

## ЗОННА СТРУКТУРА КОРОТКОПЕРІОДИЧНИХ НАДГРАТОК GaAs/AlAs

В *sps*\*-моделі сильного зв'язку теоретично досліджується енергетична зонна структура короткоперіодичних надграток  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ . Проаналізовано вплив станів об'ємних матеріалів на формування нижніх підзон провідності надгратки в залежності від товщини напівпровідникових шарів GaAs та AlAs. Визначено області існування прямозонних та непрямозонних надграток різного типу.

Однією з основних особливостей надграток (НГ)  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  є існування різних типів НГ в залежності від товщини шарів напівпровідників GaAs та AlAs. Так, при товщині шару GaAs менше 3.5 нм (кількість моношарів  $n < 12$ ) відбувається перехід від прямозонних НГ (тип I) до непрямозонних НГ (тип II) [1]. Для НГ першого типу максимум валентної зони та мінімум зони провідності формується  $\Gamma$ -станами GaAs, тоді як для непрямозонної НГ дно зони провідності утворюється з  $X_z$ -станів AlAs. В непрямозонних НГ оптичні переходи відбуваються за участю носіїв двох сусідніх напівпровідникових шарів і є непрямыми в реальному просторі. Для дуже малих товщин напівпровідникових шарів ( $n < 3$ ) спостерігається перехід до НГ II типу, дно зони провідності яких формується в основному  $X_{x,y}$ -станами AlAs [1]. В цьому випадку оптичні переходи є непрямыми також і в імпульсному просторі НГ. Теоретичні розрахунки електронного спектру НГ, виконані в різних моделях, дозволяють отримати непогане пояснення переходів [2], однак цілісна картина зміни типів НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  в залежності від товщини напівпровідникових шарів відсутня. Крім того, основна увага зосереджувалася на вивченні симетричних НГ ( $n=m$ ), тоді як

дослідження фотолюмінесценції асиметричних короткоперіодичних надграток ( $m=n/2$ ) виявили ряд цікавих особливостей структур з різною товщиною шарів [3].

В даній роботі вивчається енергетична зонна структура короткоперіодичних НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  для цілого набору товщин напівпровідникових шарів. Розрахунок спектру виконано в  $sps^*$ -моделі сильного зв'язку. В даній моделі для опису збуджених станів в звичайній  $sp$ -базис сильного зв'язку включають катіонні і аніонні  $s^*$ -орбіталі. Таке розширення базису дозволяє більш точно описати поведінку зони провідності об'ємного матеріалу в точках  $X$  і  $L$ , що особливо важливо для непрямозонного напівпровідника AlAs, мінімум дна зони провідності якого знаходиться в околі точки  $X$

Геометричну структуру НГ можна представити як сукупність атомних площин, перпендикулярних виділеному напрямку – напрямку росту НГ. Для тетраедричних бінарних напівпровідників GaAs, AlAs для напрямку росту  $[001]$  кожна атомна площина містить атоми одного типу, причому площини різного типу чергуються між собою. Пара таких площин складає моношар НГ. Вирази для матриці гамільтоніану НГ в  $sps^*$ - моделі сильного зв'язку і детальне обговорення застосованих наближень можна знайти в [1].

Розрахунок спектрів надграток проведено для різних товщин напівпровідникових шарів ( $2 \leq n, m \leq 14$ ), які дозволяють прослідкувати за виникненням всіх можливих типів НГ. На рис. 1 приведені величини енергій найнижчих підзон провідності НГ в двох точках  $\Gamma$  і  $X$  зони Бріллюена (ЗБ) надгратки в залежності від кількості моношарів  $m$  при фіксованих значеннях  $n=3,8$ . Величини енергій відраховуються від краю валентної зони НГ, тобто фактично є шириною забороненої зони НГ в точках  $\Gamma$  і  $X$ . Позначення  $\Gamma_c, X_z, X_{x,y}$  вказують на походження того чи іншого рівня відповідно з  $\Gamma_c$ -станів GaAs та  $X_z, X_{x,y}$ -станів AlAs. Величина внеску даних станів в формування підзон НГ визначалася з аналізу власних векторів відповідних секулярних матриць. Підзони в точці  $\Gamma$  надгратки виникають в результаті змішування станів точки  $\Gamma$  GaAs та станів AlAs в точці  $X$ , так як саме останні знаходяться в актуальній області енергій ( $\Gamma_c - X_z$  - змішування). Їх взаємне розміщення і визначає тип

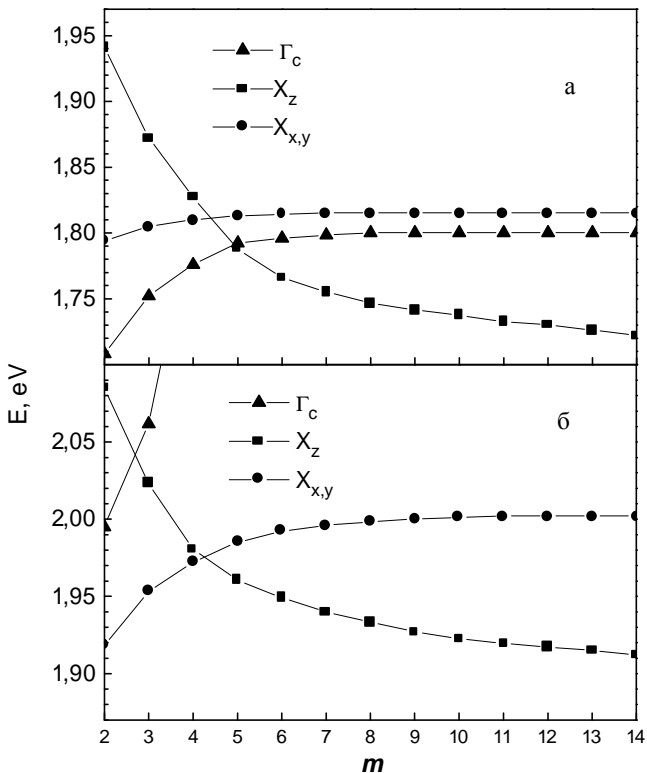


Рис. 1. Найнижчі енергетичні підзони провідності НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  в точках  $\Gamma$  і  $X$  ЗБ в залежності від  $m$ . а –  $n=8$ , б –  $n=3$ .

НГ. При  $n < 5$  (рис.1.а) нижчим є рівень, переважаючий вклад в який дають  $\Gamma_c$  – стани GaAs, і надгратка є прямозонною (НГ типу I). При  $n \geq 5$  найнижчим є рівень, основний вклад в який дають  $X_z$  стани AlAs і надгратка належить до типу II. При менших значеннях товщини напівпровідникових шарів GaAs (менших  $n$ ) даний перехід відбувається при менших  $m$ , так для  $n=3$  (рис. 1.б) перетин двох кривих має місце при  $m < 3$ . Проте, як видно з рис.1.б, для НГ з  $n=3$  при  $n \leq 4$  найнижчим по енергії є рівень  $X_{x,y}$ . Це означає, що мінімум зони провідності знаходиться не в точці  $\Gamma$ , а в точці  $X$  ЗБ надгратки.

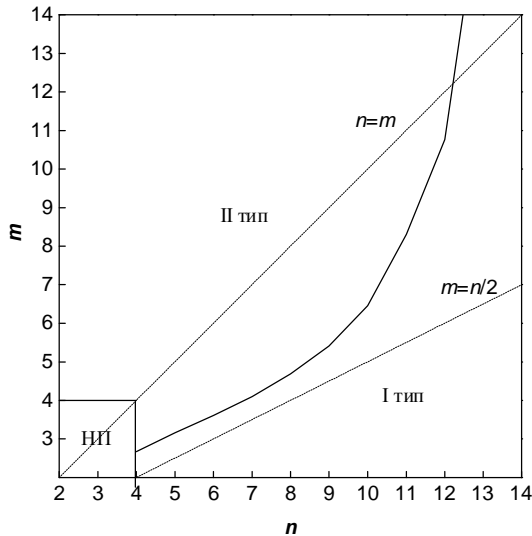


Рис. 2. Типи надграток  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ .

Оптичні переходи в таких системах є непрямыми і в імпульсному просторі і НГ належать до типу непрямих (НП) надграток. Зміна типу НГ для малих  $n=m=2$  спостерігалася експериментально при вивченні особливостей спектрів фотолюмінесценції короткоперіодичних НГ [3].

Результати аналізу внеску станів GaAs і AlAs в формування нижніх підзон провідності НГ систематизовані на рис.2, де визначено області існування можливих типів НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ . Для НГ з кількістю моношарів GaAs  $n>12$  надгратки є прямозонними для любых  $m$ . Цей факт підтверджується експериментально і співпадає з теоретичними результатами, отриманими в інших моделях [2]. Для  $n<12$  НГ можуть бути двох типів, причому при  $n, m \leq 4$  НГ є непрямыми. Пунктирними лініями на рисунку приведені прямі, що відповідають симетричним та асиметричним НГ. В [3] встановлено, що всі досліджувані асиметричні НГ є прямозонними, що добре узгоджується з нашими

теоретичними оцінками. Слід відмітити, що НГ з дещо більшим  $m$  ніж для асиметричних НГ, (зокрема НГ 6/4, 7/5), належать до НГ типу II, що також підтверджується на рис. 2.

Проведені дослідження енергетичної зонної структури дозволили проаналізувати вплив станів об'ємних матеріалів на формування нижніх підзон провідності НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  та визначити області існування різних типів НГ. Модель  $sps^*$ , незважаючи на деякі розбіжності з експериментальними даними в області малих  $n$  і  $m$ , дозволяє адекватно відомим експериментальним результатам та іншим, більш складним теоретичним моделям, описати зонну структуру НГ  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ .

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Analysis of Photoluminescence Spectra Peculiarities of Short-Period GaAs/AlAs Superlattices / Korbutyak D.V., Krylyuk S.G., Litovchenko V.G., Melnychuk, S.V., Studenets V.I., Yuriychuk I.M. // Phys. Low-Dim. Struct.–1996.-**11/12**.-P. 97-108.
2. Yan-Ten Lu, Sham L.J. Valley mixing effects in short-period superlattices // Phys.Rev.B.–1989.-**40**, №8.–P.5567-5578.
3. Особливості спектрів фотолюмінесценції асиметричних короткоперіодичних надграток GaAs/AlAs / Корбутяк Д.В., Крилюк С.Г., Литовченко В.Г., Деверіц Л., Гран Х., Хей Р., Плог К. // УФЖ.–1998.-**43**, №1.-С. 116-118.

#### SUMMARY

YURIJCHUK I.M.

#### **BAND STRUCTURE OF SHORT-PERIOD SUPERLATTICES GaAs/AlAs**

Energy band structure of short-period  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$  superlattices is investigated in the frame of  $sps^*$ -tight-binding model. Influence of bulk semiconductor states on formation of low conduction subbands of superlattice for different width of GaAs and AlAs layers is analyzed. The ranges of existence of direct and indirect superlattices are defined.