

Резонансное туннелирование X -электронов в структурах AlAs/GaAs(111). Псевдопотенциальный расчет и модель

© Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов

Физико-технический институт Сибирского отделения Российской академии наук,
634050 Томск, Россия

(Получена 22 февраля 2000 г. Принята к печати 21 июня 2000 г.)

Рассмотрено резонансное туннелирование X -электронов в гетероструктурах AlAs/GaAs (111) с AlAs в качестве электродов. Расчет в модели с разрывным на границах потенциалом проведен методом матрицы рассеяния, комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Найлены резонансные пики в коэффициенте прохождения, связанные с X -состояниями в AlAs и L -состояниями в GaAs. Предложена модель для описания данных процессов.

В последние годы ведется интенсивное изучение различных наноструктур, представляющих интерес с точки зрения их оптических и электрических свойств. Наибольшее число работ посвящено гетероструктурам GaAs/AlAs(001), в которых слои AlAs встроены в GaAs. Электронные свойства таких структур в основном связаны с электронами Γ -долины зонного спектра, но существенную роль играет и так называемое ΓX -смешивание электронов на гетерограницах.

В настоящей работе мы хотим обратить внимание на структуры с гетерограницами по плоскости (111). Существует ряд экспериментальных исследований, посвященных выращенным на GaAs-подложках гетероструктурам с данными границами раздела, например, [1–8]. В этих работах показано, что при выполнении определенных условий в процессе роста могут быть созданы качественные структуры с достаточно большим отношением "пик–долина" в вольт-амперных характеристиках. Резонансное туннелирование в двухбарьерной структуре GaAs/AlAs (111) теоретически рассмотрено в работе [9], где проведен анализ $\Gamma\Gamma$ -, ΓL - и LL -каналов прохождения. Резонансные свойства таких структур определяются в основном туннелированием Γ -электронов из минимума зоны проводимости GaAs. Как известно, дно зоны проводимости AlAs реализуется в 3-х неэквивалентных X -долинах, поэтому они должны играть существенную роль в процессах туннелирования. Однако электроны из Γ -долины GaAs для границ раздела (111) не могут перейти в X -долины без рассеяния на фононах или дефектах, что существенно усложняет описание туннелирования.

Иная ситуация возникает при рассмотрении структур AlAs/GaAs (111), в которых тонкие слои GaAs встроены в кристалл AlAs. В этом случае резонансные свойства структуры определяются туннелированием X -электронов из минимума зоны проводимости AlAs. Оценки показывают, что при толщине слоев GaAs менее 10 монослоев резонансные энергии, соответствующие состояниям Γ , оказываются по энергии выше X -долин в AlAs, и поэтому главный вклад в электронные свойства таких гетероструктур будет обусловлен X -электронами. Если

слой GaAs заменить на твердый раствор $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, то за счет выбора состава твердого раствора также можно добиться того, что Γ -электроны в твердом растворе не будут оказывать существенного влияния на свойства гетероструктуры. Такого же эффекта можно достичь и с помощью всестороннего сжатия.

Рассмотрим гетероструктуру AlAs/GaAs с границами раздела по плоскости (111) с AlAs в качестве электродов. Рассеяние X -электронов на таких гетерограницах осуществляется при отличных от нуля параллельных границе компонентах волнового вектора k_{\parallel} . Для данной структуры в поверхностной зоне Бриллюэна существуют 6 точек с координатами $k_{\parallel} = (2\pi/3a)(\pm 1, \pm 1, \mp 2)$ (a — постоянная решетки), в окрестности которых располагаются X -долины, при этих же k_{\parallel} существуют и L -долины. Для данных k_{\parallel} X -долины имеют перпендикулярные границе компоненты волнового вектора $k_{\perp} = (2\pi/3a)(\mp 1, \mp 1, \mp 1)$, а L -долины имеют $k_{\perp} = (2\pi/6a)(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$. При прохождении через гетерограницу волновой вектор k_{\parallel} сохраняется, а вектор k_{\perp} не сохраняется. Поэтому при данном k_{\parallel} на гетерограницах (111) возможно XL -рассеяние. Поскольку энергия L -состояния в GaAs $E_L(\text{GaAs})$ около 0.29 эВ, а энергия X -состояния в AlAs $E_X(\text{AlAs}) \simeq 0.21$ эВ (отсчет энергии здесь и далее — от дна зоны проводимости GaAs), при рассеянии на гетерогранице XL -смешивание электронов будет играть существенную роль. В таких структурах в AlAs существуют X -ямы и L -барьеры, в GaAs — наоборот, L -ямы и X -барьеры.

Мы провели исследование процессов XX -, XL -, LL -смешивания электронных состояний в структуре AlAs/GaAs (111) в модели с разрывным на гетерограницах кристаллическим потенциалом. В такой модели проводится шивание общих решений уравнения Шредингера и их нормальных к гетерограницам производных на плоскостях границ. Для построения общих решений в каждом из слоев решается задача определения так называемой комплексной зонной структуры. Для гетероструктуры AlAs/GaAs($3\sqrt{3}a$)/AlAs($3\sqrt{3}a$)/GaAs($3\sqrt{3}a$)/AlAs (в скобках указаны толщины соответствующих слоев) нами проведен расчет коэффициентов прохождения P_{XX} (первый индекс у P указывает тип падающей волны, второй — прошедшей) для долин, соответствующих

Факс: (382-2)233015
E-mail: kanc@spti.tsu.ru

$k_{\parallel} = (2\pi/3a)(1, 1, -2)$. Очевидно, что для других долин результат получится аналогичным. Гетерограницы проводились по слоям As. Расчет проводился методом матрицы рассеяния [10], комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Детальное изложение метода расчета приведено в работах [11,12]. Для вычислений использовались псевдопотенциалы [13], параметры которых определялись из условий наилучшего совпадения рассчитанных и экспериментально определенных энергетических зазоров. Векторы обратной решетки, удовлетворяющие условию $(k_0 + b_1)^2 \leq 10(2\pi/a)^2$, где k_0 равняется k_X или k_L , учитывались в разложении волновой функции точно, кроме того, около 250 плоских волн учитывалось с помощью теории возмущений Левдина. Как нами показано, учет такого большого числа плоских волн необходим для выполнения условий унитарности рассеяния.

На рис. 1 приведена комплексная зонная структура GaAs(111). Для выбранного k_{\parallel} X-долина типа $X(0, 0, -1)$ существует при $k_X = k_{\perp} = (2\pi/3a)(-1, -1, -1)$; L-долина вида $L(1/2, 1/2, -1/2)$ — при $k_L = k_{\perp} = (2\pi/6a)(1, 1, 1)$. Сплошными линиями на этом рисунке приведены энергетические зависимости с вещественными k_{\perp} . Ширина области изменения вещественных k_{\perp} равна периоду в обратном пространстве в направлении (111), а именно $2\sqrt{3}\pi/a$. Штриховыми линиями на рис. 1 изображены зависимости с комплексными k_{\perp} , для которых $\text{Re}k_{\perp} = k_X$ (или k_L) соответственно. Кроме данных вещественных линий имеется еще большое число не представленных на рисунке зависимостей $k_{\perp}(E)$ с большими $\text{Im}k_{\perp}(E)$ в выбранном интервале энергий. Комплексная зонная структура AlAs(111) имеет аналогичный вид. При построении общего решения уравнения Шредингера в слоях в расчете учитывались все (около 30) ветви комплексной зонной структуры.

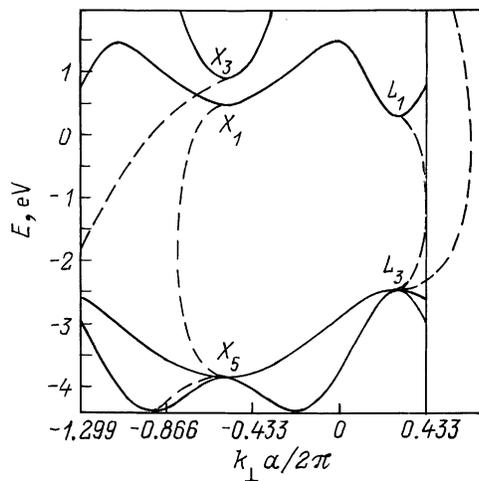


Рис. 1. Комплексная зонная структура GaAs(111) при $k_{\parallel} = (2\pi/3a)(1, 1, -2)$. Сплошными линиями обозначены энергетические зависимости с вещественными k_{\perp} ; штриховыми — зависимости с комплексными k_{\perp} , для которых $\text{Re}k_{\perp} = k_X$ (или k_L) соответственно.

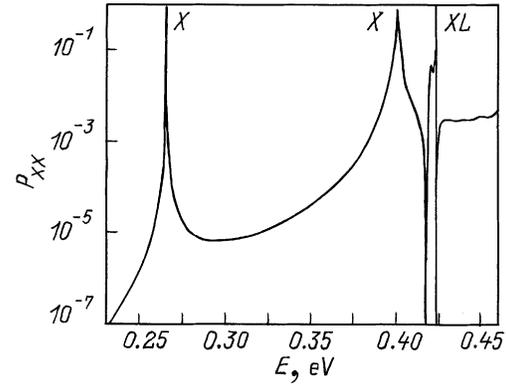


Рис. 2. Коэффициенты прохождения P_{XX} для гетероструктуры AlAs/GaAs($3\sqrt{3}a$)/AlAs($3\sqrt{3}a$)/GaAs($3\sqrt{3}a$)/AlAs. Показаны типы резонансных пиков.

На рис. 2 изображены коэффициенты прохождения P_{XX} . Первые два пика — это X-резонансы в X-яме AlAs. Сложная структура в окрестности энергии 0.42 эВ связана с L-резонансами в двух L-ямах GaAs и обусловлена XL-взаимодействием на гетерограницах. Отметим, что XL-взаимодействие достаточно слабое и имеет ярко выраженную зависимость от типа гетерограницы. Так, для систем AlAs/GaAs с одной гетерограницей коэффициент прохождения примерно равен 0.04 (для энергий около 0.42 эВ), если плоскость из атомов Ga в GaAs расположена ближе к гетерогранице (тип *ga*), чем плоскость из атомов Al в AlAs. В противоположном случае (гетерограница типа *al*) он на 3 порядка меньше. В рассмотренной нами структуре порядок гетерограниц следующий: *al-ga-al-ga*. Именно этой зависимостью от типа гетерограницы обусловлена существенная разница в высоте пиков в окрестности энергии 0.42 эВ. Изменяя размеры структуры, мы установили, что первый пик для коэффициента прохождения в окрестности данной энергии (меньший по высоте) связан с правой L-ямой GaAs, второй (большой) — с левой. Качественное объяснение данного обстоятельства следующее. Электрон, попадая в правую L-яму GaAs, сравнительно легко "выбывает из игры", нарушая тем самым условия существования хорошего резонанса, так как коэффициент прохождения через самую правую (типа *ga*) гетерограницу GaAs/AlAs составляет ~ 0.04 . Другая ситуация возникает для электронов в левой L-яме GaAs, в которой электрон оказывается "заперт" между первой (типа *al*) и третьей (тоже типа *al*) гетерограницами, коэффициент прохождения через которые на 3 порядка меньше.

Анализ данных псевдопотенциального расчета показывает, что в интервале энергий, представляющих интерес для описания рассеяния электронов с участием X- и L-состояний AlAs и GaAs, можно ограничиться взаимодействием только состояний из долин X_1 , X_3 и L_1 . Более того, качественно правильные результаты получаются и в двухдолинном приближении с участием долин X_1 и

L_1 . Учет X_3 -состояний необходим для более точного выполнения условий унитарности полученных матриц рассеяния.

Таким образом, можно надеяться построить в рамках метода огибающих волновых функций трехдолинную модель, адекватно воспроизводящую результаты точного расчета прохождения электронов. Для построения модели требуется использовать вариант kp -гамильтониана, обеспечивающий более или менее точное определение комплексной зонной структуры, и найти согласованные с точным расчетом условия сшивания для огибающих.

Для построения модели волновые функции для любого слоя в окрестности точек k_0 , где k_0 равняется k_X или k_L , представим в виде разложения

$$\psi_{k_0k} = \exp[i(k - k_0)r] \sum_m D_m(k) |K_{0,m}\rangle, \quad (1)$$

где $|K_{0,m}\rangle$ — блоховские волновые функции в точке k_0 .

Коэффициенты разложения $D_m(k)$ и k_\perp находятся из системы уравнений, которая решается при фиксированных значениях E и k_\parallel :

$$\sum_m D_m(k) \{ [E_m(k_0) + (k - k_0)^2 - E] \delta_{nm} + 2(k - k_0) p_{nm} \} = 0, \quad (2)$$

где $p_{nm} = \langle K_{0n} | p | K_{0m} \rangle$ — матричные элементы оператора импульса, $E_m(k_0)$ — энергия в точке k_0 . Здесь и далее мы используем атомную систему единиц. Таким образом, решая (2), мы находим комплексную зонную структуру, т.е. зависимости $k_{\perp j}(E, k_\parallel)$ и $D_m(E, k_\parallel, k_{\perp j})$, где j — номер решения.

Проведенные исследования показали, что в окрестности точки $X(0,0,-1)$ в интересующей нас области энергий при построении kp -гамильтониана можно ограничиться учетом долин зоны проводимости X_1 и X_3 и долины X_5 в валентной зоне. Отметим, что учет долин X_5 необходим для получения правильных зависимостей $k_{\perp j}(E, k_\parallel)$, но их вклад в волновые функции незначителен. В окрестности точки $L(1/2, 1/2, -1/2)$ мы учитывали в (1) и (2) долину зоны проводимости L_1 и долины L_3 валентной зоны и зоны проводимости (L_3^v и L_3^c). Соответствующие волновые функции в основном имеют вклад от долин L_1 с небольшими поправками от L_3 -состояний. Квадратичный закон дисперсии здесь справедлив в довольно широком энергетическом интервале, хорошо воспроизводя те ветви комплексной зонной структуры на рис. 1, которые начинаются от уровня L_1 нижней зоны проводимости.

Матричные элементы оператора импульса и энергии $E_m(k_0)$ находятся с использованием псевдволновых функций, полученных в точном псевдопотенциальном расчете. Значения этих величин приведены в табл. 1 и 2. Матричные элементы импульса приведены для долин $X(0,0,-1)$ и $L(1/2, 1/2, 1/2)$. Волновые функции X_{5x} , X_{5y} , вырожденного состояния X_5 имеют симметрию координат x и y соответственно; для вырожденных L_3 -уровней волновые функции L_{31} и L_{32} имеют симметрию

Таблица 1. Значения энергии в эВ в точках X и L для AlAs и GaAs

| | X_1 | X_3 | X_5 | L_1 | L_3^v | L_3^c |
|------|---------|---------|----------|---------|----------|---------|
| AlAs | 0.20823 | 1.18303 | -4.24294 | 0.86169 | -2.88137 | 3.06542 |
| GaAs | 0.46877 | 0.90684 | -3.84209 | 0.29084 | -2.45145 | 3.36002 |

Таблица 2. Значения матричных элементов оператора импульса в атомных единицах для AlAs и GaAs

| | AlAs | GaAs |
|---|-----------|-----------|
| $\langle X_1 p_z X_3 \rangle$ | 0.10793i | 0.11399i |
| $\langle X_1 p_x X_{5x} \rangle$ | 0.49409i | 0.49235i |
| $\langle X_3 p_x X_{5y} \rangle$ | 0.52922i | 0.52863i |
| $\langle L_1 p_x L_{31}^v \rangle$ | 0.42154i | 0.42011i |
| $\langle L_1 p_x L_{32}^v \rangle$ | 0.24338i | 0.24254i |
| $\langle L_1 p_x L_{31}^c \rangle$ | 0.00581i | 0.00910i |
| $\langle L_1 p_x L_{32}^c \rangle$ | -0.00335i | -0.00525i |
| $\langle L_{31}^v p_x L_{31}^c \rangle$ | 0.26767i | 0.26246i |
| $\langle L_{31}^v p_x L_{32}^c \rangle$ | -0.34219i | -0.34272i |
| $\langle L_{32}^v p_x L_{31}^c \rangle$ | 0.34219i | 0.34272i |
| $\langle L_{32}^v p_x L_{32}^c \rangle$ | 0.12746i | 0.133263i |
| $\langle L_{31}^v p_z L_{31}^c \rangle$ | -0.32502i | -0.33112i |
| $\langle L_{32}^v p_z L_{32}^c \rangle$ | -0.46523i | -0.46038i |

$(1/\sqrt{2})(x - y)$ и $(1/\sqrt{6})(x + y - 2z)$ соответственно. Матричные элементы импульса, не приведенные в таблице, либо равны 0, либо легко определяются из соображений симметрии. Для других долин X и L значения матричных элементов импульса могут быть получены с помощью применения соответствующих элементов симметрии из группы T_d^2 .

Общее решение для данных E и k_\parallel может быть построено как суперпозиция решений, связанных с точкой L и с точкой X . Введем обозначение $\chi_j = k_{\perp j} - k_{0\perp}$. Примем следующую нумерацию ветвей комплексной зонной структуры. Пусть $\chi_1 = -\chi_4$ ($\text{Re}\chi_1 > 0$, либо $\text{Im}\chi_1 > 0$) соответствуют ветвям, начинающимся от уровня X_1 зоны проводимости; $\chi_3 = -\chi_6$ ($\text{Re}\chi_3 > 0$, либо $\text{Im}\chi_3 > 0$) — ветвям, начинающимся от уровня X_3 , а $\chi_2 = -\chi_5$ ($\text{Re}\chi_2 > 0$, либо $\text{Im}\chi_2 > 0$) — ветвям, начинающимся от уровня L_1 зоны проводимости. Тогда общее решение при фиксированном значении k_\parallel можно представить в виде

$$\Psi_E = \sum_{j=1}^6 C(\chi_j, E) \Psi_j, \quad (3)$$

где $C(\chi_j E)$ — произвольные коэффициенты, $\Psi_j = \Psi_{k_0 k_j}$ — найденные ранее частные решения. По данной схеме можно найти общие решения как слева, так и справа от гетерограницы, а затем найти условия сшивания этих решений на гетерогранице, включающие 12 различных коэффициентов $C(\chi_j, E)$, по 6 коэффициентов с каждой стороны.

Подставляя (1) в (3), общее решение (3) можно представить в виде

$$\Psi_E = F_{X_1}|X_1\rangle + F_{X_3}|X_3\rangle + F_{L_1}|L_1\rangle, \quad (4)$$

где огибающие F определены соотношениями

$$\begin{aligned} F_{X_1} &= C(\chi_1)D_{X_1}(\chi_1) \exp(i\chi_1 z) \\ &+ C(-\chi_1)D_{X_1}(-\chi_1) \exp(-i\chi_1 z) \\ &+ C(\chi_3)D_{X_1}(\chi_3) \exp(i\chi_3 z) \\ &+ C(-\chi_3)D_{X_1}(-\chi_3) \exp(-i\chi_3 z), \\ F_{L_1} &= C(\chi_2)D_{L_1}(\chi_2) \exp(i\chi_2 z) \\ &+ C(-\chi_2)D_{L_1}(-\chi_2) \exp(-i\chi_2 z), \quad (5) \\ F_{X_3} &= C(\chi_1)D_{X_3}(\chi_1) \exp(i\chi_1 z) \\ &+ C(-\chi_1)D_{X_3}(-\chi_1) \exp(-i\chi_1 z) \\ &+ C(\chi_3)D_{X_3}(\chi_3) \exp(i\chi_3 z) \\ &+ C(-\chi_3)D_{X_3}(-\chi_3) \exp(-i\chi_3 z). \end{aligned}$$

Ось z здесь направлена вдоль направления (111). Отметим, что в (5) опущены слагаемые, связанные с огибающими функций $|X_5\rangle$ и $|L_3\rangle$. Как уже было отмечено, их вклад в волновые функции незначителен. Производные от огибающих имеют вид

$$\begin{aligned} F'_{X_1} &= i\chi_1[C(\chi_1)D_{X_1}(\chi_1) \exp(i\chi_1 z) \\ &- C(-\chi_1)D_{X_1}(-\chi_1) \exp(-i\chi_1 z)] \\ &+ i\chi_3[C(\chi_3)D_{X_1}(\chi_3) \exp(i\chi_3 z) \\ &- C(-\chi_3)D_{X_1}(-\chi_3) \exp(-i\chi_3 z)], \\ F'_{L_1} &= i\chi_2[C(\chi_2)D_{L_1}(\chi_2) \exp(i\chi_2 z) \\ &- C(-\chi_2)D_{L_1}(-\chi_2) \exp(-i\chi_2 z)], \quad (6) \\ F'_{X_3} &= i\chi_1[C(\chi_1)D_{X_3}(\chi_1) \exp(i\chi_1 z) \\ &- C(-\chi_1)D_{X_3}(-\chi_1) \exp(-i\chi_1 z)] \\ &+ i\chi_3[C(\chi_3)D_{X_3}(\chi_3) \exp(i\chi_3 z) \\ &- C(-\chi_3)D_{X_3}(-\chi_3) \exp(-i\chi_3 z)]. \end{aligned}$$

Шесть соотношений (5) и (6) при фиксированном z , соответствующем положению плоскости гетерограницы, можно представить в матричном виде

$$\mathbf{F} = \Phi \mathbf{C}, \quad (7)$$

где \mathbf{F} — вектор с компонентами F_{X_1} , F_{L_1} , F_{X_3} , F'_{X_1} , F'_{L_1} , F'_{X_3} , \mathbf{C} — вектор с компонентами $C(\chi_1)$, $C(\chi_2)$, $C(\chi_3)$, $C(-\chi_1)$, $C(-\chi_2)$, $C(-\chi_3)$, Φ — матрица (6×6), элементы которой определяются из соотношений (5) и (6).

Таблица 3. Значения матричных элементов t_{ij} в атомных единицах

| i | j | | | | | |
|-----|---------|---------|---------|---------|---------|--------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| 1 | -0.0257 | 0.0452 | 0.0170 | 0.0146 | -0.0131 | 0.0067 |
| 2 | 0.0286 | -0.0223 | -0.0139 | 0.0024 | 0.0351 | 0.0113 |
| 3 | 0.0128 | -0.0472 | 0.0018 | 0.0396 | 0.0744 | 0.0085 |
| 4 | -0.0089 | -0.0100 | 0.0035 | 0.0754 | -0.1680 | 0.0446 |
| 5 | 0.0022 | -0.0024 | 0.0066 | -0.0031 | 0.0178 | 0.0086 |
| 6 | 0.0092 | 0.0194 | -0.0058 | -0.0358 | 0.1515 | 0.0033 |

Соотношение (7) можно записать для обоих веществ, образующих гетероструктуру. Индекс "1" соответствует веществу, находящемуся слева от гетерограницы (в нашем случае AlAs), индекс "2" — справа (GaAs):

$$\mathbf{F}_1 = \Phi_2 \mathbf{C}_1, \quad \mathbf{F}_2 = \Phi_2 \mathbf{C}_2. \quad (8)$$

Связь между коэффициентами \mathbf{C}_1 и \mathbf{C}_2 (условия сшивания на гетерогранице) может быть представлена в виде

$$\mathbf{C}_1 = \mathbf{J} \mathbf{C}_2, \quad (9)$$

где \mathbf{J} — так называемая матрица сшивания на данной гетерогранице, элементы которой вычисляются в псевдопотенциальном расчете. Отметим, что \mathbf{J}^{-1} в трехдолинном приближении практически точно совпадает с матрицей сшивания на следующей гетерогранице GaAs/AlAs (между этими гетерограницами нами выбрано четное число монослоев), что является хорошим критерием справедливости трехдолинного приближения.

Из (8) и (9) следуют условия сшивания для огибающих и их производных:

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{T} \mathbf{F}_2, \quad (10)$$

где \mathbf{T} — матрица (6×6),

$$\mathbf{T} = \Phi_1 \mathbf{J} \Phi_2^{-1}. \quad (11)$$

Расчет матричных элементов \mathbf{T} показал их достаточно слабую энергетическую зависимость. Поэтому для матричных элементов \mathbf{T} с хорошей степенью точности можно выбрать их средние по энергии значения. Результаты удобно представить в симметричном виде

$$\mathbf{T}_1 \mathbf{F}_1 = \mathbf{T}_2 \mathbf{F}_2, \quad (12)$$

где $\mathbf{T} = \mathbf{T}_1^{-1} \mathbf{T}_2$. Матричные элементы T_k ($k = 1, 2$) имеют вид

$$(T_k)_{ij} = \delta_{ij} + (-1)^k t_{ij}, \quad (k = 1, 2). \quad (13)$$

Значения t_{ij} приведены в табл. 3. Отметим, что матричные элементы матрицы \mathbf{T} в недиагональных блоках (t_{ij} для $i = 1, 2, 3$; $j = 4, 5, 6$ и $i = 4, 5, 6$; $j = 1, 2, 3$) зависят от выбора размерности волновых

векторов, и поэтому их нельзя сравнивать с безразмерными t_{ij} в диагональных блоках этой матрицы. Отличия t_{ij} от 0 связаны с различными комплексными зонными структурами для AlAs и GaAs, а также с перекрытием волновых функций на плоскости границы. Анализируя данные табл. 3, можно сделать качественный вывод о том, что XL -взаимодействие в основном обусловлено смешиванием производных огибающих функций L и X на плоскости границы. Отметим, что при использовании условий сшивания для огибающих (12) необходимо иметь в виду, что они получены в атомной системе единиц ($\hbar = 1$, $m_0 = 1/2$, где m_0 — масса электрона). Функции $|X_1\rangle$, $|X_3\rangle$, $|L_1\rangle$ для обоих веществ должны быть вещественными. Приведенные t_{ij} относятся к границе AlAs/GaAs, т.е. AlAs — слева, граница типа al в наших обозначениях. Для гетерограниц, отстоящих от нее на четное число монослоев в направлении (111), условия сшивания остаются теми же, а для гетерограниц, отстоящих на нечетное число монослоев, для получения граничных условий в формуле (12) следует заменить знаки у F_{L_1} , F'_{L_1} для обоих веществ, что достаточно очевидно.

Для проверки модели мы провели расчет коэффициентов прохождения для указанной выше структуры, используя условия сшивания (12), и получили практически точное совпадение с данными псевдопотенциального расчета. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о пригодности разработанной достаточно простой модели. Полученные условия сшивания для огибающих предполагается в дальнейшем использовать для расчета различных физических характеристик гетероструктур, например времен туннелирования, вольт-амперных характеристик и т.д.

Работа выполнена частично при поддержке программы Министерства науки "Поверхностные атомные структуры", проект 5.12.99 и гранта РФФИ № 00-02-17996.

Список литературы

- [1] S.de Gironncoli, S. Baroni, R. Resta. Phys. Rev. Lett., **62**, 2853 (1989).
- [2] M. Livingstone, I. Galbraith, B.S. Wherrett. Nuovo Cim., **17**, 1595 (1995).
- [3] L. Cong, E. Williamson, M.J. Nathan. Electron. Matter., **25**, 305 (1995).
- [4] B.J. Garcia, C. Fontaine, W.W. Ruhle, J. Collet, A. Ponchet. Microelectron. J., **26**, 777 (1995).
- [5] A. Chin, K. Lee. Appl. Phys. Lett., **68**, 347 (1996).
- [6] R.K. Hayden, T. Takamasu, N. Miura, M. Henini, L. Eaves, G. Hill. Techn. Rept. ISSP, N 3148, 1 (1996).
- [7] T. Watanabe, T. Yamamoto, P.O. Vassaró, H. Ohnishi, K. Fujita. Microelectron. J., **27**, 411 (1996).
- [8] G. Wang, P. Trong, R. Melliti, E. Mao, A. Majerfield, A. Sanz-Herevas, J. Depeyrot, B.W. Kim. Phys. St. Sol., **164**, 117 (1997).
- [9] Г.Ф. Каравасва, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 9, 91 (1998).

- [10] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9945 (1988).
- [11] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992).
- [12] Г.Ф. Каравасва, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 9, 64 (1992).
- [13] В.А. Чалдышев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 3, 38 (1983).

Редактор Т.А. Полянская

Resonant tunneling of X-electrons in AlAs/GaAs(111) structures. Pseudopotential calculations and the model

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov

Siberian Physicotechnical Institute,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The X-electron resonant tunneling in AlAs/GaAs(111) heterostructures with AlAs electrode have been considered. Potential model calculations are carried out using the scattering matrix method; the complex band structure is calculated by empirical pseudopotential method. The resonant peaks in transmission coefficients related to X-states of AlAs and L-states of GaAs were found. The model for description of this processes is suggested.