

# Резонансное туннелирование электронов в напряженных структурах GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001) с учетом спонтанной поляризации и пьезоэффекта

© С.Н. Гриняев, А.Н. Разжувалов

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова,  
634050 Томск, Россия

E-mail: gsn@phys.tsu.ru

(Поступила в Редакцию 18 мая 2000 г.  
В окончательной редакции 15 августа 2000 г.)

Методами псевдопотенциала и матрицы рассеяния изучено туннелирование электронов через напряженные вюрцитные структуры GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001). Показано, что при небольшой концентрации алюминия ( $x < 0.3$ ) результаты многозонных расчетов удовлетворительно описываются однодолинной моделью метода огибающей волновой функции при учете зависимости эффективной массы от энергии и деформации. При прохождении электронов через двухбарьерные структуры выраженные резонансные пики получаются при толщине барьеров в несколько монослоев, характерное время столкновения в области резонанса составляет  $\sim 1$  ps. Внутренние электрические поля, связанные со спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией, приводят к "красному" или "голубому" сдвигу резонансных энергий в зависимости от толщины и расположения барьеров по отношению к полярной оси. В сверхрешетках (GaN)<sub>n</sub>(Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N)<sub>m</sub> внутренние поля могут формировать штарковскую лестницу электронных состояний при небольшом числе ультратонких слоев даже в отсутствие внешнего поля.

Широкозонные вюрцитные структуры GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001) представляют значительный интерес для ультрафиолетовой опто- и высокочастотной нанoeлектроники. На их основе уже созданы "голубые" светоизлучающие [1] и многоямные лазерные [2] диоды, быстродействующие полевые транзисторы [3]; они перспективны для создания высокочувствительных сенсоров [4]. Отличительной особенностью этих материалов являются рекордные величины спонтанной поляризации и компонент пьезоэлектрического тензора [5,6], приводящие к сильным внутренним электрическим полям ( $\sim 10^7$  V/cm), которые заметно влияют на электронный транспорт [7,8], формирование дефектов [8] и оптические свойства [9–11]. Установленные в последние годы параметры нитридов [5,6,12,13] позволяют проводить моделирование физических свойств гетероструктур с учетом поляризационных полей и деформаций. Несмотря на интенсивные исследования, влияние этих полей на фундаментальные электронные процессы изучено еще недостаточно. Теоретические работы обычно проводятся в рамках метода эффективной массы в приближении плоских зон или с учетом только пьезоэлектрических полей [4,8,9], тогда как спонтанная поляризация в нитридных соединениях может создавать поля даже с большей напряженностью [13]. Недавно было показано [14], что спонтанная поляризация вносит основной вклад в "красный" штарковский сдвиг энергий оптических переходов в квантовых ямах GaN. Величина и ориентация внутренних полей зависят от толщины слоев, их химического состава, легирования, типа подложки и т.д., что значительно расширяет возможности для управления приборными

характеристиками [15]. Известные эффекты, связанные с внешними электрическими полями (блоховские осцилляции, штарковская локализация состояний, межзонное туннелирование), существенно модифицируются в присутствии внутренней поляризации и могут проявляться даже при малом числе ультратонких слоев в гетероструктуре. Для сравнения в сверхрешетках (GaAs)<sub>n</sub>(Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As)<sub>m</sub> с толщиной слоев  $\sim 30$  Å штарковская локализация носителей в ямах GaAs наблюдается при внешних полях со значительно меньшей напряженностью ( $\sim 10^5$  V/cm) [16]. Однако в этих кристаллах пьезоэлектрические поля не столь существенны, а спонтанная поляризация запрещена из-за кубической симметрии. Большинство из проведенных исследований нитридных структур касается оптических свойств, определяющих их основное применение в современной оптоэлектронике. Вместе с тем значительная величина разрыва зоны проводимости на гетерограницах GaN/AlN [12,13] ( $\sim 1$  eV, как и в структурах GaAs/AlAs), быстрое (на расстоянии порядка одного периода решетки) затухание электронной волны в барьерных областях и простое, однодолинное, устройство нижней зоны проводимости, исключаящее нежелательное влияние эффектов междолинного смешивания (приводящих в структурах GaAs/AlAs к увеличению времени туннелирования [17]), делают их интересными для создания быстродействующих, резонансно-туннельных, субатомных структур, устойчивых, как и их бинарные компоненты, к экстремальным внешним воздействиям [18] (высоким температурам, внешним напряжениям, облучению и т.д.). Очевидно, что сильные поляризионные поля должны существенно изменять все характеристики процесса туннелирования,

причем вследствие зависимости напряженностей полей от параметров гетероструктуры формы их проявления могут быть многообразными. Надежную основу для точного описания и разработки упрощенных моделей электронных состояний в гетероструктурах с учетом встроенных полей дают фундаментальные методы расчета электронного энергетического спектра (методы псевдопотенциала, присоединенных плоских волн и т.д.). С использованием *ab initio* псевдопотенциалов были определены параметры спонтанной и пьезоэлектрической поляризации и разрывы зон на гетерограницах напряженных структур GaN/AlN [12,13]. Еще более точное описание зонной структуры может быть получено в рамках квазичастичного подхода [19]. Однако нелокальный характер *ab initio* псевдопотенциалов затрудняет определение состояний с комплексными значениями волнового вектора, возникающих при решении задачи о рассеянии электронов. Поэтому в настоящей работе исследование процессов туннелирования электронов через напряженные гетероструктуры GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001) проведено методом локального псевдопотенциала [20], позволяющего использовать эффективный метод нахождения общих решений уравнения Шредингера [21]. На основе рассчитанной комплексной зонной структуры разработана упрощенная модель, в рамках которой изучены эффекты, вызванные встроенными поляризационными полями, при туннелировании электронов через нитридные гетероструктуры.

## 1. Метод расчета

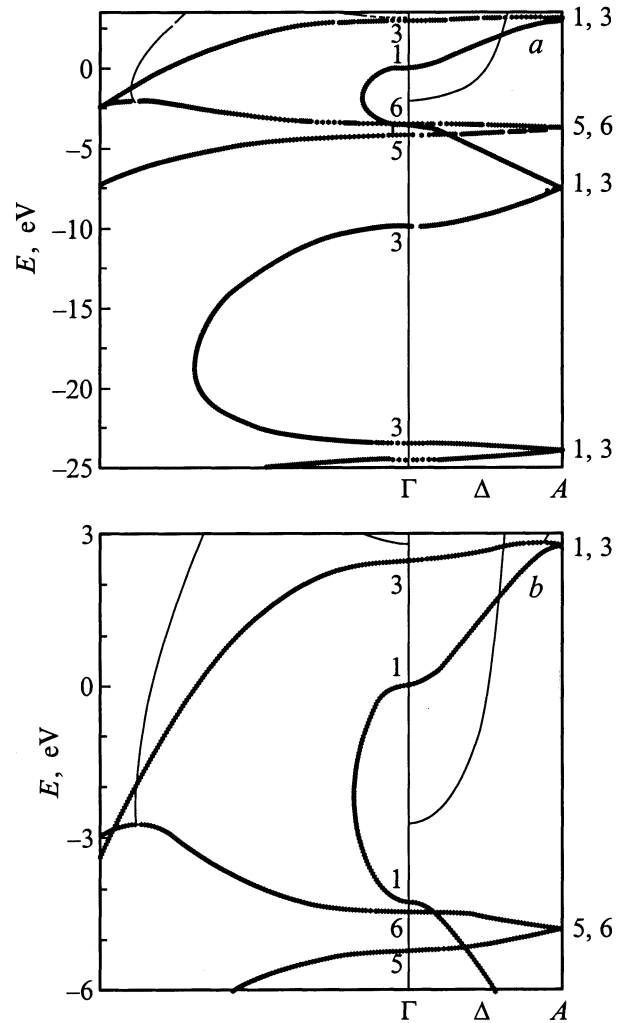
Самосогласованные расчеты электронного спектра сверхрешеток (GaN)<sub>n</sub>(AlN)<sub>n</sub>(0001) показывают [13], что на расстояниях порядка одного монослоя от границ внутренние электрические поля хорошо описываются в рамках макроскопического подхода, поэтому для изучения нитридных структур с толщиной слоев из нескольких периодов можно использовать модель с резко оборванным на гетерограницах кристаллическим потенциалом, приближенно учитывая интерфейсные диполи через изменение разрывов зон, а экранирование монополей с учетом решеточной релаксации — с помощью статической диэлектрической постоянной [13]. Для иллюстрации возникающих за счет внутренних полей эффектов здесь рассмотрены структуры GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N с естественной границей роста (0001). Барьерные слои брались тонкими (в несколько периодов решетки), поэтому их постоянная решетки в плоскости границы согласовывалась с постоянной решетки контактных областей из GaN. Для свободных кристаллов использовались экспериментальные значения структурных параметров [18]:  $a(\text{GaN}) = 3.189 \text{ \AA}$ ,  $c(\text{GaN}) = 5.185 \text{ \AA}$ ,  $a(\text{AlN}) = 3.111 \text{ \AA}$ ,  $c(\text{AlN}) = 4.98 \text{ \AA}$ . Несоответствие постоянных решеток GaN и AlN ( $\sim 4\%$ ) приводит к значительным деформациям слоев в гетероструктуре. Сжатие барьерных слоев вдоль оси дается соотношени-

ем [22]  $\Delta c = -2(c_{13}/c_{33})(\Delta a/a)c$ . Деформации вызывают пьезоэлектрическую поляризацию, проекция которой на гексагональную ось равна [22]  $P_{\text{piezo}} = 2e_{31}\Delta a/a + e_{33}\Delta c/c$ . В растворах Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N модули упругости определялись из интерполяции экспериментальных данных [23]:  $c_{13} = (10.5 + 1.1x) \text{ dyn/cm}^2$ ,  $c_{33} = 39 \text{ dyn/cm}^2$ , а компоненты пьезоэлектрического тензора  $e_{31}$ ,  $e_{33}$  и спонтанной поляризации  $P_{\text{spont}}$  — из данных расчета [13]:  $e_{31} = (-0.49 - 0.11x) \text{ C/m}^2$ ,  $e_{33} = (0.73 + 0.73x) \text{ C/m}^2$ ,  $P_{\text{spont}} = (-0.029 - 0.052x) \text{ C/m}^2$ . Величина пьезополяризации в барьерах получилась равной  $P_{\text{piezo}}(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}) = -0.012 \text{ C/m}^2$ . Суммарная поляризация (спонтанная и пьезоэлектрическая) вдоль гексагональной оси  $P_{w,b}$  ( $w$  — яма,  $b$  — барьер) в области барьера  $P_b = -0.057 \text{ C/m}^2$  на 80% определяется вкладом от спонтанной поляризации и почти в 2 раза больше поляризации в яме  $P_w = -0.029 \text{ C/m}^2$ . Разрыв макроскопической поляризации на гетерограницах приводит к возникновению поверхностных зарядов. Из условия непрерывности нормальной составляющей диэлектрической индукции на границе слоев следует связь напряженностей электрических полей  $F_{w,b}$  [24]:  $\epsilon_w F_w - \epsilon_b F_b = -(P_w - P_b)/\epsilon_0$ , где  $\epsilon_{w,b}$  — статические диэлектрические проницаемости (для всех составов использовалось значение  $\epsilon = 9.5$  [25]),  $\epsilon_0$  — диэлектрическая постоянная вакуума. Величины и ориентации полей в слоях зависят от граничных условий. За счет различия в поляризации слоев внутреннее поле в гетероструктуре неоднородно. В [13] использовались периодические граничные условия, что соответствует полной компенсации однородной составляющей внутреннего электрического поля на периоде сверхрешетки. В реальных структурах компенсация однородной составляющей внутреннего поля в активной области  $F_0$  может быть достигнута разными способами, в том числе за счет экранировки свободными зарядами легированных контактных областей [15]. При напряженности внешнего поля, много меньшей  $F_0$ , внешнее поле можно не учитывать в граничном условии. Тогда условие компенсации дается выражением  $\sum_i l_i F_i = 0$ , где  $l_i$  — толщина  $i$ -го слоя, суммирование ведется по слоям активной области. Для активной области из ограниченной сверхрешетки (GaN)<sub>n</sub>(Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N)<sub>n+1</sub> ( $n$  — число периодов вдоль гексагональной оси) со спейсер-слоем из того же твердого раствора (толщиной  $l_s$ ), находящихся между контактными областями из GaN, из условия компенсации следуют выражение для сдвига потенциала на периоде сверхрешетки  $d = l_w + l_b \Delta V = l_w(l_b + l_s)(P_b - P_w)/D$ , где  $D = [n(l_w\epsilon_b + l_b\epsilon_w) + (l_b + l_s)\epsilon_w]\epsilon_0$ , и выражения для напряженностей внутренних полей в слоях  $F_w = -[(n+1)l_b + l_s](P_b - P_w)/D$ ,  $F_b = F_s = nl_w \times (P_w - P_b)/D$ . В пределе  $n \rightarrow \infty$  они переходят в формулы для бесконечной сверхрешетки [13]. У контактных областей толщина обычно много больше толщины активной области  $d_a = (n+1)l_b + nl_w + l_s$ , поэтому поля в них близки к нулю [15]. Выясним возможность компенсации  $F_0$  свободными зарядами. Величина

$F_0$  дается отношением скачка потенциала на "лишнем" барьере, содержащем спейсер-слой, к толщине активной области  $d_a$ . Поэтому при сравнимых толщинах слоев  $l_s \sim l_w \sim l_s$  поле  $F_0$  примерно в  $(n+1)$  число раз слабее поля в барьере, величина которого для рассмотренных здесь структур меньше  $2 \cdot 10^6$  V/cm. Таким образом, уже для двухбарьерной структуры ( $n=1$ )  $F_0 < 10^6$  V/cm. Как следует из [15,26], подобные поля эффективно экранируются при практически достижимой концентрации доноров  $\sim 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Самосогласованное решение уравнений Пуассона и Шредингера показывает [15], что перераспределение свободных зарядов по объему структуры с квантовой ямой GaN/Ga<sub>0.8</sub>Al<sub>0.2</sub>N приводит к заметным изгибам зон в обедненных областях контактов и малым изгибам в активной области. В нашем случае поле  $F_0$  значительно слабее неэкранированного поля в яме [15], поэтому компенсация  $F_0$  была учтена в пренебрежении искривлениями зон вблизи границ.

Расчет вероятностей туннелирования электронов через гетероструктуры проводился в модели с разрывным на гетерограницах потенциалом по методу матрицы рассеяния [27], модифицированному для кристаллов с гексагональной симметрией. Рассматривался случай нормального падения электрона на гетерограницу. Волновые функции соседних слоев сшивались на плоскостях, содержащих атомы азота. Общие решения уравнения Шредингера в слоях находились из расчета комплексной зонной структуры [19] с перенормированной по методу Левдина матрицей кристаллического потенциала в базе из 73 точно учитываемых плоских волн, построенных вокруг опорной точки  $\Gamma$ . В этом базисе формируются 19 падающих и 19 отраженных блоховских волн [27]. При расчете использовались модельные псевдопотенциалы [20], в которые для повышения точности описания спектра были включены дополнительные поправки на нелокальность и энергетическую зависимость путем перенормировки массы свободного электрона ( $m$ ) в операторе кинетической энергии  $T = -\hbar^2 \Delta (1 + \beta/\Omega)/2m$ ,  $\Omega$  — объем элементарной ячейки. Параметры псевдопотенциалов определялись из условия согласия рассчитанных энергий межзонных переходов и боковых долин нижней зоны проводимости в  $w$ -GaN и  $w$ -AlN, а также эффективных масс и деформационных потенциалов с экспериментальными данными и результатами *ab initio* расчетов. Найденные значения параметров ионных псевдопотенциалов равны (в а.е.  $\hbar = m = e = 1$ )  $v_0(N) = -4.3$ ,  $R_m(N) = 2.49$ ,  $\beta(N) = 0$ ;  $v_0(Al) = -0.7$ ,  $R_m(Al) = 3.34$ ,  $\beta(Al) = -60$ ;  $v_0(Ga) = -0.8$ ,  $R_m(Ga) = 4.1$ ,  $\beta(Ga) = 0$ . Вычисленные с этими псевдопотенциалами зонные параметры GaN и AlN в окрестности запрещенной зоны приведены в таблице в сравнении с результатами других работ. Здесь деформационные потенциалы  $D_1$ ,  $D_3$  и  $D_2$ ,  $D_4$  характеризуют сдвиги уровней при изменении постоянных решетки  $c$  и  $a$  согласно [6].

Электронные состояния в растворах Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N рассчитывались в приближении виртуального кристалла.



**Рис. 1.** Фрагменты комплексных зонных структур свободного кристалла  $w$ -GaN (a) и деформированного твердого раствора  $w$ -Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N (b). Справа от точки  $\Gamma$  показаны решения с чисто вещественными значениями волнового вектора вдоль гексагональной оси (жирные линии) и реальные части комплексных решений (тонкие линии), слева показаны чисто мнимые решения (жирные линии) и мнимые части комплексных решений (тонкие линии).

Псевдопотенциал катиона представлялся в виде среднего от потенциалов Al и Ga, взятых с пропорциональными их концентрации весами. Вычисленная энергия запрещенной зоны получилась почти линейной функцией от состава раствора. На рис. 1 показаны фрагменты рассчитанных комплексных зонных структур вдоль направления  $\Delta$  гексагональной зоны Бриллюэна при равной нулю параллельной границе составляющей волнового вектора. Энергии отсчитаны от дна зоны проводимости каждого соединения. Для неприводимых представлений группы  $C_{6v}^4$  использованы стандартные обозначения. Насколько нам известно, комплексные зонные структуры данных материалов здесь приводятся впервые. Из их рассмотрения можно установить состоя-

Параметры зонной структуры GaN и AlN

Уровень	GaN		AlN	
	1	2	1	2
$\Gamma_{5v}$	-0.7	-1.2 [19]	-0.8	-1.1 [19]
$\Gamma_{6v}$	0	0	-0.22	-0.2 [19]
$\Gamma_{1v}$	-0.08 (-0.022 [28])	-0.02 [19] -0.0504 [6]	0	-0.176 [6] 0
$\Gamma_{1c}$	3.52 (3.44 [29])	3.5 [19]	6.28 (6.28 [32])	5.8 [19]
$\Gamma_{3c}$	6.5	5.9 [19]	7.7	8.3 [19]
$M_{4v}$	-0.7	-1.1 [19]	-0.6	-0.9 [19]
$M_{1c}$	6.5	6.5 [19]	7.6	7.4 [19]
$m^*/m(\Gamma_{1c})$	0.14 (0.22 [30])	0.19 [31]	0.30	0.35 [31]
$D_1(\Gamma_{1v})$	-24.3	-20.0 [6]	-14.3	-17.1 [6]
$D_2(\Gamma_{1v})$	-13.6	-14.2 [6]	-6.6	-7.9 [6]
$D_1(\Gamma_{1c})$	-15.0		-8.6	
$D_2(\Gamma_{1c})$	-13.5		-8.8	
$D_3(\Gamma_{6v})$	10.6 (8.82 [28])	5.8 [6]	8.9	8.84 [6]
$D_4(\Gamma_{6v})$	-3.4 (-4.41 [28])	-3.25 [6]	-1.5	-3.92 [6]

Примечание. В столбцах 1 приведены результаты данной работы (в скобках — экспериментальные значения), в столбцах 2 — результаты других работ. Энергии уровней и деформационные потенциалы даны в электрон-вольтах.

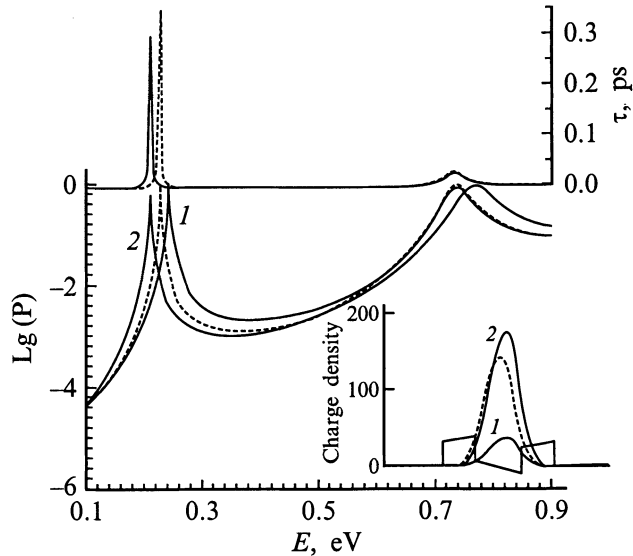
ния с наименьшими декрементами затухания, которые играют наиболее существенную роль в процессах туннелирования. Поскольку боковая точка  $A$  на границе зоны Бриллюэна не является точкой нулевого наклона зонного спектра для вюрцитных кристаллов [33], ветви комплексной зонной структуры с такими декрементами затухания происходят только из центральной  $\Gamma$ -долины нижней зоны проводимости твердых растворов  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}$ . Биаксиальное растяжение в плоскости границы и сжатие вдоль гексагональной оси слоя из раствора  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}$  приводят к изменению симметрии верхнего состояния валентной зоны и величины кристаллического расщепления от  $\Delta_{\text{cr}}(\Gamma_{1v} - \Gamma_{6v}) = 0.009 \text{ eV}$  до  $\Delta_{\text{cr}}(\Gamma_{6v} - \Gamma_{1v}) = 0.202 \text{ eV}$ , уменьшению запрещенной зоны от  $E(\Gamma_{1c} - \Gamma_{6v}) = 4.37 \text{ eV}$  до  $E(\Gamma_{1c} - \Gamma_{1v}) = 4.26 \text{ eV}$  и эффективной массы электрона от 0.191 до 0.177 (в единицах  $m$ ). Величина разрыва зон на гетерогранице также зависит от напряжений слоев [12,13,34]. Для ее учета в структурах с деформированными слоями из твердых растворов применялась линейная интерполяция по составу величины разрыва валентной зоны  $\Delta E_v = 0.2 \text{ eV}$  [13], найденной для гетеропары GaN/AlN с напряженными барьерами. С использованием полученного значения  $\Delta E_v(\text{GaN}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}) = 0.06 \text{ eV}$  и рассчитанных энергий запрещенных зон был определен разрыв зоны проводимости  $\Delta E_c(\text{GaN}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}) = 0.81 \text{ eV}$ .

## 2. Результаты расчета и обсуждение

Вычисленный коэффициент прохождения электронов  $P(E)$  через симметричную двухбарьерную структуру  $\text{GaN}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(3c)/\text{GaN}(4c)/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(3c)/\text{GaN}$  показан на рис. 2. Результаты многозонного расчета здесь получены без учета внутренних полей. Двум пикам в

$P(E)$  соответствуют резонансные состояния в яме. При этих же условиях был проведен приближенный расчет, в котором в точной матрице шивания учитывались "взаимодействия" между состояниями только из нижней зоны проводимости. При энергиях электронов до  $\sim 2 \text{ eV}$  от дна ямы результаты двух расчетов оказались практически одинаковыми, что связано со слабым влиянием на асимптотику волновой функции гетероструктуры состояний из высших зон, имеющих большие декремента затухания. Это является основанием для применения в данной области энергии метода эффективной массы, в котором учитываются состояния, принадлежащие одной реальной ветви, связывающей состояния с симметрией  $\Gamma_1$  на краях запрещенной зоны.

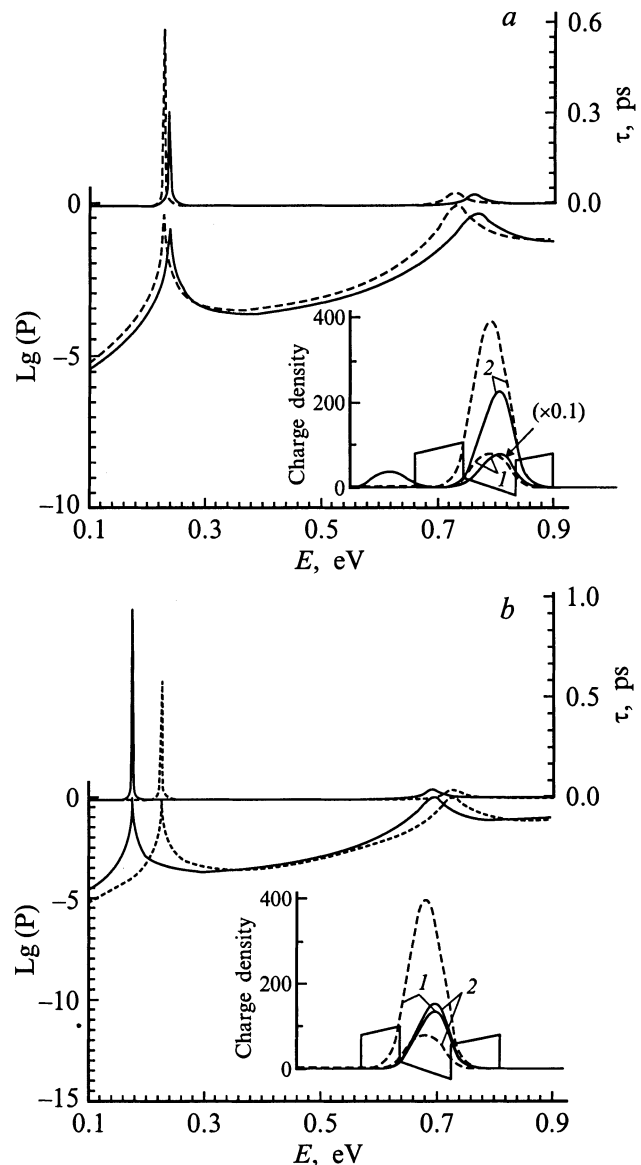
Для упрощения расчета огибающая волновая функция выбиралась в виде одной плоской волны (при блоховской функции в  $\Gamma$ -экстремуме зоны проводимости), для которой использовались стандартные условия шивания на границах с учетом зависимости эффективной массы от энергии и деформации. Вычисленный в этой модели коэффициент прохождения удовлетворительно согласуется с результатами многозонного расчета (рис. 2). Некоторое отличие в энергиях нижнего резонанса ( $\sim 0.02 \text{ eV}$ ) связано с влиянием состояний валентной зоны. С ростом концентрации алюминия в барьерных слоях энергия резонанса приближается к точке ветвления комплексной зонной структуры твердого раствора, и расхождение с точным расчетом увеличивается. При небольшой концентрации Al можно пользоваться однодолинной моделью, которую мы применили для анализа влияния внутренних электрических полей на туннелирование электронов в структурах  $\text{GaN}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}$ . В этом анализе поля в контактных областях полагались равными нулю, а в



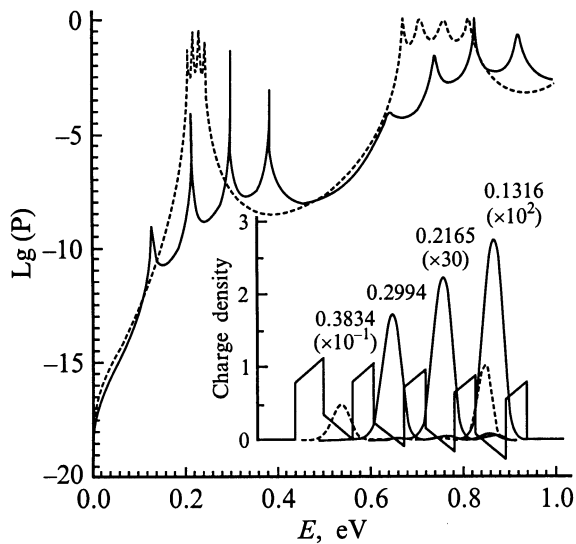
**Рис. 2.** Коэффициент  $P(E)$  и фазовое время  $\tau(E)$  прохождения электронов через двухбарьерную структуру GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN. Сплошная линия 1 и штриховая линия — результаты многозонного расчета и расчета однодолинной модели без учета электрических полей соответственно. Сплошная линия 2 — расчет в однодолинной модели с учетом внутренних электрических полей. На вставке показаны профиль эффективного потенциала и зарядовые плотности резонансных состояний. Штриховая линия отвечает расчету без полей, сплошные линии 1 и 2 — расчетам с внутренними полями при падении электронов слева и справа соответственно.

активной области наклонный потенциал электрического поля в слоях учитывался путем разбиения на тонкие прямоугольные барьеры. Вычисленные с учетом внутренних полей коэффициент прохождения, фазовое время прохождения  $\tau = \hbar \partial \varphi(E) / \partial E$  ( $\varphi(E)$  — сдвиг фазы амплитуды прошедшей волны), профиль эффективного электронного потенциала и зарядовая плотность, рассчитанная при условии равенства единице амплитуды падающей волны, для той же двухбарьерной структуры также показаны на рис. 2. При выбранных граничных условиях внутреннее поле в барьерных областях направлено от катиона к ближайшему аниону вдоль гексагональной оси ( $F_b = 1.31 \cdot 10^6$  V/cm), в области ямы — в противоположном направлении ( $F_w = -1.92 \cdot 10^6$  V/cm). Основной вклад в значения этих полей связан со спонтанной поляризацией. Внутренние поля меняют электронный потенциал в слоях на величины, сравнимые с разрывами зон, и делают его несимметричным. Вследствие этого локализация зарядовой плотности в яме зависит от направления падения электрона, а вероятность туннелирования, энергия нижнего резонанса и фазовое время уменьшаются. С ростом концентрации Al в барьерах эти эффекты усиливаются. Существование полярного направления в вюрцитных кристаллах

приводит к зависимости коэффициента прохождения от взаимного расположения барьеров в несимметричных двухбарьерных структурах GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(4c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN (рис. 3, a) и GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(4c)/GaN (рис. 3, b). Напряженности внутренних полей в однотипных слоях этих структур одинаковые ( $F_w = -2.04 \cdot 10^6$  V/cm,  $F_b = 1.20 \cdot 10^6$  V/cm), но профили потенциала разные. В случае когда левый



**Рис. 3.** Коэффициент прохождения и фазовое время прохождения электронов через несимметричные двухбарьерные структуры GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(4c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN (a) и GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(4c)/GaN (b) без учета (штриховые линии) и с учетом (сплошные линии) внутренних электрических полей. На вставке показаны профиль потенциала и зарядовые плотности резонансных состояний: линии 1 и 2 отвечают падению электронов слева и справа соответственно.



**Рис. 4.** Коэффициент прохождения электронов через напряженную ограниченную сверхрешетку  $(\text{GaN})_4(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N})_5$  со спейсер-слоем из твердого раствора. Штриховая и сплошная линии — расчеты без учета и с учетом внутренних полей соответственно. На вставке показаны профиль потенциала и зарядовая плотность для резонансов при падении электрона справа на структуру. Энергии резонансов даны в электрон-вольтах.

барьер является более толстым, внутренние поля за счет эффективного поднятия дна ямы приводят к "голубому" сдвигу первого и второго резонансных пиков (рис. 3, *a*). В обратном случае (рис. 3, *b*) растет "красный" сдвиг первого резонанса и уменьшается энергия второго резонанса. Кроме того, вследствие выравнивания "мощностей" двух барьеров (левый барьер становится более высоким, а правый более низким) вероятность туннелирования в резонансе близка к единице, как для симметричной структуры. Времена прохождения электронов в области нижнего резонанса во всех структурах меньше 1 ps, т.е. имеют тот же порядок, что и в структурах GaAs/AlAs [17].

Было рассмотрено туннелирование электронов через ограниченную сверхрешетку  $(\text{GaN})_4(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N})_5$  со спейсер-слоем из того же твердого раствора, расположенным слева и имеющим толщину в одну постоянную решетки  $c$  (рис. 4). В отсутствие полей за счет "взаимодействия" между состояниями из отдельных ям возникают две перекрывающиеся по энергии мини-зоны, связанные с двумя уровнями в яме. На рис. 4 состояния таких мини-зон соответствуют резонансные пики в коэффициенте прохождения, рассчитанном без учета полей. Из положений пиков получаются значения разности между энергиями крайних резонансных состояний нижней мини-зоны  $\Delta E = 0.037$  eV и щели между соседними состояниями в мини-зоне  $\Delta E/n = 0.009$  eV ( $n = 4$ ). При учете внутренних полей напряженности в слоях равны  $F_w = -1.60 \cdot 10^6$  V/cm,  $F_b = 1.64 \cdot 10^6$  V/cm. Из приведенного на рис. 4 профиля потенциала видно,

что справа от спейсер-слоя потенциал сверхрешетки выглядит так, как если бы она находилась в однородном внешнем поле с напряженностью  $F_{\text{eff}} = -2.3 \cdot 10^5$  V/cm. Значение  $F_{\text{eff}}$  определяется из отношения сдвига потенциала  $\Delta V = 0.084$  eV к периоду сверхрешетки  $d$ . Поскольку величина  $\Delta E$  близка к предельному значению, соответствующему ширине мини-зоны бесконечной сверхрешетки [35], ее можно использовать для проверки выполнимости критерия формирования штарковской лестницы [36]:  $\Delta V \gg \Delta E/n$ . Сравнивая полученные величины, видим, что для состояний нижней мини-зоны ограниченной сверхрешетки этот критерий хорошо выполняется. Наличие основных признаков штарковской лестницы (локализация зарядовой плотности в отдельных ямах, эквидистантный шаг между резонансными уровнями, совпадающий с величиной скачка потенциала  $\Delta V$ ) продемонстрировано на рис. 4. Штарковская лестница образуется вследствие разрушения электрическим полем  $F_{\text{eff}}$  сверхрешеточной гибридизации состояний отдельных ям. Для штарковских состояний с наибольшей и наименьшей энергией за счет краевых эффектов наблюдаются некоторые отклонения от "идеальности" в виде спутников плотности при падении электронов на структуру справа и слева соответственно. При энергиях  $E > 0.6$  eV более размытым пикам в  $P(E)$  отвечают резонансные состояния второй мини-зоны. Для них критерий [36] выполняется не достаточно строго ( $n\Delta V/\Delta E \sim 2$ ), и выраженная локализация зарядовой плотности в ямах отсутствует. Таким образом, возникновение штарковской лестницы за счет внутренних полей в ограниченных нитридных сверхрешетках зависит от величины напряженности поля  $F_{\text{eff}}$  и дисперсии мини-зоны. Выполнимость условий ее наблюдения можно обеспечить подходящим выбором размеров и составов слоев сверхрешетки. Типичное значение необходимой для этого напряженности поля  $F_{\text{eff}}$  составляет  $\sim 10^5$  V/cm, как и в случае с внешними полями.

Авторы благодарят Г.Ф. Караваева и В.Г. Тютерева за полезную дискуссию.

## Список литературы

- [1] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto. *Jpn. J. Appl. Phys. Pt 2*, **1**, 35, L74 (1996).
- [2] D. Korakakis, K.F. Ludwig, T.D. Moustakas. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 9, 1004 (1998).
- [3] Y.-F. Wu, B.P. Keller, D. Kopolnek, P. Kozodoy, S.P. Denbaars, U.K. Mishra. *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1438 (1996).
- [4] R. Gaska, A.D. Bykhovski, M.S. Shur, V.V. Kaminski, S.M. Soloviov. *J. Appl. Phys.* **85**, 9, 6932 (1999).
- [5] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. *Phys. Rev.* **B56**, 16, R10024 (1997).
- [6] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki. *J. Appl. Phys.* **84**, 9, 4951 (1998).
- [7] R. Oberhuber, G. Zandler, P. Vogl. *Appl. Phys. Lett.* **73**, 6, 818 (1998).

- [8] L. Hsu, W. Walukiewicz. Appl. Phys. Lett. **73**, 3, 339 (1998).
- [9] S.-H. Park, S.-L. Chuang. Appl. Phys. Lett. **72**, 24, 3103 (1998).
- [10] N. Grandjean, B. Damilano, S. Dalmaso, M. Leroux, M. Laugt, J. Massies. J. Appl. Phys. **86**, 7, 3714 (1999).
- [11] J.S. Im, H. Kollmer, J. Off, A. Sohmer, F. Scholz, A. Hangleiter. Phys. Rev. **B57**, 16, R9435 (1998).
- [12] M.B. Nardelli, K. Rapcewicz, J. Bernholc. Phys. Rev. **B55**, 12, R7323 (1997).
- [13] F. Bernardini, V. Fiorentini. Phys. Rev. **B57**, 16, R9427 (1998).
- [14] M. Leroux, N. Grandjean, M. Laugt, J. Massies, B. Gil, P. Le-febvre, P. Bigenwald. Phys. Rev. **B58**, 20, R13 371 (1998); J. Simon, R. Lauger, A. Barski, N.T. Pelekanos. Phys. Rev. **B61**, 11, 7211 (2000).
- [15] V. Fiorentini, F. Bernardini, F.D. Sala, A.Di Carlo, P. Lugli. Phys. Rev. **B60**, 20, 8849 (1999).
- [16] E.E. Mendez, F. Agullo-Rueda, J.M. Hong. Phys. Rev. Lett. **60**, 23, 2426 (1988).
- [17] Г.Ф. Караваев, А.А. Воронков. ФТП **32**, 11, 1363 (1998).
- [18] Properties of Group III Nitrides / Ed. J.H. Edgar. Kansas State University, emis DATAREVIEWS SERIES N 11 (1994). 302 p.
- [19] A. Rubio, J.L. Corkill, M.L. Cohen. Phys. Rev. **B49**, 3, 1952 (1994).
- [20] С.Н. Гриняев, В.Я. Малахов, В.А. Чалдышев. Изв. вузов. Физика **4**, 69 (1986).
- [21] Y.-C. Chang, J.N. Schulman. Phys. Rev. **B25**, 6, 3975 (1982).
- [22] Ю.И. Сиротин, М.П. Шасколькая. Основы кристаллофизики. Наука, М. (1979). 639 с.
- [23] A.A. Wright. J. Appl. Phys. **82**, 2833 (1997).
- [24] A. Bykhovski, B. Gelmont, M.S. Shur. J. Appl. Phys. **74**, 6734 (1993).
- [25] J.W. Orton, C.T. Foxon. Rep. Prog. Phys. **61**, 1 (1998).
- [26] T. Deguchi, A. Shikanai, K. Torii, T. Sota, S. Chichibu, S. Nakamura. Appl. Phys. Lett. **72**, 3329 (1998).
- [27] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП **26**, 12, 2057 (1992).
- [28] A. Shikanai, T. Azuhata, T. Sota, S. Chichibu, A. Kuramata, K. Horino, S. Nakamura. J. Appl. Phys. **81**, 417 (1997).
- [29] P. Perlin, I. Gorczyca, S. Porowski, T. Suski, N.E. Christensen, A. Polian. Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 334 (1993).
- [30] W.J. Moore, J.A. Freitas, R.L. Moluar. Phys. Rev. **B56**, 19, 12 073 (1997).
- [31] H. Wang, G.A. Farias, V.N. Freire. Phys. Rev. **B60**, 8, 5705 (1999).
- [32] P.B. Perry, R.F. Rutz. Appl. Phys. Lett. **33**, 39 (1978).
- [33] Э.И. Рашба. ФТТ **1**, 3, 407 (1959).
- [34] S.W. King, C. Ronning, R.F. Gavis, M.C. Benjamin, R.J. Ne-manich. J. Appl. Phys. **84**, 4, 2086 (1998).
- [35] D.Y. Ko, G. Edwards, J.C. Inkson. Semicond. Sci. Technol. **5**, 200 (1990).
- [36] J. Zak. Phys. Rev. Lett. **20**, 1477 (1968).