-1) + S_{22}^{\alpha}(n-1) (L_2^n)^{-1} J_{21}^{\alpha}(n) L_1^{(n+1)} S_{11}^{\alpha}(n),$$

$$S_{22}^{\alpha}(n) = S_{22}^{\alpha}(n-1) (L_2^n)^{-1} \times \left[J_{22}^{\alpha}(n) L_2^{(n+1)} + J_{21}^{\alpha}(n) L_1^{(n+1)} S_{12}^{\alpha}(n) \right], \quad (4)$$

где $J_{ij}^{\alpha}(n)$ — элементы матрицы шивания

$$J_{ij}^n(n) = \left[(P_{3-i}^{\alpha n})^{-1} P_i^{\alpha n} - (D_{3-i}^{\alpha n})^{-1} D_i^{\alpha n} \right]^{-1} \times \left[(P_{3-i}^{\alpha n})^{-1} P_j^{\alpha(n+1)} - (D_{3-i}^{\alpha n})^{-1} D_j^{\alpha(n+1)} \right],$$

$$L_{\xi\xi'}^n = \delta_{\xi\xi'} \exp(ik_{z\xi}^n z_n).$$

Искомая матрица рассеяния через N границ $S^{\alpha}(N)$ находится из решения этих уравнений при начальном условии $S^{\alpha}(0) = I$, где I — единичная матрица. Коэффициенты прохождения и отражения электронов выражаются через нормированные на потоки элементы матрицы $S_q^{\alpha}(N)$ для открытых каналов. С использованием промежуточных матриц шивания $J^{\alpha}(n)$ из (4) можно определить коэффициенты $A_{\nu}^{\alpha n}$, $B_{\mu}^{\alpha n}$ и волновую функцию гетероструктуры. Общие решения в слоях удобно находить с применением одной и той же расширенной элементарной ячейки СР методом комплексной зонной структуры с локальными псевдопотенциалами.

В настоящей работе изучено прохождение электронов при нормальном ($k_{\parallel} = 0$) падении на барьер с гетерограницами (001). В этом случае волновая функция гетероструктуры имеет максимальную симметрию и преобразуется по единичному представлению Λ_1 группы C_{2v} волнового вектора, расположенного на линии Λ зоны Бриллюэна тетрагональной решетки [17]. В качестве барьерной области выбирался период сверхрешетки $\text{Al}_2\text{Ga}_2\text{As}_4$, что позволило учесть главную часть точного микроскопического потенциала переходных слоев с относительно небольшими вычислительными затратами. В расчетах использовались псевдопотенциалы [18], определенные на основе экспериментальных данных и ab initio расчетов зонного спектра. С параметрами обрыва кинетической энергии из [18] в базе из 243 трехмерных плоских волн, построенных вокруг опорной точки Γ сверхрешетки, формируются 98 СКПВ, 8 СКППВ, 8 падающих и 8 отраженных волн, преобразующихся по единичному представлению группы C_{2v} . Учет такого числа волн обеспечивает высокую точность описания электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости (~ 1 eV), погрешность зонных энергий не превышает 0.02 eV.

2. Результаты расчета и обсуждение

Особенности резонансного туннелирования электронов в гетероструктурах определяются комплексной зонной структурой их компонент, при этом основную роль играют состояния с наименьшими декрементами затухания. В окрестности дна зоны проводимости таковыми являются состояния, происходящие из Γ_1 -, X_1 - и X_3 -долин нижних зон проводимости GaAs и AlAs. На рис. 1 приведены фрагменты комплексных зонных структур $\text{Al}_2\text{Ga}_2\text{As}_4$, AlAs и GaAs вдоль линии Λ тетрагональной зоны Бриллюэна ($k_{\parallel} = 0$) для этих состояний. Энергии отсчитаны от дна зоны проводимости GaAs. Мнимые и реальные части k_z расположены слева и справа от точки Γ соответственно. Направлению Λ

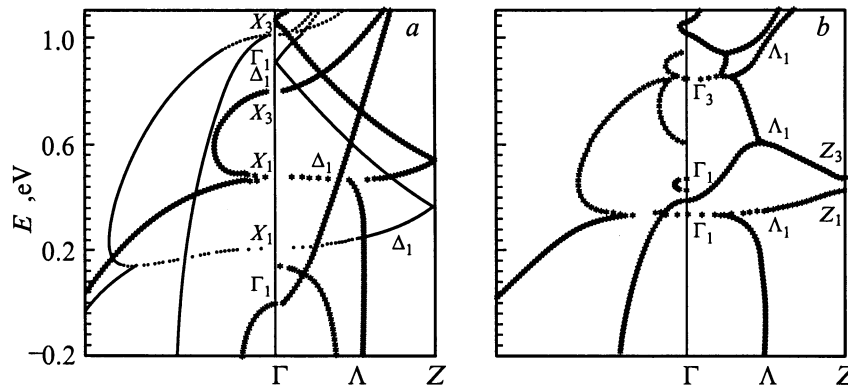


Рис. 1. Комплексные зонные структуры вдоль линии Λ тетрагональной зоны Бриллюэна для GaAs (жирные линии), AlAs (тонкие линии) (a), сверхрешетки $\text{Al}_2\text{Ga}_2\text{As}_4$ (b).

СР соответствует линия Δ зоны Бриллюэна сфалерита, точке Γ СР эквивалентны сфалеритные точки Γ , X и $\Delta(0, 0, 1/2)$. Состояния сверхрешетки с симметрией Λ_1 связаны соотношениями совместности с состояниями Γ_1 , Γ_3 , Z_1 и Z_3 в симметричных точках. Тетрагональная компонента кристаллического потенциала в СР приводит к снятию вырождения и смешиванию сфалеритных состояний виртуального кристалла из Γ - и X -долин и линии Δ . Экстремумы расщепленных состояний связаны петлями в комплексной области волнового вектора. В зонном спектре СР вблизи боковой точки Z за счет расщепления возникают новые долины Z_1 и Z_3 с экстремумами при энергиях 0.428 и 0.47 eV соответственно. Еще большее расщепление получилось в области пересечения сфалеритных состояний из Γ - и X -долин, ему отвечает щель в интервале $\sim 0.6-0.8$ eV. Анализ интегралов перекрытия волновых функций СР и бинарных соединений показывает, что в нижнем состоянии зоны проводимости СР с симметрией $\Gamma_1^{(1)}$ ($E = 0.3406$ eV) с наибольшим весом представлены сфалеритные X_1 -состояния GaAs и AlAs, а в следующем по энергии состоянии сверхрешетки $\Gamma_1^{(2)}$ ($E = 0.3864$ eV) кроме состояний Γ_1 GaAs и AlAs заметный вклад вносят состояния AlAs с линии Δ . Эффективной массе нижней долины $m(\Gamma_1^{(1)}) = 4.4$ (в единицах массы свободного электрона) соответствует среднее значение масс в X_1 -долине AlAs $m(X_1) = 2.2$ и Δ минимуме GaAs $m(\Delta) \approx 6$. Вдоль тетрагональной оси волновые функции сверхрешетки плавно переходят от состояний, подобным в GaAs, к состояниям, подобным в AlAs. Энергии экстремумов зоны проводимости в бинарных соединениях равны $E_{X_1}(\text{GaAs}) = 0.4818$, $E_{\Delta_1}(\text{GaAs}) = 0.4673$, $E_{X_3}(\text{GaAs}) = 0.7955$, $E_{\Gamma_1}(\text{AlAs}) = 1.0040$, $E_{X_1}(\text{AlAs}) = 0.2083$, $E_{X_3}(\text{AlAs}) = 1.0099$ eV. Из этих энергий можно восстановить профиль зон вдоль оси гетероструктуры GaAs/Al₂Ga₂As₄/GaAs, однако из-за смешивания сфалеритных состояний не только на гетерограницах, как в модели с резким потенциалом, но и внутри СР соединение линий становится неоднозначным. Для электрона, налетающего из GaAs, сверхрешетка выступает как наложенные друг на друга барьеры (ямы) с разными высотами (глубинами) и эффективными массами из $\Gamma_1^{(1)}$, $\Gamma_1^{(2)}$, Z_1 - и Z_3 -долин, с которыми электрон взаимодействует одновременно, но с разными вероятностями, пропорциональными весам состояний из Γ_1 - и Z_1 -долин в волновой функции СР. Отсюда, вообще говоря, следует, что для тонких слоев требуется уточнение установленных до сих пор значений разрывов зон и их интерпретации.

Для анализа реального микроскопического потенциала гетероструктуры были рассчитаны усредненный в плоскости границы ($\mathbf{a}_i^g = 0$) кристаллический потенциал СР вдоль оси z и его разность ΔV с потенциалом в модели с резкими границами (рис. 2), которым отвечают положения атомов мышьяка As_{av} , окруженных двумя атомами Ga и двумя атомами Al. Здесь учтено, что псевдопотенциалы мышьяка [18] зависят от сорта

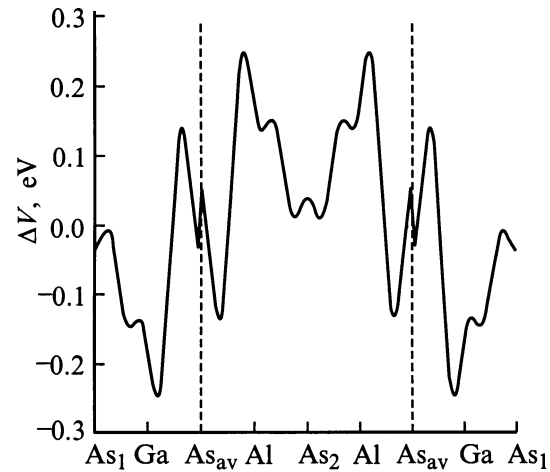


Рис. 2. Усредненная в плоскости границы разность кристаллического потенциала сверхрешетки $\text{Al}_2\text{Ga}_2\text{As}_4$ и потенциала в модели с резкой границей. Вертикальными штриховыми прямыми показаны положения резких гетерограниц.

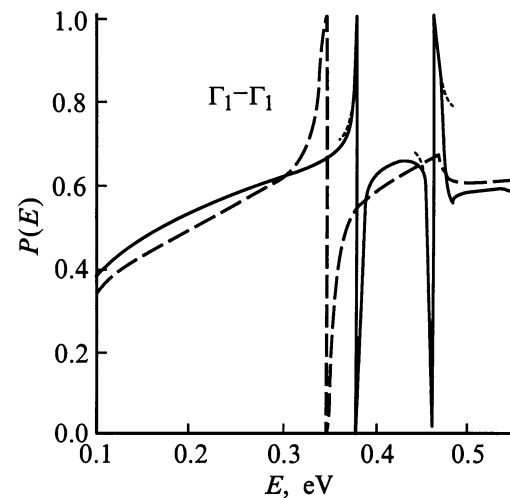


Рис. 3. Коэффициент прохождения электронов из Γ_1 - в Γ_1 -долину GaAs через барьер AlAs(a_0). Сплошные линии — расчет с плавной границей. Штриховая линия — расчет в модели с резкой границей, пунктирная линия — расчет с использованием формулы (5).

ближайших атомов. Увеличение периода сверхрешетки не меняет существенно потенциал ΔV в окрестности барьера, а его вид подобен соответствующим профилям компонент нелокальных псевдопотенциалов [15,16]. Основная разница между реальным и разрывным потенциалом локализована в пределах первых четырех атомных слоев около границ, захватывающих область барьера, и является резко изменяющейся функцией, которая, очевидно, плохо аппроксимируется ступенчатым потенциалом. Подобное поведение характерно и для других Фурье-компонент кристаллического потенциала ($\mathbf{a}_i^g \neq 0$). Поэтому сшивание волновых функций СР и GaAs проводилось на границах, отстоящих друг от

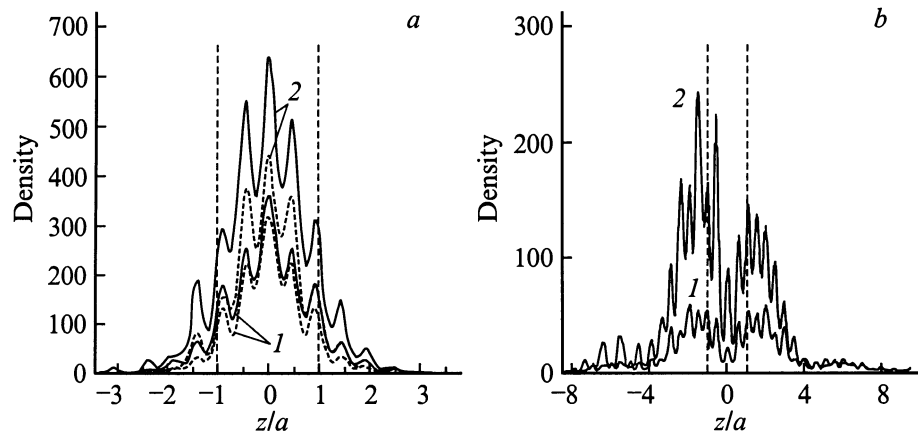


Рис. 4. Усредненная в плоскости гетерограницы плотность вероятности для состояний вблизи первого (а) и второго (б) Фано-резонансов. Сплошные линии — расчет с плавной границей, пунктирные — расчет в модели с резкой границей. Линии с номером 1 относятся к состояниям, соответствующим пикам резонансов, а помеченные цифрой 2 — к состояниям, соответствующим провалам резонансов. Вертикальными штриховыми прямыми показаны границы периода сверхрешетки.

друга на период сверхрешетки ($2a_0$) и совпадающих с положением атомов мышьяка As_1 (окруженных атомами Ga), на которых отличие кристаллических потенциалов GaAs и CP минимальное. Были выполнены также расчеты при положении границ сшивания на соседних с As_1 атомах Ga. Полученные результаты в обоих случаях оказались близкими, что говорит о достижении сходимости в описании интерфейсного потенциала с помощью сверхрешетки $Al_2Ga_2As_4$. Амплитуда потенциала ΔV сопоставима по величине с разрывами зон, такой же порядок должны иметь поправки к электронным состояниям, вычисленным в модели с разрывным потенциалом. Наибольшие изменения можно ожидать для квазистационарных X-состояний AlAs, локализованных в области потенциала возмущения.

Рассчитанный коэффициент прохождения электронов из Γ -долины GaAs (Γ_1 - Γ_1 -канал) через барьер из AlAs приведен на рис. 3. Во всей области энергии наблюдаются заметные различия с результатами расчета в модели с резкой границей. В терминах параметров метода эффективной массы они связаны с изменением профиля зон, значений масс и констант междолинной связи на границах. В низкоэнергетической области ($E < 0.3$ eV) учет реального интерфейсного потенциала делает барьер примерно на 20% прозрачнее в основном вследствие меньшего декремента затухания Γ_1 -волны в CP по сравнению с AlAs. Более существенные отличия обнаружались в области перекрытия профилей разных долин, где возникают Фано-резонансы, соответствующие квазистационарным состояниям в X_1 -яме AlAs ($E_1 = 0.28$, $E_2 = 0.45$ eV) и $\Gamma_1^{(1)}$ -яме CP ($E_1 = 0.39$, $E_2 = 0.45$ eV). В скобках приведены энергии уровней в изолированных ямах, рассчитанные в однодолинном приближении. При учете многих зон эти уровни несколько изменяются, причем в большей степени для более узкой X_1 -ямы AlAs (сдвигаются вверх), в результате чего второй уровень в ней становится выше Δ_1 -минимума

GaAs ($E_2 = 0.48$ eV). Анализ волновой функции гетероструктуры показывает, что состояние нижнего Фано-резонанса в области барьера построено из трех состояний, происходящих из $\Gamma_1^{(1)}$ - (распространяющееся состояние), $\Gamma_1^{(2)}$ - (состояние с малой величиной $Im(k_z)$) и $\Gamma_1^{(1)}$ - (состояние с большой величиной $Im(k_z)$) долин сверхрешетки. При нормировке периодических частей волновых функций на единицу амплитуды $A_\nu^{\alpha n}$ (или $B_\mu^{\alpha n}$) этих состояний соотносятся как 7:3:3, поэтому нижний резонанс является гибридным состоянием, которое приближенно можно рассматривать как квазистационарное состояние в $\Gamma_1^{(1)}$ -яме. Отличия двух расчетов связаны с особенностями поведения поправки ΔV к разрывному потенциалу, которая в областях между атомами As_{av} и As_1 в среднем понижает высоту барьера, а в области между атомами As_{av} поднимает дно ямы, что делает яму для X-подобных состояний в CP более широкой, но менее глубокой, при этом эффективная масса таких состояний увеличивается в 2 раза. Это привело к росту энергии нижнего состояния в X_1 -яме AlAs и проваливанию верхнего уровня под экстремум двугорбой структуры GaAs. В отличие от первого Фано-резонанса у второго резонанса минимум $P(E)$ не достигает точно нулевого значения. На возможность неполной деструктивной и неполной конструктивной интерференций волн за счет влияния других зон ранее указывалось в [19]. В нашем случае вблизи второго Фано-резонанса имеются три взаимодействующих состояния, происходящие из $\Gamma_1^{(2)}$ - (распространяющееся), Z_3 - (с малой мнимой частью $Im(k_z)$) и $\Gamma_1^{(1)}$ - (с большой мнимой частью $Im(k_z)$) долин сверхрешетки. В волновой функции гетероструктуры амплитуды у второго состояния наибольшие, поэтому электрон туннелирует через барьер в основном по щелевому состоянию, возникшему в результате расщепления зонного спектра CP на границе зоны Бриллюэна. В модели с резкой границей электрон при тех же энергиях туннелирует в основном по Γ_1 -состоянию AlAs.

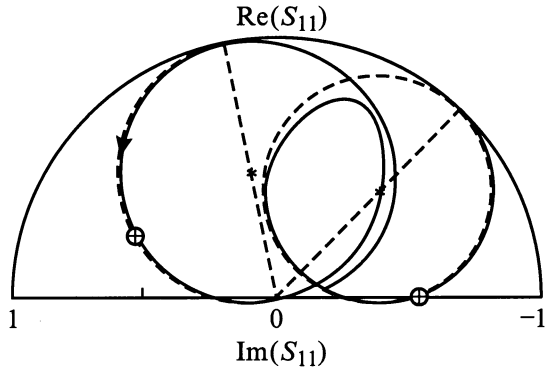


Рис. 5. Диаграмма зависимости реальной и мнимой частей элемента матрицы рассеяния $(S_{11})_{\Gamma_1\Gamma_1}$. Стрелкой показано направление роста энергии, а маленькими кружками — положения реальных частей энергий полюсов E_r . Штриховые линии построены по формуле (5), крестиками обозначены центры окружностей.

Увеличение размера потенциальной Х-ямы и величины эффективной массы при учете реального микроскопического потенциала привело к росту в области АІАс зарядовой плотности электронных состояний, соответствующих пику (A_{\max}) и провалу (E_{\min}) нижнего Фано-резонанса (рис. 4). При расчете плотности волновая функция гетероструктуры нормировалась условием равенства единице амплитуды налетающей волны. Плотность заряда состояний вблизи пика нижнего резонанса максимальна в области барьера, в сторону GaAs она экспоненциально (с декрементом, соответствующим $\text{Im}(k_z)$ X_1 -долины GaAs) переходит в осциллирующую суперпозицию налетающей и отраженной волн (слева) или в осциллирующую прошедшую волну (справа). У состояний с энергиями E_{\min} функция ограничена в одном направлении, что сопровождается ростом плотности в области АІАс. Зарядовая плотность состояний, отвечающих второму Фано-резонансу, менее локализована и в основном находится за пределами слоя АІАс.

Ноль-пиковая природа Фано-резонансов наглядно проявляется в зависимости реальной части элемента матрицы рассеяния S_{11} (для открытого канала $\Gamma_1-\Gamma_1$) от ее мнимой части (рис. 5). На этой диаграмме S_{11} является вектором, эволюция которого от энергии ограничена кругом единичного радиуса. Вблизи резонансов этот вектор испытывает наибольшие изменения, что удобно для моделирования матрицы рассеяния. Диаграммы подобного типа (диаграммы Арганда [20]) часто используются при интерпретации структур в оптических характеристиках (в виде зависимостей реальной и мнимой частей диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(\epsilon_2)$, оптических констант $n(k)$ и т.д. [21]) в терминах параметров изолированных или взаимодействующих осцилляторов. Из рис. 5 видно, что траектории S_{11} около обоих Фано-резонансов в большей своей части представляют собой окружности. Радиус окружности для нижнего резонанса равен 0,5,

а для второго — несколько меньше 0,5, поскольку значение $P(E)$ в провале не равно нулю. Параметры этих окружностей связаны с нулями и полюсами матрицы рассеяния в комплексной области энергии. Поскольку резонансы расположены достаточно далеко друг от друга по энергии, то их "взаимодействием" можно пренебречь и в окрестности каждого каноническое разложение матрицы рассеяния приближенно представить в виде [22]

$$S_{11}(E) \approx S_{\text{pot}} + A/(E - E_p) = B \frac{(E - E_n)}{(E - E_p)}, \quad (5)$$

где S_{pot} описывает потенциальное, слабо зависящее от энергии рассеяние, $E_p = E_r - i\Gamma$ — энергия полюса ($\Gamma > 0$), $E_n = E_0 - i\gamma$ — энергия нуля элемента матрицы рассеяния в комплексной плоскости энергии, B — комплексное число. Формула типа (5) использовалась в [23] при анализе прохождения электронов через несколько монослоев АІАс в приближении теории возмущений. В частном случае $\gamma = 0$ эта формула привлекалась для интерпретации нелоренцевских особенностей в вероятностях туннелирования электронов через квантовые волноводы со связанными резонаторами [24]. Она также приводит к сечению рассеяния, полученному Фано [25] для резонансных состояний в атомах и молекулах. В общем случае параметры формулы (5) можно определить из результатов точного расчета минимального $P(E_{\min})$ и максимального значений $P(E_{\max}) = 1$ коэффициента прохождения в области Фано-резонанса и экстремумов фазового времени задержки [26] $\tau(E) = \hbar \frac{\partial \Theta(E)}{\partial E}$ ($\Theta(E)$ — сдвиг фазы элемента матрицы S_{11}) при энергиях E_r и E_0 . Зависимости от энергии фазы $\Theta(E)$ и параметра уширения $\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$ показаны на рис. 6. Для нижнего Фано-резонанса $E_{\min} = E_0 = 0.3799(0.348)$ eV, $E_{\max} = 0.3781(0.343)$ eV, $\gamma = 0$, а найденные параметры полюса равны: $E_r = 0.3793(0.3459)$ eV, $\Gamma = 0.00085(0.00246)$ eV, $\tau(E_r) = 0.387(0.134)$ ps. В скобках даны значения, полученные в модели с разрывным потенциалом. Таким образом, при учете реального микроскопического потенциала время столкновения электрона с барьером в области первого Фано-резонанса увеличилось почти в 3 раза. Это изменение непосредственно связано с усилением локализации волновой функции в барьерной области и

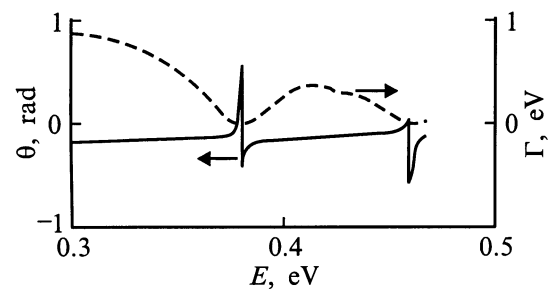


Рис. 6. Зависимость от энергии сдвига фазы $\Theta(E)$ и параметра уширения $\Gamma(E)$ для элемента матрицы рассеяния $(S_{11})_{\Gamma_1\Gamma_1}$.

уменьшением константы междолинной ($\Gamma_1 - \Gamma_1^{(1)}$)-связи на границе GaAs/Al₂Ga₂As₄ $|(J_{11})_{\Gamma_1\Gamma_1^{(1)}}| = 0.03$ по сравнению с константой ($\Gamma_1 - X_1$)-связи для резкой границы GaAs/AlAs $|(J_{11})_{\Gamma_1X_1}| = 0.05$. Отношение квадратов модулей этих констант дает оценку отношения времен столкновения. Уменьшение ширины Фано-резонанса (и соответствующее увеличение времени столкновения) с уменьшением константы междолинной связи ранее отмечалось в [19]. Влиянием интерфейсного потенциала на времена туннелирования можно объяснить результаты работы [2], в которой экспериментальные значения времен туннелирования через сверхрешетки GaAs/AlAs с тонкими барьерами и ямами оказались больше значений, полученных методом эффективной массы со ступенчатым потенциалом. В работе [2] это расхождение связывалось с дополнительным рассеянием на фононах и кулоновским взаимодействием электронов с дырками. Однако величины расхождений в [2] растут с уменьшением толщины слоев, что, вероятнее, указывает на влияние интерфейса. Для второго Фано-резонанса параметры равны: $E_r = 0.4605$ eV, $\Gamma = 0.00126$ eV, $\tau(E_r) = 0.261$ ps, $E_0 = 0.45975$ eV, $E_{\max} = 0.4626$ eV, $\gamma = -0.00022$ eV. Поскольку γ мало, то $E_{\min} \approx E_0$, а траектория S_{11} на диаграмме, как легко убедиться из (5), близка к окружности. Менее локализованным в области AlAs состояниям второго Фано-резонанса соответствуют меньшие времена столкновения волнового пакета с барьером.

В заключение отметим, что результаты многозонных расчетов хорошо воспроизводятся при учете в матрицах сшивания $J^\alpha(n)$ состояний только из нижних $\Gamma_1^{(1)}$ -, $\Gamma_1^{(2)}$ -, Z_1 - и Z_3 -долин сверхрешетки. Развитие модели, в которой через зонные параметры этих долин можно эффективно учесть реальный профиль микроскопического потенциала в гетероструктурах GaAs/AlAs(001), будет дано в отдельной статье.

Список литературы

- [1] D.F. Nelson, R.C. Miller, C.W. Tu, S.K. Sputz. Phys. Rev. **B36**, 15, 8063 (1987).
- [2] K. Fujiwara, K. Kawashima, T. Imanashi. Phys. Rev. **B54**, 24, 17724 (1996).
- [3] B.A. Foreman. Phys. Rev. Lett. **80**, 17, 3823 (1998).
- [4] Г.Ф. Караваев, И.Н. Криворотов. ФТП **30**, 1, 177 (1996).
- [5] D.Y. Ko, J.C. Inkson. Phys. Rev. **B38**, 14, 9945 (1988).
- [6] D.Y. Ko, J.C. Inkson. Semicond. Sci. Technol **3**, 791 (1988).
- [7] T. Ando, S. Wakahana, H. Akera. Phys. Rev. **B40**, 17, 11 609 (1989).
- [8] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. **B40**, 17, 11 619 (1989).
- [9] J.P. Cuypers, W. van Haeringen. Physica **B168**, 58 (1991).
- [10] J.P. Cuypers, W. van Haeringen. J. Phys. Condens. Matt. **4**, 10, 2587 (1992); J.P. Cuypers. Scattering of electrons at heterostructure interfaces. Ph. D. Thesis. The Eindhoven University of Technology, Eindhoven, The Netherlands (1992). 129 p.
- [11] T. Osotchan, V.W.L. Chin, T.L.O. Tansley. Phys. Rev. **B54**, 3, 2059 (1996).
- [12] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика **35**, 9, 64 (1992).
- [13] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП **26**, 12, 2057 (1992).
- [14] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП **28**, 8, 1393 (1994).
- [15] C.G. van de Walle, R.M. Martin. Phys. Rev. **B35**, 15, 8154 (1987).
- [16] D.M. Bylander, L. Kleinman. Phys. Rev. **B36**, 6, 3229 (1987).
- [17] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986). 368 с.
- [18] K.A. Mader, A. Zunger. Phys. Rev. **B50**, 23, 17 393 (1994).
- [19] E. Tekman, P.F. Bagwell. Phys. Rev. **B48**, 4, 2553 (1993).
- [20] Т. Мосс. Оптические свойства полупроводников. Изд-во иностр. лит., М. (1961). 304 с.
- [21] В.В. Соболев, В.В. Немошкаленко. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Наук. думка, Киев (1988). 424 с.
- [22] Х.М. Нуссенцвейг. Причинность и дисперсионные соотношения. Мир, М. (1976). 461 с.
- [23] E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev, Y. Fu, M. Willander. Phys. Rev. **B50**, 11, 7747 (1994).
- [24] W. Porod, Z.-an Shao, C.S. Lent. Phys. Rev. **B48**, 11, 8495 (1993).
- [25] U. Fano. Phys. Rev. **124**, 6, 1866 (1961).
- [26] Т.Ю. Ву. Т. Омура. Квантовая теория рассеяния. Наука, М. (1969). 452 с.