

Каскадный захват электронов на доноры в квантовых ямах GaAs

© В.Я. Алешкин^{†*}

[†] Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

^{*} Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 12 января 2015 г. Принята к печати 25 февраля 2015 г.)

Вычислено прицельное расстояние каскадного захвата электрона на заряженный донор в квантовых ямах GaAs. Предложено простое аналитическое выражение для его приближенного описания. Найдена зависимость прицельного расстояния от температуры при рассеянии электрона на пьезоэлектрическом потенциале акустических фононов.

1. Введение

В последние годы наблюдается возрастание интереса к экспериментальному исследованию релаксации примесной фотопроводимости как в квантовых ямах [1], так и в объемных полупроводниках [2–5]. Одним из механизмов, определяющих динамику релаксации примесной фотопроводимости, является захват носителей тока на центры захвата. В полярных полупроводниках основным механизмом релаксации энергии электронов вблизи дна зоны проводимости является рассеяние на пьезоэлектрическом потенциале акустических фононов (ПА-рассеяние). Поэтому такой же механизм должен играть основную роль при каскадном захвате электрона на притягивающий центр. Сечение каскадного захвата электрона на кулоновский центр за счет ПА-рассеяния в объемном полупроводнике было вычислено Полупановым [6], а темп захвата на диполь был вычислен в работе [7]. Однако до настоящего времени остался нерассмотренным вопрос о каскадном захвате за счет ПА-рассеяния в квантовых ямах. Отметим, что в работе Карпуса [8] было введено прицельное расстояние каскадного захвата, которое является аналогом сечения захвата для квантовых ям, и вычислена его величина для случая рассеяния электронов на деформационном потенциале акустических фононов (ДА-рассеяние).

В настоящей работе вычислено прицельное расстояние каскадного захвата электрона на кулоновский центр за счет ПА- и ДА-рассеяния в квантовой яме. Предложено простое аналитическое выражение для его приближенного описания. Показано, что полученное аналитическое выражение с высокой точностью описывает каскадный захват в квантовых ямах GaAs.

2. Расчет прицельного расстояния каскадного захвата

Рассмотрим заряженный донор, находящийся в квантовой яме. Обозначим поток электронов на него в стационарных условиях j . Прицельное расстояние каскадного

захвата определяется следующим соотношением [8]:

$$j = n\rho_0\langle v \rangle, \quad (1)$$

где n — двумерная концентрация электронов, $\langle v \rangle = \sqrt{\pi k_B T / 2m}$ — средняя тепловая скорость электронов в квантовой яме, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, m — масса электрона.

Для вычисления j необходимо рассматривать область отрицательных энергий E [9]. Для квазиупругого рассеяния в стационарных условиях функция распределения удовлетворяет уравнению [9]

$$B(E) \left[f(E) + k_B T \frac{\partial f}{\partial E} \right] = j, \quad (2)$$

где величина $B(E)$ является коэффициентом „динамического трения“ в уравнении Фоккера–Планка, которому удовлетворяет функция распределения [9]. Выражение для $B(E)$ в квантовой яме имеет следующий вид (согласно выражению (П7.19) из [9]):

$$B(E) = \int R(\varepsilon) G \delta(E - \varepsilon - U(r)) d\varepsilon d^2r, \quad E < 0, \quad (3)$$

где $R(\varepsilon)$ — скорость релаксации энергии электрона с кинетической энергией ε , $G = m/2\pi\hbar^2$ — плотность состояний электрона, находящегося на нижней подзоне размерного квантования без учета спина, $U(r)$ — потенциальная энергия электрона в поле притягивающего центра.

Интегрируя уравнение (2) в области отрицательных энергий с граничным условием $f(E_1) = 0$, где E_1 — энергия электрона, находящегося на основном состоянии донора, можно получить следующее соотношение [9]:

$$f(E) = \frac{j}{k_B T} \int_{E_1}^E \frac{\exp(E/k_B T)}{B(E)} dE. \quad (4)$$

Для нахождения j можно потребовать, чтобы $f(0)$ соответствовало равновесному распределению, т.е.

[†] E-mail: aleshkin@ipmras.ru

$f(0) = n\pi\hbar^2/mk_B T$. Полагая $E_1 \ll -k_B T$, получаем следующее выражение [9]:

$$\rho_0(v) = \frac{k_B T f(0)}{n} \left[\int_{-\infty}^0 \frac{\exp(E/k_B T)}{B(E)} dE \right]^{-1}. \quad (5)$$

Как видно из (4), (3), для нахождения прицельного расстояния каскадного захвата необходимо найти скорость релаксации энергии в квантовой яме. Для того чтобы найти эту величину, рассмотрим вероятность рассеяния электрона на акустических фононах. Будем полагать, что электрон находится в первой подзоне размерного квантования, а энергия между подзонами размерного квантования много больше тепловой энергии. Будем полагать, что электрон взаимодействует с трехмерными акустическими фононами, т.е. акустические фононы в квантовой яме и барьере идентичны. Такое приближение является разумным для квантовых ям GaAs/Al_xGa_{1-x}As с небольшим x . В работах Карпуса [10,11] было рассмотрено ДА- и ПА-рассеяние соответственно. В этих работах были получены приближенные аналитические выражения для времен релаксации энергии и импульса для различных предельных случаев, однако необходимое выражение для скорости релаксации энергии электрона вблизи дна зоны проводимости отсутствует. Поэтому далее мы его найдем.

Гамильтониан взаимодействия электронов Γ -долины в кубическом кристалле с акустическими фононами можно представить в виде [12]

$$H = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{q,\lambda} V(q)^* b_q^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) + V(q) b_q \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (6)$$

где L^3 — объем кристалла, \mathbf{q} — волновой вектор фонона, индекс λ обозначает его поляризацию,

$$V(q) = 4\pi e \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\lambda q}} \right)^{1/2} \frac{d_j^{(\lambda q)} \beta_{jlm} q_l q_m}{q^2} \quad (7)$$

для рассеяния на пьезоакустическом потенциале и

$$V(q) = i\Xi \mathbf{q} d^{\lambda q} \left(\frac{\hbar}{2\rho s q} \right)^{1/2} \quad (8)$$

при рассеянии на деформационном потенциале, e — заряд электрона, $\omega_{\lambda q}$ — циклическая частота фонона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ , s — скорость звука, ρ — плотность кристалла, $\mathbf{d}^{(\lambda d)}$ — единичный вектор, направленный в сторону смещения масс элементарных ячеек для соответствующего фонона, β_{ijk} — тензор пьезомодулей, Ξ — постоянная деформационного потенциала. Волновую функцию электрона в квантовой яме представим в виде $\Psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\psi(z)/L^2$, где \mathbf{k} — двумерный волновой вектор электрона. Вероятность рассеяния из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' с испусканием

(верхний индекс „+“) или поглощением (верхний индекс „-“) имеет вид

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\pm} = \frac{1}{\hbar L^2} \int dq_z |V(q)\Phi(q_z)|^2 \times (n_q + 1/2 \pm 1/2) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k') \pm \hbar s q), \quad (9)$$

компонента вектора \mathbf{q} в плоскости квантовой ямы равна $\mathbf{q}_{\parallel} = \pm(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, $\Phi(q_z) = \int dz \psi^* \exp(iq_z z) \psi$. Для дальнейшего (9) удобно переписать в несколько ином виде. Для этого введем величину $Q > 0$:

$$Q = \begin{cases} \frac{\varepsilon(k) - \varepsilon(k')}{\hbar s}, & k > k', \\ \frac{\varepsilon(k') - \varepsilon(k)}{\hbar s}, & k < k'. \end{cases}$$

Используя эту величину, (9) можно переписать в следующем виде:

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+ = \frac{1}{\hbar^2 s L^2} \int dq_z |V(Q)\Phi(q_z)|^2 (n_Q + 1/2 \pm 1/2) \times \delta \left(Q - \sqrt{q_z^2 + k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta} \right), \quad (10)$$

где ϑ — угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' .

Скорость релаксации энергии пробной частицы [12] можно записать в виде

$$R(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{k' < k} d^2 k' |V(Q)|^2 Q \int dq_z |\Phi(q_z)|^2 \times \delta \left(Q - \sqrt{q_z^2 + k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta} \right). \quad (11)$$

Интегрируя (10) по q_z и переходя от переменной k' к $\varepsilon' = \hbar^2 k'^2 / 2m$, получаем:

$$R(\varepsilon) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\varepsilon} d\varepsilon' |V(Q)|^2 Q^2 \times \int_0^{\theta} d\vartheta \frac{|\Phi(\sqrt{Q^2 - k^2 - k'^2 + 2kk' \cos \vartheta})|^2}{\sqrt{Q^2 - k^2 - k'^2 + 2kk' \cos \vartheta}}, \quad (12)$$

где

$$\theta = \begin{cases} \pi, & \frac{k^2 + k'^2 - Q^2}{2kk'} < -1 \\ 0, & \frac{k^2 + k'^2 - Q^2}{2kk'} > 1 \\ \arccos \left(\frac{k^2 + k'^2 - Q^2}{2kk'} \right), & \left| \frac{k^2 + k'^2 - Q^2}{2kk'} \right| < 1. \end{cases}$$

Как будет показано далее (см. формулу (17) и текст под ней), основной вклад в $B(E)$ дает область энергий $\varepsilon \sim k_B T$. Непосредственные вычисления максимального значения волнового вектора $q_{z \max} = \sqrt{Q^2 - (k - k')^2}$

для GaAs дают $\sim 10^6 \text{ см}^{-1}$ для электрона с энергией 0.4 мэВ, что соответствует тепловой энергии при $T = 5 \text{ К}$. Характерным масштабом изменения функции $\Phi(q_s)$ является обратная ширина квантовой ямы. Будем рассматривать не очень широкие квантовые ямы, тогда $q_z \max d \ll 1$. В этом случае $\Phi(q_z) \approx 1$ и выражение (12) упрощается:

$$R(\varepsilon) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\varepsilon d\varepsilon' |V(Q)|^2 Q^2 \times \int_0^\theta d\vartheta \frac{1}{\sqrt{Q^2 - k^2 - k'^2 + 2kk' \cos \vartheta}}. \quad (13)$$

Для ПА-рассеяния (13) можно переписать в виде

$$R(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{2\pi \tau_{\text{ПА}} p_0 m} \int_0^k (k^2 - k'^2) k' dk \times \int_0^\theta d\vartheta \frac{1}{\sqrt{Q^2 - k^2 - k'^2 + 2kk' \cos \vartheta}}, \quad (14)$$

где

$$(\tau_{\text{ПА}})^{-1} = \frac{(e\beta)^2 p_0}{2\pi \hbar p_s^2}, \quad p_0 = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}{\hbar},$$

$\hbar\omega_0$ — энергия оптического фонона, β — усредненный пьезомодуль [12].

Можно показать, что хорошим приближением для интеграла (14) в области небольших энергий является следующее выражение:

$$R(\varepsilon) = \frac{ms}{\tau_{\text{ПА}} \hbar p_0} \varepsilon. \quad (15)$$

Для иллюстрации сделанного утверждения на рис. 1 приведены функция (15) и численно рассчитанная функция $R(\varepsilon)$ из выражения (12) для квантовой ямы GaAs шириной 100 Å, заключенной между барьерами $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$. Из рисунка видно, что (15) хорошо согласуется с точной зависимостью при энергиях электрона $< 1 \text{ мэВ}$. Там же приведена зависимость $R(\varepsilon)$ для рассеяния на деформационном потенциале в этой квантовой яме, вычисленная согласно (12). Параметры рассеяния электронов взяты из [12].

Энергия взаимодействия электрона с однократно заряженным кулоновским центром в квантовой яме имеет следующий вид:

$$U(r) = -\frac{e^2}{\kappa} \int dz \frac{|\psi(z)|^2}{\sqrt{(z - z_0)^2 + r^2}}, \quad (16)$$

где e — заряд электрона, κ — статическая диэлектрическая проницаемость, z_0 — одна из трех координат центра. На больших по сравнению с размером квантовой ямы расстояниях для центра, расположенного внутри

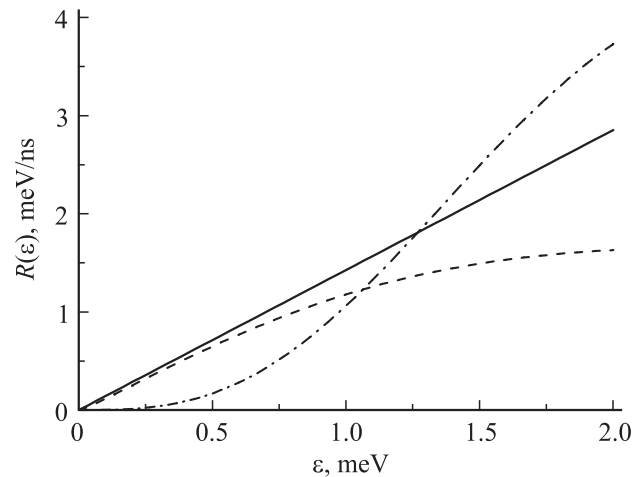


Рис. 1. Скорость релаксации энергии $R(\varepsilon)$ для квантовой ямы GaAs 100 Å. Сплошная линия — зависимость (15), штриховая линия — зависимость, рассчитанная численно из выражения (12) для рассеяния на пьезоакустическом потенциале, штрихпунктирная линия соответствует (12) для рассеяния на деформационном потенциале.

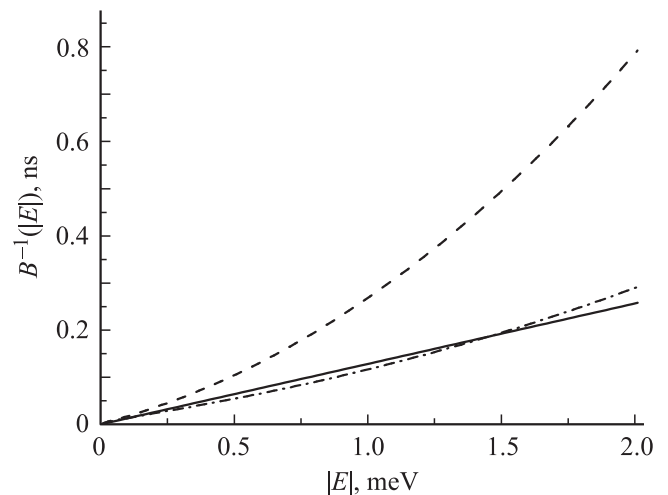


Рис. 2. Зависимости $B^{-1}(|E|)$. Сплошная линия соответствует (18), штриховая линия соответствует точному учету ПА-рассеяния, штрихпунктирная линия — точному учету рассеяния электронов как на пьезоакустическом потенциале, так и на деформационном потенциале акустических фононов.

квантовой ямы, $U(r) \approx -e^2/\kappa r$. Для того чтобы можно было использовать это выражение, необходимо иметь энергию ионизации центра много больше $k_B T$. Подставляя выражение для $U(r)$ в (3) и интегрируя по r , получаем

$$B(E) = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\kappa}\right)^2 \int_0^\infty d\varepsilon \frac{R(\varepsilon)}{(|E| + \varepsilon)^3}. \quad (17)$$

Из (5) видно, что основной вклад в прицельный параметр дает область $|E| < k_B T$. Имея это в виду, из (17)

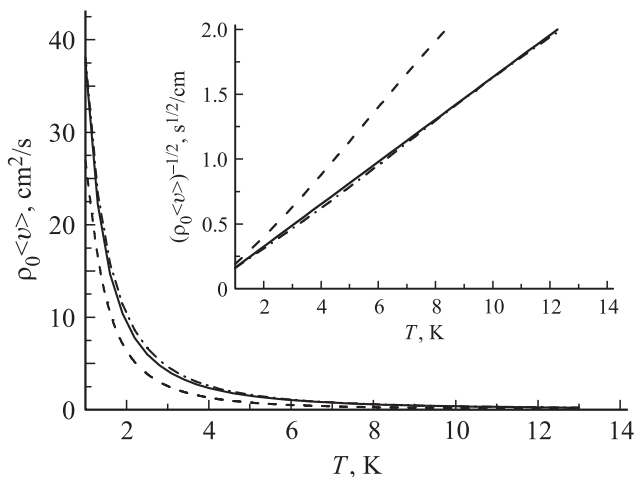


Рис. 3. Зависимости $\rho_0\langle v \rangle$ от температуры. На вставке — зависимости $(\rho_0\langle v \rangle)^{-1/2}$ от температуры. Сплошные линии соответствуют формуле (19), штрихпунктирные — численному расчету с учетом ПА- и ДА-рассеяния, штриховые линии — численному расчету с учетом только ПА-рассеяния.

видим, что при определении прицельного параметра важна область кинетической энергии $\varepsilon \leq k_B T$. Если подставить (15) в (17), получается следующее выражение для $B(E)$:

$$B(E) = \frac{m^2 s}{2\tau_{\text{PA}} \hbar^3 \rho_0 |E|} \left(\frac{e^2}{\kappa} \right)^2. \quad (18)$$

На рис. 2 представлены зависимости $B^{-1}(E)$, вычисленные согласно (18) и с использованием точных численных функций $R(\varepsilon)$ для квантовой ямы GaAs шириной 100 Å. Из рисунка видно, что функция, обратная (18), меньше $B^{-1}(E)$, вычисленной только с учетом ПА-рассеяния, но хорошо согласуется с зависимостью $B^{-1}(E)$, вычисленной с учетом как ПА-, так и ДА-рассеяния.

Подставляя (18) в (5), получаем выражение для $\rho_0\langle v \rangle$:

$$\rho_0\langle v \rangle = \frac{\pi m s}{2\tau_{\text{PA}} \hbar p_0} \left(\frac{e^2}{\kappa k_B T} \right)^2. \quad (19)$$

На рис. 3 приведены рассчитанные зависимости $\rho_0\langle v \rangle$ от температуры с использованием (18) и с использованием зависимостей $B(E)$, полученных численно с учетом только ПА-рассеяния или ПА- и ДА-рассеяния. Из рисунка видно, что зависимость (19) хорошо согласуется с зависимостью, полученной численно с учетом ПА- и ДА-рассеяния. Кроме того видно, что (19) является довольно грубым, но качественно верным приближением к численной зависимости, полученной с учетом только ПА-рассеяния.

Для того чтобы показать следование закону $\rho_0\langle v \rangle \propto T^{-2}$, на вставке к рис. 3 приведены зависимости $(\rho_0\langle v \rangle)^{-1/2}$ от температуры. Хорошо видно, что изображенные линии близки к линейным зависимостям.

Поэтому можно сделать вывод о том, что прицельное расстояние каскадного захвата в GaAs $\propto T^{-5/2}$ как для ПА-рассеяния, так и при одновременном учете ДА- и ПА-рассеяния. Проведенные численные расчеты для квантовых ям с толщинами от 200 до 50 Å показали примерно те же результаты, что и для ямы толщиной 100 Å. Отметим: в работе Карпуса [10] было показано, что прицельное расстояние каскадного захвата при захвате при ДА-рассеянии $\propto T^{-7/2}$.

3. Заключение

В заключение приведем основные результаты работы. В работе численно определено прицельное расстояние каскадного захвата в квантовой яме GaAs. Предложена простая аналитическая формула для описания прицельного параметра каскадного захвата. Предложенная формула хорошо описывает численные результаты в температурном интервале 1–15 К для GaAs. Найдена зависимость прицельного расстояния каскадного захвата в GaAs от температуры. Показано, что прицельное расстояние каскадного захвата при рассеянии $\propto T^{-5/2}$. Прицельное расстояние каскадного захвата для ПА-рассеяния также $\propto T^{-5/2}$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-02-00404).

Список литературы

- [1] S.V. Morozov, L.V. Gavrilenko, I.V. Erofeeva, A.V. Antonov, K.V. Maremyanin, A.N. Yablonskiy, D.I. Kuritsin, E.E. Orlova, V.I. Gavrilenko. *Semicond. Sci. Technol.*, **26**, 085 009 (2011).
- [2] С.В. Морозов, К.В. Маремьянин, И.В. Ерофеева, А.Н. Яблонский, А.В. Антонов, Л.В. Гавриленко, В.В. Румянцев, В.И. Гавриленко. *ФТП*, **44**, 1523 (2010).
- [3] В.В. Румянцев, С.В. Морозов, К.Е. Кудрявцев, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов. *ФТП*, **46**, 1414 (2012).
- [4] С.В. Морозов, В.В. Румянцев, К.Е. Кудрявцев, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов. *ФТП*, **47**, 1472 (2013).
- [5] Д.В. Козлов, С.В. Морозов, В.В. Румянцев, И.В. Тузов, К.Е. Кудрявцев, В.И. Гавриленко. *ФТП*, **49**, 192 (2015).
- [6] А.Ф. Полупанов. *ФТП*, **11**, 2044 (1977).
- [7] В.Я. Алешкин, С.В. Морозов, В.В. Румянцев, И.В. Тузов. *ФТП*, **49**, 117 (2015).
- [8] В. Карпус. *ФТП*, **19**, 1625 (1985).
- [9] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясневич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Петербургский ин-т ядерной физики им. Б.П. Константинова, 1997).
- [10] В. Карпус. *ФТП*, **20**, 12 (1986).
- [11] В. Карпус. *ФТП*, **22**, 439 (1988).
- [12] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).

Редактор Л.В. Шаронова

Cascade capture of electrons on donors in GaAs quantum wells

V.Ya. Aleshkin^{+,*}

⁺ Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

^{*} Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The impact parameter for electron capture on charged donor in GaAs quantum well has been calculated. The simple analytic expression is suggested for its approximate description. The dependence of the impact parameter for electron capture on temperature has been found for electron scattering on piezoelectric potential of the acoustic phonons.