

Інститут фізики і хімії твердого тіла, Ужгородський національний університет, Ужгород

\*Інститут фізики, Жешувський університет, Жешув, Польща

## АНАЛІЗ ВПЛИВУ ПЕРЕХІДНОГО ШАРУ НА ЕНЕРГЕТИЧНІ СТАНИ КОРОТКОПЕРІОДНИХ НАДГРАТОК $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ .

Виходячи з першопринципних розрахунків рівноважного стану, оцінено ширину приінтерфейсної області у короткоперіодних надгратках  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ . Для розрахунку енергетичних станів досліджуваних гетероструктур, на базі одержаних результатів, запропоновано нову модель, що враховує наявність перехідного шару. Значення енергетичних проміжків між мінізонами, отримані при числовому моделюванні виявилися у доброму кількісному узгодженні з наявними експериментальними даними.

The width of the interface transition region in the short-period  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$  superlattices has been estimated on the basis of equilibrium state calculations from the first principles. The new model that accounts the transition region presence has been proposed for the energy states calculation in the heterostructures under investigation. Magnitudes of the energy distances between minibands obtained by numerical modeling are in good quantitative agreement with experimental ones.

Потреби сучасної електроніки щодо твердотільних джерел когерентного випромінення зі змінною довжиною хвилі, які працюють у видимій області спектра, роблять актуальними дослідження енергетичної структури таких розмірно-квантованих систем, як надгратки, що широко використовуються як матеріали активного середовища для лазерів. Відомо, що поява інтерфейсів у системі, які обмежують рух носіїв вздовж одного напрямку, зумовлює квантування енергетичного спектра, причому, у випадку надграток  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ , коли вихідні матеріали мають багатодолинну будову енергетичного спектра, квантування відбувається в декількох долинах, що може зумовити залежність типу переходів у надгратці від співвідношення товщин її шарів. Така можливість експериментально підтверджена у працях [1,2], де встановлено, що так звані асиметричні  $(2N=M)$  надгратки є прямозонними матеріалами, на відміну від симетричних  $(N=M)$  надграток, які виявляються непрямозонними. У прямозонних надгратках  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$  зафіксовано оптичне підсилення [3]. Це робить такі матеріали перспективними як активне середовище напівпровідникових лазерів.

Відомо, що у сучасній теоретичній фізиці досягнуті значні успіхи у розробці і застосуванні так званих першопринципних методів розрахунку фізичних властивостей матеріалів, що базуються на теорії функціоналу електронної густини [4,5].

Результати, які отримуються з використанням цих методів, добре узгоджуються з експериментальними даними щодо параметрів рівноважної структури кристалів і надграток, проте час розрахунку і необхідні розрахункові потужності сильно залежать від розмірів досліджуваної системи. Проте при використанні цих методів актуальне врахування додаткового потенціалу, зв'язаного з наявністю різних матеріалів у надкомірці. У зв'язку з цим, а також із тим, що надкомірка надгратки набагато більша за комірки звичайних об'ємних матеріалів і містить велику кількість атомів, залишається актуальною задача розробки моделей, які були б спроможні відтворювати принципові риси енергетичної структури гетеросистем.

Відомо, що чи не найбільш широко вживаним методом розрахунку енергетичних станів у гетеросистемах є метод ефективної маси. Можливість застосування цього наближення до гетеросистем з малою кількістю моношарів у періоді широко дискутувалася у літературі. На сучасному етапі розвитку цього методу, завдяки працям [6-10], його застосовність до опису енергетичних станів, навіть короткоперіодних над граток, можна вважати доведеною.

У нашій роботі ми використали розрахунки для дослідження на мікроскопічному рівні (як першопринципні) і на основі одержаної інформації

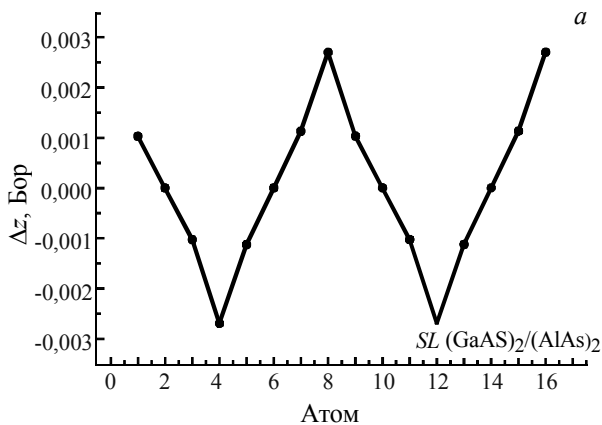
ції запропонували нову модель для розрахунку енергетичних станів носіїв у короткоперіодних надгратках (GaAs)<sub>N</sub>/(AlAs)<sub>M</sub>.

Для з'ясування розмірів перехідного шару, нами було проведено першопринципні розрахунки оптимальної геометрії надкомірок кількох короткоперіодних надграток (GaAs)<sub>N</sub>/(AlAs)<sub>M</sub>. Ми розрахували координати атомів у цих надгратках при релаксації структури лише вздовж напрямку росту надгратки з утриманням параметрів комірки у площині інтерфейсів. Такий тип релаксації здається найбільш наближеним до реальної картини, що реалізується при вирощуванні відносно тонкої надструктури на поверхні об'ємного шару GaAs, що виконує роль підкладки. Отримані в результаті величини зміщень атомів всередині надкомірки по відношенню до їх положень у повністю релаксованій системі дозволяють оцінити ширину перехідного шару, на довжині якого відбувається зміна матеріальних параметрів. Наведені результати одержані завдяки використанню коду *ABINIT* [5,10].

Наведені криві на рис. 1а,б ілюструють вищеказані зміщення для надграток (GaAs)<sub>2</sub>/(AlAs)<sub>2</sub> і (GaAs)<sub>5</sub>/(AlAs)<sub>5</sub> вздовж напрямку росту *z*.

Одержані результати дозволяють зробити висновок, що навіть у випадку ідеального, з композиційної точки зору, інтерфейсу існує перехідний шар ширина якого сягає кількох моношарів. Ці результати були використані нами при побудові моделі надгратки з просторово залежними матеріальними параметрами.

Зауважимо тут, що в нашому розгляді ми користувалися одновимірною однозонною моделлю, яка може бути описана рівнянням Шредінгера з узагальненим оператором кінетичної енергії у формі [11]:



$$-\frac{\hbar^2}{2} m^\alpha(z) \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m^{2\alpha+1}(z)} \frac{d}{dz} (m^\alpha(z) \Psi(z)) \right] + U(z) \Psi(z) = E \Psi(z), \quad (1)$$

де величина  $\alpha$  відіграє роль параметра моделі. Зауважимо, що  $\alpha$  впливає на граничні умови, які накладені на обвідну  $\Psi(z)$  і її похідну  $\Psi'(z)$  на гетероінтерфейсі.

При знаходженні енергетичного спектра носіїв у досліджуваних надгратках ми користувалися матричним методом [12,13], суть якого полягає у побудові матриці перенесення  $\tau(z_2, z_1)$ , що зв'яже значення обвідної  $\Psi(z)$  і її похідної  $\Psi'(z)$  у двох різних просторових точках  $z_1$  і  $z_2$ :

$$\Psi(z_2) = \begin{bmatrix} \Psi(z_2) \\ \Psi'(z_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tau_{11}(z_2, z_1) & \tau_{12}(z_2, z_1) \\ \tau_{21}(z_2, z_1) & \tau_{22}(z_2, z_1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Psi(z_1) \\ \Psi'(z_1) \end{bmatrix} \equiv \tau(z_2, z_1) \cdot \Psi(z_1). \quad (2)$$

Головна перевага цього методу полягає у тому, що матрицю перенесення  $\tau$  можна побудувати на базі будь-яких двох лінійно-незалежних функцій-розв'язків  $\psi_1(z)$  і  $\psi_2(z)$ . Це дозволяє вибрати цими функціями-розв'язками такі, що задовольняють найпростішим початковим умовам. Справді, загальний розв'язок диференціального рівняння другого порядку (1) можна записати у вигляді:

$$\Psi(z) = C_1 \psi_1(z) + C_2 \psi_2(z). \quad (3)$$

Або з використанням матричного запису:

$$\Psi(z) = \begin{bmatrix} \psi_1(z) & \psi_2(z) \\ \psi_1'(z) & \psi_2'(z) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \equiv \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{C}. \quad (4)$$

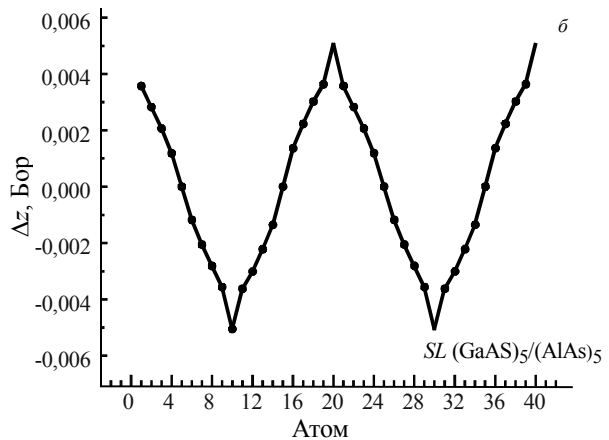


Рис. 1. Зміщення атомів у приінтерфейсній області при аксіальній релаксації в надгратках (GaAs)<sub>2</sub>/(AlAs)<sub>2</sub> (а) і (GaAs)<sub>5</sub>/(AlAs)<sub>5</sub> (б)

Зауважимо, що матриця  $\mathbf{W}(z)$  є матрицею Вронського і для лінійно незалежних розв'язків  $\psi_1(z)$  і  $\psi_2(z)$  вона має ненульовий визначник (вронскіан), а отже, до неї існує обернена матриця. Розглянемо далі значення вектора-стовпчика  $\Psi(z)$  у точках  $z_1$  і  $z_2$ :

$$\Psi(z_1) = \mathbf{W}(z_1) \cdot \mathbf{C}, \quad \Psi(z_2) = \mathbf{W}(z_2) \cdot \mathbf{C}. \quad (5)$$

Шляхом виключення стовпчика вільних невідомих приходимо до рівності:

$$\Psi(z_2) = \mathbf{W}(z_2) \cdot \mathbf{W}^{-1}(z_1) \cdot \Psi(z_1). \quad (6)$$

Порівнюючи (6) і (2), знаходимо вираз для матриці перенесення:

$$\tau(z_2, z_1) = \mathbf{W}(z_2) \cdot \mathbf{W}^{-1}(z_1). \quad (7)$$

Очевидно, що початкові умови, яким задовольняють функції  $\psi_1(z)$  і  $\psi_2(z)$ , – найпростіші:

$$\begin{bmatrix} \psi_1(z_1) \\ \psi'_1(z_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \psi_2(z_1) \\ \psi'_2(z_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Ці початкові умови зручні при числовому розрахунку елементів матриці перенесення.

Знання матриці перенесення через період структури вирішальне при знаходженні енергетичної структури надграток. Дійсно, використання теореми Блоха дозволяє записати:

$$\Psi(z+d) = e^{iKd} \cdot \mathbf{1} \cdot \Psi(z), \quad (9)$$

де  $\mathbf{1}$  - одинична матриця,  $d$  - період надгратки, а  $K$  – проекція хвильового вектора на напрямок росту структури. Об'єднання (9) і (2) дає рівняння

$$\tau(z_2, z_1) = e^{iKd} \cdot \mathbf{1}. \quad (10)$$

Оскільки елементи матриці перенесення  $\tau_{ij}$  залежать від енергії, рівняння (10) у неявному виді визначає закон дисперсії  $E(K)$ .

Повертаючись до питання про граничні умови на гетероінтерфейсі, зауважимо таке. У випадку математично різкого переходу (тобто при стрибкоподібній зміні матеріальних параметрів на інтерфейсі) оператор кінетичної енергії у формі (1) приводить до таких граничних умов [14]:

$$\begin{aligned} m_+^\alpha \Psi_+ - m_-^\alpha \Psi_- &= 0, \\ \frac{\Psi'_+}{m_+^{\alpha+1}} - \frac{\Psi'_-}{m_-^{\alpha+1}} &= \alpha \left( \frac{m'_+}{m_+^{\alpha+2}} \Psi_+ - \frac{m'_-}{m_-^{\alpha+2}} \Psi_- \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Значками "+", "-" позначені ліві і праві границі відповідних функцій на інтерфейсі. Коли  $m'_+ = m'_- = 0$ , отримуються так звані "діагональні" граничні умови, які виявилися достатніми для вірного якісного і непоганого кількісного опису типу та енергії переходів у короткоперіодних надгратках  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$  [15].

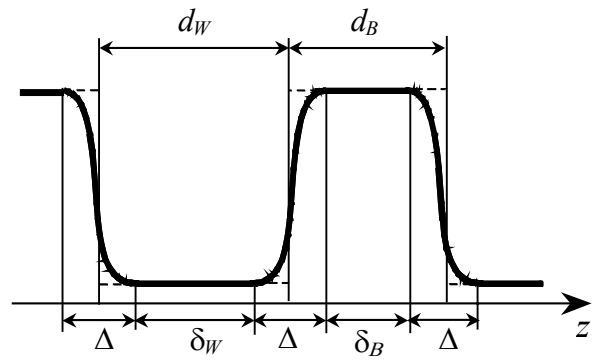


Рис. 2. Схематичний вигляд профілю модельного потенціалу, що використовувався при розрахунках енергетичних станів надграток  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$

При використанні моделі з неперервними на гетероінтерфейсі матеріальними параметрами (рис.2) як сама обвідна, так і її похідна залишатимуться всюди неперервними функціями. Порівняємо структуру матриці перенесення без  $\tau^{(abr)}$  і при наявності перехідного шару  $\tau^{(smf)}$ :

$$\begin{aligned} \tau^{(abr)}(-d_W, d_B) &= \\ &= \tau_W(-d_W, 0) \cdot \mathbf{T}_{WB}(0) \cdot \tau_B(0, d_B) \cdot \mathbf{T}_{BW}(d_B), \\ \tau^{(smf)}(-d_W, d_B) &= \tau_\Delta(-d_W, \Delta/2 - d_W) \times \\ &\times \tau_W(\Delta/2 - d_W, -\Delta/2) \cdot \tau_\Delta(-\Delta/2, 0) \times \\ &\times \tau_\Delta(0, \Delta/2) \cdot \tau_B(\Delta/2, d_B - \Delta/2) \times \\ &\times \tau_\Delta(d_B - \Delta/2, d_B). \end{aligned} \quad (12)$$

Тут через  $\mathbf{T}_{WB}$ ,  $\mathbf{T}_{BW}$  позначені матриці граничних умов (матриці переходу) на межі між ямою і бар'єром,  $\tau_\Delta$  - матриці перенесення через перехідну область, а  $\tau_W$  і  $\tau_B$  - матриці перенесення через ділянки сталих значень матеріальних параметрів, що утворюють ями і бар'єри. Ці останні матриці відомі [14] і мають вигляд:

$$\begin{aligned} \tau_W(z_2, z_1) &= \\ &= \begin{bmatrix} \cos(k_W(z_2 - z_1)) & -\frac{1}{k_W} \sin(k_W(z_2 - z_1)) \\ k_W \sin(k_W(z_2 - z_1)) & \cos(k_W(z_2 - z_1)) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \tau_B(z_2, z_1) &= \\ &= \begin{bmatrix} \cosh(k_B(z_2 - z_1)) & \frac{1}{k_B} \sinh(k_B(z_2 - z_1)) \\ k_B \sinh(k_B(z_2 - z_1)) & \cosh(k_B(z_2 - z_1)) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \text{де} \quad k_W &= (2m_W(E - U_W))^{1/2} \hbar^{-1}, \\ k_B &= (2m_B(U_B - E))^{1/2} \hbar^{-1}. \end{aligned}$$

В останніх виразах через  $m_{W,B}$  і  $U_{W,B}$  позначені ефективні маси носіїв і значення енергій країв зон у відповідних квазідвовимірних областях.

Цікавими є питання щодо існування і можливості визначення таких граничних умов  $T_{WB}(0)$  і  $T_{BW}(d_B)$ , які у надгратці з математично різкими інтерфейсами давали б енергетичний спектр, ідентичний тому, що отримується у надгратці з перехідними шарами. З огляду на викладену вище методику одержання закону дисперсії, очевидним, що для цього необхідний збіг матриць переносу  $\tau^{(abr)} = \tau^{(smf)}$ . Отже, використавши (12) і (13), можна отримати шукані граничні умови:

$$T_{WB}(0) = \tau_W(0, -\Delta/2) \cdot \tau_\Delta(-\Delta/2, \Delta/2) \cdot \tau_B(\Delta/2, 0), \quad (16)$$

$$T_{BW}(d_B) = \tau_B(d_B, d_B - \Delta/2) \times \tau_\Delta(d_B - \Delta/2, d_B + \Delta/2) \cdot \tau_W(d_B + \Delta/2, d_B). \quad (17)$$

Можливість врахувати у граничних умовах наявність перехідного шару є доволі корисним результатом, оскільки порівняно складна задача знаходження матриці перенесення через перехідний шар може бути зведеною до більш простого підбору граничних умов.

При числовому моделюванні профілю потенціалу перехідного шару

$$U(z) = U_W + (U_B - U_W) \cdot P(z) \quad (18)$$

як форм-фактор  $P(z)$  ми використовували сплайн другого порядку. Вигляд отриманого при цьому профілю потенціалу схематично зображено на рис.2. Параметром нашої моделі була ширина перехідного шару  $\Delta$ . Отримані залежності величин енергій переходів між мінізонами, які походять від станів  $\Gamma$  та  $X_1$  долин зони провідності об'ємних GaAs і AlAs і мінізонами, пов'язаними із зоною важких дірок ( $hh$ ), від величини  $\Delta$  наведені на рис.3. Тут наведено розраховані залежності

для симетричної (непрямозонної) і асиметричної (прямозонної) надграток  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_{10}$  і  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_5$  відповідно. Значення параметру  $\alpha$  у подальшому розгляді вибираємо сталим і таким, що дорівнює нулеві.

З одержаних залежностей видно, що хоча якісний щодо типу переходів збіг розрахунку з експериментом і має місце, у кількісному відношенні є відмінності. Окрім того, аналіз рис.3 показує, що для узгодження значень енергій  $\Gamma-hh$  переходів треба брати більші значення ширини перехідної області, ніж для узгодження значень енергій  $X-hh$  переходів. Це означає, що при моделюванні слід відмовитися від наближення симетричного по відношенню до площини інтерфейсу профілю перехідної області. Наш результат вказує на те, що ширина перехідної ділянки всередині GaAs більша ніж у AlAs.

Розрахунок у моделі з різними товщинами ділянок перехідного шару, що припадають на область GaAs ( $\Delta_W$ ) і AlAs ( $\Delta_B$ ), дійсно дає краще кількісне узгодження з експериментальними даними (рис.4).

Отже, виходячи з результатів *ab initio* розрахунків структури надграток  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$  ми встановили наявність перехідного шару, що сягає кількох моноатомних шарів навіть у випадку ідеального інтерфейсу.

Моделльні розрахунки показали, що за рахунок підбору ширини перехідного шару можна отримати якісне і певною мірою кількісне відтворення експериментальних даних щодо типу та енергій переходів у симетричних та асиметричних короткоперіодних надгратках  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ . Аналіз результатів розрахунків дозволив вдосконалити модель перехідного шару шляхом врахування несиметричності формфактору по відношенню до площини гетероінтерфейсу.

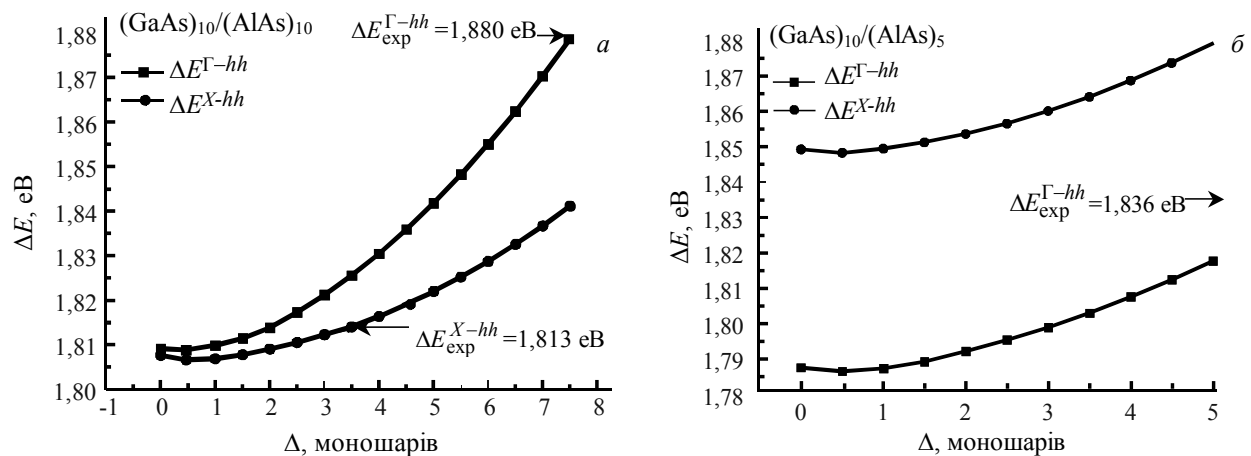


Рис. 3. Залежності величини енергетичних проміжків від ширини перехідного шару в надгратках  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_{10}$  (а) і  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_5$  (б)

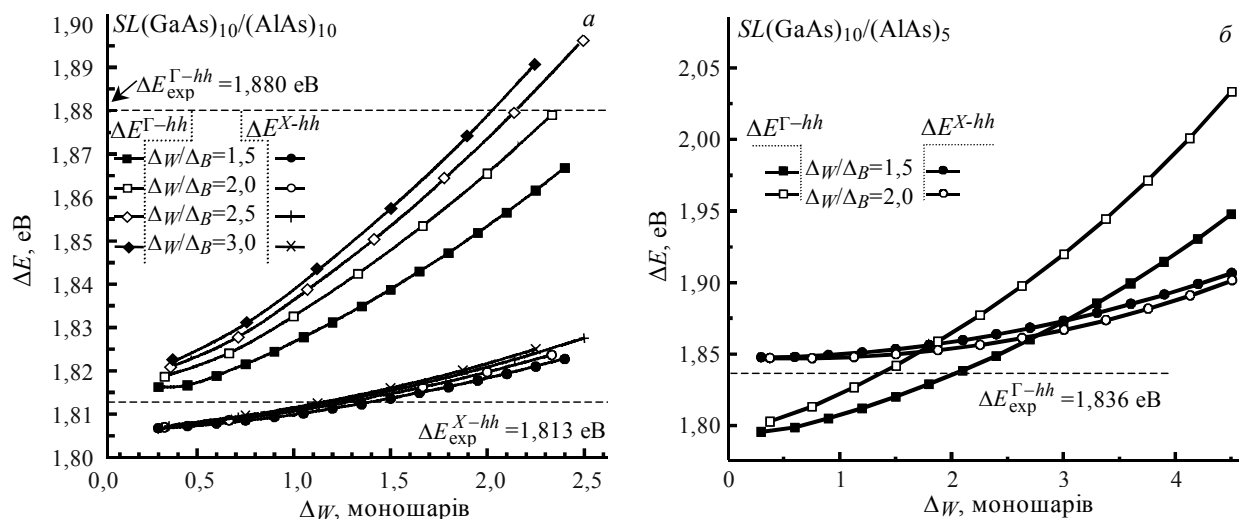


Рис. 4. Залежності величини енергетичних проміжків від ширини перехідного шару для різних співвідношень між  $\Delta W$  і  $\Delta B$  в надгратках  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_{10}$  (а) і  $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_5$  (б)

Така модифікація дозволила значно поліпшити кількісне узгодження розрахункових і експериментальних даних щодо величини енергій переходів між мінізонами. Для досліджуваних надграток, нами також отримані "ефективні" граничні умови, які дозволяють врахувати вплив перехідного шару у простій моделі з прямокутним профілем потенціалу. Ці граничні умови виявилися доволі слабо енергетично залежними і сильно залежними від товщини перехідного шару. Останній результат дозволяє стверджувати, що при незмінній формі профілю перехідного шару за допомогою відповідного вибору інтерфейсної матриці можна отримати непогані кількісні результати щодо величин переходів між мінізонами досліджуваних надграток навіть у найпростішій моделі з прямокутним профілем потенціалу.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Корбутяк Д.В., Крилюк С.Г., Литовченко В.Г., Деверц Л., Гран Х., Хей Р., Плог К. Особливості спектрів фотолюмінесценції асиметричних короткоперіодних надграток GaAs/AlAs // УФЖ. – 1998. – **43**, №1. – С.116.
2. Krylyuk S., Korbutyak D.V., Litovchenko V.G., Hey R., Grahn H.T., Ploog K.H. Enhancement of the photoluminescence intensity in short-period GaAs/AlAs superlattices with different well and barrier thickness // Appl. Phys. Lett. – 1999. – **74**, No. 18. – P.2596.
3. Litovchenko V.G., Korbutyak D.V., Bercha A.I., Kruchenko Yu.V., Krylyuk S.G., Grahn H.T., Hey R., Ploog K.H. Observation of stimulated emission in an ultrashort-period nonsymmetric GaAs/AsAs superlattice // Appl. Phys. Lett. – **78**, No. 26. – P.4085.
4. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. – 1965. – **140**. – P. A1133.
5. Gonze X., Beuken J.-M., Caracas R. et al. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project // Comp. Mat. Sci. – 2002. – **25**. – P. 478-492.
6. Караваев Г.Ф., Тиходеев Ю.С. Уравнения для огибающих в варизонной структуре // ФТП. – 1991. – **25**. – С.1237.
7. Foreman B.A. Envelope-function formalism for electrons in abrupt heterostructures with material-dependent basis functions // Phys. Rev. B. – 1996. – **54**. – P. 1909.
8. Тахтамиров Э.Е., Волков В.А. Динамика электрона с пространственно-зависящей массой и метод эффективной массы для полупроводниковых гетероструктур // УФН. – 1997. – **116**. – С.1843.
9. Takhtamirov E.E., Volkov V.A. Envelope-function method for the conduction band in graded heterostructures // Semicond. Sci. Technol. – 1997. – **12**. – P. 77-85.
10. Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation // Phys. Rev. B. – 1981. – **24**. – P. 5693.
11. von Roos O. Position-dependent effective masses in semiconductor theory // Phys. Rev. B. – 1983. – **27**. – P. 7547.
12. James H.M. Energy bands and wave functions in periodic potentials // Phys. Rev. – 1949. – **76**. – P.1602.
13. Гашишзаде Н.Ф., Ивченко Е.Л. Граничные условия и эффективная масса электронов в сверхрешетке // ФТП. – 1991. – **25**. – С.323.
14. Ivchenko E.L., Pikus G. Superlattices and other heterostructures. Symmetry and optical phenomena. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1995.
15. Глухов К.Е., Берча А.И., Корбутяк Д.В., Литовченко В.Г. Энергетические состояния в короткопериодных симметричных и асимметричных сверхрешетках  $(\text{GaAs})_N/(\text{AlAs})_M$ . Зависимость от граничных условий // ФТП. – 2004. – **38**. – P.426.