

ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ИМПУЛЬСА РАЗМЕРНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

B.B.Копаев, Ю.В.Копаев¹⁾

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 декабря 1996 г.

В квантовых ямах и проволоках с несимметричными барьерами связанные состояния электронов (дырок) могут существовать в ограниченных областях соответственно двумерного (2D) и одномерного (1D) импульсного пространства. При увеличении соответствующего импульса возможно как исчезновение связанных состояний (увеличение размерности), так и их возникновение (уменьшение размерности), а также наличие последовательности нескольких таких трансформаций размерности. В случае анизотропных эффективных масс квантовых ям и барьеров формы линий исчезновения и возникновения связанных состояний и изоэнергетических линий не совпадают. Поэтому имеется конечный интервал по энергии (то есть по концентрации электронов), в котором связанные состояния существуют только на части изоэнергетической линии. Под влиянием электрического поля возможно управление размерностью состояний, что должно обнаруживаться в ряде обсуждаемых экспериментов.

PACS: 71.50.+t, 73.20.Dx

Для квантовых ям компоненты волновых векторов (k_x, k_y) вдоль слоев сохраняются. Из-за несовпадения компонент эффективных масс контактирующих веществ эффективные потенциалы будут зависеть от k_x, k_y . Это может даже приводить к изменению знака эффективного потенциала, то есть к превращению потенциальной ямы в барьер и наоборот. Этот факт обсуждался в работах [1–3]. Однако критические значения волновых векторов k_c , при которых исчезают или возникают связанные состояния, оказываются слишком большими с точки зрения как возможности обнаружения, так и корректности описания. В настоящей работе показано, что эти проблемы принципиально решаются для квантовых ям и проволок с несимметричными барьерами.

1. Волновую функцию квантовых ям можно представить в виде $\psi(x, y, z) = Z(z) \exp(ik\rho)$, где z – координата в направлении оси роста, ρ – в плоскости слоев, $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$. Уравнение Шредингера для $Z(z)$ в случае изотропных масс в каждом из слоев, формирующих гетероструктуру, имеет вид

$$Z''(z) + \frac{2m_n}{\hbar^2} (E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} - U_n) Z(z) = 0, \quad (1)$$

где m_n и U_n – эффективная масса и потенциал в n -ом слое. На границах слоев непрерывными являются Z и Z'/m_n . Для квантовой ямы толщиной d это приводит к дисперсионному уравнению для энергии E связанных состояний:

$$\left(\frac{\kappa_1}{m_1} + \frac{\kappa_2}{m_2}\right) \cos \kappa d + \left(\frac{\kappa_1 \kappa_2}{m_1 m_2} \frac{m}{\kappa} - \frac{\kappa}{m}\right) \sin \kappa d = 0, \quad (2)$$

где

$$\kappa = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0(k))\right]^{1/2}, \quad \kappa_{1,2} = \left[\frac{2m_{1,2}}{\hbar^2} (V_{1,2}(k) - E)\right]^{1/2},$$

¹⁾e-mail: kopaev@sci.lpi.ac.ru

m_1, m_2, m – эффективные массы в левом, правом барьерах и в яме; $V_{1,2}(k) = U_{1,2} + \hbar^2 k^2 / 2m_{1,2}$, $V_0(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ – потенциалы барьеров и ямы при конечном k , U_i – при $k = 0$.

Для $U_1 \neq U_2$ связанное состояние возникает при ширине ямы выше критической [4]. Асимметрию барьеров можно характеризовать параметром

$$\beta(k) = [V_2(k) - V_0(k)]/[V_1(k) - V_0(k)].$$

При $m < m_1$ знак производной $\partial\beta(k)/\partial k$ совпадает со знаком параметра α :

$$\alpha = \frac{U_2}{U_1} - \frac{m_2 - m}{m_1 - m} \frac{m_1}{m_2}, \quad (3)$$

то есть при $\alpha > 0$ система с ростом k становится более асимметричной (для определенности считаем $U_2 > U_1$), при $\alpha < 0$ – более симметричной. Если $m > m_1$, знаки $\partial\beta(k)/\partial k$ и α противоположны.

Для гетероструктур первого рода типичным является соотношение $m < m_1 < m_2$. В этом случае при $k_i = [2U_i m_i / \hbar^2(m_i - m)]^{1/2}$ исчезает барьер слева ($i = 1$) или справа ($i = 2$), при $k_s = [2(U_2 - U_1)m_1 m_2 / \hbar^2(m_2 - m_1)]^{1/2}$ высоты барьеров сравниваются. Взаимное расположение k_1, k_2 и k_s определяется знаком величины α . При $\alpha > 0$ получается $k_1 < k_s < k_2$, при $\alpha < 0$ $k_s < k_2 < k_1$.

Асимметрия барьеров приводит к исчезновению связанного состояния при значениях k_c существенно меньших k_1 и k_2 . Для определения k_c необходимо решить (2) относительно k при дополнительном условии $E = V_i(k_{ci})$. При $\alpha > 0$ имеется одно критическое значение k_{c1} , а уравнение для него имеет вид

$$\frac{d}{\lambda} = \frac{1}{2\pi\tilde{\kappa}} \operatorname{arctg} \left[\frac{m}{m_2} (\beta(k_{c1}) - 1) \right]^{1/2} + \frac{n}{2\tilde{\kappa}}, \quad (4)$$

где

$$\tilde{\kappa} = [1 - (k_{c1}/k_0)^2 (1 - \frac{m}{m_1})]^{1/2}, \quad k_0 = 2\pi/\lambda, \quad \lambda = (2\pi^2 \hbar^2 / 2mU_1)^{1/2},$$

$n = 0, 1..$ – номер подзоны. При $\alpha < 0$ имеется второе значение k_{c2} , которое получается из (4) при $\tilde{\kappa} = [U_2/U_1 - (k_{c2}/k_0)^2 (1 - m/m_2)]^{1/2}$ и замене $m_1 \leftrightarrow m_2$, β на $1/\beta$.

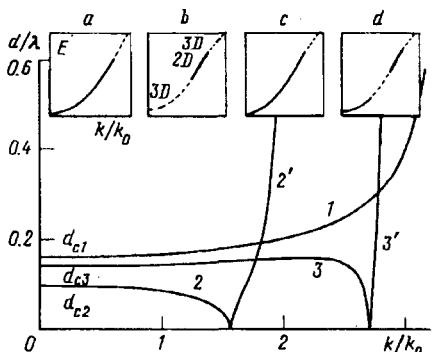


Рис.1. Диаграмма состояний квантовой ямы. Линии 1, 2, 3 соответствуют условию $E = V_1$, $2', 3' - E = V_2$; $m_1 = 1, 1m$; $m_2 = 2.0m$, для U_2/U_1 : 6 (кривая 1); 4 (2, $2'$) и 2 (3, $3'$). На вставке дисперсионные кривые $E(k)$: a) – для кривой 1; b), c) – 2, $2'$; d) – 3, $3'$

На рис.1 изображена диаграмма состояний в переменных $d(k)$, описывающая границу между связанными (2D) и несвязанными (3D) состояниями. Линия 1 соответствует $\alpha > 0$. Связанное состояние существует выше и левее этой

кривой. При $d < d_{c1}$ связанное состояние отсутствует при любом k . При $d > d_{c1}$ оно имеет место в интервале $0 < k < k_{c1}$, причем с ростом d значение k_{c1} возрастает от нуля до k_1 . Зависимость $E(k)$ при $d > d_1$ представлена на вставке a к рис.1 (сплошные линии – 2D, штриховые 3D – состояния).

Кривые 2 и $2'$ соответствуют $E = V_1$ и $E = V_2$ для $\alpha < 0$; вставка b – случаю $d < d_{c2}$, $c - d > d_{c2}$. При $\alpha < 0$ зависимость $d(k_c)$ может иметь максимум (кривая 3 на рис.1). В этом случае в узком диапазоне толщин слоев $d_{c2} < d < d_{max}$ существует три критических значения k_c (см. вставку d). Исчезновение состояния при $k \rightarrow k_{c1}$ обусловлено тем, что, несмотря на симметризацию системы глубина, ямы уменьшается быстрее, чем выравниваются высоты барьеров.

Условие $m < m_1 < m_2$ и $\alpha > 0$ выполняется для широко исследуемых гетероструктур на основе трехкомпонентных веществ типа $A_xB_{1-x}C$, когда асимметрия барьеров достигается за счет разных значений x справа и слева. Для структуры $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $x_1 = 0.1$, $x_2 = 0.4$, $d = 25 \text{ \AA}$ имеем $k_c = 0.3k_0$, что примерно на порядок меньше значения k_1 . Фермиевский волновой вектор k_F при этом сравнивается с k_c при концентрации электронов в яме $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. При малых ширинах ям согласование решеток не является принципиальным. Это увеличивает набор возможных для наблюдения описанного эффекта соединений с $\alpha < 0$. Примером служит гетероструктура $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$. При $x = 0.4$, $y = 0.03$ параметр $\alpha = -20$, и асимметрия уменьшается с ростом k , критическая ширина d_c при $k = 0$ равна 36.6 \AA .

Включение электрического поля F_z изменяет соотношение между потенциалами барьеров, оставляя массы в слоях неизменными. Такая "развязка" масс и потенциалов позволяет управлять параметром α . При положительном напряжении ΔU на более высоком барьере возможен переход от $\alpha > 0$ к $\alpha < 0$, и, наоборот при $\Delta U < 0$, то есть можно реализовать все рассмотренные выше ситуации в структурах одного состава. В частности, зависимость $E(k)$ типа изображенной на вставке d рис.1 получается в структуре $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ с шириной ямы 18 \AA при приложении напряжения порядка 0.1 В .

Отметим несколько возможностей наблюдения линий окончания (возникновения) в импульсном пространстве (k_x, k_y) связанных состояний.

1. Изменится характер движения электронов в магнитном поле как при ориентации последнего вдоль слоев, так и вдоль оси z . В зависимости от взаимного расположения линий окончания и линии Ферми осцилляции кинетических и термодинамических величин в магнитном поле будут соответствовать двумерному или трехмерному случаям. При 2D–3D трансформации должен исчезнуть квантовый эффект Холла. Само явление трансформации можно наблюдать на одном и том же образце, управляя электрическим полем концентрацией носителей и положением линий окончания.

2. При 2D–3D трансформации электрическим полем может происходить изменение характера фазовых превращений. Например, если ферромагнитное упорядочение определяется магнитными ионами, расположенными в квантовых ямах, путем косвенного обменного взаимодействия через носители, то при 2D–3D трансформации ферромагнетизм может исчезнуть.

3. При изменении положения линии окончания (начала) возможно наблюдение резкого изменения энергии связи экситонов или примесных состояний, поскольку для 2D случая энергия связи в 4 раза выше, чем для 3D. Это рез-

кое изменение будет иметь место при сравнивании импульса линии окончания (начала) и соответствующего обратного боровского радиуса.

4. Для сверхрешеток, построенных из асимметричных квантовых ям, возможно наблюдение обратного эффекта Франца–Келдыша, то есть увеличение ширины запрещенной минизоны под действием поля F_z , из-за 3D–2D трансформации. В результате образования связанных 2D состояний интеграл перекрытия волновых функций между соседними квантовыми ямами уменьшается, что приводит к уменьшению ширин разрешенных минизон.

5. Возможно и прямое наблюдение 2D–3D трансформации под действием латерального электрического поля. Происходящая при этом 2D–3D расфокусировка (или 3D–2D фокусировка) электронных состояний может наблюдаться в переходных процессах. В экспериментах с временным разрешением сдвиг положения экситонной линии будет определяться изменением энергии связи.

6. Система из двух квантовых ям, одна из которых имеет несимметричные барьеры, может оказаться привлекательной для понижения порогового тока в квантовом каскадном лазере [5]. Если нижняя подзона соответствует несимметричной яме, то линия ее окончания может лежать существенно ниже минимума верхней подзоны. Это приведет к подавлению однофононной межподзонной релаксации и уменьшению порогового тока.

II. Предыдущее рассмотрение легко обобщается на случай анизотропных масс, что имеет место, если экстремумы объемных спектров расположены не в Γ точках зоны Бриллюэна. Для дырочных состояний Ge, Si и полупроводников A_3B_5 массы анизотропны даже в Γ точках. Уравнение для определения энергии связанных состояний при этом имеет вид (2), в котором под m, m_1 и m_2 следует понимать z -компоненты масс, а потенциалы V_i в величинах k_x, k_y следует заменить на $V_i = U_i + \hbar^2/2(k_x^2/m_{ix} + k_y^2/m_{iy})$, где m_{ix}, m_{iy} – компоненты эффективной массы в слое i . Для классификации возможных при этом ситуаций проанализируем форму линий исчезновения барьеров $V_0 = V_1$ и $V_0 = V_2$. Уравнения этих линий имеют вид

$$k_x^2/a_i + k_y^2/b_i = 1,$$

где

$$a_i = 2U_i m_x m_{ix} / \hbar^2 (m_{ix} - m_x), \quad b_i = 2U_i m_y m_{iy} / \hbar^2 (m_{iy} - m_y), \quad i = 1, 2.$$

При положительных a_i и b_i это эллипсы; если либо a_i , либо b_i отрицательны, то гиперболы. Взаимное расположение точек исчезновения барьеров по каждой из осей можно характеризовать параметрами α_x и α_y . Связь k_y и k_x для линий появления (исчезновения) связанных состояний получается из (2) при дополнительном условии $E = V_i(k_x, k_y)$. Важнейшими характеристиками системы являются линии равной энергии (изоэнергетические линии), которые получаются из уравнения (2) при $E = \text{const}$.

Примеры изоэнергетических линий (сплошные) и линий окончания связанных состояний (штриховые) приведены на рис.2. Не ограничивая общности, будем считать массы в яме изотропными и $m_{iz} = m_{ix}$. Для рис.2a, b линии исчезновения барьеров – эллипсы, причем в обоих случаях $a_2 > a_1$ и $b_2 > b_1$. Рис.2c соответствует ситуации, когда линия $V_0 = V_1$ эллипс, а $V_0 = V_2$ – гипербола, пересекающая эллипс ($a_2 < a_1$, а $b_2 < 0$). Для рис.2d линии $V_0 = V_1$ и $V_0 = V_2$ – гиперболы со взаимно перпендикулярными осями ($a_1 > 0, a_2 < 0, b_1 < 0, b_2 > 0$).

Наиболее характерной особенностью является то, что линии исчезновения и возникновения и изоэнергетические линии имеют разную форму. Поэтому имеется интервал по энергии (а значит, и по концентрации носителей),

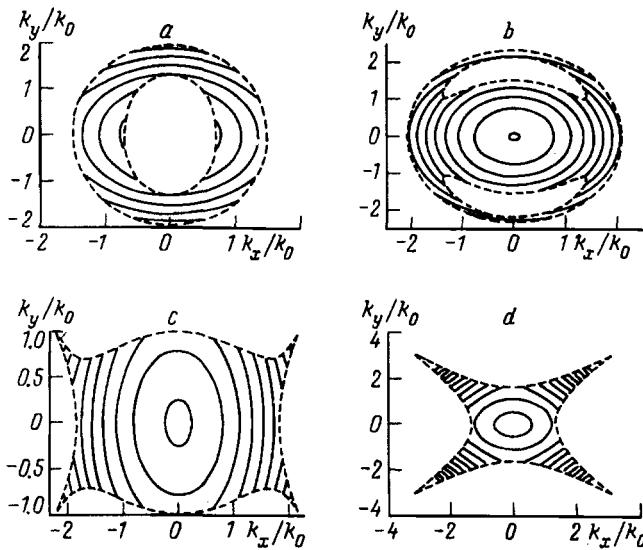


Рис.2. Изоэнергетические линии (сплошные) и линии окончания (штриховые) квантовых ям с анизотропными массами для $U_2/U_1 = 2$, $m_{1z} = m_{2z}$ и: a) $m_{1z} = 1.2m$, $m_{2z} = 3.0m$, $m_{1y} = 1.15m$, $m_{2y} = 1.7m$, $d = 0.08\lambda$; b) $m_{1z} = 1.2m$, $m_{2z} = 1.7m$, $m_{1y} = 1.17m$, $m_{2y} = 1.5m$, $d = 0.08\lambda$; c) $m_{1z} = 1.2m$, $m_{2z} = 2.0m$, $m_{1y} = 1.25m$, $m_{2y} = 0.7m$, $d = 0.14\lambda$; d) $m_{1z} = 1.5m$, $m_{2z} = 0.7m$, $m_{1y} = 0.8m$, $m_{2y} = 3.0m$, $d = 0.30\lambda$. Изоэнергетические линии изображены с шагом 0.5, начиная с $E/U_1 = 1.5$ для a и 1.0 для b – d

в котором связанные состояния существуют на части изоэнергетической линии. В этом случае трансформация размерностей при изменении управляемого параметра (например, электрического поля F_z) растягивается на некоторую область. Изоэнергетические линии 2D состояний в этой области являются незамкнутыми, и в магнитном поле H_z возможно наблюдение магнитного пробоя, обусловленного туннелированием с одного участка изоэнергетической кривой на другой.

III. При исследовании связанных состояний асимметричных квантовых нитей мы будем пользоваться приближенным методом, состоящим в сведении двумерной задачи к последовательности одномерных [6]. Задача решается в два этапа. Вначале в каждом из сечений $x = \text{const}$ решается одномерное уравнение Шредингера с потенциалом $V(y, k_z)$. Получающийся в результате зависящий от координаты x и волнового вектора k_z уровень энергии $\epsilon(x, k_z)$ служит эффективным потенциалом $V(x, k_z)$ для движения электронов вдоль оси x .

Исследование закона дисперсии $E(k_z)$ и вычисление области существования связанных состояний для квантовых нитей с асимметричными барьерами проведем на примере нити прямоугольного сечения (см. вставку к рис. 3) ширины L и высоты H . Эффективная масса в нити m , потенциал и масса в барьере при $x < L$ равны соответственно m_1 и U_1 , в барьере при $x > L$ – m_2 и U_2 . Для такой структуры сведение к одномерной задаче приводит к эффективному потенциалу $V(x)$: $V(x) \equiv V_1(k_z) = U_1 + \hbar^2 k_z^2 / 2m_1$ при $x < 0$; $V(x) \equiv V_2(k_z) = U_2 + \hbar^2 k_z^2 / 2m_2$ при $x > L$, а при $0 < x < L$ значение $V(x) \equiv V_0(k_z)$ определяется из решения трансцендентного уравнения

$$\tan[L(2mV_0/\hbar^2 - k_z^2)^{1/2}] = 2f/(1 - f^2), \quad (5)$$

где

$$f = \frac{m}{m_1} \left[\frac{2m_1(U_1 - V_0) + \hbar^2 k_z^2}{2mV_0 - \hbar^2 k_z^2} \right]^{1/2}$$

Решение одномерного уравнения Шредингера для потенциала $V(x)$ и дает искомую зависимость энергии локализованного состояния $E(k_z)$.

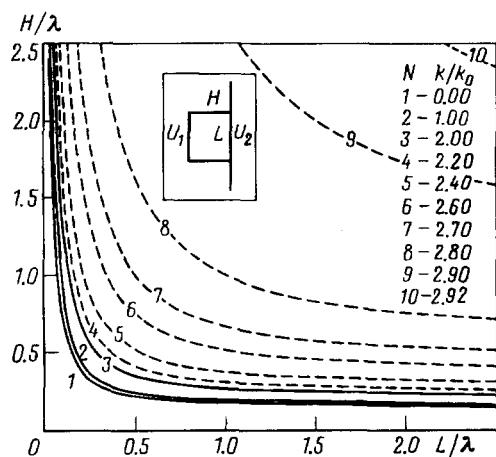


Рис.3. Границы связанных состояний $H(L)$ квантовой нити

Как и в случае квантовых ям, асимметрию структуры можно характеризовать параметром α (3). При $\alpha > 0$ имеется единственное условие появления (исчезновения) связанного состояния $E = V_1(k_z)$, и имеются только точки окончания спектра (в квантовых ямах это были линии). На рис. 3 представлен пример расчета семейства кривых $H(L)$ для разных k_z для нити на основе GaAs/Al_xGa_{1-x}As с $x = 0.4$ для высокого барьера и $x = 0.1$ для низкого. При заданном k_z связанные состояния существуют выше и правее линии $H(L)$. При фиксированном H критическое значение k_{zc} монотонно возрастает с ростом L , например, при $H = 30 \text{ Å}$ величина $k_{zc} = 0.2k_0$ при $L = 110 \text{ Å}$, $k_{zc} = 0.9k_0$ при $L = 140 \text{ Å}$, $k_{zc} = 1.2k_0$ при $L = 200 \text{ Å}$.

Более сложной оказывается ситуация при $\alpha < 0$. В этом случае наряду с линиями $H(L)$, соответствующими $E = V_1$, имеются решения с $E = V_2$. Последние имеют вид, аналогичный рис.3. Главной особенностью решений с $E = V_1$ является наличие точек пересечения линий $H(L)$ для разных k_z . Для H и L , соответствующих точке пересечения, имеются два значения k_z (k_{z1} и k'_{z1}), при которых $E = V_1$. Закон дисперсии $E(k_z)$ при этом имеет вид, аналогичный вставке d на рис.1 (сплошные линии – 1D, штриховые – 3D).

При 1D–2D (или 1D–3D) трансформации, например, поперечным электрическим полем возможен переход от электронной жидкости Томонага – Латтинжера типа [7] (связанное состояние в проволоке) к ферми-жидкости.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Российской МНТП "Физика твердотельныхnanoструктур" и INTAS.

1. Б.А.Волков, Б.Г.Идлис, М.Ш.Усманов, УФН **165**, 799 (1995).
2. З.С.Грибников, О.Э.Райчев, ЖЭТФ **96**, 996 (1989).
3. А.В.Колесников, А.П.Силин, ЖЭТФ **109**, 2125 (1996).
4. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1974.
5. J.Faist, F.Capasso, D.L.Sivco et al., Science **264**, 553 (1994).
6. Ю.А.Алещенко, В.В.Капаев, Ю.В.Копаев, Н.Н.Мельник, Письма в ЖЭТФ **63**, 260 (1996).
7. S.Tarucha, T.Honda, and T.Saku, Solid State Commun. **94**, 413 (1995).