

# Электронные и оптические свойства сверхрешеток $\text{AlAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (110)

© Г.Ф. Караваяв<sup>¶</sup>, В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,  
634050 Томск, Россия

(Получена 29 июля 2002 г. Принята к печати 16 октября 2002 г.)

Исследованы электронные состояния в зоне проводимости сверхрешеток  $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$  (110) при различных  $M$  и  $N$ . Показано, что электронные свойства этих структур в основном определяются электронами двух пар долин — или  $\Gamma$ - $X^Z$ , или  $X^X$ - $X^Y$ . Расчеты проведены на основе разработанной нами модели сшивания огибающих функций. Найдены и проанализированы минизонные спектры, симметрия и локализация волновых функций, а также вероятности межминизонного инфракрасного поглощения. Показано, что в случае  $X^X$ - $X^Y$ -связки долин вероятности поглощения имеют значительную величину не только при поляризации света в направлении оси роста сверхрешетки, но также и при нормальном к поверхности структуры падении световой волны.

## 1. Введение

При исследовании электронных и оптических свойств наноструктур на основе полупроводников  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  наибольшее внимание уделяется таким структурам, у которых главную роль играют состояния в центре зоны Бриллюэна (точка  $\Gamma$ ). Значительно меньше работ выполнено по изучению структур, электронные свойства которых обусловлены состояниями на краю зоны Бриллюэна (точка  $X$ ). Ранее мы рассмотрели подобные структуры с осью роста в направлении  $[111]$  [1,2]. Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию электронных и оптических свойств сверхрешеток (СР)  $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$  с ориентацией гетерограниц (110). Здесь  $M$  и  $N$  — числа монослоев в AlAs и твердом растворе соответственно. Эти системы, в отличие от структур с границами (001) и (111), к настоящему моменту времени теоретически мало изучены. В работе [3] изучалась симметрия состояний дефектов в СР с ориентациями слоев (001), (110) и (111). В [4,5] исследовались электронные состояния в квантовых ямах GaAs (110). В [6] исследовались оптические свойства СР GaAs/AlAs (110). Насколько нам известно, СР с осью роста  $[110]$  и достаточно большим периодом, в которых определяющей оказывается роль  $X$ -электронов, ранее не изучались.

Обсудим симметрию СР  $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$  (110). В силу близости постоянных решетки  $a$  кристаллов AlAs и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  будем считать их одинаковыми и пренебрегать возникающими в СР напряжениями, обусловленными их реальным различием. Каждая атомная плоскость, перпендикулярная оси роста, содержит атомы аниона и атомы катиона. Расстояние между соседними атомными плоскостями равно  $a/2\sqrt{2}$ . Атомные плоскости можно пронумеровать по мере их удаления от некоторой плоскости, принятой за нулевую. Тогда появятся четные и нечетные по номеру плоскости. Расположение атомов в четных (или

нечетных) плоскостях идентично. Расположение атомов в нечетных плоскостях относительно четных сдвинуто на некоторый вектор в плоскости (110). Поэтому симметрия СР зависит от чисел  $M$  и  $N$ . Рассмотрим сначала трансляционную симметрию. Все возможные СР относятся к ромбической сингонии. В случае четной суммы  $M+N$  элементарную ячейку СР удобно выбирать в виде прямоугольного параллелепипеда, построенного на векторах  $A_1 = (a/2)(1, -1, 0)$ ,  $A_2 = (M+N)(a/2)(1, 1, 0)$ ,  $A_3 = a(0, 0, 1)$ . Такая решетка является простой и обозначается символом  $\Gamma_0$ . В случае нечетной суммы  $M+N$  векторы  $A_1, A_3$  сохраняются, а вектор  $A_2$  можно выбрать в виде  $A_2 = (M+N-1)(a/2)(1, 1, 0) + (a/2)(1, 0, 1)$ . Соответствующая решетка является объемно-центрированной и обозначается символом  $\Gamma_0^v$ . Зона Бриллюэна для решетки  $\Gamma_0$  достаточно проста — представляет собой прямоугольный параллелепипед. Зона Бриллюэна для решетки  $\Gamma_0^v$  изображена на рис. 1. Рассмотрим далее точечную симметрию СР. В случае, когда имеется слой материала, содержащий нечетное число молекулярных слоев (одно или оба числа  $M$  и  $N$  нечетны), можно поместить начало отсчета в один из атомов на средней

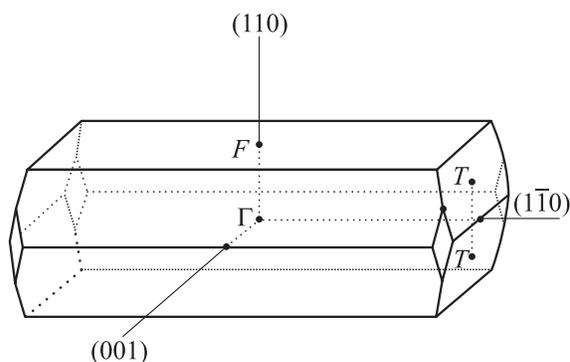


Рис. 1. Зона Бриллюэна сверхрешетки  $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})_N$  (110),  $(M+N)$  — нечетное число.

<sup>¶</sup> E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru

атомной плоскости в таком слое. В этом случае СР симметрична относительно поворота на 180° вокруг оси [001] и относительно отражений в плоскостях (110) и (110). Соответствующие пространственные группы симметрии являются симморфными ( $C_{2v}^1$  — в случае нечетных как  $M$ , так и  $N$ ,  $C_{2v}^{20}$  — в случае нечетного  $M(N)$  и четного  $N(M)$ ). Если оба слоя содержат четное число монослоев, то удобно выбирать начало отсчета в середине одного из слоев между двумя атомными плоскостями. В этом случае СР симметрична относительно отражения в плоскости (110), но поворот на 180° и отражение в плоскости (110) должны сопровождаться нецелыми трансляциями, чтобы при этой операции СР совпала сама с собой. Соответствующая пространственная группа является несимморфной, она обозначается символом  $C_{2v}^7$  [7].

## 2. Модели электронного рассеяния на гетерогранице

Электронные состояния в СР мы исследовали в приближении разрывного на гетерограницах потенциала. В отличие от структур с ориентациями (001) и (111) [1,2], здесь гетерограницы выбраны посередине между атомными слоями. Расчет проводился методом матрицы рассеяния, комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Подробно методика расчета приведена в работах [1,2]. В рамках приближения огибающих функций для описания электронных состояний в данных структурах нами разработаны соответствующие приближенные модели. Они кратко обсуждаются далее. Более подробно обоснование предложенных моделей будет проведено в отдельной публикации.

### 2.1. $X^X - X^Y$ -модель

В зависимости от значения параллельной гетерограницам компоненты волнового вектора  $k_{\parallel}$  электронные минизоны формируются из различных долин исходных компонентов.

В случае  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$  существуют две  $X$ -долины с нормальными к гетерогранице компонентами волнового вектора  $k_{\perp}^X = (2\pi/a)(1/2, 1/2, 0)$  ( $\mathbf{k} = (2\pi/a)(100)$ ,  $X^X$ -долина), и  $k_{\perp}^Y = (2\pi/a)(-1/2, -1/2, 0)$  ( $\mathbf{k} = (2\pi/a)(0\bar{1}0)$ ,  $X^Y$ -долина). Точки  $X^X$  и  $X^Y$  в случае четного числа монослоев  $M + N$  попадают в одну и ту же точку на границе зоны Бриллюэна, и в разные точки звезды  $T$  (см. рис. 1) — в случае нечетного числа монослоев. При данном  $k_{\parallel}$  в AlAs существуют две  $X$ -ямы ( $X^X$  и  $X^Y$ ), в Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As — два  $X$ -барьера, и возможно  $X^X - X^Y$ -смешивание состояний.

Наши исследования показали, что для случая  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$  можно ограничиться 4-долинной моделью, в которой волновая функция для каждой

из сред может быть представлена в виде

$$\Psi = F_{X1}^X |X_1^X\rangle + F_{X3}^X |X_3^X\rangle + F_{X1}^Y |X_1^Y\rangle + F_{X3}^Y |X_3^Y\rangle + \chi, \quad (1)$$

где  $|X_1^X\rangle, |X_1^Y\rangle, |X_3^X\rangle, |X_3^Y\rangle$  — вещественные волновые функции уровней  $X_1$  и  $X_3$  в точках  $X^X$  и  $X^Y$ ;  $F$  — огибающие функции для соответствующих состояний. Условия сшивания на гетерограницах находятся именно для этих функций и их нормальных производных. Учет в условиях сшивания искомой волновой функции вкладов, связанных с 4 долинами, однако, не означает, что в разложении (1) должно быть представлено только 4 слагаемых. В (1) может присутствовать и более 4 членов, но только 4 огибающих функции могут считаться независимыми. Учет остальных вкладов, описываемых функцией  $\chi$  в (1), необходим для более точного определения энергетического спектра и волновых функций.

Найдено, что огибающие функции  $F$  и их нормальные производные  $F'$  на гетерограницах удовлетворяют условиям сшивания:

$$\tilde{\mathbf{F}}^A = \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{F}}^B, \quad (2)$$

где индекс  $A$  соответствует AlAs,  $B$  — твердому раствору;  $\tilde{\mathbf{F}}^A, \tilde{\mathbf{F}}^B$  — векторы-столбцы с восемью компонентами:  $(F_{X1}^X, F_{X3}^X, F_{X1}^Y, F_{X3}^Y, (F_{X1}^X)', (F_{X3}^X)', (F_{X1}^Y)', (F_{X3}^Y)')$ ;  $\tilde{\mathbf{T}}$  — матрица сшивания размерности  $(8 \times 8)$ . Из-за симметрии задачи систему из 8 уравнений (2) можно свести к двум несвязанным системам из 4 уравнений. Для этого составим симметричные и антисимметричные линейные комбинации огибающих и их производных и запишем условия сшивания для этих функций. В результате (2) преобразуется к виду

$$\mathbf{F}^A = \mathbf{T}\mathbf{F}^B, \quad (3)$$

где  $\mathbf{F}^A, \mathbf{F}^B$  — векторы-столбцы

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( F_{X1}^X + F_{X1}^Y, F_{X3}^X + F_{X3}^Y, (F_{X1}^X + F_{X1}^Y)', (F_{X3}^X + F_{X3}^Y)', F_{X1}^X - F_{X1}^Y, F_{X3}^X - F_{X3}^Y, (F_{X1}^X - F_{X1}^Y)', (F_{X3}^X - F_{X3}^Y)' \right); \quad (4)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_1 \oplus \mathbf{T}_2. \quad (5)$$

Матрицы размерности  $(4 \times 4)$   $\mathbf{T}_1$  и  $\mathbf{T}_2$  имеют вид

$$\mathbf{T}_{1(2)} = x\mathbf{E} + (1-x)\mathbf{B}_{1(2)}, \quad (6)$$

где  $x$  характеризует состав твердого раствора,  $\mathbf{E}$  — единичная матрица размерности  $(4 \times 4)$ , а матрицы  $\mathbf{B}_{1(2)}$ , определенные согласно методике [1,2], равны

$$\mathbf{B}_{1(2)} = \begin{pmatrix} 0.9715 & \mp 0.0109 & \mp 0.0073 & 0.0033 \\ \mp 0.0447 & 1.0236 & -0.0045 & \mp 0.0059 \\ \pm 0.1268 & -0.0678 & 1.0579 & \pm 0.0486 \\ -0.1761 & \pm 0.2938 & \mp 0.0039 & 1.0630 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Верхний знак в (7) относится к матрице  $\mathbf{B}_1$ , нижний — к  $\mathbf{B}_2$ . Отметим, что матричные элементы,

связывающие огибающие с производными огибающих, имеют размерность. Численные значения в (7) приведены при условии, что единицей длины является постоянная решетки объемного материала. Базисные блоховские функции объемных материалов определены при условии, что начало отсчета координат находится на атоме As, и выбраны вещественными. Это приводит к тому, что элементы матриц  $\mathbf{V}_{1(2)}$  также оказываются вещественными. Определенные на избранной границе (с номером  $n$ ) матрицы  $\mathbf{T}_1$  и  $\mathbf{T}_2$  при переходе к другой гетерогранице (с номером  $m$ ) не меняются, если число монослоев  $K$  между ними четное, и  $\mathbf{T}_1$  переходит в  $\mathbf{T}_2$  (и наоборот), если  $K$  — нечетное. Формально это изменение матриц сшивания можно описать соотношением  $\mathbf{T}(m) = \mathbf{U}^{-1}(K)\mathbf{T}(n)\mathbf{U}(K)$ , где

$$\mathbf{U}(K) = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{E} \\ -\mathbf{E} & 0 \end{pmatrix}^K, \quad (8)$$

$\mathbf{E}$  — единичная матрица четвертого порядка.

Для проведения численных расчетов условия сшивания для огибающих необходимо дополнить моделью для определения энергетического спектра и волновых функций объемных материалов. При решении уравнения Шредингера в каждом из слоев можно отдельно рассматривать состояния, связанные с точками  $X^X$  и  $X^Y$ . В окрестности точки  $X^{X(Y)}$  мы ищем волновую функцию в виде разложения по волновым функциям  $X_1^{X(Y)}$ ,  $X_3^{X(Y)}$ -состояний зоны проводимости и двум функциям  $X_5^{X(Y)}$ -состояний валентной зоны. При подстановке данных разложений в уравнение Шредингера для  $X^{X(Y)}$ -долин получаем систему линейных уравнений относительно коэффициентов  $D$  этого разложения:

$$\begin{pmatrix} E_{X1} + E_0 w^2 - E & -iE_0 \cdot R_1^X w & iE_0 \cdot R_2^X w & 0 \\ iE_0 \cdot R_1^X w & E_{X3} + E_0 w^2 - E & 0 & iE_0 \cdot R_3^X w \\ -iE_0 \cdot R_2^X w & 0 & E_{X5} + E_0 w^2 - E & 0 \\ 0 & -iE_0 \cdot R_3^X w & 0 & E_{X5} + E_0 w^2 - E \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} D_1 \\ D_3 \\ D_{5y(x)} \\ D_{5z} \end{pmatrix} = 0. \quad (9)$$

Здесь  $w = (k_{\perp} - k_{\perp}^{X(Y)})a$ ,  $E_0 = \hbar^2/2m_0a^2$ ,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $m_0$  — масса покоя свободного электрона;

$$R_1^X = i\langle X_1 | P_X | X_3 \rangle a \sqrt{2}/\hbar, \quad R_2^X = -i\langle X_1 | P_Y | X_{5Y} \rangle a \sqrt{2}/\hbar,$$

$$R_3^X = -i\langle X_3 | P_Z | X_{5Z} \rangle a \sqrt{2}/\hbar.$$

Необходимые для расчета значения энергий состояний  $X_1$ ,  $X_3$  и  $X_5$ , а также матричные элементы  $\langle X_i | P_a | X_j \rangle$  оператора импульса для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  при различных  $x$  определены методом псевдопотенциала и приведены в [2]. Отметим, что система уравнений (9) одинакова для долин  $X^Y$  и  $X^X$ , поскольку мы рассматриваем случай фиксированного значения  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$ .

Из условий разрешимости системы алгебраических уравнений (9) находятся корни  $w_j(E)$ . При этом учитываются не все полученные корни, а только те, которые согласуются с условиями применимости уравнений (9). Таких корней оказывается 4 для каждой системы уравнений. Выбранные таким образом, корни  $w_j(E)$  оказываются очень близкими к найденным при изучении комплексной зонной структуры методом псевдопотенциала. Огибающие функций  $X^X$  и  $X^Y$  имеют вид линейной комбинации частных решений  $D_i^{X(Y)}(j) \exp(iw_j y'/a\sqrt{2})$ , где  $y' = (x+y)/\sqrt{2}$ . Волновые числа  $w_j$  для обеих долин одинаковы. В итоге в каждом слое общее решение (1) зависит от 8 произвольных коэффициентов.

## 2.2. $\Gamma$ - $X^Z$ -модель

Для  $k_{\parallel} = 0$  существует  $\Gamma$ -состояние с  $k_{\perp} = 0$  и состояние с  $k_{\perp}^Z = (2\pi/a)(110)$ . Ясно, что последнее с точностью до вектора обратной решетки  $\mathbf{b} = (2\pi/a)(\bar{1}\bar{1}1)$  эквивалентно  $X^Z$ -состоянию. При данном  $k_{\parallel}$  в AlAs существуют  $X$ -ямы и  $\Gamma$ -барьеры, в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  —  $\Gamma$ -ямы и  $X$ -барьеры, и возможно  $\Gamma$ - $X$ -смешивание состояний на гетерограницах. Для четного числа монослоев в периоде CP точки  $\Gamma$  и  $X^Z$  зоны Бриллюэна сфалерита сворачиваются в центр зоны Бриллюэна CP, в случае нечетного числа монослоев точка  $X^Z$  попадает на границу зоны Бриллюэна (точка  $F$ ).

Хорошим приближением для описания электронных состояний при  $k_{\parallel} = 0$  является 3-долинная модель, в которой волновая функция для любой из сред записывается в виде

$$\Psi = F_1^{\Gamma} |\Gamma_1\rangle + F_{X1}^Z |X_1^Z\rangle + F_{X3}^Z |X_3^Z\rangle + \chi, \quad (10)$$

где  $|\Gamma_1\rangle$ ,  $|X_1^Z\rangle$ ,  $|X_3^Z\rangle$  — волновые функции состояний  $\Gamma_1$ ,  $X_1$ ,  $X_3$ ,  $F$  — огибающие функции для соответствующих состояний; функция  $\chi$  —

$$\chi = F_{5x}^Z |X_{5x}^Z\rangle + F_{5y}^Z |X_{5y}^Z\rangle + F_{15}^{\Gamma} |\Gamma_{15}^{\Gamma}\rangle + F_{15c}^{\Gamma} |\Gamma_{15c}^{\Gamma}\rangle \quad (11)$$

— описывает вклад  $X_5$ -состояний валентной зоны и ближайших  $\Gamma_{15}$ -состояний (под последним понимаются комбинации  $|\Gamma_{15}\rangle = (1/\sqrt{2})(|\Gamma_{15x}\rangle + |\Gamma_{15y}\rangle)$ ).

По-прежнему огибающие функции  $F$  и их нормальные производные  $F'$  на гетерограницах удовлетворяют условиям сшивания вида (3); в данном случае  $\mathbf{F}$  — векторы-столбцы с 6 компонентами:

$$\mathbf{F} = (F_{X1}^Z, F_{X3}^Z, (F_{\Gamma1}^Z)', (F_{X1}^Z)', (F_{X3}^Z)', F_{\Gamma1})', \quad (12)$$

Матрица сшивания  $\mathbf{T}$  имеет размерность  $(6 \times 6)$  и, как в предыдущем случае, может быть представлена в виде

$$\mathbf{T} = x\mathbf{E} + (1-x)\mathbf{B}. \quad (13)$$

матрица **B**, определенная также согласно методике [1,2], в данном случае имеет вид (в той же системе единиц)

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0.9637 & 0.0064 & 0.0373 & 0 & 0 & 0 \\ 0.0005 & 0.9900 & 0.0299 & 0 & 0 & 0 \\ 0.0372 & -0.0594 & 0.9348 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.14477 & 0.1454 & 0.8011 \\ 0 & 0 & 0 & -0.0585 & 0.9524 & -0.8218 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0252 & 0.0251 & 0.8020 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

В матрице **T** при переходе к гетерогранице, отстоящей на нечетное число монослоев, изменяют знак элементы, описывающие  $\Gamma$ - $X^Z$ -взаимодействие.

Для отыскания огибающих функций в долинах  $\Gamma$  и  $X^Z$  должны быть записаны системы уравнений типа (9). Система уравнений для  $X^Z$ -долины очевидным образом отличается от системы (9):

$$\begin{pmatrix} E_{X1} + E_0 w^2 - E & 0 & iE_0 \cdot R_2^X w & iE_0 \cdot R_2^X w \\ 0 & E_{X3} + E_0 w^2 - E & iE_0 \cdot R_3^X w & iE_0 \cdot R_3^X w \\ -iE_0 \cdot R_2^X w & -iE_0 \cdot R_3^X w & E_{X5} + E_0 w^2 - E & 0 \\ -iE_0 \cdot R_2^X w & -iE_0 \cdot R_3^X w & 0 & E_{X5} + E_0 w^2 - E \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} D_{X1} \\ D_{X3} \\ D_{X5x} \\ D_{X5y} \end{pmatrix} = 0. \quad (15)$$

Здесь  $w = (k_{\perp} - k_{\perp}^Z)a$ , остальные обозначения — как в (9).

Для  $\Gamma$ -долины мы использовали систему уравнений, позволяющую достаточно точно описать непараболичность энергетического спектра. Мы учли прямое взаимодействие  $\Gamma_1$ -уровня зоны проводимости с ближайшими  $\Gamma_{15}$ -уровнями в валентной зоне и зоне проводимости. В результате получили систему из трех уравнений:

$$\begin{pmatrix} E_{\Gamma_1} + E_0 w^2 - E & iE_0 \cdot R_1^{\Gamma} w & -iE_0 \cdot R_2^{\Gamma} w \\ -iE_0 \cdot R_1^{\Gamma} w & E_{\Gamma_{15}^V} + E_0 \lambda_V w^2 - E & 0 \\ iE_0 \cdot R_2^{\Gamma} w & 0 & E_{\Gamma_{15}^C} + E_0 \lambda_C w^2 - E \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} D_{\Gamma_1} \\ D_{\Gamma_{15}^V} \\ D_{\Gamma_{15}^C} \end{pmatrix} = 0. \quad (16)$$

Здесь  $w = k_{\perp} a$ ,

$$\lambda_V = 1 + \frac{4E_0 |R_3^{\Gamma}|^2}{E_{\Gamma_{15}^V} - E}, \quad \lambda_C = 1 + \frac{4E_0 |R_3^{\Gamma}|^2}{E_{\Gamma_{15}^C} - E}$$

учитывают вклад прямого взаимодействия  $\Gamma_{15}^C - \Gamma_{15}^V$  в эффективные массы;

$$R_1^{\Gamma} = -i \langle \Gamma_1 | P_X | \Gamma_{15}^V \rangle a \sqrt{2} / \hbar, \quad R_2^{\Gamma} = i \langle \Gamma_1 | P_X | \Gamma_{15}^C \rangle a \sqrt{2} / \hbar, \\ R_3^{\Gamma} = -i \langle \Gamma_{15}^C | P_X | \Gamma_{15}^V \rangle a / \hbar.$$

Матричные элементы оператора импульса, как и энергии  $E_{\Gamma_1}$ ,  $E_{\Gamma_{15}^V}$ ,  $E_{\Gamma_{15}^C}$ , определяются методом псевдопотенциала. Из условий разрешимости систем алгебраических уравнений (15), (16) находятся согласующиеся с условиями

применимости уравнений (15), (16) корни  $w_j(E)$ . Таких корней оказывается 4, если мы рассматриваем огибающие  $X$ -функций, и 2 — в случае  $\Gamma$ -функций. Выбранные таким образом корни используются при построении общего решения для огибающих функций в виде линейной комбинации частных решений  $D_i^{\Gamma(Z)}(j) \exp(iw_j y' / a \sqrt{2})$ . Ясно, что волновые числа  $w_j$  здесь различны для долин  $\Gamma$  и  $X^Z$ .

Таким образом, представленные в настоящем разделе модели позволяют исследовать различные квантовые свойства наноструктур на основе AlAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Отметим, что проведенные нами расчеты с использованием метода псевдопотенциала, и вычисления, использующие представленные выше модели, дают практически одинаковые результаты.

### 3. Анализ электронных свойств сверхрешеток

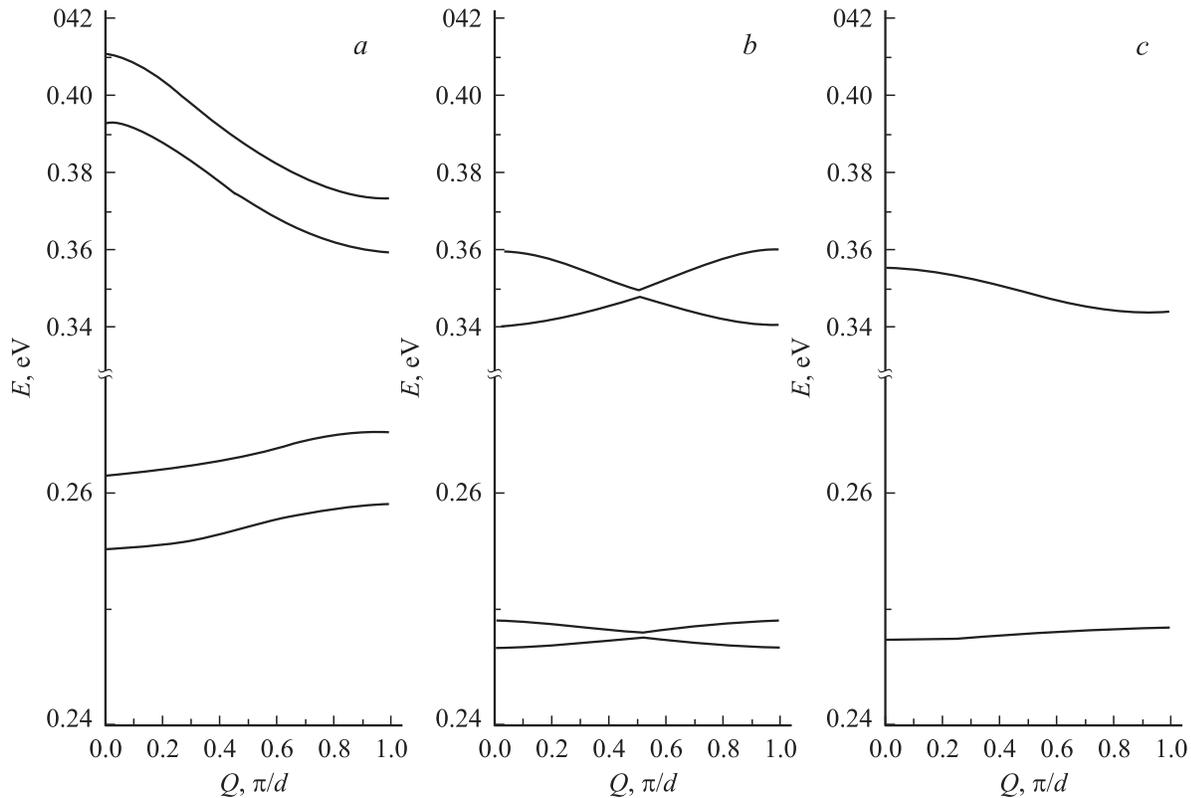
Мы исследовали случаи, когда резонансные энергии  $\Gamma$ -состояний в Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As оказываются по энергии выше  $X$ -долин в AlAs. Это достигается выбором  $x$  и  $N$  и позволяет исключить влияние  $\Gamma$ -электронов на фотоэлектрические свойства. Свойства таких СР в основном определяются  $X$ -электронами.

В работе мы приводим результаты расчетов для структур (AlAs)<sub>M</sub>(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As)<sub>N</sub> (110), обозначаемых далее  $(M, N)$ , где  $M = 13, 16$ ,  $N = 13, 16$  при значении параметра  $x = 0.3$ . Пусть  $d_1$  — толщина слоя AlAs,  $d_2$  — толщина слоя твердого раствора. Тогда период СР в направлении роста есть  $d = d_1 + d_2$ . В соответствии с теоремой Блоха при сдвиге на целый вектор СР (в основном вдоль оси роста на период  $d = d_1 + d_2$ ) решение должно изменяться на фазовый множитель. Запишем это условие в виде

$$\mathbf{F}^{A(B)}(y') = e^{-iQd} \mathbf{U}(M+N) \mathbf{F}^{A(B)}(y' + d), \quad (17)$$

где  $Q$  — компонента волнового вектора СР в направлении [110]. В случае  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$   $Q$  отсчитывается от точки  $T$ , в которую сворачивается точка  $X^Y$ , вектор  $\mathbf{F}$  определяется (4), матрица  $\mathbf{U}$  — формулой (8). В случае  $k_{\parallel} = 0$   $Q$  отсчитывается от точки  $\Gamma$ ,  $\mathbf{F}$  имеет вид (12), матрица  $\mathbf{U}$  — диагональная матрица 6-го порядка, отличающаяся от единичной четырьмя членами на главной диагонали (элементы 1, 2, 4, 5), которые равны  $(-1)^{M+N}$ .

Рассмотрим сначала случай  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$ . Как уже отмечалось, в каждом слое общее решение (1) зависит от 8 произвольных коэффициентов. Поскольку (17) справедливо для любых  $y'$ , из этого соотношения следует 8 линейных уравнений, связывающих 16 неизвестных коэффициентов. Столько же уравнений для тех же коэффициентов можно получить, используя матрицу рассеяния, связывающую состояния на противоположных границах элементарной ячейки СР в направлении (110). Из условия

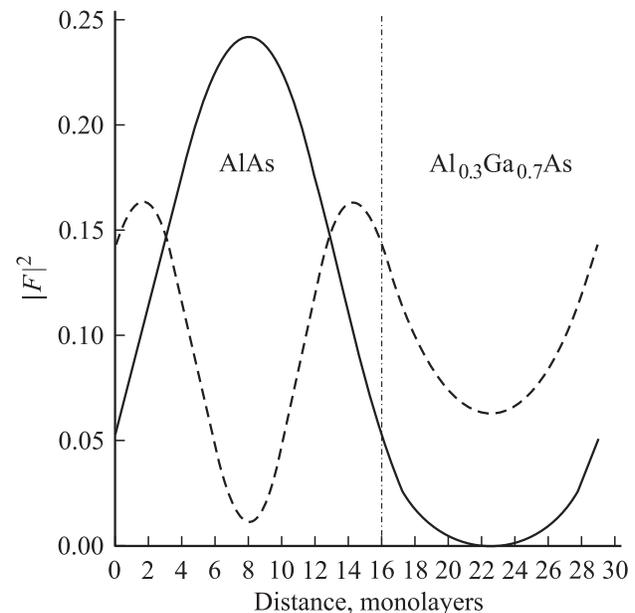


**Рис. 2.** Минизонный спектр в сверхрешетках  $(\text{AlAs})_M(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_N$  (110) — зависимости энергии  $E$  от волнового вектора  $Q$  при  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$ . Числа  $(M, N)$ :  $a$  — (13,13),  $b$  — (16,13),  $c$  — (16,16). Энергии минизон  $E$  отсчитываются от дна зоны проводимости GaAs.

разрешимости данных систем уравнений определяется спектр допустимых энергий. Затем для каждого слоя строятся огибающие функции и находится общее решение задачи в виде (1). Подробно данная методика изложена в нашей работе [1].

На рис. 2 для СР (13,13), (16,13) и (16,16) показаны энергетические спектры для четырех нижних состояний в зависимости от волнового вектора  $Q$  СР. Отметим, что энергетическое положение минизон хорошо коррелирует с уровнями соответствующих квантовых ям. Обратим внимание на качественно различный ход дисперсионных кривых в представленных трех случаях. В случае СР (13,13) пространственной группой ее симметрии является  $C_{2v}^1$ , и в точках на границе зоны Бриллюэна вдоль линии  $(2\pi/a)(0.5 + \kappa, -0.5 + \kappa, 0)$ , где  $|\kappa| \leq 0.5(N + M)^{-1}$ , все малые копредставления одномерны [7]. Поэтому каждая из минизон на рис. 2,  $a$  не вырождена. В случае СР (16,16) группа симметрии есть  $C_{2v}^7$ , ее малые копредставления вдоль этой линии двумерны. Соответственно минизоны оказываются двукратно вырожденными (рис. 2,  $c$ ). Наконец, в случае СР (16,13) в точках вдоль той же линии, но проходящей теперь внутри зоны Бриллюэна и соединяющей две неэквивалентные точки звезды  $T$  (см. рис. 1), все малые копредставления одномерны (пространственная группа СР  $C_{2v}^{20}$ ) и минизоны не вырождены. Видно, что рас-

щепления минизон невелики (порядка одной–двух сотых долей электронвольта) как для первой, так и для второй пары минизон.



**Рис. 3.** Распределение полной электронной плотности  $|F|^2$  по периоду сверхрешетки  $(\text{AlAs})_{16}(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})_{13}$  (110). Сплошная линия — 1-я минизона, штриховая — 3-я минизона.

Значения оптического параметра  $\Sigma$  при разных направлениях падения световой волны

(M, N)	Переход	Q = 0		Q = $\pi/2d$		Q = $\pi/d$	
		нормальное	боковое	нормальное	боковое	нормальное	боковое
(13,13)	1-3	0	0.348	0	0.436	0	0.573
	1-4	0.114	0	0.126	0	0.158	0
	2-3	0.129	0	0.14	0	0.169	0
	2-4	0	0.388	0	0.457	0	0.589
(13,16)	1-3	0.021	0.314	0	0.451	0.021	0.314
	1-4	0.111	0.137	0.126	0	0.111	0.137
	2-3	0.131	0.207	0.142	0	0.131	0.206
	2-4	0.019	0.291	0	0.457	0.019	0.291
(16,13)	1-3	0	0	0.113	0.002	0	0
	1-4	0.107	0.332	0.001	0.385	0.107	0.332
	2-3	0.137	0.478	0.004	0.401	0.137	0.478
	2-4	0	0	0.124	0.014	0	0
(16,16)	s1-s2	0	0.372	0	0.406	0	0.447
	s1-a2	0.117	0	0.122	0	0.130	0
	a1-s2	0.117	0	0.122	0	0.130	0
	a1-a2	0	0.372	0	0.406	0	0.447

На рис. 3 для структуры (16,13) представлена усредненная по элементарной ячейке объемного кристалла полная электронная плотность при  $Q = 0$  для 1-го и 3-го нижних уровней; похожие зависимости имеют электронные плотности для 2-го и 4-го уровней соответственно. Видно, что электронная плотность в основном сосредоточена в слое AlAs. Аналогичное поведение наблюдается и для большинства других исследованных структур. На границе слоев наблюдается небольшой разрыв средней электронной плотности, что связано с различием блоховских волновых функций в AlAs и Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Для всех вышеперечисленных СР был проделан расчет величин  $\Sigma$ , характеризующих способность СР к поглощению инфракрасного излучения,

$$\Sigma = |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{12}|^2.$$

Здесь  $\mathbf{P}_{12} = \langle \Psi_1(\mathbf{r}) | \mathbf{P} | \Psi_2(\mathbf{r}) \rangle$  — матричный элемент импульса между волновыми функциями первой и второй пар минизон,  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации световой волны, выбранный так, чтобы значение  $\Sigma$  было максимальным. Расчет показал, что структуры (AlAs)<sub>M</sub>(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As)<sub>N</sub> (110) способны достаточно эффективно поглощать нормально падающее излучение (см. таблицу). В таблице индексы, расположенные во второй колонке, нумеруют функции минизон по мере увеличения энергии. В вырожденном случае (16,16) s(a) означает симметричную (антисимметричную) относительно отражения в плоскости (1 $\bar{1}$ 0) функцию, а число указывает на номер минизоны. Отметим, что равные нулю значения величины  $\Sigma$  для структур с четным числом монослоев (13,13) и (16,16) обусловлены симметрией волновых функций. Для этих структур, как для нормального, так и для бокового падения света,  $\Sigma$  монотонно возрастает при увеличении  $Q$ . Для структур (13,16)

и (16,13) зависимость  $\Sigma$  от  $Q$  разная для различных переходов; кроме того, приведенные в таблице значения  $\Sigma = 0$  для этих структур просто означают, что  $\Sigma < 10^{-3}$ . Из полученных результатов видно, что величина  $\Sigma$  для

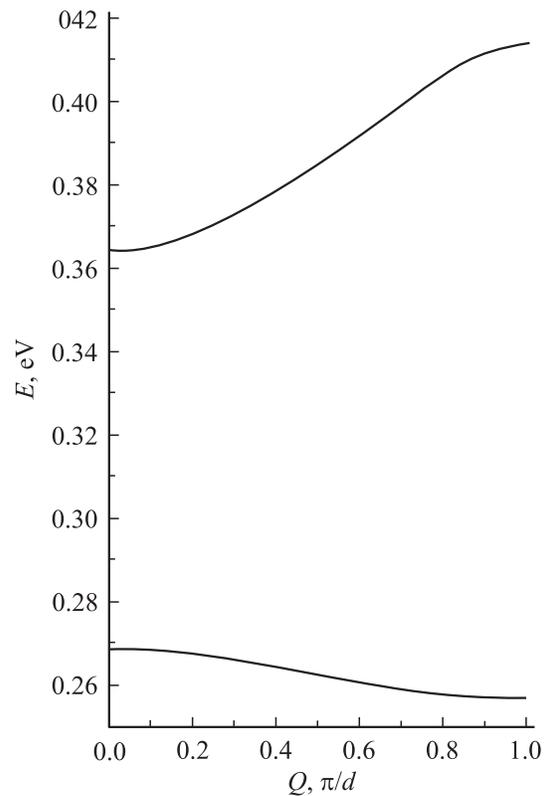


Рис. 4. Минизонный спектр в сверхрешетках (AlAs)<sub>16</sub>(Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As)<sub>13</sub> (110) в зависимости от волнового вектора  $Q$  при  $k_{\parallel} = 0$ . Энергии минизон  $E$  отсчитываются от дна зоны проводимости GaAs.

нормального падения в целом в 3–4 раза меньше этой величины при боковом падении света на структуру. Полученные результаты являются вполне приемлемыми, поскольку нормальное падение света способно задействовать площадь облучаемой поверхности, на несколько порядков большую, чем при боковом падении.

Кратко рассмотрим результаты для  $k_{\parallel} = 0$ . В отличие от предыдущего случая, здесь в энергетическом спектре нет принципиальной зависимости от выбора значений  $M$  и  $N$ . Для примера спектр СР с  $M = 16$ ,  $N = 13$  и  $x = 0.3$  изображен на рис. 4. Компонента волнового вектора СР в направлении  $[110]$   $Q$  в этом случае отсчитывается от точки  $\Gamma$ . Обратим внимание на то, что в данном случае соответствующие минизоны расположены по энергии примерно на 0.01 эВ выше, чем при  $k_{\parallel} = (2\pi/a)(1/2, -1/2, 0)$ . Это коррелирует с различием значений эффективных масс долин  $X^{X(Y)}$  и  $X^Z$  в направлении  $(110)$ . Расчет показал, что электронная плотность в основном сосредоточена в слоях AlAs. Найдено, что величина  $\Sigma$  для переходов из 1-й минизоны во 2-ю в случае нормального падения света при всех  $Q$  значительно меньше этой величины при боковом падении света на структуру.

#### 4. Заключение

В работе исследован энергетический спектр электронов в СР  $(AlAs)_M(Al_xGa_{1-x}As)_N$  с ориентацией гетерограниц  $(110)$  и составом твердого раствора, соответствующим  $x = 0.3$ . В этом случае главную роль играют электроны  $X$ -долин, поскольку  $\Gamma$ -состояния располагаются выше по энергии. Эти  $X$ -долины в общем случае оказываются в разных точках зоны Бриллюэна СР. Найдены энергии нижних минизон и проанализировано происхождение соответствующих состояний. Показано, что электронная плотность в нижних минизонах сосредоточена в основном в слоях AlAs. Определены квадраты соответствующих оптических матричных элементов и показано, что, подобно аналогичным СР с ориентацией гетерограниц  $(111)$ , изученные СР способны достаточно эффективно поглощать нормально падающее излучение. При этом оказалось, что такое поглощение характерно для состояний, „генетически“ связанных с  $X^{X(Y)}$ -долинами. В то же время для состояний, связанных с  $X^Z$ -долиной, поглощение излучения, падающего на СР нормально, практически запрещено. Отмечено, что минизоны, связанные с  $X^{X(Y)}$ -долинами, по энергии оказываются ниже минизон, связанных с  $\Gamma$ - $X^Z$ -долинами. Поэтому в легированных СР первые будут проявлять себя более ярко. Таким образом СР  $(AlAs)_M(Al_xGa_{1-x}As)_N$ , выращенные в направлении  $[110]$ , подобно СР с направлением роста  $[111]$  [1,2], могут представлять интерес в качестве структур для фотоприемников инфракрасного диапазона.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 02-02-17848.

#### Список литературы

- [1] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов. ФТП, **36**, 558 (2002).
- [2] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов. ФТП, **36**, 709 (2002).
- [3] P. Tronc, Yu.E. Kitaev, A.G. Panfilov, M.F. Limonov, G. Wang, V.P. Smirnov. Phys. Rev. B, **61**, 1999 (2000).
- [4] M. Yoshita, N. Kondo, H. Sakaki, M. Baba, H. Akiyama. Phys. Rev. B, **63**, 075305 (2001).
- [5] S. Nojima. Phys. Rev. B, **47**, 13 535 (1993).
- [6] U. Schmid, N.E. Christensen, M. Cardona, F. Luke, K. Ploog. Phys. Rev. B, **45**, 3546 (1992).
- [7] О.В. Ковалев. *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп* (М., Наука, 1986).

Редактор Л.В. Шаронова

#### The electron and optical properties of AlAs / $(Al_xGa_{1-x}As)$ (110) superlattices

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov, R.M. Egunov

Siberian Physical-Technical Institute  
at Tomsk State University,  
634050 Tomsk, Russia

**Abstract** Electron states in the conduction band of  $(110)$ -oriented  $(AlAs)_M(Al_xGa_{1-x}As)_N$  superlattices with different  $M$  and  $N$  are considered. It is shown that the electron properties of these structures in basic are determined by electrons of two pairs of valleys either  $\Gamma$ - $X^Z$  or  $X^X$ - $X^Y$ . The calculations are carried out using a model developed by us for the envelope-function matching at heterointerfaces. Miniband spectra, symmetries and localizations of the wave functions, as well as the probabilities of interminiband infrared absorption, are calculated and analyzed. It is shown that in the case of  $X^X$ - $X^Y$ -bundle of valleys the absorption probabilities may be high not only for a light wave polarized along the superlattice axis, but also for a light wave incident normally to the surface of the structure.