Краткие сообщения по физике № 12-1985 г.

УДК 539.21

ОДНОЗОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

А.П. Силин

Получена область параметров композиционных сверхрешеток типов I и III, в которой для их расчета справедливо однозонное приближение. Показано, что однозонное приближение не применимо для композиционных свехрешеток типа II.

Сверхрешетками называют твердотельные структуры, в которых помимо периодического потенциала кристаллической решетки имеется дополнительный одномерный потенциал, период которого значительно превышает постоянную решетки. Наличие такого потенциала существенно изменяет энергетический спектр системы, вследствие чего сверхрешетки приобретают ряд характерных свойств, которые отсутствуют у однородных материалов. Впервые такие системы были рассмотрены в работе /1/. Полупроводниковые сверхрешетки привлекают большое внимание своими уникальными оптическими и транспортными свойствами /2, 3/.

Полупроводники групп A_3B_5 и A_4B_6, из которых составлены сверхрешетки, могут иметь довольно узкие энергетические щели, поэтому для их расчетов нужно, вообще говоря, использовать многозонное приближение. В настоящей работе указана область параметров сверхрешеток, в которой для их расчета можно использовать однозонное приближение.

Для учета совместного влияния зоны проводимости и валентной зоны на спектр носителей тока использовалось уравнение типа Дирака /4/ для огибающих функций носителей тока в сверхрешетке в следующем виде /5/ (блоховские функции экстремумов зон и кейновские матричные элементы P в составляющих решетку полупроводниках считались одинаковыми):

$$\left\{\frac{1}{i}P\sum_{j=1}^{3}\begin{bmatrix}0 & \sigma_j\\ \sigma_j & 0\end{bmatrix}\frac{\partial}{\partial x_j}+\Delta(z)\begin{bmatrix}\hat{I}_2 & 0\\ 0 & -\hat{I}_2\end{bmatrix}+V(z)\hat{I}_4\right\}F(\vec{r})=EF(\vec{r}). \qquad (1)$$

Здесь σ_j – матрицы Паули; $x_1 = x$, $x_2 = y$; $x_3 = z$; z – ось сверхрешеток; $\hat{I}_n$ – n-мерная единичная матрица; $F(\vec{r})$ – 4-столбец огибающих функций; $2\Delta(z)$ – энергетическая щель; $V(z)$ – положение центра энергетической щели в точке z.

Отделив свободное движение носителей тока перпендикулярно оси сверхрешетки ($k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$) и совершив унитарное преобразование /5/, уравнение (1) можно преобразовать к уравнению типа Шредингера:

$$[\Delta(z) + V(z) - E]\,\psi(z) - \left(k_\perp + \frac{\partial}{\partial z}\right) \frac{P^2}{-\Delta(z) + V(z) - E}\left(k_\perp - \frac{\partial}{\partial z}\right) \times \psi(z) = 0. \tag{2}$$

Уравнение (2) справедливо при произвольном изменении $\Delta(z)$ и $V(z)$, в частности, для пилообразных сверхрешеток /6/ и легированных сверхрешеток /1, 2/. Ниже рассмотрим композиционные сверхрешетки, составленные из полупроводников I и II, когда

$$\Delta(z) = \begin{cases} \Delta_I, & 0 < z < d_I, \\ \Delta_{II}, & -d_{II} < z < 0 \end{cases} \qquad \Delta(z + d) = \Delta(z), \quad d = d_I + d_{II}, \tag{3}$$

$$V(z) = \begin{cases} V_I, & 0 < z < d_I, \\ V_{II}, & -d_{II} < z < 0 \end{cases} \qquad V(z + d) = V(z). \tag{4}$$

В этом случае из (2) получаем

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2}\,\psi(z) = (k_i^2 + k_\perp^2)\,\psi(z), \tag{5}$$

где

$$k_i^2 = [(E - V_i)^2 - \Delta_i^2]/P^2, \quad i = I, II. \tag{6}$$

Отметим, что в однозонном приближении уравнение Шредингера для носителей тока с эффективной массой m в сверхрешетке с потенциалом $\widetilde{\Delta}$ имеет вид, аналогичный (5), но k_i определяются следующими выражениями:

$$k_I^2 = 2mE/\hbar^2, \quad k_{II}^2 = -2m(\widetilde{\Delta} - E)/\hbar^2, \tag{7}$$

где I – яма, II – барьер.

Рассмотрим сверхрешетки типа I /2, 3/, наиболее исследованными из которых являются сверхрешетки GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$. В этих сверхрешетках минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны полупроводника I находятся в энергетической щели II. Выберем $V_I = -\Delta_I$, тогда $V_{II} = -[\Delta_I + (\Delta_v - \Delta_c)/2]$, $\Delta_{II} = \Delta_I + (\Delta_v + \Delta_c)/2$, где $\Delta_{c(v)} > 0$ – разность энергий дна зоны проводимости (потолка валентной зоны) полупроводников, составляющих сверхрешетку. При этом

$$k_I^2 = \left(\frac{2m_I E}{\hbar^2}\right)\left(1 + \frac{E}{2\Delta_I}\right), \quad k_{II}^2 = -\frac{2m_I(\Delta_c - E)}{\hbar^2}\left(1 + \frac{\Delta_v + E}{2\Delta_I}\right),$$

следовательно, при $(E + \Delta_v)/2\Delta_I \ll 1$ уравнение (5) эквивалентно однозонному уравнению Шредингера для электрона с эффективной массой $m_I = \Delta_I\hbar^2/P^2$ в сверхрешетке с потенциалом Δ_c.

Аналогично, выбирая $V_I = \Delta_I$, можно показать, что при $(\Delta_c - E)/2\Delta_I \ll 1$ уравнение (5) эквивалентно уравнению Шредингера для дырок ($E < 0$) с массой m_I в сверхрешетке с потенциалом Δ_v.

Рассмотрим сверхрешетки типа III ($In_xGa_{1-x}As$-$GaSb_{1-y}As_y$, $x \approx y \approx 1 - x$), у которых минимум зоны проводимости полупроводника I расположен в энергетической щели полупроводника II, а максимум валентной зоны полупроводника II – в энергетической щели I. Выберем $V_I = -\Delta_I$, тогда

$$k_I^2 = \frac{2m_I E}{\hbar^2}\left(1 + \frac{E}{2\Delta_I}\right), \quad k_{II}^2 = -\frac{2m_I(\Delta_c - E)}{\hbar^2}\left(1 - \frac{\Delta_v - E}{2\Delta_I}\right). \qquad (8)$$

При $E/2\Delta_I \ll 1$, $|\Delta_v - E|/2\Delta_I \ll 1$ уравнение (5) эквивалентно однозонному уравнению Шредингера для электрона с эффективной массой m_I в сверхрешетке с потенциалом Δ_c.

Аналогично, выбирая $V_{II} = \Delta_{II}$, можно показать, что при $|E|/2\Delta_{II} \ll 1$ и $|E + \Delta_c|/2\Delta_{II} \ll 1$ уравнение (5) эквивалентно однозонному уравнению Шредингера для дырки ($E < 0$) с эффективной массой $m_{II} = \Delta_{II}\hbar^2/P^2$ в сверхрешетке с потенциалом Δ_v.

Рассмотрим сверхрешетки типа II (InAs-GaSb), у которых минимум зоны проводимости полупроводника I расположен по энергии на Δ_{vc} ниже, чем максимум валентной зоны полупроводника II. Выберем $V_I = -\Delta_I$, тогда

$$k_I^2 = \frac{2m_I E}{\hbar^2}\left(1 + \frac{E}{2\Delta_I}\right), \quad k_{II}^2 = \frac{2m_{II}(\Delta_{cv} - E)}{\hbar^2}\left(1 + \frac{\Delta_{cv} - E}{2\Delta_{II}}\right).$$

Очевидно, что для сверхрешеток типа II ни при каких значениях параметров Δ_I, Δ_{II}, Δ_{cv} двухзонная модель (6), (8) не совпадает с однозонной (7) (k^2_{II} имеет противоположный знак).

Автор благодарен Л.В. Келдышу за обсуждение результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Келдыш Л.В., ФТТ, 4, 2265 (1962).
2. Ploog K., Döhler G.H. Adv. Phys., 32, 285 (1983).
3. Силин А.П. УФН, 147, № 3, 485 (1985).
4. Келдыш Л.В. ЖЭТФ, 45, 364 (1963).
5. de Dios Leyva M., Alvarez R.P., Gondar J.L. Phys. Stat. Sol. (b), 125, 221 (1984).
6. Лобаев А.Н., Силин А.П. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 1, 19 (1985).

Поступила в редакцию 18 июля 1985 г.