Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 20, вып. 2, 75—80 (1985)

УДК 621.315.592

ПОПЕРЕЧНАЯ ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА В ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ И СВЕРХРЕШЕТКЕ ИЗ *In As—Ga Sb*

З. А. КАСАМАНЯН, В. М. ГАСПАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 3 июня 1983 г.)

Получена аналитическая формула для эффективной массы поперечного движения электронов в двухзонном приближении. Показано, что в случае, когда зона проводимости одного полупроводника близка к валентной зоне другого, учет конечного радиуса локализации электронов в области запрещенного объемного спектра может привести к эффективному увеличению поперечной эффективной массы. Численный расчет для сверхрешетки из пары *In As—Ga Sb* дает для поперечной эффективной массы носителей заряда значения, хорошо согласующиеся с имеющимися экспериментальными данными при произвольных толщинах слоев.

Гетероструктура из *In As—Ga Sb* имеет интересную особенность, заключающуюся в том, что зона проводимости *In As* находится ниже валентной зоны *Ga Sb* [1, 2], вследствие чего система в направлении плоскости раздела обладает полуметаллическими свойствами. Благодаря возникновению энергетической щели при малых толщинах слоев, в тонкопленочной гетероструктуре или сверхрешетке могут проявляться полупроводниковые свойства, что и наблюдается экспериментально [3].

При больших толщинах слоев из-за возможности перехода электронов из высоколежащих состояний валентной зоны *Ga Sb* в нижележащие состояния зоны проводимости *In As* имеет место искривление энергетических зон, поэтому носители заряда в каждой области находятся в соответствующих одномерных потенциальных ямах и в связи с этим должны обладать эффективными массами соответствующих кристаллов. Ситуация может несколько измениться при малых толщинах слоев, когда между зоной проводимости *In As* и валентной зоной *Ga Sb* образуется щель и изоэнергетический переход запрещен, вследствие чего искривление зон отсутствует. Движение носителей по двумерным зонам в направлении плоскости раздела должно обладать интересными особенностями, связанными с тем, что носители в одной области движутся по разрешенным объемным состояниям одного кристалла, а в другой области — по запрещенным объемным состояниям другого кристалла. Если радиус локализации электронов в области запрещенного объемного спектра порядка толщины слоя, это должно сказаться в эффективном увеличении эффективной массы поперечного (по отношению к нормали поверхности слоев) движения. В работах [3, 4] это обстоятельство не принято во внимание и, по-видимому, по этой причине теоретический расчет дает заниженные по сравнению с экспериментальными значения для эффективных масс поперечного движения при малых толщинах [3, 5].

Здесь мы покажем, что учет конечного размера радиуса локализации электронов приводит к эффективному увеличению поперечной эффективной массы носителей, оценим ее значения для конкретной структуры и сравним с соответствующими экспериментальными данными.

Начнем рассмотрение со случая тонкопленочной гетероструктуры, энергетический спектр которой в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы дается уравнением [6]

$$G_1 \operatorname{tg} k_1 a_1 + G_2 \operatorname{tg} k_2 a_2 = 0. \tag{1}$$

Здесь $G_j(\mathbf{q}, E)$ — функция Грина электрона в j-кристалле ($j = 1, 2$), k_j — проекция волнового вектора в направлении, перпендикулярном к плоским границам гетероструктуры и пленки, a_1 и a_2 — толщины соответствующих слоев или отдельных пленок, $\mathbf{q}$ — двумерный волновой вектор в плоскости границы раздела. Здесь принято также во внимание, что плоскость раздела является плоскостью симметрии отдельных кристаллов, вследствие чего производные от функций Грина обращаются в нуль.

В случае, когда рассматриваемые состояния находятся в разрешенной области для первого кристалла и запрещенной для второго, уравнение (1) принимает вид ($k_2 = i\gamma_2$, $\gamma_2 > 0$):

$$-i G_1 \operatorname{tg} k_1 a_1 + G_2 \operatorname{th} \gamma_2 a_2 = 0. \tag{2}$$

При аналитическом продолжении уравнения (1) в область запрещенной зоны первого или второго кристалла необходимо соблюдать осторожность при выборе знаков функций Грина. При этом следует руководствоваться общими аналитическими свойствами квазиодномерных функций Грина. Так, функция Грина в разрешенных зонах является чисто мнимой с положительной мнимой частью (запаздывающие функции Грина с совпадающими одномерными координатами). В запрещенной зоне функция Грина вещественна, знакопеременна и монотонно возрастает с увеличением энергии. Однако поскольку сшивание здесь производится в максимуме периодического поля, соответствующая функция Грина на нижнем крае запрещенной зоны обращается в нуль, затем она монотонно возрастает, так что здесь всегда $G_j(\mathbf{q}, E) > 0$.

Далее, при использовании уравнения (1) в области общей разрешенной зоны обоих кристаллов необходимо различать два случая. Если перекрываются зоны проводимости или валентные зоны, то при малых k оба слагаемых в (1) положительны. Если же зона проводимости одного кристалла перекрывается с валентной зоной другого, то слагаемые в (1) имеют противоположные знаки. При этом мы предположили, что экстремумы зон находятся в одной точке зоны Бриллюэна, как и обстоит дело в рассматриваемых нами кристаллах.

Для анализа уравнения (2) представим его формальное решение в виде (при $\gamma_2 a_2 > 1$):

$$k_1 a_1 = \pi n - \operatorname{arc\,tg}\left[\frac{G_2 \operatorname{th} \gamma_2 a_2}{-iG_1}\right] \approx \pi n - \varphi, \quad \varphi = \operatorname{arc\,tg}\left(\frac{G_2}{-iG_1}\right) > 0. \tag{3}$$

При $n \gg 1$ справедливо квазиклассическое решение для первой пленки, совпадающее с точным решением в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы: $k_1 a_1 = \pi n$. Однако здесь главную роль играют подзоны с малыми значениями n, когда квазиклассическое решение неприменимо. Поскольку $\varphi > 0$, первый уровень образуется при $\pi/2 < k_1 a_1 < \pi$, т. е. уровень опускается по сравнению с его положением в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы.

Для решения уравнения (2) необходимо задать явный вид функций Грина при $\mathbf{q} \neq 0$. Мы будем пользоваться выражением для функции Грина электрона в узкощелевом полупроводнике в двухзонном приближении [7]. При $z = 0$ имеем (при $E_1 < E < E_2$)

$$G_1(\mathbf{q}, E) = i\left[\frac{m_1}{\Delta_1}\frac{E - E_1 + \Delta_1(\mathbf{q})}{E - E_1 - \Delta_1(\mathbf{q})}\right]^{1/2},$$

$$k_1 = \left\{\frac{m_1}{\Delta_1}[E - E_1)^2 - \Delta_1^2(\mathbf{q})]\right\}^{1/2},$$

$$G_2(\mathbf{q}, E) = \left[\frac{m_2}{\Delta_2}\frac{E - E_2 + \Delta_2(\mathbf{q})}{E_2 - E + \Delta_2(\mathbf{q})}\right]^{1/2}, \qquad (4)$$

$$\gamma_2 = \left\{\frac{m_2}{\Delta_2}[\Delta_2^2(\mathbf{q}) - (E_2 - E)]\right\}^{1/2},$$

где

$$\frac{\Delta_1}{m_1} \approx \frac{\Delta_2}{m_2} \approx \left(\frac{2\pi}{m_0 a_0}\right)^2,$$

E_j — середина запрещенной зоны соответствующего кристалла шириной $2\Delta_j$, $\Delta_j(\mathbf{q}) = [\Delta^2{}_j + \Delta_j m_j^{-1}\mathbf{q}^2]^{1/2}$, a_0 — постоянная решетки, m_j — эффективная масса электронов, равная эффективной массе легких дырок на краях зон, m_0 — масса свободного электрона ($\hbar = 1$).

Удобно решить уравнение (2) сначала при $\mathbf{q} = 0$ и определить положения пленочных подзон, а затем вычислить поперечную эффективную массу при соответствующей энергии по формуле, получаемой из уравнения (2) (при $\gamma_2 a_2 > 1$):

$$m_s = q\frac{dq}{dE}\bigg|_{q\to 0} = \frac{\left[k_1 a_1\left(\frac{|G_1|}{G_2} + \frac{G_2}{|G_1|}\right)\frac{E - E_1}{\Delta_1} + 1\right]\frac{m_1}{k_1^2} + \frac{m_2}{\gamma_2^2}}{\left[k_1 a_1\left(\frac{|G_1|}{G_2} + \frac{G_2}{|G_1|}\right) + \frac{E - E_1}{\Delta_1}\right]\frac{1}{k_1^2} - \frac{E_2 - E}{\Delta_2}\frac{1}{\gamma_2^2}}. \qquad (5)$$

В пределе, когда $k_1 a_1 \gg 1$, для поперечной эффективной массы в двумерной подзоне получаем асимптотику $m_s = m_1^*(E) \equiv m_1(E - E_1)/\Delta_1$, т. е. зависящую от энергии эффективную массу первого кристалла. Согласно (5) в первой пленочной подзоне ($k_1 a_1 \sim 1$) в области $E > E_2 - \Delta_2$ эффективная масса m_s должна увеличиться, т. е. $m_s > m_1^*(E)$.

Аналогичную формулу можно получить для поперечной эффективной массы электрона в сверхрешетке из гетеропереходов. Для этой цели мы будем пользоваться уравнением, определяющим неявным образом закон дисперсии $E = E_n(\mathbf{q}, E)$ (n — номер минизоны) [8, 9]. При $z = 0$ имеем

$$\cos k(a_1+a_2)=\cos k_1a_1\cos k_2a_2-\frac{1}{2}\left(\frac{G_1}{G_2}+\frac{G_2}{G_1}\right)\sin k_1a_1\sin k_2a_2. \quad (6)$$

Отметим, что уравнение (6) отличается от аналогичного уравнения работы [10], полученного в приближении эффективной массы (расчет, проведенный в [8, 9], является точным, а метод эффективной массы в интересующей нас здесь задаче неприменим). В [10] вычислена эффективная масса поперечного движения в сверхрешетке из пары $GaAs - AlAs$, где зоны проводимости двух кристаллов близки друг к другу. Вычисленные значения m_s в этой сверхрешетке незначительно отличаются от эффективной массы в $GaAs$ (до 7%). Отметим также, что уравнение (6) точно совпадает с соответствующим уравнением работы [3].

В интересующей нас области энергий разрешенной зоны для первого кристалла и запрещенной для второго имеем

$$\cos k(a_1+a_2)=\operatorname{sh}\gamma_2a_2\left[\cos k_1a_1\operatorname{cth}\gamma_2a_2-\frac{i}{2}\left(\frac{G_1}{G_2}+\frac{G_2}{G_1}\right)\sin k_1a_1\right]. \quad (7)$$

Выражение в квадратных скобках обращается в нуль при энергии, соответствующей примерно середине (при $\gamma_2 a_2 > 1$) разрешенной одномерной минизоны. Для узких разрешенных минизон вычисление поперечной эффективной массы можно провести для этих значений энергии, ибо для остальной части разрешенной минизоны она существенно не меняется. Поэтому уравнение

$$\operatorname{ctg}k_1a_1=\frac{i}{2}\left(\frac{G_1}{G_2}+\frac{G_2}{G_1}\right) \quad (8)$$

наряду с определением центральной области разрешенных минизон позволяет вычислить и поперечную эффективную массу. Уравнение (8) в сущности есть условие для определения энергетических уровней в тонкой пленке первого кристалла, заключенной во второй кристалл. Решение (8) можно записать в виде

$$k_1a_1=\pi n-2\varphi. \quad (9)$$

Сравнение условия (9) с аналогичным условием (3) для тонкопленочной гетероструктуры при $\gamma_2 a_2 > 1$ показывает, что они отличаются лишь коэффициентом перед фазой φ. При больших значениях n ($n \gg 1$) условие (9) сводится к квазиклассическому условию квантования, а поперечная эффективная масса совпадает с зависящей от энергии эффективной массой первого кристалла. Однако в узкощелевых полупроводниках при достаточно малых толщинах слоев образуется всего несколько разрешенных минизон, а для них m_s уже отличается от $m_1^*(E)$. В двухзонном приближении для поперечной эффективной массы в сверхрешетке из (9) получаем формулу (5) с заменой a_1 на $a_1/2$:

$$m_s=\frac{\left[\frac{k_1a_1}{2}\left(\frac{|G_1|}{G_2}+\frac{G_2}{|G_1|}\right)\frac{E-E_1}{\Delta_1}+1\right]\frac{m_1}{k_1^2}+\frac{m_2}{\gamma_2^2}}{\left[\frac{k_1a_1}{2}\left(\frac{|G_1|}{G_2}+\frac{G_2}{|G_1|}\right)+\frac{E-E_1}{\Delta_1}\right]\frac{1}{k_1^2}-\frac{E_2-E}{\Delta_2}\frac{1}{\gamma_2^2}}. \quad (10)$$

Формулу (10) мы получили в предположении о равенстве эффективных масс электронов и легких дырок на краях зон ($m_e = m_p$) для каждого кристалла. Нетрудно получить соответствующую формулу и в случае $m_e \neq m_p$. Для этого необходимо лишь из закона дисперсии

$$E = \frac{\mathbf{k}^2}{2m'} \pm [\Delta^2 + \Delta m^{-1} \mathbf{k}^2]^{1/2}, \ m' > m$$

определить

$$k_1 = \left[\frac{m_1}{1 + \dfrac{m_1}{m_1'} \dfrac{E - E_1}{\Delta_1}} \frac{(E - E_1)^2 - \Delta_1^2}{\Delta_1} - \mathbf{q}^2 \right]^{1/2},$$

$$\gamma_2 = \left[\frac{m_2}{1 - \dfrac{m_2}{m_2'} \dfrac{E_2 - E}{\Delta_2}} \frac{\Delta_2^2 - (E_2 - E)^2}{\Delta_2} - \mathbf{q}^2 \right]^{1/2},$$

вычислить функции Грина по образцу [7] и провести аналогичный расчет.

Учитывая условие $m/m' \ll 1$ (для $InAs$ $m/m' = 1/47$; для $GaSb$ $m/m' = 1/13$), видим, что величина

$$m_j^* = m_j \left[1 + \frac{m_j}{m_j'} \frac{E - E_j}{\Delta_j} \right]^{-1}$$

в интересующей нас области изменения энергии меняется не столь существенно. Поэтому для простоты мы ограничимся лишь случаем $m_e = m_p$.

Уравнение (8) для определения центральных частей разрешенных минизон и формулу (10) для поперечной эффективной массы можно проанализировать лишь численно. В сверхрешетке из $InAs - GaSb$ для оценок мы будем пользоваться следующими объемными значениями:

$$m_2 \approx 2\, m_1 = 0{,}05\, m_0, \ \Delta_2 \approx 2\, \Delta_1 = 0{,}4 \text{ эВ},$$

$$E_1 = -0{,}2 \text{ эВ}, \ E_2 = 0{,}5 \text{ эВ}, \ a_0 = 6 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

При $a_1 = a_2 = 9\, a_0$ расчет дает $E_1^0 = 0{,}22$ эВ, $m_s = 1{,}2\, m_1^*(E)$, а при $a_1 = a_2 = 15\, a_0 - E_1^0 = 0{,}12$ эВ, $m_s = 1{,}4\, m_1^*(E)$.

Сравнение этих результатов с [3] дает правильные значения для центральных частей разрешенных минизон. Заметное увеличение (от 20 до 40%) поперечной эффективной массы электрона в сверхрешетке по сравнению с зависящей от энергии эффективной массой электрона в $InAs$ позволяет получить хорошее согласие с экспериментальными данными [3, 5].

Один из авторов (З. К.) благодарит В. Л. Бонч-Бруевича за обсуждение результатов, а также А. Т. Игитян за проведение расчетов на ЭВМ.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Harrison W. A.* J. Vac. Sci. Technol., 14, 1016 (1977).
2. *Sai—Halasz G. A., Tsu R., Esaki L.* Appl. Phys. Lett., 30, 651 (1977).
3. *Sakaki H. et al.* Sol. State Commun., 26, 589 (1978).
4. *Esaki L., Chang L. L.* J. Magn. and Magn. Matter., 11, 208 (1979).
5. *Mean J. C. et al.* Surface Sci., 113, 347 (1982).

6. *Gasparyan V. M., Kasamanyan Z. H.* Phys. Stat. Sol. (b), 98, 435 (1980).
7. *Касаманян З. А., Гаспарян В. М.* Изв. АН АрмССР, Физика, 16, 402 (1981).
8. *Касаманян З. А., Юзбашян Э. С.* ФТТ, 19, 563 (1977).
9. *Kasamanyan Z. H., Yuzbashyan E. S.* Phys. Stat. Sol. (b), 97, K145 (1980).
10. *Mukherji D., Nag B. R.* Phys. Rev., B21, 5357 (1980).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ԼԱՅՆԱԿԱՆ ԷՖԵԿՏԻՎ ԶԱՆԳՎԱԾԸ ԲԱՐԱԿ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻՑ ԿԱԶՄՎԱԾ ՀԵՏԵՐՈՍՏՐՈՒԿՏՈՒՐԱՅՈՒՄ ԵՎ InAs-GaSb ԶՈՒՅԳԻՑ ԿԱԶՄՎԱԾ ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ

Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ, Վ. Մ. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ

Ստացված է անալիտիկ բանաձև էլեկտրոնի լայնական շարժման էֆեկտիվ զանգվածի համար երկգոտու մոտավորությամբ։ Ցույց է տրված, որ երբ կիսահաղորդիչներից մեկի հաղորդականության գոտին մոտ է մյուսի վալենտական գոտուն, էլեկտրոնների վերջավոր լոկալիզացման շառավղի հաշվի առնելը արգելված ծավալային սպեկտրի տիրույթում կարող է բերել լայնական շարժման էֆեկտիվ զանգվածի զգալի մեծացմանը։ InAs-GaSb *զույգից կազմված գերցանցի դեպքում թվային հաշվարկը լիցքակիրների լայնական շարժման էֆեկտիվ զանգվածի համար տալիս է արժեքներ, որոնք լավ համընկնում են եղած փորձնական տվյալների հետ՝ կամայական հաստությունների դեպքում։*

THE TRANSVERSE EFFECTIVE MASS OF AN ELECTRON IN *InAs-GaSb* THIN-FILN HETEROSTRUCTURE AND SUPERLATTICE

Z. H. KASAMANYAN, V. M. GASPARYAN

An analytical expression for the effective mass of transverse motion of electons was obtained in two-band approximation. It was shown that when the conduction band of one semiconductor was close to that of an another, the allowance for the finite radius of localization of electrons in the region of forbidden bulk spectrum could lead to a significant increase in the transverse effective mass. Numerical calculations for the *InAs-GaSb* superlattice give the values of transverse effective mass that are in good agreement with experimental data for arbitrary thicknesses of the layers.