

УДК 539.293.011

ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РАСЧЕТ МЕЖДОЛИННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ РАССЕЯНИЯ

С. Н. Гриняев, Г. Ф. Каравасев, В. Г. Тютерев, В. А. Чалдышев

В модели жестких ионов рассчитаны константы деформационного потенциала для междолинного рассеяния электронов в GaAs с использованием метода модельного псевдопотенциала. Теоретические значения констант для рассеяния $\Gamma-L$, $\Gamma-X$, $L-L$, $X-X$, $X-L$ в зоне проводимости GaAs находятся в интервале, перекрываемом разбросом экспериментальных значений.

Характер протекания кинетических процессов и само существование многих интересных явлений в полупроводниках с многодолинным зонным спектром в значительной степени определяются междолинным рассеянием электронов. Для описания междолинного рассеяния на коротковолновых колебаниях решетки широко используется представление о деформационных потенциалах. Вероятность перехода электрона из состояния $\Psi_{n\mathbf{k}}$ в долине i в состояние $\Psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ в долине j записывается в виде

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_s \frac{|D_{ij}^s|^2 \hbar}{2\gamma V \omega_s(\mathbf{q})} \left(N_s(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \pm \hbar \omega_s(\mathbf{q})). \quad (1)$$

Здесь для простоты считается, что зонный номер n не изменяется, и поэтому он опущен; ρ — плотность, а V — объем кристалла; $\omega_s(\mathbf{q})$ и $N_s(\mathbf{q})$ — частота и число фононов с номером $(s\mathbf{q})$; s — номер фононной ветви; \mathbf{q} — волновой вектор фонона; $E_{\mathbf{k}}$ и $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ — энергии электрона до и после рассеяния.

В случае, когда имеется несколько фононных ветвей с близкими частотами $\omega_s(\mathbf{q})$, в выражении (1) заменяют $\omega_s(\mathbf{q})$ и $N_s(\mathbf{q})$ на некоторые средние значения, а сумму $\sum_s |D_{ij}^s|^2$ представляют как одну эффективную константу $|D_{ij}|^2$. Фактически именно в этом приближении выполнено подавляющее число работ по анализу разогрева и транспорта электронов в полупроводниках $A^{III}B^V$ и их твердых растворах. Более того, в таких исследованиях предполагается, что $|D_{ij}|^2$ не зависит от величины волнового вектора фонона \mathbf{q} , а определяется только номерами долин i и j .

В полупроводниках $A^{III}B^V$ и их твердых растворах существенными оказываются переходы между долинами Γ , L и X . Число различных констант деформационного потенциала D_{ij} в этом случае равно пяти. Это приводит к определенным трудностям при определении констант D_{ij} из эксперимента. Известные в настоящее время из литературы значения D_{ij} меняются в довольно широких пределах даже для одного из наиболее изученных материалов — арсенида галлия. Вместе с тем задачи моделирования физических процессов в полупроводниках и полупроводниковых приборах настоятельно требуют все более точного и детального описания таких фундаментальных характеристик материала, как его электронный и фононный спектры и вероятности электрон-фононного рассеяния.

Поэтому представляет несомненный интерес проведение теоретического расчета констант деформационного потенциала междолинных фононов. При теоретическом определении констант D_{ij} возникают определенные трудности как вычислительного, так и принципиального характера. К последним относятся выбор кристаллического потенциала, определение оператора электрон-фононного взаимодействия, проблема экранировки нелокального псевдопотенциала, выбор модели для расчета фононного спектра и векторов поляризации фононов и другие.

Единственный, насколько нам известно, теоретический расчет констант D_{ij} предпринят в работе [1]. К сожалению, использованная в ней модель зонного спектра GaAs не соответствует современным представлениям, колебания решетки рассмотрены крайне упрощенным образом, рассчитаны не все практически важные величины D_{ij} .

В настоящей работе приводятся результаты расчета констант деформационного потенциала для GaAs с использованием метода модельного псевдопотенциала [2]. В приближении жестких ионов потенциал электрон-фононного взаимодействия имеет вид

$$\delta V = \sum_{l,x} (V_x(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l - \boldsymbol{\tau}_x - \mathbf{u}_{lx}) - V_x(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l - \boldsymbol{\tau}_x)) \approx \sum_{l,x} \nabla V_x(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l - \boldsymbol{\tau}_x) \mathbf{u}_{lx}.$$

Здесь l — номер элементарной ячейки, x — сорт атома, \mathbf{u}_{lx} — смещение атома сорта x в ячейке l . Представляя смещение \mathbf{u}_{lx} в стандартном виде

$$\mathbf{u}_{lx} = \frac{1}{\sqrt{Nm_x}} \sum_{\mathbf{q},s} (\mathbf{e}_x(\mathbf{sq}) a_s(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}R_l} + \mathbf{e}_x^*(\mathbf{sq}) a_s^+(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}R_l}), \quad (2)$$

где N — число элементарных ячеек в кристалле, m_x — масса атома сорта x , $\mathbf{e}_x(\mathbf{sq})$ — вектор поляризации фонона, можно получить для вероятности перехода W_{ij} формулу (1), в которой

$$|D_{ij}^s|^2 = \left| \sum_x \sqrt{\frac{M}{m_x}} \mathbf{e}_x(\mathbf{sq}) D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^x \right|^2, \quad M = \sum_x m_x. \quad (3)$$

Константа $D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^x$ представляет собой матричный элемент электронной части оператора δV , который в базисе блоховских функций

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{k} + \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (4)$$

принимает вид

$$D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^x = i \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} C^*(\mathbf{k} + \mathbf{G} + \mathbf{q}) C(\mathbf{k} + \mathbf{G}') (\mathbf{G} - \mathbf{G}' + \mathbf{q}) \times \\ \times V_x(\mathbf{G} - \mathbf{G}' + \mathbf{q}) e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}'+\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\tau}_x}. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{G}, \mathbf{G}' — векторы обратной решетки; $V_x(\mathbf{k})$ — Фурье-образ экранированного модельного псевдопотенциала

$$V_x(\mathbf{k}) = \frac{N}{\varepsilon(\mathbf{k})V} \int d\mathbf{r} v_x(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

$v_x(\mathbf{r})$ — неэкранированный потенциал иона сорта x ; $\varepsilon(\mathbf{k})$ — диэлектрическая функция, вычисленная в модели Пэнна. Блоховские функции (4) были рассчитаны с локальными модельными псевдопотенциалами [2] в базисе из ~ 100 плоских волн. Это обеспечило хорошую сходимость при вычислении матричных элементов.

В табл. 1 приведены рассчитанные по формуле (5) величины $D_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^x$, входящие в деформационные потенциалы (3). Они были вычислены в предположении, что точки \mathbf{k} и $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ находятся в центре соответствующих долин i и j , поскольку в этом случае можно воспользоваться правилами

Таблица 1

Компоненты вектора междолинного рассеяния для зоны проводимости $D'_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}$ (в 10^8 эВ·см) с точностью до фазового множителя

	Симметрия фонона	D_x	D_y	D_z
$D_{L\Gamma}^{\text{Ga}}$	L_1	1.33	1.33	1.33
$D_{L\Gamma}^{\text{As}}$	L_1	0.61	0.61	0.61
$D_{X\Gamma}^{\text{Ga}}$	X_3	0	0	2.65
D_{XX}^{Ga}	X_3	0	0	4.42
D_{LL}^{Ga}	X_3	0	0	0.24
D_{LL}^{As}	X_1	0	0	-0.37
D_{LX}^{Ga}	L_1, L_3	1.08	1.08	-0.58
D_{LX}^{As}	L_1, L_3	-1.29	-1.29	-2.26

отбора. Нами были также проведены некоторые расчеты при условиях, что точки \mathbf{k} и $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ удаляются от центра долины. При этом обнаружено заметное (до 30 %) изменение констант $D'_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}$.

При выборе начала координат в катионном узле волновые функции в центре Γ , L и X долин зоны проводимости GaAs нумеруются представлениями Γ_1 , L_1 и X_3 соответственно. В табл. 1 приведены компоненты вектора междолинного потенциала рассеяния $D'_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}$ для зоны проводимости GaAs. Здесь же указана симметрия фононов, принимающих участие в междолинном переходе. Разделение электронного $D'_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}$ и фононного $e_x(\mathbf{sq})$ сомножителей деформационного потенциала представляет определенное удобство, поскольку электронный сомножитель не зависит от номера s фононной ветви.

В системе координат с началом в узле катионной подрешетки кристалла (Ga) в точке X (001) зоны Бриллюэна фононы с симметрией X_1 и X_3 имеют векторы поляризации $e_{\text{Ga}}(X_3)=e_{\text{As}}(X_1)=(001)$, $e_{\text{Ga}}(X_1)=e_{\text{As}}(X_3)=0$. Частоты, рассчитанные в модели межатомного взаимодействия с 11 параметрами, по данным работы [3], составляют $\omega(X_1)=4.43 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$, $\omega(X_3)=4.15 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$. В точке L (1/2 1/2 1/2) продольные оптические и акустические фононы преобразуются по представлению L_1 . Их частоты и векторы поляризации, по данным [3], равны: $\omega_{L0}(L_1)=4.74 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$, $\omega_{LA}(L_1)=3.87 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$, $e_x(s, L_1)=b_x^s(111)/\sqrt{3}$, где $b_{\text{Ga}}^{L0}=-b_{\text{As}}^{LA}=0.717$, $b_{\text{Ga}}^{LA}=b_{\text{As}}^{L0}=0.697$. Поперечные фононы L_3 в точке L принимают участие в междолинном рассеянии $X_3 \rightarrow L_1$. Частоты двукратно вырожденных поперечных оптических колебаний равны: $\omega_{T0}(L_3)=4.80 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$, $\omega_{TA}(L_3)=1.11 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$, а векторы поляризации имеют вид: $e_x(1, s; L_3)=b_x^s(11\bar{2})/\sqrt{6}$, $e_x(2, s; L_3)=b_x^s(1\bar{1}0)/\sqrt{2}$, где $b_{\text{Ga}}^{T0}=-b_{\text{As}}^{TA}=0.911$, $b_{\text{Ga}}^{TA}=b_{\text{As}}^{T0}=0.412$.

С использованием табл. 1 и сведений о фононном спектре были рассчитаны по формуле (3) константы деформационного потенциала для каждой фононной ветви, а затем для близких частот объединены в одну константу, которую можно сравнивать с экспериментальной. Для $X-L$ рассеяния целесообразно ввести две константы D_{XL} ; одну для описания вклада от трех верхних, близких по частоте, фононных ветвей и одну для нижней (TA) фононной ветви.

Наши расчеты проводились без какой-либо подгонки под результаты экспериментов по междолинному рассеянию. Вычисленные теоретически

Таблица 2

Междолинные потенциалы рассеяния в GaAs (в 10^8 эВ/см)

Тип фонона	Теория	Эксперимент
$D_{GL} LO+LA$	3.6	7 [4], 10 [6], 4.84 [7], 7÷9 [8], 10 [9, 10], 1.8 [13, 16], 2.8 [14], 1.5÷40 [15], 1.8 < D_{GL} < < 10 [18]
$D_{GX} LO$	3.8 4.4 [1]	1.54 [7], 10 [9, 13, 16], 5÷41 [15], 8 [17]
$D_{LL} LO+LA$	0.6	0.6 D_{GL} [5], (5±4) [5], 2÷9 [8], 5 [7, 13, 16], 1.8 [14], 10 [15]
$D_{XX} LO$	6.3 5.5 [1]	5 [11], 3.37 [12], 7 [9], 10 [13, 16], 2.7÷41 [15]
$LA+LO+TO$	4.7	5.5 [7], (11±2) [8], 3.37 [12], 1 [13], 5 [9],
$D_{XL} TA$	0.2	(3.4÷41) [15], 3.0 [16]

и найденные при той или иной обработке эксперимента константы деформационного потенциала [4-18] приведены в табл. 2. Теоретические значения D_{ij} попадают в интервал, перекрываемый разбросом экспериментальных данных. Исключение составляет только константа D_{LL} , которая оказалась самой малой. Ее величина не зависит от модели фононного спектра и определяется только форм-фактором псевдопотенциала, для которого нами принято локальное, сферически-симметричное приближение. Выяснение роли нелокальности, несферичности псевдопотенциала, а также отклонений от модели недеформируемого иона нуждается в специальном исследовании. Отметим, что влияние нелокальности псевдопотенциала на акустический деформационный потенциал может достигать 30 % [19].

Л и т е р а т у р а

- [1] Herbert D. C. J. Phys., 1973, vol. C6, N 18, p. 2788—2810.
- [2] Чалдышев В. А., Гриняев С. Н. Изв. вузов. Физика, 1983, т. 26, № 3, с. 38—61.
- [3] Kunc K., Balkanski M., Nusimovici M. A. Phys. St. Sol. (b), 1975, vol. 72, N 1, p. 229—248.
- [4] Карлик И. Я., Мирлин Д. Н., Санага В. Ф. ФТП, 1987, т. 21, № 6, с. 1030—1032.
- [5] Карлик И. Я., Катилос Р., Мирлин Д. Н., Санага В. Ф. Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 43, № 5, с. 250—252.
- [6] Erskinc D. J., Taylor A. J., Lang C. L. Appl. Phys. Lett., 1984, vol. 45, N 1, p. 54—56.
- [7] Mathur P. C., Saxena T. K. J. Appl. Phys., 1979, vol. 50, N 7, p. 5018—5022.
- [8] Lee H. J., Basinski J., Juravel L. Y. et al. J. Phys., 1979, vol. 57, N 2, p. 233—242.
- [9] Littlejohn M. A., Hauser J. R., Glisson T. H. Appl. Phys., 1977, vol. 48, N 11, p. 4587—4590.
- [10] Kratzer S., Frey J. J. Appl. Phys., 1978, vol. 49, N 7, p. 4064—4068.
- [11] Lee H. J., Juravel L. Y., Woolley J. C. et al. Phys. Rev., 1980, vol. B21, N 2, p. 659—669.
- [12] Saxena A. K., Gurumurthy K. S. J. Phys. Chem. Sol., 1982, vol. 43, N 9, p. 801—808.
- [13] Pozela J., Reklaitis A. Sol. St. Commun., 1978, vol. 27, N 11, p. 1073—1077.
- [14] Vinson P. J., Pickering C., Adams A. R. et al. In: Proc. of 13 Int. Conf. on Phys. Semicond. Roma, 1976, p. 1243.
- [15] Adachi S. J. Appl. Phys., 1985, vol. 58, N 3, p. R1—R29.
- [16] Мицкявичус Р., Реклайтис А. ФТП, 1986, т. 20, № 9, с. 1693—1697.
- [17] Lee H. J., Woolley J. C., Can. J. Phys., 1979, vol. 57, N 11, p. 1929—1933.
- [18] Gasquet D., de Marcia M., Nougier J. P., Contrand C. Physica, 1985, vol. BC134, N 1—3, p. 264—267.
- [19] Гриняев С. Н., Катаев С. Г., Чалдышев В. А. Изв. вузов. Физика, 1987, т. 30, № 12, с. 92—94.

Томский государственный университет
Сибирский физико-технический институт
им. В. Д. Кузнецова
Томск

Поступило в Редакцию
28 октября 1987 г.
В окончательной редакции
20 марта 1988 г.