

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ТРАНСПОРТА В СВЕРХРЕШЕТКАХ СО СЛАБОЙ ТУННЕЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ

*М. П. Теленков, Ю. А. Митягин**

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 декабря 2003 г.

Построена микроскопическая модель резонансно-туннельного транспорта во внешнем стационарном однородном электрическом поле в полупроводниковых сверхрешетках со слабой туннельной связью с учетом многоподзонного характера задачи, принимающая во внимание зависимость от электрического поля процессов рассеяния на акустических и оптических фонах, заряженных примесях и шероховатости гетерограниц. На основании данной модели проведен численный расчет профилей туннельного резонанса для структур с малыми энергиями размерного квантования. Найдено хорошее согласие с экспериментом. Показано, что в структурах указанного типа существенную роль играет зависимость процессов рассеяния от электрического поля, а также существенно проявляются пороги упругих процессов. Кроме того, для данного типа структур получена существенная асимметрия не только первого туннельного резонанса, но и туннельных резонансов более высокого порядка.

PACS: 73.21.-b, 73.40Gk, 73.61.Ey

1. ВВЕДЕНИЕ

Проявляемый в последние годы значительный интерес к изучению поперечного транспорта в полупроводниковых сверхрешетках и структурах с квантовыми ямами обусловлен прежде всего использованием явления резонансного туннелирования в таких структурах для селективной накачки верхних подзон размерного квантования, достижения инверсной заселенности подзон и создания униполярных инжекционных ИК-лазеров на межподзонных оптических переходах [1], а также открытием новых эффектов, связанных с резонансно-туннельным характером протекания тока в таких структурах, например, токовой мультистабильности [2, 3] и возникновения самоподдерживающихся высокочастотных осцилляций тока в поперечном постоянном электрическом поле [4–6]. Последний эффект представляет помимо фундаментального также и определенный прикладной интерес, поскольку частота осцилляций может варьироваться в весьма широких пределах.

В основе указанных явлений лежит резонанс-

но-туннельный характер протекания тока. При этом принципиально важную роль в туннельном транспорте играют процессы рассеяния носителей, существенным образом определяя как величину туннельного тока, так и профиль туннельного резонанса. Поэтому для математического моделирования и понимания физической сути интересующих явлений необходима достаточно близкая к реальности микроскопическая модель резонансно-туннельного транспорта с учетом различных процессов рассеяния носителей.

Построение указанной теории возможно с привлечением математического аппарата, основанного на формализме функций Грина [7]. Впервые такой подход к задаче о туннельном транспорте в сверхрешетках со слабой туннельной связью в однородном стационарном электрическом поле с использованием формализма одноэлектронных двухвременных функций Грина был применен в работах [8–10], в результате чего удалось провести учет процессов рассеяния без использования подгоночных параметров и получить согласующиеся с экспериментом плотности туннельного тока.

*E-mail: mityagin@mail1.lebedev.ru

В данной работе предлагается основанная на аналогичном подходе микроскопическая модель резонансно-туннельного транспорта в сверхрешетках и структурах из квантовых ям, позволяющая проводить расчет плотности туннельного тока и профиля туннельного резонанса из первых принципов для широкого класса сверхрешеточных структур, в том числе и для структур с малыми энергиями размерного квантования (т. е. с широкими квантовыми ямами).

Отличительной особенностью таких структур является наличие в ямах большого числа низко расположенных подзон с относительно малым межподзонным расстоянием. Важным следствием этого является то, что индуцированная электрическим полем связь между состояниями различных подзон в яме приводит к сильному и довольно сложному (в первую очередь, из-за многоподзонности задачи) влиянию электрического поля как на резонансно-туннельные механизмы переходов, так и на процессы рассеяния. Последнее является важным, и поэтому здесь, в отличие от работ [8–10], мы учитываем зависимость от поля не только механизмов туннельных переходов, но и внутриямных процессов рассеяния, принимая во внимание многоподзонный характер задачи. Изучаются процессы рассеяния на примесях, акустических и оптических фононах, а также на шероховатости гетерограниц.

Процессы рассеяния на примесях рассматриваются с учетом их экранировки. При этом при расчете экранированного потенциала системы примесей в сверхрешетке решается трехмерная задача в приближении самосогласованного поля Хартри с учетом ее многоподзонного характера. Развитый нами здесь математический аппарат, позволил нам принять во внимание влияние электрического поля на процессы рассеяния с данным механизмом. При этом данная модель учитывает влияние электрического поля также и на экранировку, что нельзя сделать, вычислив матричные элементы при нулевом поле и затем преобразовав их к новому базису. Кроме того, мы не делаем никаких приближений типа обычно используемого приближения Томаса–Ферми. Последнее, как показал численный анализ, в данном случае является важным, поскольку позволяет принять во внимание особенности в поляризованном операторе на порогах упругих процессов, за которыми довольно резко уменьшается экранировка. Это вызывает усиление процессов рассеяния и приводит к усложнению картины. Данная модель позволяет также проводить расчет для произвольного распределения примесей как вдоль оси z , так и в планар-

ной плоскости (в настоящей работе проведен численный расчет для структур с равномерным объемным легированием по всей сверхрешетке), в отличие от обычного случая δ -легирования.

Процессы рассеяния на фононах рассматриваются в приближении правила Ферми на основании математического аппарата, развитого в работе [11]. При этом учитывается зависимость собственной энергии от планарного волнового вектора, что в ряде случаев является важным, и принимаются во внимание внутриподзонные процессы рассеяния на оптических фононах, которые играют существенную роль в «хвостах» резонансов.

Процессы рассеяния на шероховатости гетерограниц мы рассматриваем в статистическом подходе [8], разбив его до получения аналитических формул для вкладов в собственную энергию в борновском приближении различных каналов рассеяния с данным механизмом, вычисляя их как функции полной энергии, планарного волнового вектора и электрического поля. Полученные нами аналитические выражения, помимо того что позволяют проводить качественный анализ, также существенно упрощают численный расчет (в частности, существенно сокращают время вычислений). Также предлагается феноменологический подход, позволяющий принимать во внимание наличие корреляции различных гетерограниц.

Развитая нами модель также позволяет учитывать (за исключением процессов рассеяния на шероховатости гетерограниц) непараболический характер подзон и корреляцию планарного и поперечного движений (зависимость от планарного волнового вектора волновых функций поперечного движения). Последнее может оказаться важным при рассмотрении транспорта в ситуации, когда величина энергии дна подзоны близка к высоте барьера.

На основании развитой теории выполнен численный расчет профилей туннельного резонанса для структур с малыми энергиями размерного квантования. Было получено хорошее согласие с экспериментом. При этом для туннельных резонансов не только первого, но и более высоких порядков были получены ширины, существенно превышающие соответствующие оценки по соотношению неопределенности с временами релаксации, рассчитанными по правилу Ферми [11–14]. Кроме того, для данного типа структур получена существенная асимметрия туннельных резонансов всех порядков.

В отличие от выводов работы [13, 14] о том, что в случае структур с широкими квантовыми ямами для высоколежащих подзон подавляюще силь-

ными по отношению к остальным являются межподзонные процессы рассеяния на оптических фонах, было показано, что не менее интенсивными для всех подзон в данных структурах также являются внутривидовые процессы рассеяния на примесях. При этом было обнаружено, что при рассмотрении туннелирования в различные подзоны их роль существенно различается, что довольно сильно проявляется в зависимости характеристик туннельного резонанса от его порядка.

Было установлено, что для структур с малыми энергиями размерного квантования существенную роль играет зависимость процессов рассеяния от электрического поля, а также существенно проявляются пороги упругих процессов.

В разд. 2 излагается общая часть теории, а также рассматривается транспорт с учетом процессов рассеяния без их конкретизации при наличии в качестве внешнего воздействия только однородного стационарного электрического поля. В разд. 3 рассмотрено рассеяние на примесях, в разд. 4 — на оптических и акустических фонах, а в разд. 5 — на шероховатости гетерограниц. В разд. 6 приведены результаты численных расчетов и их обсуждение.

2. ОСНОВНЫЕ ПРЕДПОЛОЖЕНИЯ. БАЗОВЫЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

В основе предлагаемой к рассмотрению модели лежат следующие базовые предположения. Во-первых, будем считать, что внешнее электрическое поле \mathbf{F} является стационарным, однородным и приложено против оси роста структуры (в дальнейшем ось z). Будем также пренебрегать всеми спиновыми корреляциями в электронном газе и, таким образом, рассматривать ситуацию, когда имеет место вырождение по спину. Во-вторых, электрон-электронное взаимодействие учитывается только при расчете экранированного потенциала примесей в рамках подхода самосогласованного поля Хартри и рассмотрение транспорта в сверхрешетке сводится к задаче о невзаимодействующем электронном газе во внешнем потенциале. В-третьих, туннельная связь между электронными состояниями в соседних ямах предполагается слабой — характерное время туннелирования существенно превышает характерное время внутриямной релаксации. В этом случае сверхрешетка может быть представлена в виде набора сопряженных

квантовых ям с сильно локализованными в них состояниями и можно считать, что на масштабе времен туннелирования в каждой яме имеет место равновесие со своим электрохимическим потенциалом, а вероятность туннелирования в единицу времени описывается правилом Ферми для системы невзаимодействующих электронов с плотностью состояний в ямах, рассчитанной с учетом внутриямных процессов рассеяния. При этом расчет плотностей состояний в ямах мы осуществляем без использования каких-либо подгоночных параметров с привлечением математического аппарата формализма одноэлектронных двухвременных функций Грина [7, 15], ограничиваясь при вычислении собственных энергий борновским приближением и пренебрегая интерференционным вкладом в собственную энергию различных процессов рассеяния. Также будем использовать приближение эффективной массы формализма огибающих функций [16] с эффективной массой, меняющейся скачком на границах раздела яма-барьер. Будем также пренебрегать эффектами, связанными с конечностью сверхрешетки (использовать периодические граничные условия).

В качестве исходного будем использовать базис, состоящий из произведений плоских волн, отвечающих латеральному движению, на функции Ванье, соответствующие движению вдоль оси роста структуры:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}^{\nu}(\mathbf{r}, z) = \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{S}} W_{\mathbf{k}}^{\nu}(z - nd), \quad (1)$$

где \mathbf{r} — координата в плоскости, перпендикулярной оси роста структуры (планарной плоскости), \mathbf{k} — планарный волновой вектор, S — площадь образца,

$$W_{\mathbf{k}}^{\nu}(z - nd) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-\pi/d < q \leq \pi/d} \exp(-iqnd) \varphi_{q\mathbf{k}}^{\nu}(z)$$

— квазилокализованная в яме n функция Ванье, отвечающая состоянию подзоны ν с планарным волновым вектором \mathbf{k} , N — число ям в сверхрешетке, d — ее период, q — волновой вектор Блоха, $\varphi_{q\mathbf{k}}^{\nu}(z)$ — соответствующая функция Блоха. При этом постоянные фазовые множители функций Блоха выбираются удовлетворяющими теореме Кона [17]. Тогда каждая функция Ванье является вещественной, симметричной или антисимметричной относительно центра соответствующей ямы и из всех возможных линейных комбинаций функций Блоха данной подзоны является максимально локализованной в соответствующей яме.

Как было показано в [18], внешнее электрическое поле помимо резонансно-туннельных переходов приводит к связи между состояниями различных подзон в одной яме, которую мы, как и в работе [8],

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Psi}_{n\mathbf{k}}^\nu(z, \mathbf{r}, U_d) = \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{S}} \tilde{W}_{\mathbf{k}}^\nu(z - nd, U_d), \\ \tilde{W}_{\mathbf{k}}^\nu(z - nd, U_d) = \sum_{\mu} U_{\mathbf{k}}^{\mu\nu}(U_d) W_{\mathbf{k}}^\mu(z - nd) \end{array} \right\}_{n, \mathbf{k}} \quad (2)$$

с вещественной матрицей унитарного преобразования $\{U_{\mathbf{k}}^{\nu\mu}(U_d)\}^{\nu\mu}$, элементы которой удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{\nu'} \left\{ \left[E^\nu(\mathbf{k}) - \tilde{E}^\mu(\mathbf{k}) \right] \delta^{\nu\nu'} - U_d R_0^{\nu\nu'} \right\} \times U_{\mathbf{k}}^{\nu'\mu}(U_d) = 0, \quad (3)$$

где

$$E^\nu(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{-\pi/d < q \leq \pi/d} E_{\mathbf{k}}^\nu(q)$$

— средняя энергия по зоне Блоха ν при планарном волновом векторе \mathbf{k} с законом дисперсии $E_{\mathbf{k}}^\nu(q)$ (средняя энергия электрона в соответствующем состоянии Ванье в отсутствие процессов рассеяния и электрического поля), а

$$R_0^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) = \int dz W_{\mathbf{k}}^{\nu'}(z) \frac{z}{d} W_{\mathbf{k}}^\nu(z) \quad (4)$$

описывает обусловленную электрическим полем связь между локализованными в одной яме состояниями подзон ν и ν' , каждое из которых отвечает планарному волновому вектору \mathbf{k} , $U_d = eFd$ — падение напряжения на периоде сверхрешетки, e — заряд электрона.

В отличие от работ [8–10], мы при этом не ограничиваемся только перенормировкой как одноэлектронных энергий в отсутствие процессов рассеяния, так и резонансно-туннельных матричных элементов, но и используем базис (2) при расчете собственных энергий внутриямных процессов рассеяния (даже при определении экранированного примесного потенциала), тем самым практически точно учитывая их зависимость от электрического поля. Как показывает численный анализ, это является особенно существенным при рассмотрении транспорта в структурах с малыми энергиями размерного квантования, а также при описании процессов туннелирования в высоколежащие подзоны.

В базисе (2) гамильтониан электронного газа в сверхрешетке при наличии внешнего электрического

учитываем посредством включения ее в одноэлектронные состояния, переходя к новому зависящему от электрического поля базису [18]

го поля и стационарных дефектов с полным потенциалом рассеяния

$$V_{sc}(\mathbf{r}, z) = \sum_i V_{sc,i}(\mathbf{r}, z),$$

где $V_{sc,i}(\mathbf{r}, z)$ — полный потенциал, обусловленный дефектами i -го типа, имеет вид

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_{inter}^{res} + \tilde{H}_{sc}, \quad (5)$$

где

$$\tilde{H}_0 = \sum_{n, \nu, \mathbf{k}, \sigma} \left\{ \tilde{E}_n^\nu(\mathbf{k}) \right\} a_{n\nu\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) a_{n\nu\sigma}(\mathbf{k}), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{inter}^{res} = & \sum_{\substack{n, h > 0 \\ \nu, \nu', \mathbf{k}, \sigma}} \left\{ \tilde{T}_h^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) - U_d \tilde{R}_h^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) \right\} \times \\ & \times \left[a_{n+h, \nu'\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) a_{n, \nu\sigma}(\mathbf{k}) + a_{n, \nu\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) a_{n+h, \nu'\sigma}(\mathbf{k}) \right] \quad (7) \end{aligned}$$

— часть гамильтониана, отвечающая резонансным (с сохранением планарного волнового вектора) переходам, обусловленным потенциалом сверхрешетки и электрическим полем,

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{sc} = & \sum_{\substack{i, n, h, \nu, \nu', \mathbf{k}, \mathbf{p}, \sigma \\ (h, \nu', \mathbf{p}) \neq (0, \nu, 0)}} \left[\tilde{V}_{sc,i} \right]_{n+h, n}^{\nu', \nu}(\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}) \times \\ & \times a_{(n+h)\nu'\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{p}) a_{n\nu\sigma}(\mathbf{k}) \quad (8) \end{aligned}$$

— вклад в гамильтониан, описывающий процессы рассеяния на стационарных дефектах сверхрешетки. Здесь $a_{n\nu\sigma}^\dagger$ и $a_{n\nu\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона в базисном состоянии, определенном набором квантовых чисел $\{n, \nu, \sigma\}$, где σ — спиновое квантовое число,

$$\tilde{E}_n^\nu(\mathbf{k}) = \tilde{E}^\nu(\mathbf{k}) - U_d n + \sum_i \left[\tilde{V}_{sc,i} \right]_{n, n}^{\nu, \nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}), \quad (9)$$

$$\tilde{T}_h^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\nu_1} U_{\mathbf{k}}^{\nu_1\nu'} \times \sum_{-\pi/d < q \leq \pi/d} E_{\mathbf{k}}^{\nu_1}(q) \cos(qhd) U_{\mathbf{k}}^{\nu_1\nu}, \quad (10)$$

$$\tilde{R}_h^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) = \int dz \tilde{W}_{\mathbf{k}}^{\nu'}(z - hd) \frac{z}{d} \tilde{W}_{\mathbf{k}}^{\nu}(z), \quad (11)$$

$$\left[\tilde{V}_{sc,i} \right]_{n+h,n}^{\nu',\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}) = \int dz \tilde{W}_{\mathbf{k}+\mathbf{p}}^{\nu'}(z - hd) \times \frac{1}{S} \int d^2r \exp\{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\} V_{sc,i}(z + nd, \mathbf{r}) \tilde{W}_{\mathbf{k}}^{\nu}(z). \quad (12)$$

В рамках указанных выше предположений плотность полного тока из ямы n в яму $n + 1$ дается выражением [19]

$$j_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{S} \frac{4\pi e}{\hbar} \times \sum_{\substack{\nu, \nu' \\ \mathbf{k}, \mathbf{p}}} \left| \tilde{T}_1^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{p},0} - U_d \tilde{R}_1^{\nu'\nu}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{p},0} + \sum_i \left[\tilde{V}_{sc,i} \right]_{n+1,n}^{\nu'\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}) \right|^2 \times \rho_{eff}(n, \nu, \mathbf{k}, n + 1, \nu', \mathbf{k} + \mathbf{p}), \quad (13)$$

где

$$\rho_{eff}(n, \nu, \mathbf{k}, n', \nu', \mathbf{k}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_n^{\nu}(\mathbf{k}, E) \rho_{n'}^{\nu'}(\mathbf{k}', E) [N_n(E) - N_{n'}(E)], \quad (14)$$

$$\rho_n^{\nu}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{\pi} \times \frac{\text{Im} \Sigma_n^{\nu}(\mathbf{k}, E)}{\left[E - \tilde{E}_n^{\nu}(\mathbf{k}) - \text{Re} \Sigma_n^{\nu}(\mathbf{k}, E) \right]^2 + \left[\text{Im} \Sigma_n^{\nu}(\mathbf{k}, E) \right]^2} \quad (15)$$

— вклад в приходящуюся на одну проекцию спина плотность состояний в яме n локализованного в ней состояния с квантовыми числами $\{\nu, \mathbf{k}\}$ (парциальная плотность состояний на проекцию спина, отвечающая состоянию с квантовыми числами $\{\nu, \mathbf{k}\}$ ямы n),

$$\Sigma_n^{\nu}(\mathbf{k}, E) = \sum_i \Sigma_{ni}^{\nu}(\mathbf{k}, E), \quad (16)$$

$$\Sigma_{ni}^{\nu}(\mathbf{k}, E) = \sum_{\substack{\nu_1, \mathbf{k}_1 \\ (\nu_1, \mathbf{k}_1) \neq (\nu, \mathbf{k})}} \frac{\left| \left[\tilde{V}_{sc,i} \right]_{n,n}^{\nu_1\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \right|^2}{E - \tilde{E}_n^{\nu_1}(\mathbf{k}_1) - i0} \quad (17)$$

— вклад в собственную энергию процессов рассеяния с соответствующим механизмом между состояниями, локализованными в яме n , $N_n(E)$ — функция распределения Ферми для электронов в яме n .

При всех дальнейших вычислениях будем использовать матричные элементы и квадраты модулей матричных элементов потенциалов стационарных рассеивающих центров, усредненные по случайному их распределению.

3. РАССЕЙНИЕ НА ИОНИЗОВАННЫХ ПРИМЕСЯХ

При рассмотрении примесного рассеяния считаем примеси одинаковыми положительными точечными зарядами Ze . Электрон-электронное взаимодействие учитываем только в экранированном примесном потенциале в приближении самосогласованного поля Хартри [15]. Также пренебрегаем влиянием, оказываемым на экранировку туннельными переходами и процессами внутриямного рассеяния с другими механизмами, и в качестве нулевой задачи при расчете экранированного примесного потенциала рассматриваем задачу с гамильтонианом

$$H^0 = \sum_{n, \mu, \mathbf{k}, \sigma} \left[\tilde{E}_n^{\mu}(\mathbf{k}) \right] a_{n\mu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{n\mu\sigma}(\mathbf{k}), \quad (18)$$

где $\tilde{E}_n^{\nu}(\mathbf{k}) = \tilde{E}^{\nu}(\mathbf{k}) - U_d n$, и фермиевской функцией распределения по одноэлектронным состояниям каждой ямы, $N_F(n, \mu, \mathbf{k})$. При этом поле примесей считаем включающимся мгновенно в момент времени $t = 0$ и интересуемся экранированным примесным потенциалом в момент времени $t = \infty$.

Используя метод квантовомеханического самосогласованного расчета отклика электронного газа на внешнее воздействие [15], мы получили самосогласованную систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов разложения $V_{imp}^{tot}(n, \nu, \mathbf{k})$ по базису (2) экранированного потенциала примесей в сверхрешетке, $V_{imp}^{tot}(\mathbf{r}, z)$:

$$\sum_{n', \nu'} \left\{ -k^2 \delta_{nn'} \delta^{\nu\nu'} + K_2^{\nu\nu'}(n - n', \mathbf{k}) + \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \Lambda_{nn'}^{\nu\nu'}(\mathbf{k}) \right\} V_{imp}^{tot}(n', \nu', \mathbf{k}) = \frac{4\pi Ze^2}{\varepsilon \sqrt{S}} \sum_{i=1}^{N_{imp}} \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i\} W_{\mathbf{k}}^{\nu}(z_i - nd), \quad (19)$$

и непосредственно из определения связь между коэффициентами разложения и матричным элементом экранированного примесного потенциала:

$$\begin{aligned} \langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} | n', \nu', \mathbf{k}' \rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{n_1, \nu_1} K_3^{\nu \nu' \nu_1} (n' - n, n_1 - n, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{k}') \times \\ &\quad \times V_{imp}^{tot} (n_1, \nu_1, \mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (20) \end{aligned}$$

Здесь ε — средняя диэлектрическая проницаемость сверхрешетки, N_{imp} — число примесей, точка $(\mathbf{r} = \mathbf{r}_i, z = z_i)$ — координата i -й примеси,

$$\begin{aligned} K_2^{\nu \nu'} (n - n', \mathbf{k}) &= \\ &= \int dz \tilde{W}_{\mathbf{k}}^{\nu} (z - (n - n') d) \frac{\partial^2 \tilde{W}_{\mathbf{k}}^{\nu'} (z)}{\partial z^2}, \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{nn'}^{\nu \nu'} (\mathbf{k}) &= \\ &= \sum_{\substack{n_1, \nu_1 \\ n_2, \nu_2}} \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{p}} K_3^{\nu \nu' \nu_1 \nu_2} (n_1 - n, n_2 - n, \mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{p}) \times \\ &\quad \times \frac{N_F(n_1, \nu_1, \mathbf{k} + \mathbf{p}) - N_F(n_2, \nu_2, \mathbf{p})}{\tilde{E}_{n_1}^{\nu_1} (\mathbf{k} + \mathbf{p}) - \tilde{E}_{n_2}^{\nu_2} (\mathbf{p}) - i0} \times \\ &\quad \times K_3^{\nu_1 \nu_2 \nu'} (n_2 - n_1, n' - n_1, \mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{k}), \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_3^{\nu_1 \nu_2 \nu_3} (n_2 - n_1, n_3 - n_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) &= \\ &= \int dz \tilde{W}_{\mathbf{k}_1}^{\nu_1} (z) \tilde{W}_{\mathbf{k}_2}^{\nu_2} (z - (n_2 - n_1) d) \times \\ &\quad \times \tilde{W}_{\mathbf{k}_3}^{\nu_3} (z - (n_3 - n_1) d). \quad (23) \end{aligned}$$

При усреднении по примесям считаем их распределенными независимо с однородной в плоскости слоев функцией распределения

$$F(\{\mathbf{r}_i, z_i\}_i) = \prod_{i=1}^{N_{imp}} \frac{f(z_i)}{S}.$$

Площадь образца и концентрацию примесей предполагаем такими, что полная вероятность реализации конфигураций, при которых подавляющее число примесей находится на расстоянии, превышающем эффективный радиус экранирования, близка к единице. Тогда можно пренебречь влиянием на экранировку поля данного примесного центра всеми остальными примесями.

При таких предположениях диагональный матричный элемент экранированного потенциала системы примесей и квадрат модуля матричного элемента рассеяния на примесях между состояниями данной ямы после усреднения по примесям даются соответственно выражениями

$$\begin{aligned} \langle \langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} | n, \nu, \mathbf{k} \rangle \rangle_{imp} &= \\ &= N_{imp} \int dz \langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} (\mathbf{r}_i = 0, z_i = z) \times \\ &\quad \times |n, \nu, \mathbf{k}\rangle f(z) \quad (24) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \left\langle \left| \langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} | n, \nu_1, \mathbf{k}_1 \rangle \right|^2 \right\rangle_{imp} &= \\ &= N_{imp} \int dz \left| \langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} (\mathbf{r}_i = 0, z_i = z) \times \right. \\ &\quad \left. \times |n, \nu_1, \mathbf{k}_1\rangle \right|^2 f(z), \quad (25) \end{aligned}$$

где $\langle n, \nu, \mathbf{k} | V_{imp}^{tot} (\mathbf{r}_i = 0, z_i = z) | n, \nu_1, \mathbf{k}_1 \rangle$ — соответствующий матричный элемент рассеяния на примеси, расположенной в точке $(\mathbf{r}_i = 0, z_i = z)$, без учета влияния других примесей при расчете ее экранировки.

Полученный здесь математический аппарат позволил нам, в отличие от работ [8, 9], учесть влияние электрического поля на процессы рассеяния на примесях. Это, как показал численный анализ, оказывает особенно существенное влияние на профиль туннельного резонанса для структур с малыми энергиями размерного квантования, а также является важным при описании туннелирования в высоколежащие подзоны.

Отметим также, что проведенный нами учет влияния электрического поля на экранировку нельзя осуществить, вычислив матричный элемент экранированного примесного потенциала при нулевом поле (в базисе (1)) и затем перенормировав его с помощью унитарного преобразования к базису (2).

Следует отметить, что, несмотря на квазидвумерный характер проявления порогов упругих процессов, на экранировку примесного потенциала существенное влияние также оказывает и наличие возможности движения вдоль оси роста структуры. Наиболее важным проявлением этого является то, что поляризационный оператор (22) существенным образом определяется волновыми функциями поперечного движения, которые сильно зависят от номера подзоны, а в случае структур с малыми энергиями размерного квантования и при рассмотрении туннелирования в высоколежащие подзоны — и от электрического поля. Поэтому то, что при определении экранированного примесного потенциала нами была рассмотрена трехмерная задача в полном смысле этого слова (без всяких рассуждений о квазидвумерности при расчете экранировки), в случае структур с малыми энергиями размерного квантования является, по указанным причинам, важным.

В данной работе проведен расчет для структуры с объемным равномерным легированием (что было необходимо для сопоставления с экспериментом), но в принципе представленная модель позволяет про-

водить расчет в случае с произвольным распределением примесей как вдоль оси z , так и в планарной плоскости, в отличие от обычно рассматриваемого случая δ -легирования.

Кроме того, построенный математический аппарат позволяет сразу рассчитать матричный элемент экранированного примесного потенциала (который как раз и нужен для проведения численных расчетов) с учетом вышеперечисленного, минуя как вычисление экранированного потенциала в координатном виде, так и расчет матричных элементов затривочного примесного потенциала.

4. РАССЕЯНИЕ НА ФОНОНАХ

В данной работе принимаются во внимание внутриямные процессы рассеяния с испусканием продольных полярных оптических и длинноволновых акустических фононов. При этом учет их вклада в собственную энергию внутриямного рассеяния осуществляется в приближении правила Ферми: к суммарной собственной энергии процессов рассеяния на примесях и шероховатости гетерограниц из состояния подзоны ν ямы n с планарным волновым вектором \mathbf{k} добавляется не зависящий от полной энергии E вклад вида

$$\Sigma_{opt(ac)}(n, \nu, \mathbf{k}) = \frac{i\hbar}{2\tau_{opt(ac)}(n, \nu, \mathbf{k})}, \quad (26)$$

где $\tau_{opt(ac)}^{-1}(n, \nu, \mathbf{k})$ — вклад в обратное время жизни в данном состоянии внутриямных процессов рассеяния с испусканием продольных полярных оптических и длинноволновых акустических фононов, при расчете которого мы использовали модель из работы [11], но при этом рассматривали состояния базиса (2) в качестве одноэлектронных.

В отличие от [8], в нашей работе учитывается зависимость данных механизмов рассеяния от электрического поля, что для структур с малыми энергиями размерного квантования оказало существенное влияние на профиль туннельного резонанса. Кроме того, в отличие от [8], мы учитываем внутриподзонные каналы рассеяния на фононах, которые, как показал численный анализ, играют заметную роль в хвостах резонансов, а также принимаем во внимание дисперсионную зависимость (от планарного волнового вектора) вклада в собственную энергию процессов рассеяния с данными механизмами, что также оказало довольно заметное влияние на результаты расчетов.

5. РАССЕЯНИЕ НА ШЕРОХОВАТОСТИ ГЕТЕРОГРАНИЦ

Поверхность локализованной в точке $z = z_m$ границы раздела яма–барьер (где плоскость $z = z_m$ — m -я гетерограница идеальной сверхрешетки) будем описывать флуктуационной функцией $\xi_m(\mathbf{r})$. При этом флуктуации гетерограниц будем рассматривать как случайные функции с даваемой функционалом $P[\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m]$ совместной вероятностью их реализации и будем усреднять по этим функциям все зависящие от них функционалы:

$$\begin{aligned} \langle F[\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m] \rangle_{rough} &= \\ &= \sum_{\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m} P[\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m] F[\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m] \end{aligned} \quad (27)$$

— среднее по флуктуации гетерограниц значение функционала $F[\{\xi_m(\mathbf{r})\}_m]$.

В дальнейшем при рассмотрении рассеяния на шероховатости гетерограниц будем использовать приближение параболических подзон [16]. Тогда волновые функции исходного базиса (1), отвечающие поперечному движению, не зависят от планарного волнового вектора и вычисляются при $\mathbf{k} = 0$, а одноэлектронная энергия в этом базисе в отсутствие процессов рассеяния и электрического поля зависит от планарного волнового вектора по параболическому закону:

$$\begin{aligned} E_n^\nu(\mathbf{k}) &= E_n^\nu(\mathbf{k} = 0) + \\ &+ \frac{\hbar^2}{2N} \sum_q \left\langle \varphi_{q,0}^\nu \left| \frac{1}{\tilde{m}(z)} \right| \varphi_{q,0}^\nu \right\rangle \mathbf{k}^2, \end{aligned} \quad (28)$$

где $\tilde{m}(z) = \tilde{m}_w$ или $\tilde{m}(z) = \tilde{m}_b$, если z принадлежит соответственно яме или барьеру. В дополнение к данному приближению, основываясь на слабосвязанности сверхрешетки, будем также пренебрегать различием интегралов $\langle \varphi_{q,0}^\nu | 1/\tilde{m}(z) | \varphi_{q,0}^\nu \rangle$ от $1/\tilde{m}_w$. Тогда элементы перенормировочной матрицы не зависят от планарного волнового вектора, и, следовательно, не зависят от него и волновые функции базиса (2), а дисперсия одноэлектронной энергии по планарному волновому вектору в отсутствие процессов рассеяния имеет вид

$$\tilde{E}_n^\nu(\mathbf{k}) = \tilde{E}_n^\nu(\mathbf{k} = 0) + E_{\mathbf{k}} \quad (29)$$

с $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2\tilde{m}_w$.

В используемых приближениях обусловленный наличием примесей вклад в среднюю одноэлектронную энергию (29) также не будет зависеть от планарного волнового вектора (в дальнейшем будем включать его в $\tilde{E}_n^\nu(\mathbf{k} = 0)$).

Обусловленный наличием шероховатости гетерограниц потенциал, дополнительный к потенциалу сверхрешетки, мы берем в виде [8]

$$V^{rough}(\mathbf{r}, z) = U_{SL} \sum_m \xi_m(\mathbf{r}) \delta(z - z_m), \quad (30)$$

где U_{SL} — высота барьера сверхрешетки.

Тогда усредненные по флуктуациям гетерограниц матричный элемент (30) и квадрат его модуля даются выражениями

$$\begin{aligned} [V^{rough}]_{n+h,n}^{\nu'\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}) &= \\ &= U_{SL} \sum_m \tilde{W}^{\nu'}(z_m - nd - hd) \tilde{W}^{\nu}(z_m - nd) \times \\ &\quad \times \langle \langle \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \xi_m(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}} \rangle_{rough} \end{aligned} \quad (31)$$

и

$$\begin{aligned} \left| [V^{rough}]_{n+h,n}^{\nu'\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}) \right|^2 &= \\ &= \sum_{m,m'} J_{n,h}^{\nu'\nu}(\mathbf{p}, m, m'), \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} J_{n,h}^{\nu'\nu}(\mathbf{p}, m, m') &= U_{SL}^2 \tilde{W}^{\nu'}(z_m - (n+h)d) \times \\ &\quad \times \tilde{W}^{\nu'}(z_{m'} - (n+h)d) \tilde{W}^{\nu}(z_m - nd) \tilde{W}^{\nu}(z_{m'} - nd) \times \\ &\quad \times \langle \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}) \langle \langle \xi_m(\mathbf{r}) \xi_{m'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle_{\mathbf{r}} \rangle_{rough} \rangle_{\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь введено обозначение

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}} = \frac{1}{S} \int d^2r f(\mathbf{r}).$$

Вклады (33) в квадрат модуля матричного элемента рассеяния (32) с $m = m'$ и $m \neq m'$ имеют различную природу. Первые (в [8, 10] рассматриваются только они) отвечают чистым процессам рассеяния на соответствующих гетерограницах (без учета интерференции рассеяния на различных гетерограницах) и определяются их автокорреляцией (автокорреляционными функциями). Вторые дают интерференционный вклад рассеяния на различных гетерограницах и определяются корреляцией различных гетерограниц (корреляционными функциями для различных гетерограниц).

Будем предполагать, что для каждой гетерограницы автокорреляционная функция имеет вид [20]

$$\langle \langle \xi_m(\mathbf{r}) \xi_m(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle_{\mathbf{r}} \rangle_{rough} = \eta_m^2 \exp(-R/\lambda_m). \quad (34)$$

Тогда чистый вклад рассеяния на m -й гетерогранице в квадрат модуля матричного элемента, усредненно-

го по флуктуациям гетерограниц, дается выражением [8]

$$\begin{aligned} J_{n,h}^{\nu'\nu}((\lambda_m p)^2, m, m) &= \\ &= U_{SL}^2 \left[\tilde{W}^{\nu'}(z_m - (n+h)d) \right]^2 \left[\tilde{W}^{\nu}(z_m - nd) \right]^2 \times \\ &\quad \times \eta_m^2 \frac{2\pi\lambda_m^2}{S} \frac{1}{[1 + (\lambda_m p)^2]^{3/2}}. \end{aligned} \quad (35)$$

Для каждой гетерограницы будем считать выполненным условие

$$\langle \langle \xi_m(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{r}} \rangle_{rough} = 0, \quad (36)$$

из которого непосредственно следует равенство нулю диагонального матричного элемента (31).

Тогда полный вклад в собственную энергию рассеяния на шероховатости гетерограниц в борновском приближении разбивается на сумму чистых вкладов рассеяния на каждой гетерогранице (члены с $m = m'$) и интерференционных вкладов рассеяния на различных гетерограницах (члены с $m \neq m'$):

$$\Sigma^{rough}(n, \nu, \mathbf{k}, E) = \sum_{\substack{m, m' \\ \nu_1}} \Sigma_{mm'}^{rough, \nu_1}(n, \nu, \mathbf{k}, E). \quad (37)$$

В дальнейшем при рассмотрении внутриямных процессов рассеяния на шероховатости гетерограниц будем пренебрегать вещественной частью собственной энергии.

Для мнимых частей чистых вкладов в собственную энергию процессов рассеяния на шероховатости гетерограниц нами были получены следующие аналитические выражения:

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_{mm}^{rough, \nu_1}(n, \nu, \mathbf{k}, E) &= \\ &= \frac{U_{SL}^2}{4E\lambda_m} \eta_m^2 \left[\tilde{W}^{\nu}(z_m - nd) \right]^2 \left[\tilde{W}^{\nu_1}(z_m - nd) \right]^2 \times \\ &\quad \times I_n^{\nu_1}(\lambda_m k, E, m, m) \theta(E - \tilde{E}_n^{\nu_1}(0)), \end{aligned} \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} I_n^{\nu}(\lambda_m k, E, m, m) &= 4 \left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^{\nu}(E)} \right)^2 \right]^{-1} \times \\ &\quad \times \left[1 + \left(\lambda_m k - \sqrt{\kappa_n^{\nu}(E)} \right)^2 \right]^{-1/2} \times \\ &\quad \times E \left(\left[\frac{4\lambda_m k \sqrt{\kappa_n^{\nu}(E)}}{1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^{\nu}(E)} \right)^2} \right]^{1/2} \right), \end{aligned} \quad (39)$$

$\theta(x)$ — функция Хевисайда, $E(x)$ — полный эллиптический интеграл второго рода, $\kappa_n^\nu(E) = [E - \tilde{E}_n^\nu(0)]/E_{\lambda_m}$, $E_{\lambda_m} = \hbar^2/2m_w\lambda_m^2$ — энергия размерного квантования системы с характер-

ным размером λ_m .

Интеграл (39) при любых значениях параметров может быть представлен одним из следующих рядов:

$$I_n^\nu(\lambda_m k, E, m, m) = 2\pi \left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{-1} \left[1 + \left(\lambda_m k - \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{-1/2} \times \left\{ 1 - \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\prod_{i=0}^{\ell-1} (2i+1)^2}{(2\ell-1) \prod_{i=1}^{\ell} (2i)^2} \left[\frac{4\lambda_m k \sqrt{\kappa_n^\nu(E)}}{1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2} \right]^\ell \right\}, \quad (40)$$

$$I_n^\nu(\lambda_m k, E, m, m) = 4\pi \left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{-1/2} \left[1 + \left(\lambda_m k - \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{-1/2} \times \left\{ \left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{1/2} + \left[1 + \left(\lambda_m k - \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^{-1} \times \left\{ 1 + \frac{1}{4} [y_n^\nu(\lambda_m k, E, m)]^2 + \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{\prod_{i=0}^{\ell-1} (2i+1)^2}{\prod_{i=0}^{\ell} (2i)^2} [y_n^\nu(\lambda_m k, E, m)]^{2\ell} \right\}, \quad (41)$$

где

$$y_n^\nu(\lambda_m k, E, m) = \frac{2 \left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{1/2}}{\left[1 + \left(\lambda_m k + \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{1/2} + \left[1 + \left(\lambda_m k - \sqrt{\kappa_n^\nu(E)} \right)^2 \right]^{1/2}}. \quad (42)$$

Оба ряда являются точными с монотонно убывающими членами. При этом скорость сходимости ряда (41) при любых значениях параметров больше скорости сходимости ряда (40), и поэтому при численных расчетах удобнее использовать ряд (41). Однако ряд (40) представляется более удобным при проведении аналитических вычислений.

Полученные нами аналитические выражения (38)–(42) существенным образом упрощают вычислительную процедуру без потери точности (упрощают программную реализацию и значительно уменьшают время счета), что позволило нам, в отличие от [8, 10], учесть влияние электрического поля на процессы рассеяния на шероховатости гетерограниц.

Вопрос об учете интерференции рассеяния на различных гетерограницах является более сложным. В то время как существует эксперименталь-

ная методика [20], позволяющая оценить автокорреляционную функцию, методика оценки корреляционной функции для различных гетерограниц по нашим сведениям на сегодняшний день отсутствует. Поэтому построение «точной» теории, позволяющей проводить численные расчеты с учетом корреляции различных гетерограниц, сталкивается с большими трудностями. Тем не менее есть основания полагать, что в реальных гетероструктурах по крайней мере соседние гетерограницы будут в той или иной мере скоррелированы. Поэтому в данной работе мы предлагаем излагаемый ниже феноменологический подход с конечным числом подгоночных параметров, который позволяет при численном моделировании туннельного транспорта принимать во внимание интерференцию рассеяния на различных гетерограницах.

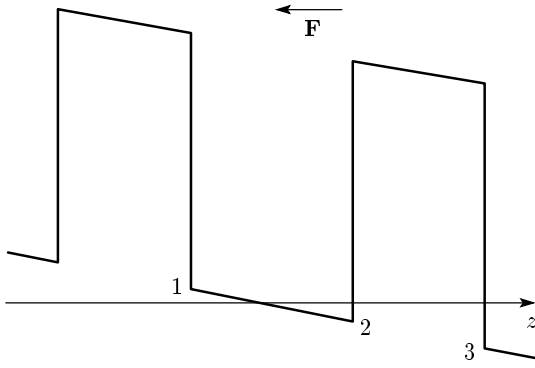


Рис. 1. Схематическое изображение сверхрешетки в электрическом поле

Поскольку рассматриваются сверхрешетки со слабой туннельной связью, во внутриямных процессах рассеяния будем учитывать интерференционный вклад только от ближайших гетерограниц соответствующей ямы (обозначим их 1 и 2), а в межъямных — только от ближайших гетерограниц соответствующего барьера (обозначим их 2 и 3), рис. 1. Для гетерограниц 1, 2 и 3 будем считать одинаковыми автокорреляционные функции,

$$\langle\langle \xi_1(\mathbf{r})\xi_1(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \rangle\rangle_{\mathbf{r}}{}_{rough} = \langle\langle \xi_2(\mathbf{r})\xi_2(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \rangle\rangle_{\mathbf{r}}{}_{rough} = \langle\langle \xi_3(\mathbf{r})\xi_3(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \rangle\rangle_{\mathbf{r}}{}_{rough} \equiv A(\mathbf{R}), \quad (43)$$

и корреляционные функции различных гетерограниц,

$$\langle\langle \xi_1(\mathbf{r})\xi_2(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \rangle\rangle_{\mathbf{r}}{}_{rough} = \langle\langle \xi_2(\mathbf{r})\xi_3(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \rangle\rangle_{\mathbf{r}}{}_{rough} \equiv K(\mathbf{R}). \quad (44)$$

Корреляцию гетерограниц будем описывать функцией (в дальнейшем — приведенная корреляционная функция)

$$g(\mathbf{p}) = \frac{\langle \exp\{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}\} K(\mathbf{R}) \rangle_{\mathbf{R}}}{\langle \exp\{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}\} A(\mathbf{R}) \rangle_{\mathbf{R}}}, \quad (45)$$

которая характеризует относительный вклад интерференции на различных гетерограницах. Ясно, что

$$|g(\mathbf{p})| < 1. \quad (46)$$

Абсолютно нескоррелированным гетерограницам отвечает значение приведенной корреляционной функции $g(\mathbf{p}) = 0$.

Случаю, когда гетерограницы максимально скоррелированы (одинаковы или инвертированы друг относительно друга), отвечает значение $|g(\mathbf{p})| = 1$ (интерференционный вклад максимален). При этом со-

ответствующий член в квадрате модуля матричного элемента имеет вид

$$J_{n,n+1}^{\nu'\nu}((\lambda p)^2, m, m') = U_{SL}^2 \tilde{W}^{\nu'}(z_m-d) \tilde{W}^{\nu'}(z_{m'}-d) \tilde{W}^{\nu}(z_m) \tilde{W}^{\nu}(z_{m'}) \eta^2 \times \frac{2\pi\lambda^2}{S} [1 + (\lambda p)^2]^{-3/2}, \quad (47)$$

а соответствующий вклад в мнимую часть собственной энергии дается выражением

$$\text{Im} \Sigma_{mm'}^{rough,\nu_1}(n, \nu, \mathbf{k}, E) = \frac{U_{SL}^2}{4E\lambda} \eta^2 \tilde{W}^{\nu}(z_m) \times \tilde{W}^{\nu}(z_{m'}) \tilde{W}^{\nu_1}(z_m) \tilde{W}^{\nu_1}(z_{m'}) \times I_n^{\nu_1}(\lambda k, E, m, m') \theta(E - \tilde{E}_n^{\nu_1}(0)). \quad (48)$$

При рассмотрении чистых вкладов мы использовали изотропные автокорреляционные функции (34), неявно при этом предполагая, что поверхности гетерограниц в среднем являются изотропными. На основании последнего предположения будем также считать корреляционную функцию для различных гетерограниц изотропной. Поскольку она является вещественнозначной аналитической функцией, приведенная корреляционная функция зависит от p^2 (разложение в ряд по \mathbf{p} содержит только четные степени модуля). Область изменений волнового вектора при рассеянии на шероховатости гетерограниц, дающая основной вклад, определяется корреляционной длиной: $\Delta p \propto \lambda^{-1}$. Для корреляционных длин 10–100 Å и концентрации электронов порядка 10^{10} см⁻² обратная корреляционная длина $\lambda^{-1} \sim (0.01-0.1)k_F$, где k_F — волновой вектор Ферми.

Фурье-образ автокорреляционной функции (34),

$$\langle \exp\{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}\} A(\mathbf{R}) \rangle_{\mathbf{R}} = \eta^2 \frac{2\pi\lambda^2}{S} [1 + (\lambda p)^2]^{-3/2}, \quad (49)$$

слабо меняется с λp . На этом основании будем предполагать также медленное изменение с λp и фурье-образа корреляционной функции для различных гетерограниц.

На основании сказанного выше приведенную корреляционную функцию (45) можно заменить рядом по $(\lambda p)^2$ с конечным числом членов,

$$g(p^2) \approx g_0 + g_1(\lambda p)^2 + g_2(\lambda p)^4 + \dots, \quad (50)$$

и коэффициенты разложения рассматривать как подгоночные параметры.

После проведения подгоночной процедуры фурье-образ корреляционной функции для различных

гетерограниц непосредственно определяется из (45) и затем используется при расчете соответствующих вкладов в квадрат модуля матричного элемента (32) и мнимую часть собственной энергии (37).

Как легко видеть из (33), роль рассеяния на шероховатости гетерограниц существенным образом определяется высотой барьера и шириной квантовой ямы (значением волновых функций на интерфейсах). Поэтому для типа структур, которые в данной работе изучаются при численном анализе, из-за довольно малой высоты барьера и довольно большой ширины квантовых ям рассеяние на шероховатости гетерограниц по сравнению с процессами рассеяния на оптических фононах и примесях оказывается слабым (чуть сильнее процессов рассеяния на акустических фононах). Однако с ростом высоты барьера и уменьшением ширины ямы роль процессов рассеяния на шероховатости гетерограниц довольно быстро растет и, как было показано в работе [21] (где проводился расчет времени рассеяния по правилу Ферми и подвижности в направлении роста структуры с использованием уравнения Больцмана, а в качестве базисных состояний были взяты состояния Блоха), для довольно широкого класса структур становится существенной. В связи с этим вопрос о роли интерференции процессов рассеяния на соседних гетерограницах является важным и требует дальнейшего изучения.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Хотя развитая нами модель позволяет проводить расчет в области электрических полей, включающих резонансы всех порядков, практически во всем диапазоне геометрических параметров структур со слабой туннельной связью, в настоящей работе мы остановимся на структурах с малыми энергиями размерного квантования, для которых наша модель позволила получить ряд ярких и довольно нетривиальных эффектов. На рис. 2 приведены рассчитанные с учетом внутриямных процессов рассеяния на продольных полярных оптических и длинноволновых акустических фононах, примесях и шероховатостях интерфейсов зависимости плотности туннельного тока от электрического поля для сверхрешетки GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As со слабой туннельной связью (ширина барьера 100 Å) и широкими (250 Å) квантовыми ямами в случае объемного равномерного легирования по всей сверхрешетке с концентрациями примесей $n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и $n_{imp} = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Расчет проведен для темпе-

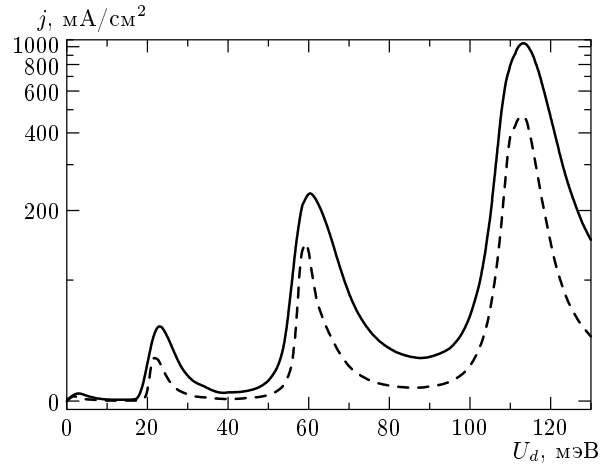


Рис. 2. Зависимости плотности туннельного тока между соседними квантовыми ямами от падения напряжения на периоде для сверхрешетки GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As (ширина ямы 250 Å, ширина барьера 100 Å). Сплошная линия — концентрация примесей $n_{imp} = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, штриховая линия — концентрация примесей $n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$

ратуры 4.2 К. Были использованы следующие параметры шероховатости гетерограниц: длина корреляции 70 Å, средняя амплитуда 3 Å. При этом мы полагали, что приведенная корреляционная функция $g(\mathbf{p}) = 0.5$. Основные характеристики резонансов (амплитуда j^{res} , полная ширина Γ на полувысоте, отношение полуширины Γ_- на полувысоте отсчитанной влево к полуширине Γ_+ на полувысоте отсчитанной вправо) для изображенных зависимостей представлены в табл. 1.

Обращают на себя внимание следующие особенности полученных нами профилей туннельного резонанса для рассматриваемых структур.

Во-первых, рассчитанные ширины резонансов существенно превышают величину, оцененную по соотношению неопределенностей с использованием времени жизни, рассчитанного по правилу Ферми [11, 13, 14], не только в случае первого резонанса, но и для резонансов более высокого порядка. В частности, для рассмотренной структуры с концентрацией примесей $n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ оценки ширины туннельных резонансов по результатам работ [11–14] дают величину, не превышающую 2 мэВ. Во-вторых, рассчитанные профили резонансов всех порядков обладают существенной асимметрией.

Как показал непосредственный численный анализ, в структурах указанного типа определяющую роль играют процессы рассеяния на оптических фо-

Таблица 1

Номер резонанса	j^{res} , мА/см ²		Γ , мэВ		Γ_-/Γ_+	
	$n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10}$ см ⁻²	$n_{imp} = 5 \cdot 10^{10}$ см ⁻²	$n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10}$ см ⁻²	$n_{imp} = 5 \cdot 10^{10}$ см ⁻²	$n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10}$ см ⁻²	$n_{imp} = 5 \cdot 10^{10}$ см ⁻²
1	2.64	4.26	3.40	5.00	0.55	0.67
2	28.70	53.87	4.43	7.35	0.48	0.62
3	146.17	232.75	5.20	11.40	0.60	0.56
4	469.67	1045.59	9.05	11.15	1.03	0.86

нонах и примесях. Вклад же процессов рассеяния на акустических фононах и шероховатости гетерограниц для рассматриваемого типа структур оказался весьма малым по сравнению с первыми двумя. Поэтому ниже мы подробно остановимся на первых двух механизмах процессов рассеяния.

Что касается рассеяния на оптических фононах, то здесь следовало бы отметить следующее. Во-первых, вклад межподзонных переходов этого типа необходимо учитывать («косые» переходы) даже в случаях, когда межподзонное расстояние меньше энергии оптического фонона. Во-вторых, хотелось бы обратить внимание на роль внутривидовых процессов рассеяния на оптических фононах. Данный канал по сравнению с межподзонными процессами рассеяния дает малый вклад в области туннельного резонанса, однако играет заметную роль в его хвосте.

Более сложная и интересная картина возникает при рассмотрении процессов рассеяния на примесях. На рис. 3 и 4 представлены соответственно зависимости от планарной энергии вкладов в мнимую часть собственной энергии внутривидовых процессов рассеяния на примесях в первой подзоне для различных полных энергий и соответствующие парциальные плотности состояний. Как непосредственно видно из приведенных рисунков, внутривидовые процессы рассеяния на примесях приводят к довольно сильной неопределенности в одноэлектронной энергии. При этом характеризующие ее вклады в мнимую часть собственной энергии довольно сильно зависят от полной энергии E . Эта зависимость, которая обязательно должна учитываться при расчете плотности туннельного тока, сказывается как на получаемой ширине и амплитуде резонанса, так и на его форме, а именно, является одной из главных причин полученной нами асимметрии резонансов высоких порядков (второго, третьего и т. д.).

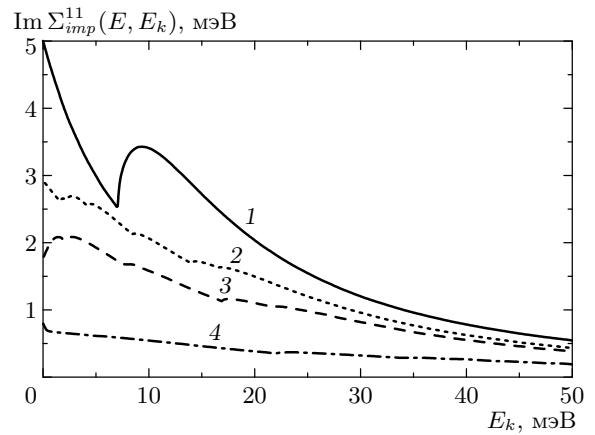


Рис. 3. Мнимая часть вклада в собственную энергию внутривидовых процессов рассеяния на примесях в первой подзоне как функция планарной энергии $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_w$ для различных полных энергий E : 1 — $E = 0$; 2 — $E = 2$ мэВ; 3 — $E = 4$ мэВ; 4 — $E = 10$ мэВ. Полные энергии отсчитываются от дна первой подзоны при данном электрическом поле с учетом примесного сдвига. Концентрация примесей $n_{imp} = 5 \cdot 10^{10}$ см⁻², $U_d = 58.93$ мэВ

При использовании правила Ферми эта зависимость не учитывается, поэтому расчет с его помощью мнимой части вклада в собственную энергию внутривидовых процессов рассеяния на примесях как функции планарной энергии (не говоря уже о введении с его помощью характерного уширения одноэлектронных состояний) в данном случае существенно снижает точность результатов.

Другим моментом, особенно важным при описании транспорта в структурах с малыми энергиями размерного квантования и при рассмотрении туннелирования в высоколежащие подзоны, является зависимость от электрического поля квазилокализо-

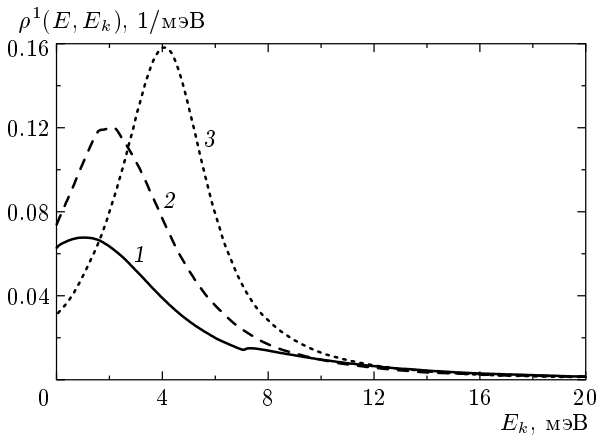


Рис. 4. Парциальные плотности состояний в яме для первой подзоны как функции планарной энергии $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_w$ при различных полных энергиях: 1 — $E = 0$; 2 — $E = 2$ мэВ; 3 — $E = 4$ мэВ. Полные энергии отсчитываются от дна первой подзоны при данном электрическом поле с учетом примесного сдвига. Концентрация примесей $n_{imp} = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $U_d = 58.93$ мэВ

ванных в ямах состояний.

Нами было установлено, что помимо зависимости от электрического поля как энергий состояний в ямах, так и туннельных матричных элементов (важность которой уже была ранее показана в [8–10]), для структур с малыми энергиями размерного квантования также сильное влияние на профиль туннельного резонанса оказывает зависимость от электрического поля процессов рассеяния. На рис. 5а приведены профили туннельного резонанса, рассчитанные без учета и с учетом зависимости процессов рассеяния от электрического поля (зависимость от электрического поля энергий состояний в ямах и туннельных матричных элементов учтена в обоих случаях). Соответствующие резонансные характеристики приведены в табл. 2. Видно, что влияние электрического поля на процессы рассеяния сказывается на амплитуде туннельного резонанса и, особенно, на его ширине и асимметрии.

Весьма существенным оказался учет зависимости от электрического поля как процессов рассеяния на оптических фононах (то, что эта зависимость для структур с малыми энергиями размерного квантования является сильной, было показано еще в работе [11]), так и внутривозонных процессов рассеяния на примесях, принять в должной мере во внимание которую позволил развитый нами математический аппарат, представленный в разд. 3. Сказанное иллю-

стрирует рис. 5а, где приведены зависимости плотности туннельного тока, рассчитанные с учетом и без учета зависимости процессов рассеяния от электрического поля.

При изучении процессов рассеяния на примесях в нашем случае важным является еще и следующий момент. Обычно при расчете экранированного примесного потенциала используется приближение Томаса–Ферми (например, для случая широких квантовых ям [13, 14]), которое не учитывает наличия порогов упругих процессов. Однако нами было установлено, что последние в случае структур с малыми энергиями размерного квантования играют существенную роль, оказывая сильное влияние на профиль туннельного резонанса. Это хорошо видно из рис. 5б, где приведены профили туннельного резонанса третьего порядка, рассчитанные с учетом и без учета порогов упругих процессов. Соответствующие резонансные характеристики для обоих случаев представлены в табл. 3. Видно, что учет порогов упругих процессов существенно влияет как на амплитуду, так и на ширину и асимметрию туннельного резонанса.

Тот факт, что в нашем случае пороги упругих процессов проявляются существенным образом, также легко видеть из рис. 4. Особенности в зависимостях, представленных на данном рисунке, обусловлены характером поведения поляризационного оператора (22) вблизи порога упругих процессов, за которым происходит резкое уменьшение поляризационного оператора, приводящее к сильному ослаблению экранировки и, соответственно, усилению процессов рассеяния. При этом интенсивность рассеяния достаточно велика и планарная энергия, начиная с которой проявляется порог упругих процессов, довольно быстро уменьшается с ростом полной энергии. Поэтому указанные особенности существенно сказываются на профиле туннельного резонанса.

Нами была обнаружена также необычная зависимость характеристик туннельного резонанса от его порядка. Как правило, считается, что различия между резонансами порядка выше первого обусловлены, главным образом, различием матричных элементов туннельных переходов, определяющих соответствующие резонансы, и разной интенсивностью рассеяния на оптических фононах для различных подзон. Однако результаты наших расчетов свидетельствуют о том, что различие характеристик резонансов разных порядков обусловлено не в меньшей степени и внутривозонными процессами рассеяния на примесях в соответствующих подзонах (межподзонные процессы рассеяния на примесях, процессы рассея-

Таблица 2

	Без учета зависимости процессов рассеяния от электрического поля	С учетом зависимости процессов рассеяния от электрического поля
U_d^{res} , мЭВ	59.34	59.14
j^{res} , мА/см ²	123.06	146.17
Γ , мЭВ	7.26	5.20
Γ_-/Γ_+	0.47	0.60

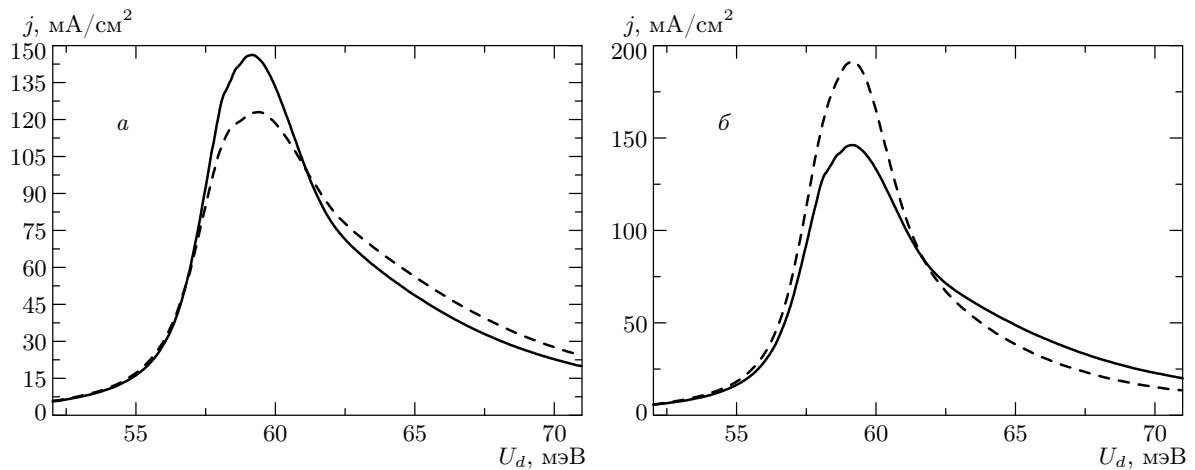


Рис. 5. Фрагменты зависимостей плотности туннельного тока между соседними квантовыми ямами от падения напряжения на периоде для сверхрешетки GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As в области электрических полей в окрестности третьего резонанса, рассчитанные с учетом (сплошная линия) и без учета (штриховая линия) зависимости от электрического поля внутривозонных процессов рассеяния (а) и порогов упругих процессов (б). Концентрация примесей $n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$

ния на шероховатости гетерограниц и акустических фононах в нашем случае очень малы). Это хорошо видно из того, что изменения концентрации примесей существенным образом меняет как ширину, так и асимметрию резонансов всех порядков (см. рис. 2), причем величина таких изменений существенно зависит от порядка резонанса.

С использованием полученного нами профиля туннельного резонанса с помощью дискретной модели резонансно-туннельного транспорта в сверхрешетках [3] была рассчитана вольт-амперная характеристика сверхрешетки GaAs/AlGaAs, приведенная на рис. 6 наряду с экспериментально измеренной. Как видно, наблюдается хорошее согласие данных расчета с экспериментом.

Хотя в настоящей работе мы акцентируем свое внимание на задаче о туннельном транспорте в

Таблица 3

	Без учета порогов упругих процессов	С учетом порогов упругих процессов
j^{res} , мА/см ²	191.72	146.17
Γ , мЭВ	4.05	5.20
Γ_-/Γ_+	0.84	0.60

сверхрешетках с малыми энергиями размерного квантования под действием внешнего однородного электрического поля в случае отсутствия других внешних воздействий, представленная к рассмотрению модель имеет большую общность и может быть привлечена для решения более

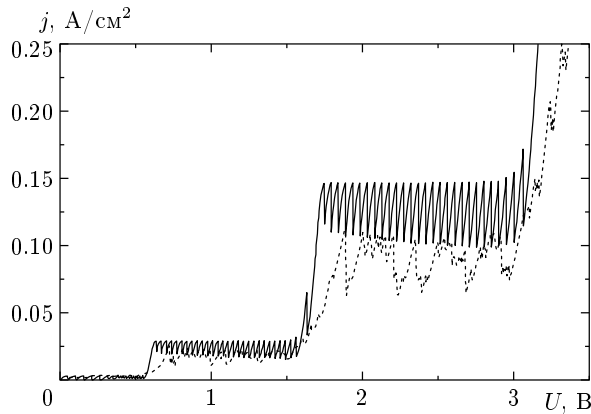


Рис. 6. Рассчитанная с использованием представленного на рис. 2 (концентрация примесей $n_{imp} = 1.75 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$) профиля туннельного резонанса (сплошная линия) и экспериментально измеренная (пунктирная линия) вольт-амперные характеристики

широкого диапазона задач, возникающих при изучении транспорта в сверхрешетках со слабой туннельной связью. Помимо описания транспорта в сверхрешетках в стационарном однородном электрическом поле общая часть предлагаемой теории и ряд используемых при решении задач указанного типа идей и приемов могут быть использованы при изучении влияния на транспорт различных видов стационарных воздействий, таких как неоднородное электрическое поле, магнитное поле и т. д.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 03-02-16663).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Faist, F. Capasso, D. Sirtori, A. L. Hutchinson et al., *Science* **264**, 553 (1994).
2. J. Kastrup, H. T. Grahn, K. Ploog et al., *Appl. Phys. Lett.* **65**, 1808 (1994).
3. Ю. А. Митягин, В. Н. Мурзин, *Письма в ЖЭТФ* **64**, 155 (1996).
4. A. Wacker, F. Prengel, and E. Scholl, in *Proc. 22nd Int. Conf. Phys. Semicond.*, ed. by D. J. Lockwood, World Scientific, Singapore (1995), p. 1075.
5. H. T. Grahn, J. Kastrup, K. Ploog et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, 4526 (1995).
6. J. Kastrup, R. Klann, T. H. Grahn et al., *Phys. Rev. B* **52**, 13761 (1995).
7. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Добросвет, Москва (1988).
8. A. Wacker, in *Theory of Transport Properties of Semiconductor Nanostructures*, ed. by E. Schöll, Chapman and Hall, London (1998), p. 321.
9. A. Wacker, A.-P. Jauho, S. Zeuner, and S. J. Allen, *Phys. Rev. B* **56**, 13268 (1997).
10. A. Wacker and A.-P. Jauho, *Phys. Scripta* **69**, 321 (1997).
11. R. Ferreira and G. Bastard, *Phys. Rev. B* **40**, 1074 (1989).
12. В. Н. Мурзин, Ю. А. Митягин, *УФН* **169**, 464 (1999).
13. В. А. Чуенков, В. Н. Мурзин, Ю. А. Митягин, Л. Ю. Щурова, *Изв. РАН, сер. физ.* **65**, 264 (2001).
14. V. N. Murzin, Yu. A. Mityagin, V. A. Chuenkov et al., *Physica E* **7**, 58 (2000).
15. У. Харрисон, *Теория твердого тела*, под ред. Р. А. Сурица, Мир, Москва (1972), сс. 243, 325.
16. G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique, Les Ulis (1998), p. 63.
17. W. Kohn, *Phys. Rev.* **115**, 809 (1959).
18. Р. Ф. Казаринов, Р. А. Сурица, *ФТП* **6**, 148 (1972).
19. G. D. Mahan, *Many-particle Physics*, Plenum, New York (1990).
20. S. M. Goodnick, D. K. Ferry, C. W. Wilmsen et al., *Phys. Rev. B* **32**, 8171 (1985).
21. I. Dharsssi and P. N. Butcher, *J. Phys. C: Condens. Matter* **2**, 4629 (1990).