

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ МЕЖДОЛИННОГО РАССЕЯНИЯ НА ФОНОНАХ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ $A^{III}B^V$

Гриняев С. Н., Караваев Г. Ф., Тютюрев В. Г.

На основе метода модельного нелокального псевдопотенциала в приближении жестких ионов проведено систематическое изучение параметров рассеяния электронов на коротковолновых фононах в соединениях $A^{III}B^V$. Рассчитаны константы деформационного потенциала для междолинного рассеяния $\Gamma-X$, $\Gamma-L$, $X-X$, $L-L$, $X-L$ в нижней зоне проводимости.

Междолинное рассеяние на фононах является одним из основных механизмов рассеяния, во многом определяющим протекание кинетических процессов в полупроводниках с многодолинным зонным спектром. Существует значительное число работ (прежде всего по транспорту горячих электронов), в которых константы междолинного рассеяния определяются феноменологически, путем подгонки под наблюдаемые характеристики. Однако опосредованность последних другими механизмами рассеяния, неопределенность некоторых параметров зонного спектра и многоканальность самих междолинных переходов ограничивают точность такого нахождения этих констант. Для большинства соединений $A^{III}B^V$ экспериментальные данные по параметрам междолинного рассеяния к настоящему времени отсутствуют, а для тех, которые исследовались, весьма противоречивы.

В связи с этим возрастает роль теоретического исследования механизмов междолинного рассеяния. В [1] на основе метода локального псевдопотенциала нами были рассчитаны константы междолинного рассеяния в GaAs. Представляет интерес определение этих констант и в других соединениях $A^{III}B^V$ с целью выявления общих закономерностей и возможного приложения к различным твердым растворам. Расчет проведен также с более точными псевдопотенциалами с учетом эффектов нелокальности и энергетической зависимости.

Вероятность перехода в единицу времени электрона из блоховского состояния Ψ_{nk} в состояние $\Psi_{n'k'}$ под действием потенциала электрон-фононного взаимодействия δV имеет вид

$$W(nk, n'k') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{N'} |\langle n'k'N' | \delta V | nkN \rangle|^2 \delta(E(n'k'N') - E(nkN)). \quad (1)$$

Здесь $|nkN\rangle$ — волновая функция электрон-фононной системы, равная произведению Ψ_{nk} на функции независимых гармонических осцилляторов, $E(nkN)$ — суммарная энергия электронного и фононного состояний. В (1) подразумевается усреднение по всем возможным начальным состояниям фононной системы. В приближении жестких ионов и при малых колебаниях потенциал δV зависит от смещений атомов $u_{e,x}$ (e — номер элементарной ячейки, x — сорт атома) линейным образом:

$$\delta V = - \sum_{e,x} U_{e,x} \nabla v_x (r - R_e - \tau_x),$$

где v_x — псевдопотенциал x -го атома. Представим смещения через операторы уничтожения $b(s, \mathbf{q})$ и рождения $b^+(s, \mathbf{q})$ (s — номер фононной ветви, \mathbf{q} — волновой вектор фонона):

$$U_{e, x} = \sqrt{\frac{M}{m_x}} \left[\frac{\hbar}{2\varrho \omega_x(\mathbf{q}) V} \right]^{1/2} \sum_{s, \mathbf{q}} [b(s, \mathbf{q}) \mathbf{e}_x(s, \mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_x} + b^+(s, \mathbf{q}) \mathbf{e}_x^*(s, \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_x}].$$

Здесь m_x — масса x -го атома, $M = \sum_x m_x$, $\varrho = M/\Omega_0$ — плотность (Ω_0 — объем элементарной ячейки), $\omega_x(\mathbf{q})$ — частота фонона, V — объем кристалла, $\mathbf{e}_x(s, \mathbf{q})$ — нормированные на единицу векторы поляризации. Тогда формулу (1) можно записать в виде

$$W^\pm(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{s\mathbf{q}} \frac{|D_{ij}^{\pm}|^2}{2\varrho V \omega_x(\mathbf{q})} \left(N_s(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}'} \pm \hbar \omega_x(\mathbf{q})),$$

где «+» соответствует поглощению, а «-» — испусканию фонона, $N_s(\mathbf{q})$ — равновесные числа фононов, D_{ij}^{\pm} — деформационный потенциал (i, j — номера долины для соответствующих состояний $n\mathbf{k}$ и $n'\mathbf{k}'$),

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

Векторный матричный элемент $D^x(n'\mathbf{k}', n\mathbf{k})$ в базисе плоских волн $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{g}} C_n(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{g})\mathbf{r})$ имеет вид

$$D^x(n'\mathbf{k}', n\mathbf{k}) = -i \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, \mathbf{q}=\mathbf{q}'} \sum_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} C_{n'}(\mathbf{k}' + \mathbf{g}') C_n(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \times \\ \times e^{-i(\mathbf{k}'+\mathbf{g}'-\mathbf{k}-\mathbf{g})\cdot\mathbf{r}_x} \langle v_x | \mathbf{k}' + \mathbf{g}' - \mathbf{k} - \mathbf{g} | v_x | \mathbf{k} + \mathbf{g} \rangle,$$

где $\langle \mathbf{k}' + \mathbf{g}' - \mathbf{k} - \mathbf{g} | v_x | \mathbf{k} + \mathbf{g} \rangle$ — форм-фактор экранированного нелокального псевдопотенциала [2], \mathbf{r}_x — вектор x -го атома в элементарной ячейке, \mathbf{g} — целый вектор обратной решетки. Для рассматриваемых здесь коротковолновых фононов вектор \mathbf{q} близок к границе зоны Бриллюэна, где дисперсия $\omega_x(\mathbf{q})$ обычно слабая. Существенную роль в рассеянии на таких фононах играет короткодействующая составляющая потенциала δV , которой соответствуют большие значения форм-факторов. Вклад поляризационных полей, дальнедействующих по своей природе, в вектор D^x должен быть мал при $i \neq j$.

Методика расчета блоховских функций и констант деформационного потенциала описана в [1]. Влияние энергетической зависимости форм-фактора псевдопотенциала в принятой модели сказывается при $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ только через волновые функции, d -нелокальность вносит вклад непосредственно через форм-фактор.

В табл. 1 приведены результаты расчета вектора D^x для наиболее важных переходов в нижней зоне проводимости в соединениях $A^{111}B^v$ между долинами Γ, X, L . Индексы k и a различают сорт атома (катион и анион соответственно). Фазы волновых функций выбраны таким образом, чтобы D^x были вещественны. Для невырожденных состояний это можно сделать всегда. В системе координат с началом в узле катионной подрешетки состояние нижней зоны проводимости в точке X преобразуется по представлению X_3 , и матричные элементы $D_{X,\Gamma}^a = D_{X,X}^a = 0$, согласно правилам отбора, т. е. переходы $X - \Gamma$ и $X - X$ осуществляются только на колебаниях катионной подрешетки. В обозначении $D_{X,X}^a$, подразумеваются переходы между разными долинами X_3 . Обращают на себя внимание малые значения констант, соответствующих $L - L$ -переходам. Наибольшие значения констант получились для $X - X$ -переходов. В рядах соединений константы изменяются монотонно. Эффекты нелокальности оказывают на них влияние в основном в пределах 30 %.

Для нахождения констант D_{ij}^{\pm} необходимо знать векторы поляризации, что в общем случае может быть сделано только численно. Однако в точке $X(001)$

Таблица 1

Ненулевые компоненты вектора междолинных переходов $D_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}}$ для нижней зоны проводимости (в 10^8 эВ/см)

Кристаллы	$D_{\Gamma\Gamma}^k$	$D_{\Gamma\Gamma}^a$	$(D_{X\Gamma}^k)_x$	$(D_{X\Gamma}^k)_y$	$(D_{LL}^k)_x$	$(D_{LL}^k)_y$	D_{LX}^k		D_{LX}^a	
	$D_x = D_y = D_z$		$D_x = D_y = 0$				$D_x = D_y$	D_z	$D_x = D_y$	D_z
AlP	2.0	0.2	3.4	5.5	0.6	-0.2	1.0	-0.3	-1.4	-2.3
AlAs	1.6	0.2	2.9	4.6	0.5	-0.5	1.0	-0.4	-1.1	-1.9
AlSb	1.1	0.4	2.0	4.0	1.0	-0.4	1.0	-0.4	-1.1	-1.8
GaP	1.6	0.6	3.2	5.0	0.5	-0.3	1.0	-0.6	-1.4	-2.4
GaAs	1.4	0.5	2.8	4.4	0.4	-0.6	1.0	-0.7	-1.2	-2.0
GaSb	1.0	0.6	2.1	3.6	0.3	-0.4	1.0	-0.7	-1.0	-1.7
InP	1.3	0.4	2.6	4.3	0.5	-0.3	0.9	-0.8	-0.9	-1.7
InAs	1.1	0.3	2.3	3.7	0.5	-0.5	0.8	-0.8	-0.8	-1.4
InSb	0.8	0.4	1.8	3.1	0.3	-0.4	0.8	-0.7	-0.7	-1.3

для фононов X_1 и X_3 они определяются однозначно из свойств симметрии: $e^a(X_1) = e^k(X_3) = (001)$, $e^k(X_1) = e^a(X_3) = 0$.

Для переходов с участием этих фононов соответствующие константы приведены в табл. 2. Точность этих констант определяется только приближениями, принятыми при расчете электронной подсистемы. Частоты и векторы поляризации фононов в точке L были рассчитаны на основе модели сил связи [3, 4] для соединений AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InSb. Для других соединений не имеется достаточно полных сведений о фононном спектре. В табл. 3 приведены константы D_{ij}^a с участием L -фононов, полученные по формуле (2) с использованием вычисленных векторов поляризации и данных табл. 1.

Таблица 2

Абсолютные величины междолинных потенциалов рассеяния D_{ij}^a с участием X -фононов (в 10^8 эВ/см)

Кристаллы	$D_{\Gamma X}^a$	D_{XX}^a	D_{LL}^a	D_{LL}^a
AlP	5.0	8.1	0.9	0.3
AlAs	5.6	8.9	1.0	0.6
AlSb	4.7	9.4	0.2	0.4
GaP	3.8	6.0	0.6	0.5
GaAs	4.0	6.3	0.6	0.8
GaSb	3.5	6.0	0.5	0.5
InP	2.9	4.8	0.6	0.7
InAs	3.0	4.8	0.6	0.8
InSb	2.6	4.5	0.4	0.6

В соединениях с близкими значениями масс атомов (AlP, GaAs, InSb) продольные частоты LA - и LO -фононов с симметрией L_1 мало отличаются друг от друга, поэтому соответствующие две константы деформационного потенциала можно объединить в одну, которая фактически и определяется в эксперименте. Можно показать, что в этом приближении ввиду нормировки и ортогональности векторов поляризации объединенная константа деформационного потенциала не зависит от модели межатомных сил и равна $D_{\Gamma L}^{L_1(L_0+L_1)} =$

$$= \sqrt{|D_{\Gamma L}^{L_1(L_0)}|^2 + |D_{\Gamma L}^{L_1(L_1)}|^2}.$$

Не располагая адекватной моделью фононного спектра для AlP, мы воспользовались указанным обстоятельством и рассчитали некоторые константы

Таблица 3

Абсолютные величины междолинных потенциалов рассеяния D_{ij}^a с участием L -фононов (в 10^8 эВ/см)

Кристаллы	$D_{LO}^{L_1(L_0)}$	$D_{\Gamma L}^{L_1(L_1)}$	$D_{XL}^{L_2(T_0)}$	$D_{XL}^{L_2(TA)}$	$D_{XX}^{L_1(L_0)}$	$D_{XX}^{L_1(L_1)}$
AlSb	4.0	2.2	2.7	0.7	2.9	1.7
GaP	1.0	3.7	2.2	0.1	5.5	0.5
GaAs	3.3	1.6	2.2	0.0	1.7	3.3
GaSb	2.8	1.5	2.3	0.7	1.4	2.6
InSb	2.0	0.9	1.9	0.2	0.7	2.2

Таблица 4

Объединенные константы междолинного рассеяния (в 10^6 эВ/см)
(в скобках — расчет [1])

Кристаллы	$D_{\Gamma L}^{L_1(L_0+L_A)}$	$D_{\Gamma X}^{X_1}$	$D_{LL}^{X_1+X_2}$	$D_{XX}^{X_2}$	$D_{XL}^{L_1(L_0+L_A)+L_2(T_0)}$	$D_{XL}^{L_2(T_A)}$
AlP	5.0	5.0	1.0	8.1	—	—
GaAs	3.7 (3.6)	4.0 (3.8)	1.0 (0.6)	6.3 (6.3)	4.3 (4.7)	0.0 (0.2)
InSb	2.2	2.6	0.7	4.5	3.0	0.2

в этом приближении (табл. 4). Там же приведены объединенные константы для кристаллов GaAs и InSb.

Для соединений с сильно различающимися массами атомов такое объединение фононных ветвей не является оправданным и число независимых констант соответственно увеличивается, причем зависимость от модели межатомных сил, входящая через векторы поляризации фононов, существенна. Заметим, что такая зависимость всегда имеет место для переходов за счет фононов симметрии L_3 .

В табл. 4 для сравнения приведены в скобках результаты расчета с локальным псевдопотенциалом [1]. Как видно, учет нелокальности не приводит к существенному изменению значений D_{ij}^* . Для GaAs вычисленные константы лежат в пределах разброса экспериментальных значений. Можно надеяться на то, что рассчитанные предложенным методом деформационные потенциалы для других соединений окажутся полезными для интерпретации экспериментов по транспорту горячих электронов в кристаллах $A^{III}B^V$, сплавах и гетероструктурах на их основе.

Список литературы

- [1] Гриняев С. Н., Караваев Г. Ф., Тютюрев В. Г., Чалдышев В. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. В. 9. С. 2753—2756.
- [2] Чалдышев В. А., Гриняев С. Н. // Изв. вузов СССР. Физика. 1983. Т. 26. В. 3. С. 38—61.
- [3] Kunc K., Balkanski M., Nusimovici M. A. // Phys. St. Sol. 1975. V. 72. P. 229—248.
- [4] Singh T. N., Roy B. N. // Nuovo Cimento. 1978. V. 46B. P. 328—336.

Сибирский физико-технический институт
им. В. Д. Кузнецова при ТГУ
Томск

Получена 26.12.1988
Принята к печати 13.04.1989