

Особенности рассеяния электронов на гетерограницах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}(001)$

© С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваяв[†], В.Н. Чернышов

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 2 сентября 2002 г. Принята к печати 3 сентября 2002 г.)

Исследован эффект полного отражения электронной волны от гетерограницы для структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$. Анализ проведен на основе расчетов по методу псевдопотенциала, а также аналитически и численно в рамках упрощенной трехдолинной модели. Показано, что появление нуля в коэффициенте прохождения электронов через гетерограницу $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$, обнаруживаемое при некоторой энергии в интервале между дном X_1 -долины AlAs и X_1 -долины $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, обусловлено многодолинным характером энергетического спектра электронов. Установлено, что это полное отражение реализуется за счет взаимной компенсации вкладов от различных долин и не связано с каким-либо резонансным интерфейсным состоянием.

1. Введение

Исследованию электронных процессов в полупроводниковых гетероструктурах уделяется большое внимание. Особый интерес представляет изучение так называемого Γ - X смешивания электронов на гетерограницах полупроводников $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}(001)$. Различные проявления этого смешивания исследованы как в теории, так и в эксперименте [1–15]. Однако до сих пор осталось не исследованным обнаруженное в теоретических расчетах полное отражение электронной волны от гетерограницы при некоторой вполне определенной энергии электрона. Обсудим подробнее этот эффект на примере гетероструктуры GaAs/AlAs . Минимум зоны проводимости GaAs реализуется в точке Γ зоны Бриллюэна, дополнительный минимум, представляющий для нас интерес, располагается вблизи точки $X(001)$, формируя так называемую „двугорбую“ структуру (ДГ). Минимум зоны проводимости AlAs располагается в точке X зоны Бриллюэна, а аналог ДГ структуры реализуется в области комплексных значений волновых векторов при более низких значениях энергии. В силу неравенства $E_\Gamma(\text{GaAs}) < E_X(\text{AlAs}) < E_X(\text{GaAs})$ существует интервал энергии от дна зоны проводимости AlAs до минимума E_0 ДГ структуры в GaAs , в котором слева и справа от гетерограницы $\text{GaAs}/\text{AlAs}(001)$ могут существовать по две распространяющиеся волны — Γ в слое GaAs и X в слое AlAs . Прохождение электронной волны через гетероструктуру $\text{GaAs}/\text{AlAs}(001)$ обязано сопровождаться ее Γ - X конверсией, поэтому последняя играет важную роль и привлекает большое внимание. Вот именно в этом интервале энергий существует такое ее значение, при котором электронная волна испытывает полное отражение от гетерограницы. Первое указание на появления нуля в коэффициенте прохождения содержится в работе Андо и Акеры [11], которые обнаружили его в расчетах коэффициента прохождения электрона через гетерограницу в структуре $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}/\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$. Авторы [11]

высказали предположение, что появление нуля связано с существованием резонансного интерфейсного состояния, сформированного из затухающих волн при энергиях вблизи дна ДГ структуры $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$ и X -уровня в $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$. В наших расчетах также обнаруживается нуль в коэффициенте прохождения электронных волн через структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}(001)$ в интервале энергий от X_1 -уровня AlAs до X_1 -уровня $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Настоящая работа посвящена исследованию причин появления этого нуля на основе расчетов по методу псевдопотенциала, а также аналитически и численно в рамках упрощенной трехдолинной модели.

2. Псевдопотенциальный расчет

Расчет туннелирования электронов через границу $\text{GaAs}/\text{AlAs}(0010)$ выполнен в модели с разрывным на гетерогранице потенциалом. Гетерограницей для данной системы выбрана кристаллическая плоскость ($z = 0$), состоящая из общих для обоих компонентов гетероструктуры атомов мышьяка. Кратко рассмотрим основные моменты при решении задачи. Подробно метод расчета описан в работах [12,13]. Будем считать, что GaAs расположен слева от гетерограницы (в области $z < 0$), AlAs — справа. Общие решения уравнения Шредингера Ψ^n в областях с номером n ($n = \alpha$ для GaAs , $n = \beta$ для AlAs) при заданных значениях энергии E и параллельной границе составляющей волнового вектора \mathbf{k}_\parallel можно представить в виде

$$\Psi^n = \sum_\nu A_\nu^n \Psi_{\mathbf{k}_\nu^n} + \sum_\mu B_\mu^n \Psi_{\mathbf{k}_\mu^n}, \quad (1)$$

где $\mathbf{k}_{\nu(\mu)}^n = \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{k}_{z\nu(\mu)}^n$ — волновые векторы для подсистемы n , $\mathbf{k}_{z\nu(\mu)}^n = k_{z\nu(\mu)}^n \mathbf{n}_z$, \mathbf{n}_z — вектор нормали к границе, числа $k_{z\nu(\mu)}^n$ могут быть комплексными, $\Psi_{\mathbf{k}_\nu^n}$ — частные решения уравнения Шредингера в среде с номером n , соответствующие волновому вектору $\mathbf{k}_{\nu(\mu)}^n$. Индексом ν обозначены волны, распространяющиеся (затухающие) слева направо, индексом μ — распространяющиеся

[†] E-mail: karavaev@elefot.tsu.ru
Fax: (382-2) 233 015

(затухающие) справа налево. Коэффициенты A_v^n и B_μ^n в (1) находятся из условий сшивания на гетерогранице и условий на бесконечности. Условия сшивания, т.е. условия непрерывности волновых функций и их первых производных на гетерогранице, можно записать, используя матрицу рассеяния \mathbf{S} [2,12–15], в виде

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^\beta \\ \mathbf{B}^\alpha \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^\alpha \\ \mathbf{B}^\beta \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где \mathbf{A}^n и \mathbf{B}^n — векторы-столбцы с компонентами A_v^n и B_μ^n соответственно. Размерность матрицы \mathbf{S} равна числу частных решений, входящих в (1).

Соотношение (2) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^\beta &= \mathbf{S}_{11}\mathbf{A}^\alpha + \mathbf{S}_{12}\mathbf{B}^\beta, \\ \mathbf{B}^\alpha &= \mathbf{S}_{21}\mathbf{A}^\alpha + \mathbf{S}_{22}\mathbf{B}^\beta, \end{aligned} \quad (3)$$

где \mathbf{S}_{ij} ($i, j = 1, 2$) — квадратные матрицы с размерностью, вдвое меньшей, чем размерность \mathbf{S} . Рассмотрим задачу о прохождении электронной волны слева направо, т.е. из GaAs в AlAs. В этом случае в (1) не должно быть волн, движущихся справа налево в AlAs, а также решений $\Psi_{\mathbf{k}_{v(\mu)}}^n$, неограниченно возрастающих при удалении от гетерограницы. Для выполнения этих условий надо положить: $\mathbf{B}^\beta = 0$, $A_v^\alpha = \delta_{v\nu_0}$, где ν_0 — номер падающей волны. Тогда (3) приобретает вид

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^\beta &= \mathbf{S}_{11}\mathbf{A}^\alpha, \\ \mathbf{B}^\alpha &= \mathbf{S}_{21}\mathbf{A}^\alpha. \end{aligned} \quad (4)$$

Коэффициент прохождения электронов из состояния с номером ν_0 в GaAs в состояние с номером ν в AlAs, при условии нормировки волновых функций этих состояний на групповые скорости в средах, равен

$$P_{\nu\nu_0} = |A_\nu^\beta|^2 = |(\mathbf{S}_{11})_{\nu\nu_0}|^2. \quad (5)$$

Таким образом, для решения задачи о туннелировании электронов необходимо вычислить элементы матрицы \mathbf{S}_{11} . Эти матричные элементы можно записать в виде [12]

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_{11})_{\nu\nu_0} &= (\mathbf{Q}_2^{-1}\mathbf{Q}_1)_{\nu\nu_0}, \\ \mathbf{Q}_2 &= (\mathbf{P}_2^\alpha)^{-1}\mathbf{P}_1^\beta - (\mathbf{D}_2^\alpha)^{-1}\mathbf{D}_1^\beta, \\ \mathbf{Q}_1 &= (\mathbf{P}_2^\alpha)^{-1}\mathbf{P}_1^\alpha - (\mathbf{D}_2^\alpha)^{-1}\mathbf{D}_1^\alpha, \end{aligned} \quad (6)$$

где \mathbf{D}_i^n , \mathbf{P}_i^n ($i = 1, 2$) — матрицы, элементы которых являются фурье-компонентами проекций на границу частных решений $\Psi_{\mathbf{k}_v^n}$ ($i = 1$) и $\Psi_{\mathbf{k}_\mu^n}$ ($i = 2$), а также их первых производных соответственно.

Для нахождения функций $\Psi_{\mathbf{k}_{v(\mu)}}^n$ применен метод псевдопотенциала с использованием локальных атомных псевдопотенциалов, определенных в [16] на основе экспериментальных данных и результатов первопринципных расчетов зонного спектра GaAs и AlAs. При использовании этих потенциалов при $\mathbf{k}_\parallel = 0$ получается

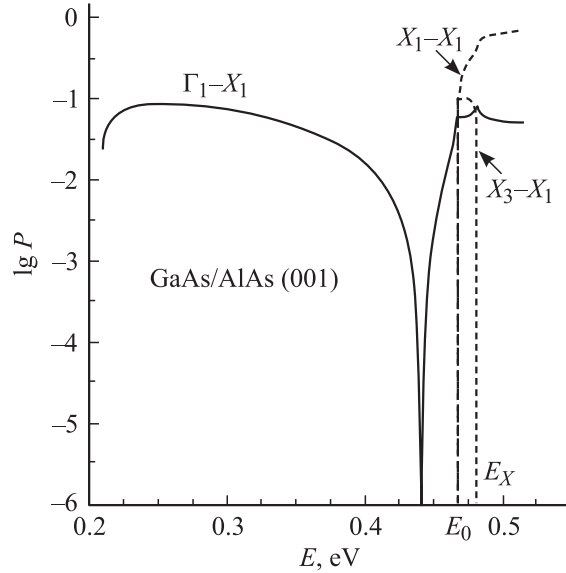


Рис. 1. Коэффициент прохождения электронов $P(E)$ через одну границу GaAs/AlAs(001) из Γ_1 -, X_1 - и X_3 -долин GaAs в X_1 -долину AlAs. Энергии E_0 и E_X отвечают дну ДГ структуры и экстремуму зоны проводимости в точке X GaAs соответственно.

42 независимых частных решения $\Psi_{\mathbf{k}_{v(\mu)}}^n$ уравнения Шредингера в каждой из сред, и, следовательно, матрица рассеяния \mathbf{S} имеет размерность (42×42) . Для повышения точности вычислений в разложении волновых функций было дополнительно к базису из плоских волн учтено по теории возмущений Левдина около 150 плоских волн.

На рис. 1 приведены коэффициенты $P(E)$ прохождения из Γ - и X -долин нижней зоны проводимости GaAs в X_1 -долину AlAs для случая $\mathbf{k}_\parallel = 0$, что соответствует распространению электронов в нормальном к гетерогранице направлении. Энергии отсчитаны от дна зоны проводимости GaAs. Экстремумы X_1 -долин в GaAs и AlAs находятся при энергиях E_X , равных 0.4818 и 0.2082 эВ соответственно, а дно ДГ структуры GaAs — при энергии $E_0 = 0.4672$ эВ. При энергии $E_4 = 0.441$ эВ имеет место полное отражение электронной волны. Состояния с данной энергией в дальнейшем будем обозначать как ПО состояния.

На рис. 2 показано распределение усредненной в плоскости границы плотности вероятности двух ПО состояний, соответствующих падению электронов на гетерограницу как слева (сплошная линия), так и справа (пунктирная линия). При рассеянии электронов из Γ_1 -долины GaAs в X_1 -долину AlAs в области-GaAs вдали от границы плотность осциллирует за счет интерференции падающих и отраженных Γ -волн. Осцилляции с большим периодом определяются поведением огибающих волновых функций, частые осцилляции связаны с изменением периодических функций. При рассеянии электронов из X_1 -долины AlAs в Γ_1 -долину GaAs плотность ПО состояния увеличивается за счет уменьшения

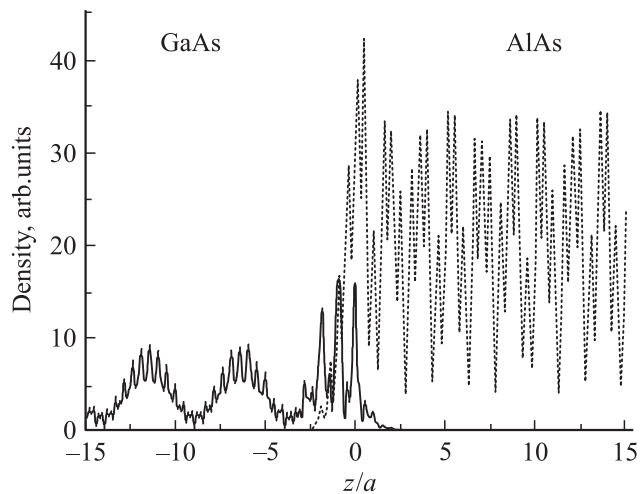


Рис. 2. Усредненная в плоскости границы (001) плотность вероятности ПО состояний при $\Gamma_1(\text{GaAs}) \rightarrow X_1(\text{AlAs})$ (сплошная линия) и $X_1(\text{AlAs}) \rightarrow \Gamma_1(\text{GaAs})$ (пунктирная линия) рассеяния электрона. a — постоянная решетки, z — координата вдоль оси гетероструктуры.

групповой скорости электронов, кроме того, из-за близости периодов огибающих функций и периодических частей блоховских функций в ней возникают биения. Как видно из рис. 2, в обоих случаях наблюдается лишь небольшой всплеск амплитуды плотности вблизи гетерограницы, поэтому ПО состояния вряд ли могут считаться резонансными интерфейсными состояниями. Расчеты показывают, что и для состояний с энергиями, близкими к E_d , нет никаких особенностей в электронной плотности вблизи гетерограницы.

Известно, что резонансные состояния характерным образом проявляют себя в матрице рассеяния, а именно, при наличии резонансных состояний матрица рассеяния должна иметь полюс вблизи вещественной оси энергии. Применительно к нашей задаче это утверждение следует из соотношений (2) и (4). Для выяснения характера ПО состояний мы рассмотрели диаграмму Арганда для элемента матрицы рассеяния $(S_{11})_{X\Gamma}$, связывающего амплитуды прошедшей в X_1 -долину AlAs и налетающей из Γ_1 -долины GaAs волн [17]. При наличии у структуры изолированного резонансного состояния эта диаграмма должна представлять собой круг, параметры которого связаны с положением полюса матрицы рассеяния в комплексной области энергии. В данном случае диаграмма напоминает лишь часть круга (рис. 3), поэтому ей не отвечает полностью сформировавшийся резонанс. Непосредственные расчеты матрицы рассеяния в области комплексных энергий подтвердили, что действительно вблизи вещественной оси энергии у нее полюса нет.

Прохождение электронной волны через границу можно рассматривать как результат взаимодействия различных „виртуальных“ процессов. Из формулы (6) для матричного элемента $(S_{11})_{X\Gamma}$ следует, что налетающая Γ_1 -волна сначала преобразуется в отраженные волны

в GaAs (посредством матрицы \mathbf{Q}_1), которые затем преобразуются в прошедшую X_1 -волну AlAs (посредством матрицы \mathbf{Q}_2). „Виртуальным“ процессам отвечают различные слагаемые в произведении матриц $(\mathbf{Q}_2^{-1}\mathbf{Q}_1)_{X\Gamma}$. Основные вклады в эту сумму дают слагаемые, связанные с преобразованием отраженных Γ_1 -, X_1 - и X_3 -волн, причем в окрестности энергии E_d главную роль играют X -волны. Для энергий, меньших E_0 , обозначения X_1 и X_3 соответствуют двум состояниям ДГ структуры GaAs. На рис. 3 на диаграмме Арганда показаны парциальные вклады от Γ -волны и всех остальных отраженных волн в GaAs. Видно, что суммарная амплитуда $(S_{11})_{X\Gamma}$ является результатом компенсации этих вкладов. Механизм компенсации проще установить, учитывая в (6) только Γ_1 -, X_1 - и X_3 -волны. В этом приближении после обращения матрицы \mathbf{Q}_2 получаем

$$\begin{aligned} (S_{11})_{X\Gamma} = & \left\{ [(\mathbf{Q}_2)_{X_1\bar{X}_3}(\mathbf{Q}_2)_{X_3\bar{\Gamma}} - (\mathbf{Q}_2)_{X_3\bar{X}_3}(\mathbf{Q}_2)_{X_1\bar{\Gamma}}](\mathbf{Q}_1)_{\Gamma\Gamma} \right. \\ & + [(\mathbf{Q}_2)_{\Gamma\bar{\Gamma}}(\mathbf{Q}_2)_{X_3\bar{X}_3} - (\mathbf{Q}_2)_{\Gamma\bar{X}_3}(\mathbf{Q}_2)_{X_3\bar{\Gamma}}](\mathbf{Q}_1)_{X_1\Gamma} \\ & \left. - [(\mathbf{Q}_2)_{\Gamma\bar{\Gamma}}(\mathbf{Q}_2)_{X_1\bar{X}_3} - (\mathbf{Q}_2)_{\Gamma\bar{X}_3}(\mathbf{Q}_2)_{X_1\bar{\Gamma}}](\mathbf{Q}_1)_{X_3\Gamma} \right\} / \det(\mathbf{Q}_2). \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь чертой отмечены состояния в AlAs, левые и правые символы относятся к отраженным и падающим волнам соответственно. Волновые функции отраженных X -состояний ДГ зонной структуры GaAs комплексно сопряжены друг другу. Как видно из формулы (7), вклады от этих волн входят с противоположными знаками. В разности проекций этих волн на границу основные компоненты при поверхностных плоских волнах взаимно сокращаются, поэтому главные вклады в (7) от „виртуальных“ X_1 - и X_3 -процессов в значительной степени

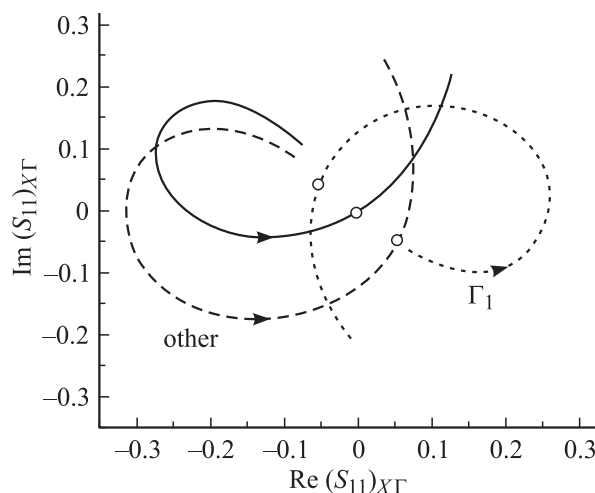


Рис. 3. Диаграмма Арганда для элемента матрицы рассеяния $(S_{11})_{X\Gamma}$ в интервале энергии $E_X(\text{AlAs}) < E < E_0(\text{GaAs})$ (сплошная линия). Стрелкой показано направление роста энергии. Кружки отвечают значению энергии E_d . Пунктирными линиями обозначены вклады от „виртуальных“ процессов (уменьшены в 5 раз), связанных с Γ_1 -волной и всеми другими волнами (other).

компенсируют друг друга. Подобная компенсация имеет место и в „виртуальном“ Г-процессе. Оставшиеся вклады от Х- и Г-процессов тоже входят с противоположными знаками и компенсируют друг друга из-за близости проекций Г-функций GaAs и AlAs.

Было рассмотрено также и наклонное падение электронов на гетерограницу для различных направлений \mathbf{k}_{\parallel} для значений $|\mathbf{k}_{\parallel}| < 0.04 \cdot 2\pi/a$. Во всех случаях было обнаружено полное отражение, причем энергия E_d монотонно увеличивалась с ростом $|\mathbf{k}_{\parallel}|$. На конце данного интервала изменение энергии E_d составило 0.03 эВ, что примерно соответствует тепловой энергии при комнатной температуре и интервалу малых значений коэффициента прохождения (см. рис. 1). Поэтому можно ожидать, что данная особенность $P(E)$ будет наблюдаться в гетероструктурах GaAs/AlAs(001) при достаточно низких температурах.

3. Трехдолинная модель

Отмеченные выше обстоятельства позволяют провести более тщательный анализ возникновения нуля в коэффициенте прохождения электронов при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ через резкую гетерограницу GaAs/AlAs(001), опираясь на более простые модели. Таковыми являются модели, основанные на методе огибающих функций при корректном выборе условий их сшивания. Для определения элементов матрицы сшивания огибающих функций мы использовали методику, подробно изложенную в работах [18,19]. Основой для данного подхода служит использование трехдолинного приближения (Γ_1 -, X_1 - и X_3 -долины) при вещественном выборе соответствующих блоховских функций. В этих условиях сшивания, если гетерограница проходит по атомам As (плоскость $z = 0$), огибающие функции при блоховских волновых функциях Γ_1 - и X_1 -уровней и производная огибающей функции при блоховской функции X_3 -уровня связаны тремя линейными соотношениями с вещественными коэффициентами, а производные Γ_1 -, X_1 -огибающих и X_3 -огибающая связаны между собой другими тремя соотношениями с вещественными коэффициентами. Следовательно, всего имеется 18 различных элементов матрицы сшивания.

Условия сшивания для огибающих функций можно представить в виде

$$\begin{pmatrix} F_{\Gamma_1}^{\alpha} \\ F_{X_1}^{\alpha} \\ a \frac{\partial}{\partial z} F_{X_3}^{\alpha} \end{pmatrix} = T_1 \begin{pmatrix} F_{\Gamma_1}^{\beta} \\ F_{X_1}^{\beta} \\ a \frac{\partial}{\partial z} F_{X_3}^{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \frac{\partial}{\partial z} F_{\Gamma_1}^{\alpha} \\ a \frac{\partial}{\partial z} F_{X_1}^{\alpha} \\ F_{X_3}^{\alpha} \end{pmatrix} = T_2 \begin{pmatrix} a \frac{\partial}{\partial z} F_{\Gamma_1}^{\beta} \\ a \frac{\partial}{\partial z} F_{X_1}^{\beta} \\ F_{X_3}^{\beta} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где огибающие функции F_{γ} и их нормальные к гетерогранице производные вычисляются на плоскости гетерограницы; индексами α, β обозначены различные материалы, составляющие гетероструктуру; a — постоянная решетки, матрицы T_1 и T_2 для гетероструктур

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$ нами определены с использованием псевдопотенциалов из [20] и имеют вид

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 - 0.0144y & 0.0732y & -0.0058y \\ 0.0649y & 1 + 0.0601y & 0.0051y \\ -1.5182y & -0.3072y & 1 - 0.1261y \end{pmatrix};$$

$$T_2 = \begin{pmatrix} 1 - 0.1245y & -0.0042y & -0.1483y \\ 0.4270y & 1 - 0.0082y & -0.0113y \\ -0.0519y & -0.0028y & 1 + 0.0411y \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Здесь $y = 1 - x$, где x — концентрация Al, индексы α и β обозначают твердый раствор и AlAs соответственно. Отметим, что для гетероструктур GaAs/Al_xGa_{1-x}As (индексы α и β соответствуют GaAs и Al_xGa_{1-x}As) матрицы T_1 и T_2 находятся при $y = x$. Мы провели расчеты с использованием данной модели и во всех случаях получали результаты, практически совпадающие с данными точных псевдопотенциальных вычислений.

Однако наглядное представление факторов, приводящих к появлению нуля в коэффициенте прохождения, в трехдолинной модели затруднено из-за чрезвычайной громоздкости выражений, полученных с использованием компьютерных систем аналитических вычислений. Примем поэтому упрощенные условия сшивания огибающих функций, предложенные в работе Андо и Акеры [11] и уточненные в [21,22]. Эти условия сшивания имеют вид

$$F_{\Gamma}^{\alpha} = F_{\Gamma}^{\beta}, \quad a \frac{m_0}{m_{\Gamma}^{\alpha}} \frac{\partial}{\partial z} F_{\Gamma}^{\alpha} = a \frac{m_0}{m_{\Gamma}^{\beta}} \frac{\partial}{\partial z} F_{\Gamma}^{\beta} + t F_{X_3}^{\beta},$$

$$F_{X_3}^{\alpha} = F_{X_3}^{\beta}, \quad a \frac{m_0}{m_{X_3}^{\alpha}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_3}^{\alpha} = a \frac{m_0}{m_{X_3}^{\beta}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_3}^{\beta} + t F_{\Gamma}^{\beta},$$

$$F_{X_1}^{\alpha} = F_{X_1}^{\beta}, \quad a \frac{m_0}{m_{X_1}^{\alpha}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_1}^{\alpha} = a \frac{m_0}{m_{X_1}^{\beta}} \frac{\partial}{\partial z} F_{X_1}^{\beta}, \quad (10)$$

где $m_{\Gamma}^{\alpha, \beta}$, $m_{X_3}^{\alpha, \beta}$, $m_{X_1}^{\alpha, \beta}$ — эффективные массы, t — безразмерный параметр Г-Х смешивания, m_0 — масса свободного электрона; здесь индекс α относится к величинам в GaAs, β — в AlAs. Ясно, что данные условия сшивания заметно отличаются от найденных нами „точных“ условий (8), (9), тем не менее оказывается, что они приводят к качественно верным результатам.

В рамках рассматриваемой модели огибающие функции имеют вид

$$F_{\Gamma}(z) = A_{\Gamma} \exp(ik_{\Gamma}z) + B_{\Gamma} \exp(-ik_{\Gamma}z),$$

$$F_{X_1}(z) = \sum_{j=1,2} [A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z)],$$

$$F_{X_3}(z) = \sum_{j=1,2} [\eta(k_j) A_j \exp(ik_j z) - \eta(k_j) B_j \exp(-ik_j z)], \quad (11)$$

где коэффициенты A являются амплитудами волн, движущихся (затухающих) слева направо, а коэффициенты B — амплитудами волн, движущихся (затухающих)

справа налево, входящие в показатели экспонент волновые числа k_j и коэффициенты η_{k_j} определяются для заданной энергии E из решения соответствующей задачи в рамках kp -модели. Заметим, что коэффициенты A и B здесь несколько отличаются от соответствующих коэффициентов в (1), а числа k_j имеют тот же смысл, что и введенные в (1) $k_{z\nu(\mu)}$.

Огибающие X -функции удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{pmatrix} E_{X_3} + \frac{p^2}{2m_{X_3}} - E & \frac{\langle X_3|p|X_1\rangle p}{m_0} \\ \frac{\langle X_1|p|X_3\rangle p}{m_0} & E_{X_1} + \frac{p^2}{2m_{X_1}} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{X_3} \\ F_{X_1} \end{pmatrix} = 0, \quad (12)$$

учитывающей прямое взаимодействие X_1 -, X_3 -долин, взаимодействие с остальными долинами учтено в эффективных массах m_{X_1} , m_{X_3} , $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$, E_{X_1} , E_{X_3} — энергии X_1 -, X_3 -долин, $\langle X_1|p|X_3\rangle$ — матричный элемент импульса между блоховскими волновыми функциями. Из решения уравнения (12) находятся два волновых числа k_1 и k_2 , входящих в выражения для F_{X_1} , а также множители

$$\begin{aligned} \eta(k_j) &= -\frac{\langle X_3|p|X_1\rangle\hbar k_j}{(E_{X_3} + \hbar^2 k_j^2/2m_{X_3} - E)m_0} \\ &= \frac{(E_{X_1} + \hbar^2 k_j^2/2m_{X_1} - E)}{\langle X_3|p|X_1\rangle\hbar k_j}, \end{aligned} \quad (13)$$

входящие в огибающую функцию F_{X_3} . Для описания Γ -электронов мы используем однодолинное приближение с учетом непараболичности, что позволяет при заданной энергии E найти два решения $\sim \exp[\pm ik_\Gamma z]$ с комплексными в общем случае волновыми числами $k_\Gamma(E)$.

Из шести условий сшивания (10) получаем шесть уравнений на коэффициенты $A_\Gamma^{\alpha,\beta}$, $A_j^{\alpha,\beta}$, $B_\Gamma^{\alpha,\beta}$, $B_j^{\alpha,\beta}$ при волнах, движущихся слева направо и справа налево:

$$\begin{aligned} A_\Gamma^\alpha + B_\Gamma^\alpha &= A_\Gamma^\beta + B_\Gamma^\beta, \\ \frac{am_0}{m_\Gamma^\alpha} ik_\Gamma^\alpha [A_\Gamma^\alpha - B_\Gamma^\alpha] &= \frac{am_0}{m_\Gamma^\beta} ik_\Gamma^\beta [A_\Gamma^\beta - B_\Gamma^\beta] \\ &+ t \sum_{j=1,2} \eta^\beta(k_j^\beta) [A_j^\beta - B_j^\beta], \\ \sum_{j=1,2} \eta^\alpha(k_j^\alpha) [A_j^\alpha - B_j^\alpha] &= \sum_{j=1,2} \eta^\beta(k_j^\beta) [A_j^\beta - B_j^\beta], \\ \frac{am_0}{m_{X_3}^\alpha} i \sum_{j=1,2} k_j^\alpha \eta^\alpha(k_j^\alpha) [A_j^\alpha + B_j^\alpha] &= \frac{am_0}{m_{X_3}^\beta} i \sum_{j=1,2} k_j^\beta \eta^\beta(k_j^\beta) [A_j^\beta + B_j^\beta] + t [A_\Gamma^\beta + B_\Gamma^\beta], \\ \sum_{j=1,2} [A_j^\alpha + B_j^\alpha] &= \sum_{j=1,2} [A_j^\beta + B_j^\beta], \\ \frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} \sum_{j=1,2} ik_j^\alpha [A_j^\alpha - B_j^\alpha] &= \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} \sum_{j=1,2} ik_j^\beta [A_j^\beta - B_j^\beta]. \end{aligned} \quad (14)$$

Полагая равными нулю коэффициенты при всех налетающих на гетерограницу волнах, кроме Γ -волны в полупроводнике GaAs, находим

$$\begin{aligned} A_\Gamma^\alpha + B_\Gamma^\alpha &= A_\Gamma^\beta, \\ \frac{am_0}{m_\Gamma^\alpha} ik_\Gamma^\alpha [A_\Gamma^\alpha - B_\Gamma^\alpha] &= \frac{am_0}{m_\Gamma^\beta} ik_\Gamma^\beta A_\Gamma^\beta + t \sum_{j=1,2} \eta^\beta(k_j^\beta) A_j^\beta, \\ - \sum_{j=1,2} \eta^\alpha(k_j^\alpha) B_j^\alpha &= \sum_{j=1,2} \eta^\beta(k_j^\beta) A_j^\beta, \\ \frac{am_0}{m_{X_3}^\alpha} i \sum_{j=1,2} k_j^\alpha \eta^\alpha(k_j^\alpha) B_j^\alpha &= \frac{am_0}{m_{X_3}^\beta} i \sum_{j=1,2} k_j^\beta \eta^\beta(k_j^\beta) A_j^\beta + t A_\Gamma^\beta, \\ \sum_{j=1,2} B_j^\alpha &= \sum_{j=1,2} A_j^\beta, \\ - \frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} \sum_{j=1,2} ik_j^\alpha B_j^\alpha &= \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} \sum_{j=1,2} ik_j^\beta A_j^\beta. \end{aligned} \quad (15)$$

Обратим внимание на то, что третье, пятое и шестое уравнения не содержат коэффициентов при Γ -волнах. Выпишем эти уравнения отдельно

$$\begin{aligned} - [\eta^\alpha(k_1^\alpha) B_1^\alpha + \eta^\alpha(k_2^\alpha) B_2^\alpha] &= \eta^\beta(k_1^\beta) A_1^\beta + \eta^\beta(k_2^\beta) A_2^\beta, \\ B_1^\alpha + B_2^\alpha &= A_1^\beta + A_2^\beta, \\ - i \frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} [k_1^\alpha B_1^\alpha + k_2^\alpha B_2^\alpha] &= i \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} [k_1^\beta A_1^\beta + k_2^\beta A_2^\beta]. \end{aligned} \quad (16)$$

Если теперь в этих уравнениях выразить из второго уравнения величину $A_2^\beta = B_1^\alpha + B_2^\alpha - A_1^\beta$ и подставить в два оставшихся уравнения, то получаем

$$\begin{aligned} - [\eta^\alpha(k_1^\alpha) + \eta^\beta(k_2^\beta)] B_1^\alpha - [\eta^\alpha(k_2^\alpha) + \eta^\beta(k_2^\beta)] B_2^\alpha &= [\eta^\beta(k_1^\beta) - \eta^\beta(k_2^\beta)] A_1^\beta, \\ - i \left[\frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} k_1^\alpha + \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} k_2^\beta \right] B_1^\alpha - i \left[\frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} k_2^\alpha + \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} k_2^\beta \right] B_2^\alpha &= i \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} [k_1^\beta - k_2^\beta] A_1^\beta. \end{aligned} \quad (17)$$

Будем для определенности считать, что в интересующей нас области энергий ниже ДГ структуры арсенида галлия вектор k_1^α имеет положительную вещественную часть и положительную мнимую, а вектор k_2^α — отрицательную вещественную и положительную мнимую части. Для случая арсенида алюминия положим, что вектор k_1^β является вещественным, а вектор k_2^β является чисто мнимым. Тогда величина $\eta^\beta(k_2^\beta)$ является вещественной и оказывается, что в первом уравнении системы (17) коэффициенты при B_1^α и при B_2^α комплексно сопряжены друг другу. Во втором уравнении коэффициенты при этих величинах также комплексно сопряжены друг

другу. Если теперь построить детерминант из коэффициентов при B_1^α и B_2^α в этих двух уравнениях, то он оказывается чисто мнимой величиной

$$\Lambda = i \left[\frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} k_2^\alpha + \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} k_2^\beta \right] [\eta^\alpha(k_1^\alpha) + \eta^\beta(k_2^\beta)] - i \left[\frac{am_0}{m_{X_1}^\alpha} k_1^\alpha + \frac{am_0}{m_{X_1}^\beta} k_2^\beta \right] [\eta^\alpha(k_2^\alpha) + \eta^\beta(k_2^\beta)],$$

которая может при некотором вещественном значении энергии $E = E_d$ обратиться в нуль. При $\Lambda = 0$, очевидно, должна в общем случае обращаться в нуль также и величина A_1^β . В самом деле, условие обращения в нуль величины Λ совпадает с условием обращения в нуль коэффициента прохождения электронов через резкую гетерограницу GaAs/AlAs(001), что подтверждается соответствующими численными и аналитическими расчетами. Можно видеть из выражения для величины Λ , что в нее никоим образом не входят параметры, характеризующие Γ -электроны и Γ -X смешивание (на самом деле этот параметр присутствует в качестве общего множителя и коэффициенте прохождения). Таким образом, полное отражение налетающей из GaAs Γ -волны от гетерограницы с AlAs в рамках этой простой модели сшивания огибающих функций на гетерогранице обусловлено свойствами и взаимодействием друг с другом X-электронов в обоих материалах. Этот вывод согласуется с результатами псевдопотенциального расчета (см. выше), показывающими, что вклады X_1 - и X_3 -состояний в элемент матрицы рассеяния $(S_{11})_{X\Gamma}$ наибольшие.

Проанализируем, не является ли случайным обращение в нуль величины Λ , не исчезнет ли оно при другом выборе параметров зонного спектра. Подставим в Λ явные выражения для величин η^α , η^β при условии:

$$k_1^\alpha = h + if, \quad k_2^\alpha = -h + if, \quad k_2^\beta = i\sigma; \quad h, f, \sigma > 0.$$

Тогда получаем

$$\Lambda = 2i \frac{a^3 m_0^2 h}{\hbar^2 P^\alpha} \left\{ (E - E_{X_1}^\alpha) \left(\frac{2f}{m_{X_1}^\alpha} + \frac{\sigma}{m_{X_1}^\beta} \right) \frac{1}{(f^2 + h^2)} + (E - E_{X_1}^\beta) \frac{P^\alpha}{m_{X_1}^\alpha P^\beta \sigma} + \frac{\hbar^2 \sigma}{m_{X_1}^\alpha m_{X_1}^\beta} P^\alpha \left(\frac{1}{P^\beta} - \frac{1}{P^\alpha} \right) \right\}, \quad (18)$$

где $P^{\alpha,\beta} = \frac{ia}{\hbar} \langle X_3^{\alpha,\beta} | p | X_1^{\alpha,\beta} \rangle$.

Первый член в фигурных скобках в формуле (18) отрицателен в рассматриваемом интервале энергий, второй член положителен, а третий примерно равен нулю, поскольку величины $P^{\alpha,\beta}$ близки друг другу в полупроводниках GaAs(α) и AlGa(β). Первый член преобладает в области энергий $E \approx E_{X_1}^\beta$, а второй в области энергий $E \leq E_0 < E_{X_1}^\alpha$, если выполняется неравенство

$$(E_{X_1}^\alpha - E_0) \frac{\sigma^2}{m_{X_1}^\beta} < (E_0 - E_{X_1}^\beta) \frac{\hbar^2 P^\alpha}{P^\beta m_{X_1}^\alpha}, \quad (19)$$

где значения σ и h вычислены при энергии E_0 . Выписанное неравенство с большим запасом выполняется, поскольку разность энергий $(E_{X_1}^\alpha - E_0)$ существенно меньше

разности $(E_0 - E_{X_1}^\beta)$. Поэтому существует энергия, при которой величина Λ обращается в нуль.

Так обстоит дело, если ДГ структура в GaAs реализуется при вещественных волновых числах. Если вместо GaAs взять твердый раствор AlGaAs, то можно получить экстремум ДГ структуры в области мнимых волновых чисел. (Здесь и далее под экстремумом ДГ структуры в области мнимых волновых векторов понимается энергия E_0 , при которой мнимые волновые числа k_1^α и k_2^α становятся одинаковыми.) В этом случае для энергий $E < E_0$ проведенные выше выкладки для Λ пригодны, однако условие существования нуля у этой величины иное, поскольку при приближении энергии к величине E_0 к нулю стремится не f , а h .

Поэтому условие обращения в нуль величины Λ в данном случае есть неравенство

$$(E_{X_1}^\alpha - E_0) \left(\frac{2f}{m_{X_1}^\alpha} + \frac{\sigma}{m_{X_1}^\beta} \right) \frac{1}{f^2} < (E_0 - E_{X_1}^\beta) \frac{P^\alpha}{m_{X_1}^\alpha P^\beta \sigma}, \quad (20)$$

где f и σ вычислены при энергии E_0 . Этому условию удовлетворять труднее в сравнении с предыдущим случаем из-за наличия дополнительного слагаемого в левой части неравенства. Неравенство (20), конечно, выполняется при малых $(E_{X_1}^\alpha - E_0)$. Можно, однако, рассмотреть область энергий выше E_0 , но ниже $E_{X_1}^\alpha$. В этом интервале энергий волновые числа k_1^α , k_2^α являются чисто мнимыми, однако величина Λ оказывается вещественной и потому имеется возможность обращения ее в нуль. Действительно, полагая $k_1^\alpha = if_1$, $k_2^\alpha = if_2$, $k_2^\beta = i\sigma$, получаем выражение для Λ в виде

$$\Lambda = - \frac{a^2 m_0^2 (f_1 - f_2)}{P^\alpha} \left\{ P^\alpha \frac{E - E_{X_1}^\beta}{P^\beta m_{X_1}^\alpha \sigma \hbar^2} + \frac{(E - E_{X_1}^\alpha) (m_{X_1}^\beta (f_1 + f_2) + m_{X_1}^\alpha \sigma)}{f_1 f_2 m_{X_1}^\alpha m_{X_1}^\beta \hbar^2} + \sigma \frac{P^\alpha - P^\beta}{2 m_{X_1}^\alpha m_{X_1}^\beta P^\beta} \right\}. \quad (21)$$

Последний член в фигурных скобках (21) может быть отброшен в силу малого различия матричных элементов импульса в AlAs и в AlGaAs. Второй член обращается в нуль при $E = E_{X_1}^\alpha$, а первый положителен. При понижении энергии от $E_{X_1}^\alpha$ первый член будет уменьшаться, а второй — возрастать по модулю, оставаясь отрицательным. Если справедливо неравенство

$$\frac{E_0 - E_{X_1}^\beta}{P^\beta m_{X_1}^\alpha \sigma} P^\alpha < \frac{(E_{X_1}^\alpha - E_0)}{f^2} \left(\frac{2f}{m_{X_1}^\alpha} + \frac{\sigma}{m_{X_1}^\beta} \right), \quad (22)$$

в котором волновые числа вычислены при энергии E_0 и $f_1 = f_2 = f$, то при некоторой энергии в рассматриваемом интервале фигурная скобка у величины Λ (21) обратится в нуль, и мы будем иметь нуль коэффициента прохождения электронов при этой энергии. Итак, мы получили, что при выполнении неравенства (20) имеет место полное отражение электронной волны от

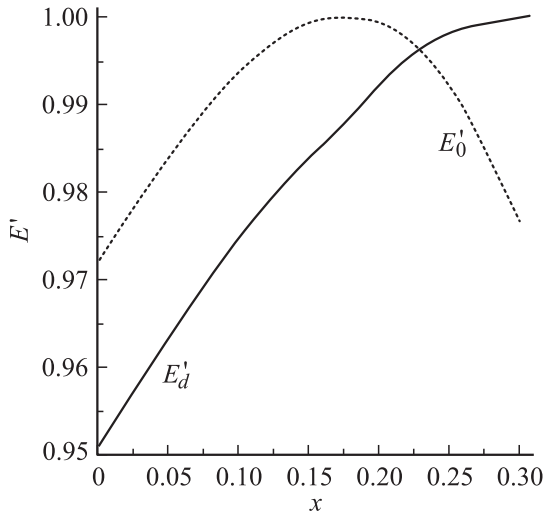


Рис. 4. Безразмерные энергии, соответствующие дну ДГ структуры E'_0 в $Al_xGa_{1-x}As$ и нулю коэффициента прохождения E'_d для структуры $Al_xGa_{1-x}As/AlAs$, в зависимости от концентрации x . Здесь $E'_d = (E_d - E_{X_1}^\beta)(E_{X_1}^\alpha - E_{X_1}^\beta)^{-1}$; $E'_0 = (E_0 - E_{X_1}^\beta)(E_{X_1}^\alpha - E_{X_1}^\beta)^{-1}$.

гетерограницы при некоторой энергии E ниже энергии E_0 экстремума ДГ структуры, а при выполнении противоположного неравенства (22) полное отражение электронной волны имеет место при энергии выше E_0 , но ниже $E_{X_1}^\alpha$.

Псевдопотенциальные расчеты, проведенные с псевдопотенциалами [20], для структур $Al_xGa_{1-x}As/AlAs$ показывают наличие нулей в $P(E)$ и подтверждают качественные выводы, полученные в этой простой модели. На рис. 4 изображены зависимости от концентрации x рассчитанных безразмерных энергий E'_d и E'_0 , определенных согласно формуле $E' = (E - E_{X_1}^\beta)(E_{X_1}^\alpha - E_{X_1}^\beta)^{-1}$. Ясно, что при $E = E_{X_1}^\alpha$, $E' = 1$ и при $E = E_{X_1}^\beta$, $E' = 0$. Расчеты показывают, что для $x < 0.175$ ДГ структура в $Al_xGa_{1-x}As$ реализуется при вещественных волновых числах, для $x > 0.175$ — в области мнимых волновых чисел, при $x = 0.175$ ДГ структура отсутствует. Вплоть до $x < 0.23$ мы имеем $E_d < E_0$, а при $x > 0.23$ имеем $E_d > E_0$.

Легко заметить, что за счет общего множителя величина Λ обращается в нуль также и при $E = E_0$, поскольку при этом $f_1 = f_2 = f$. Следует, однако, иметь в виду, что в этом случае два выбранных решения уравнения Шредингера становятся одинаковыми. Такая ситуация требует специального исследования. Аналитическое рассмотрение в рамках простой модели и псевдопотенциальный расчет показывают, что в данном случае никакого нуля в коэффициенте прохождения нет (в данном случае в коэффициенте прохождения входит величина Λ , поделенная на $(f_1 - f_2)$).

Можно убедиться в том, что чисто интерфейсного локализованного состояния, ответственного за появление нуля в коэффициенте прохождения, не существует.

В самом деле, в системе (17) при условии, что $\Lambda = 0$, получаем равной нулю амплитуду A_1^β прошедшей X -волны и находим, что амплитуды B_1^α и B_2^α отраженных X -волн связаны фазовым множителем. Второе уравнение системы (16) определяет амплитуду A_2^β другой, затухающей внутрь слоя $AlAs$, X -волны. Таким образом, использованными оказываются три уравнения из шести, представленных в системе (15). В оставшихся трех уравнениях неизвестными являются три коэффициента, которые при решении выражаются через амплитуду падающей из слоя $GaAs$ Γ -волны. При этом оказывается, что по модулю амплитуда B_Γ отраженной волны равна амплитуде падающей волны. Если последняя равна нулю, то и все остальные коэффициенты равны нулю. Отсюда следует, что квантовое состояние при энергии, отвечающей нулю коэффициента прохождения, представляет собой суперпозицию стоячей Γ -волны, находящейся в полупространстве, занятом слоем $GaAs$, затухающей в глубь слоя $GaAs$ стоячей X -волны и затухающих в глубь слоя $AlAs$ двух волн (одна X -, другая Γ -типа). Таким образом, наличие падающей на гетерограницу электронной волны обязательно для существования рассмотренного состояния. Поиск состояний резонансного типа, т.е. существующих при комплексном значении энергии, показал, что таких состояний нет.

Рассмотрение случая, когда со стороны $AlAs$ на гетерограницу падает одна X -волна, приводит к аналогичным выводам. За счет симметрии относительно обращения времени коэффициенты отражения Γ -электронов в $GaAs$ и X -электронов в $AlAs$ в рассматриваемом интервале энергии ниже ДГ структуры $GaAs$ должны совпадать. Поэтому при той же энергии E_d наблюдается полное отражение X -волны в $AlAs$ от гетерограницы $AlAs/GaAs(001)$.

Квантовое состояние, отвечающее нулю коэффициента прохождения в случае падения на гетерограницу электронной X -волны из $AlAs$, включает в себя стоячую X_1 -волну в полупространстве, занятом слоем $AlAs$, две затухающие в глубь слоя $GaAs$ X -волны с одинаковой амплитудой и одну X_3 -волну, затухающую в глубь слоя $AlAs$. В отличие от предыдущего случая здесь вообще отсутствует вклад Γ -состояний. Разумеется, это справедливо только в рамках простой модели сшивания (10).

4. Заключение

Рассмотрено рассеяние электронов на гетерограницах $Al_xGa_{1-x}As/AlAs(001)$ в рамках псевдопотенциального описания и в рамках трехдолинного приближения огибающих функций. Показано, что использование данной модели приводит к практически совпадающим с псевдопотенциальными вычислениями результатам. Численные расчеты и аналитические формулы, полученные в рамках упрощенной модели, позволяют сделать вывод, что появление нуля в коэффициенте прохождения электронов через гетерограницу $GaAs/AlAs(001)$, обнаруживаемое в интервале энергии от дна X_1 -долины $AlAs$ до

дна ДГ структуры в GaAs, обусловлено многодолинным характером энергетического спектра электронов. Оно реализуется за счет взаимной компенсации вкладов от различных „виртуальных процессов“. Эта компенсация оказывается возможной за счет того, что в рассматриваемом интервале энергии можно сформировать затухающие состояния, описываемые вещественными функциями. Тогда и из распространяющихся волн возможно сформировать стоячую волну, что и реализуется при определенном значении энергии. Такое состояние отвечает нулевому потоку электронной плотности. Показано, что с появлением нуля в коэффициенте прохождения не связано какое-либо интерфейсное резонансное состояние.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 02-02-17848.

Список литературы

- [1] E.E. Mendez, W.I. Wang, E. Calleja, C.E.T. Goncalves da Silva. *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 1263 (1987).
- [2] D.Y. Ko, J.C. Inkson. *Phys. Rev. B*, **38**, 9945 (1988).
- [3] Xue Fang Shi. *Semicond. Sci. Technol.*, **4**, 150 (1989).
- [4] E.E. Mendez, E. Calleja, W.I. Wang. *Phys. Rev. B*, **34**, 6062 (1986).
- [5] E.E. Mendez, E. Calleja. *Appl. Phys. Lett.*, **53**, 977 (1988).
- [6] J.J. Finley, M.S. Skolnick, J.W. Cockburn, R. Teissier, R. Grey, G. Hill, M.A. Pate. *Superlatt. Microstruct.*, **23**, 513 (1998).
- [7] Hyunsik Im, P.C. Klipstein, R. Grey, G. Hill. *Phys. Rev. B*, **62**, 11 076 (2000).
- [8] C. Gourdon, D. Martins, P. Lavallerd, E.L. Ivchenko, Yun-Lin Zheng, R. Planel. *Phys. Rev. B*, **62**, 16 856 (2000).
- [9] M. Hosoda, N. Ohtani, H. Mimura, K. Tominaga, P. Davis, T. Watanabe, G. Tanaka, K. Fujiwara. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 4500 (1995).
- [10] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11 609 (1989).
- [11] T. Ando, H. Akera. *Phys. Rev. B*, **40**, 11 619 (1989).
- [12] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. *ФТП*, **26**, 2057 (1992).
- [13] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. *ФТП*, **28**, 1393 (1994).
- [14] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. *Изв. вузов. Физика*, № 9, 64 (1992).
- [15] G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov. *Abstracts Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology* (St. Petersburg, 1995) p. 126.
- [16] K.A. Mader, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **50**, 17 393 (1994).
- [17] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев. *ФТП*, **42**, 752 (2000).
- [18] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. *ФТП*, **35**, 105 (2001).
- [19] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. *ФТП*, **35**, 841 (2001).
- [20] В.А. Чалдышев, С.Н. Гриняев. *Изв. вузов. Физика*, № 3, 38 (1983).
- [21] И.А. Алейнер, Е.Л. Ивченко. *ФТП*, **27**, 594 (1993).
- [22] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. *Phys. Rev. B*, **47**, 13 498 (1993).

Редактор Л.В. Беляков

Singularities of Electron Scattering on $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}(001)$ Heterointerfaces

S.N. Grinyaev, G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov

Siberian Physicotechnical Institute hosted by Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The effect of total reflection of an electronic wave from $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}(001)$ heterointerface is investigated. The analysis is carried out on the basis of calculations on a pseudopotential method, and also analytically and numerically within the framework of abbreviated three-valley model. It is shown that the occurrence of zero in the electron transmission coefficient through the heterointerface $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$ at some energy in the interval between minima of a X_1 -valley AlAs and X_1 -valley $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ is conditioned by many-valley structure of a electron spectrum. It is established that this total reflection is realised because of mutual compensating of the contributions from different valleys and is irrelevant to any resonance interface state.