

Теоретическое исследование процессов оже-рекомбинации в глубоких квантовых ямах

© Л.В. Данилов[¶], Г.Г. Зегря^{¶¶}

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 13 августа 2007 г. Принята к печати 30 августа 2007 г.)

Исследованы основные процессы и механизмы оже-рекомбинации неравновесных носителей в полупроводниковой гетероструктуре с глубокими квантовыми ямами $\text{InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$. Показано, что в достаточно узких квантовых ямах преобладает беспороговый процесс оже-рекомбинации с участием двух тяжелых дырок; а в широких квантовых ямах доминирует резонансный процесс с участием двух электронов. Определена область значений ширины квантовой ямы, при которых происходит максимальное подавление оже-рекомбинации в данной структуре (область подавления). При этом основным процессом безызлучательной рекомбинации остается пороговый процесс с участием двух электронов, вероятность которого на несколько порядков меньше, чем для беспорогового и резонансного механизмов. В свою очередь беспороговый механизм с участием двух электронов в исследуемой гетероструктуре полностью исключен из-за большого разрыва зоны проводимости (значительно больше ширины запрещенной зоны). Также произведена оценка интервала длин волн излучения, соответствующего области подавления. Показано, что рассчитанный интервал принадлежит среднему ИК-диапазону.

PACS: 73.21.Fg, 78.67.De

1. Введение

В полупроводниках при высоких уровнях возбуждения существует два основных механизма рекомбинации носителей: излучательная рекомбинация (с испусканием фотона) и безызлучательная оже-рекомбинация (ОР), связанная с электрон-электронным или дырочно-дырочным взаимодействием. В связи с этим различают два наиболее вероятных процесса ОР в полупроводниках: СНСС-процесс с участием двух электронов и тяжелой дырки и СННС-процесс с участием электрона и двух тяжелых дырок с переходом одной из них в спин-орбитально отщепленную зону. В однородных полупроводниках такие процессы являются пороговыми [1]. Ограничения на темп ОР накладываются законами сохранения энергии и импульса носителей. Однако в гетероструктурах (квантовых ямах, нитях, точках) ограничения, накладываемые законом сохранения квазиимпульса, снимаются [2]. Вследствие этого в таких системах появляются дополнительные, более эффективные, беспороговые каналы оже-рекомбинации. Кроме того, в гетероструктурах вероятность ОР выше, чем в однородном полупроводнике, за счет большей локализации носителей (в потенциальной яме). Таким образом, безызлучательная ОР является важным механизмом рекомбинации носителей в гетероструктурах. Особенно ярко это выражено в узкощелевых полупроводниках, что затрудняет создание инфракрасного (ИК) полупроводникового гетеролазера, эффективно работающего при комнатной температуре.

В работе [3] была предложена идея использования гетероструктур с глубокими и узкими квантовыми ямами

для электронов и дырок с целью создания ИК-лазера. В таких структурах возможно существенное подавление беспороговых механизмов ОР. Для этого необходимо выполнение условий $(U_c, U_v) > E_g$ и $E_2 - E_1 > E_g$ (где E_1 и E_2 — энергии первого и второго уровня размерного квантования носителей, U_c, U_v — глубина квантовых ям для электронов и дырок соответственно, E_g — ширина запрещенной зоны). В таких квантовых ямах энергия возбуждения недостаточна для выхода электрона в сплошной спектр (беспороговый механизм) или перехода электрона на второй уровень размерного квантования (резонансный механизм). Таким образом, при таких условиях остается только пороговый механизм ОР, скорость которого может быть на несколько порядков меньше, чем у последних двух механизмов. Современные технологии позволяют создавать подобные структуры на основе материалов InAs/AlSb и $\text{InAs}/\text{GaSb}/\text{AlSb}$.

В данной работе исследуется гетероструктура I типа $\text{InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$. Применение тройного твердого раствора для создания активной области связано с необходимостью подавления СННС-процесса ОР, который является почти что резонансным, так как для InAs ширина спин-отщепленной зоны близка к ширине запрещенной зоны ($E_g = 0.35$ эВ, $\Delta_{so} = 0.4$ эВ). Благодаря использованию подобного тройного соединения ($\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$) удалось добиться увеличения Δ_{so} и уменьшения E_g , что в свою очередь способствовало значительному подавлению СННС-процесса.

Цель настоящей работы состоит в исследовании процессов оже-рекомбинации в глубоких квантовых ямах и оптимизации параметров гетероструктуры, при которых возможно максимальное ослабление безызлучательной ОР. В работе были рассчитаны уровни энергии и волновые функции неравновесных носителей в квантовой

[¶] E-mail: danleon84@mail.ru

^{¶¶} E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

яме, исследованы основные механизмы и процессы оже-рекомбинации в этой гетероструктуре. Выполнен расчет соответствующих коэффициентов оже-рекомбинации (СНСС-, СННС-процессов), в том числе и резонансного СНСС-процесса, с переходом возбужденного электрона на второй энергетический уровень размерного квантования, в значительном интервале ширины квантовой ямы. Найдены оптимальные параметры гетероструктуры, при которых имеет место максимальное подавление безызлучательной оже-рекомбинации.

В расчетах использовались следующие параметры исследуемой полупроводниковой системы: ширина запрещенной и спин-отщепленной зоны в узкозонном материале (InAs_{0.84}Sb_{0.16}) $E_{g1} = 0.24$ эВ и $\Delta_1 = 0.6$ эВ, для широкозонного материала (AlSb) $E_{g2} = 1.616$ эВ и $\Delta_2 = 0.676$ эВ, разрывы валентной зоны и зоны проводимости $U_c = 1.253$ эВ и $U_v = 0.118$ эВ соответственно; эффективные массы электронов, тяжелых и спин-отщепленных дырок $m_c = 0.018m_0$, $m_{hh} = 0.413m_0$, $m_{so} = 0.16m_0$. Все расчеты и исходные значения приведены для комнатной температуры $T = 300$ К.

2. Основные уравнения

Процесс ОР связан с электрон-электронным взаимодействием. Вероятность электрон-электронного взаимодействия вычисляется в рамках 1-го порядка теории возмущений:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (1)$$

где

$$M_{fi} = \left\langle \Psi_f(r_1, r_2) \left| \frac{e^2}{\kappa_0 |r_1 - r_2|} \right| \Psi_i(r_1, r_2) \right\rangle \quad (2)$$

— матричный элемент электрон-электронного взаимодействия, r_1, r_2 — координаты носителей, e — заряд электрона, κ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника.

С учетом антисимметризации волновых функций матричный элемент оже-перехода можно представить в виде

$$M_{fi} = M_I - M_{II}, \quad (3)$$

где

$$M_I = \left\langle \Psi_3(r_1)\Psi_4(r_2) \left| \frac{e^2}{\kappa_0 |r_1 - r_2|} \right| \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) \right\rangle, \\ M_{II} = \left\langle \Psi_3(r_1)\Psi_4(r_2) \left| \frac{e^2}{\kappa_0 |r_1 - r_2|} \right| \Psi_1(r_2)\Psi_2(r_1) \right\rangle, \quad (4)$$

Ψ_1, Ψ_2 — волновые функции электронов в начальном состоянии; Ψ_3 — волновая функция тяжелой дырки; Ψ_4 — волновая функция возбужденного электрона.

Для вычисления скорости ОР необходимо просуммировать вероятность оже-перехода в единицу времени (1)

по всем начальным и конечным состояниям носителей с соответствующими весами — числами заполнения:

$$G_a = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \langle M_{fi}^2 \rangle f_1 f_2 (1 - f_3)(1 - f_4) \\ \times \delta(E_3 + E_4 - E_1 - E_2). \quad (5)$$

Здесь f_1 и f_2 — фермиевские функции распределения носителей в начальном состоянии, а f_3 и f_4 — в конечном состоянии. Для высоковозбужденных состояний функцию распределения f_4 можно положить равной нулю. Следует отметить, что вместо $1 - f_3$ можно писать \tilde{f}_3 , где \tilde{f}_3 — функция распределения дырок.

В дальнейшем нас также будет интересовать коэффициент оже-рекомбинации, который связан со скоростью ОР выражением

$$C = G_a / n^2 p. \quad (6)$$

Итак, для расчета скорости и коэффициента ОР необходимо знать волновые функции носителей. Волновые функции электронов и дырок рассчитываются в рамках четырехзонной модели Кейна, которая учитывает взаимодействие между всеми четырьмя зонами в полупроводнике (зоной проводимости, зонами тяжелых и легких дырок и спин-отщепленной зоной).

2.1. Электроны в прямоугольной квантовой яме

Волновые функции электронов в квантовой яме дают выражения (7)–(8), приведем их без вывода. Более подробно этот вопрос рассмотрен в работе [4]. Итак, при $|x| < a/2$

$$\Psi_{sc} = A_1 \cos k_c x \eta + A_2 \sin k_c x \xi,$$

$$\Psi_c = \frac{i\hbar\gamma}{Z} A_1 \begin{pmatrix} k_c \sin k_c x \eta - \lambda_c q \cos k_c x \xi \\ -iq \cos k_c x \eta + i\lambda_c k_c \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c k_c \sin k_c x \xi + \lambda_c q \cos k_c x \eta \end{pmatrix} \\ + \frac{i\hbar\gamma}{Z} A_2 \begin{pmatrix} -k_c \cos k_c x \xi - \lambda_c q \sin k_c x \eta \\ -i\lambda_c k_c \cos k_c x \eta - iq \sin k_c x \xi \\ -\lambda_c q \sin k_c x \xi - \lambda_c k_c \cos k_c x \eta \end{pmatrix}, \quad (7)$$

при $x > a/2$

$$\Psi_{sc}^{(1)} = [\tilde{A}_1 \eta + \tilde{A}_2 \xi] e^{-\kappa_c(x-a/2)},$$

$$\Psi_c^{(1)} = \frac{i\hbar\gamma}{Z} \tilde{A}_1 \begin{pmatrix} \kappa_c \eta - \tilde{\lambda}_c q \xi \\ -iq \eta + i\tilde{\lambda}_c \kappa_c \xi \\ -\tilde{\lambda}_c \kappa_c \xi + \tilde{\lambda}_c q \eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-a/2)} \\ + \frac{i\hbar\gamma}{Z} \tilde{A}_2 \begin{pmatrix} \kappa_c \xi - \tilde{\lambda}_c q \eta \\ -i\tilde{\lambda}_c \kappa_c \eta - iq \xi \\ -\tilde{\lambda}_c q \xi + \tilde{\lambda}_c \kappa_c \eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_c(x-a/2)}, \quad (8)$$

где

$$Z = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}(2E_g + 2\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{\mathcal{E} + E_g + 2\delta},$$

$$\tilde{Z} = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}(2E_g + 2U_v + 2\tilde{\delta}) + (E_g + U_v + 3\tilde{\delta})(E_g + U_v)}{\mathcal{E} + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}},$$

$$\tilde{\lambda}_c = \frac{\tilde{\delta}}{\mathcal{E} + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}}.$$

Здесь k_c — x -компонента квазиимпульса электронов в квантовой яме, q — продольный импульс электронов, κ_c — модуль x -компоненты квазиимпульса электронов под барьером, $\delta = \Delta_1/3$ и $\tilde{\delta} = \Delta_2/3$, a — ширина квантовой ямы.

2.2. Дырки в прямоугольной квантовой яме

Тяжелые дырки:

$$\Psi_h(q, x) = H_1 \begin{pmatrix} q \cos k_h x \xi \\ -ik_h \sin k_h x \xi \\ -k_h \sin k_h x \xi + q \cos k_h x \eta \end{pmatrix} + H_2 \begin{pmatrix} q \sin k_h x \eta \\ ik_h \cos k_h x \eta \\ -q \sin k_h x \xi + k_h \cos k_h x \eta \end{pmatrix}.$$

Здесь q, k_h — y - и x -компоненты квазиимпульса тяжелых дырок, $\xi = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\eta = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, H_1 и H_2 — нормировочные константы.

В области барьера ($x > a/2$) волновые функции связанных носителей экспоненциально затухают при удалении от интерфейса:

$$\Psi_h = \tilde{H}_1 \begin{pmatrix} q\xi \\ -ik_h\xi \\ -\kappa_h\xi + q\eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x-a/2)} + \tilde{H}_2 \begin{pmatrix} q\eta \\ -ik_h\eta \\ -q\xi + \kappa_h\eta \end{pmatrix} e^{-\kappa_h(x-a/2)}. \quad (10)$$

2.3. Расчет уровней энергии в квантовой яме

Для вычисления энергетических уровней электронов и дырок в квантовой яме необходимо воспользоваться граничными условиями, налагаемыми на волновые функции носителей. Подробно вывод граничных условий представлен в работе [4].

Граничное условие дает, что для электронов Ψ_s и Ψ_x должны быть непрерывными. Это приводит к дисперсионному уравнению

$$\left(k_c \operatorname{tg} k_c a/2 - \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) \times \left(k_c \operatorname{ctg} k_c a/2 + \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) = -q^2 \left(\lambda_c - \tilde{\lambda}_c \frac{Z}{\tilde{Z}} \right)^2. \quad (11)$$

Спектр тяжелых дырок совпадает с квантово-механическим спектром частицы в прямоугольной квантовой яме. Дисперсионное уравнение принимает вид

$$\operatorname{tg} k_h a/2 = \frac{\kappa_h}{k_h}. \quad (12)$$

Принимая ширину квантовой ямы за параметр, можно численно построить зависимости $\varepsilon_{c,v}(a)$.

3. Энергетический спектр электронов и дырок и их зависимость от ширины квантовой ямы

Рассмотрим различные межзонные переходы при комбинации носителей заряда (рис. 1).

1) Электронно-дырочный переход (СН-переход) с энергией $E_1 = \varepsilon_{c1} + \varepsilon_{h1} + E_{g1}$, где ε_{c1} и ε_{h1} — основные энергетические уровни размерного квантования электронов и дырок в яме. Зависимость значений уровней энергии электронов и дырок от ширины квантовой ямы получаем путем численного решения дисперсионных уравнений (11), (12) относительно параметра a .

2) Переход возбужденного электрона на второй энергетический уровень в яме (СС-переход), $\Delta\varepsilon_n$ — расстояние между соседними электронными уровнями в яме.

3) Переход с возбуждением тяжелой дырки в спин-отщепленную зону (НС-переход). E_2 — расстояния между основными уровнями тяжелых ε_h и спин-отщепленных дырок ε_{so} .

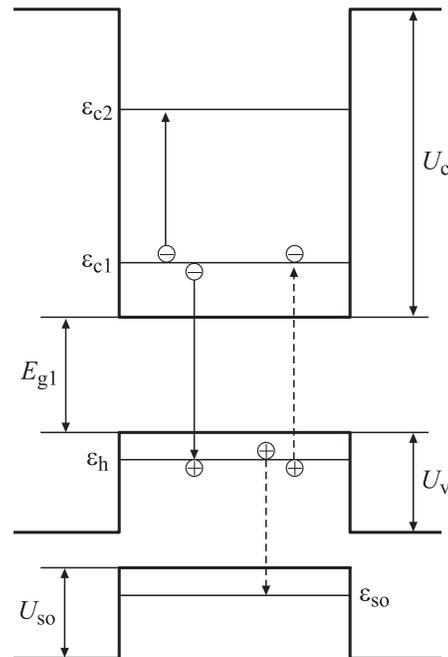


Рис. 1. Схема гетероструктуры с глубокими квантовыми ямами; сплошными стрелками показан СНСС-процесс оже-рекомбинации, пунктирными стрелками — СННС-процесс оже-рекомбинации.

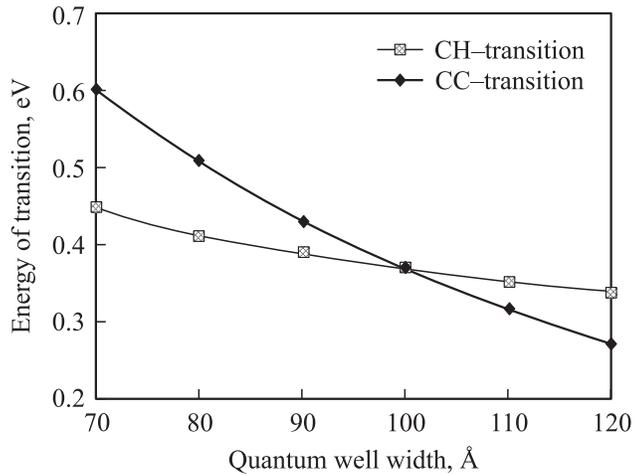


Рис. 2. Зависимость энергетического спектра СНСС-процесса от ширины квантовой ямы.

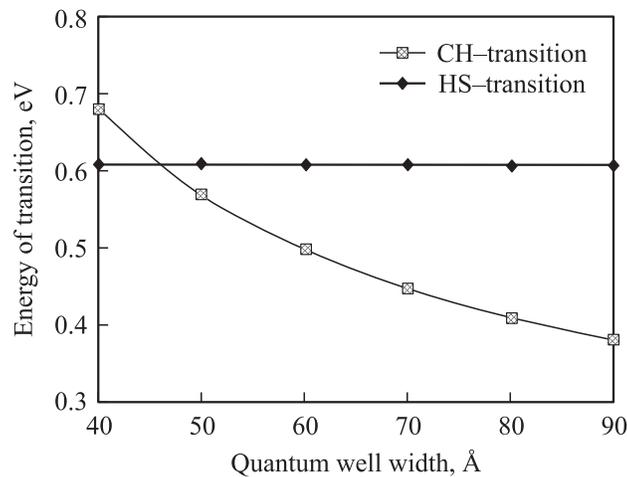


Рис. 3. Зависимость энергетического спектра СННС-процесса от ширины квантовой ямы.

Из рис. 2 и 3 видно, что, с одной стороны, оже-процесс с участием двух дырок (СННС-процесса) возможен при выполнении условия $a < 45 \text{ \AA}$, когда эффективная ширина запрещенной зоны E_1 больше эффективной ширины спин-отщепленной зоны E_2 , а с другой — резонансный СНСС-процесс имеет место в структуре с шириной квантовой ямы $a > 100 \text{ \AA}$, когда $E_1 > \Delta\epsilon_n$. В интервале $45 \text{ \AA} < a < 100 \text{ \AA}$ единственным механизмом ОР остается пороговый механизм СНСС-процесса, при котором возбужденный электрон остается на основном уровне энергии в квантовой яме, а изменяется только продольная составляющая его квазиимпульса. На вероятность такого перехода накладывает ограничение закон сохранения продольной составляющей квазиимпульса, в отличие от беспорогового механизма, когда возбужденный электрон переходит в сплошной спектр. В данной структуре последний (беспороговый) механизм исключен благодаря достаточной глубине квантовой ямы ($U_c = 1.25 \text{ эВ}$, $E_1 = 0.58 \text{ эВ}$ при $a = 50 \text{ \AA}$).

Таким образом, видно, что, варьируя ширину квантовой ямы и высоту интерфейса, можно управлять процессами оже-рекомбинации в гетероструктуре, а следовательно, контролировать скорость оже-рекомбинации, и при правильном выборе параметров структуры добиться ее полного или хотя бы частичного подавления.

Напомним, что вышеизложенный расчет спектров рекомбинации производился для комнатной температуры. Чтобы определить аналогичный интервал значений ширины зоны, при котором двойное условие $E_1 < \Delta\epsilon_n$ и $E_1 > E_2$ выполнялось бы для любой рабочей температуры, необходимо произвести такой же расчет для $T = 0 \text{ К}$ (учитывая температурную зависимость ширины запрещенной зоны и спин-отщепленной зоны). Подобный расчет приводит к значениям $55\text{--}85 \text{ \AA}$. Как и ожидалось, интервал оказался уже.

4. Коэффициенты оже-рекомбинации порогового СНСС- и беспорогового СННС-процесса

Как отмечалось выше, в подобной гетероструктуре (с глубокими квантовыми ямами) полностью исключена вероятность беспорогового механизма ОР, т.е. механизма ОР, при котором один из взаимодействующих электронов переходит в сплошной спектр зоны проводимости, а второй рекомбинирует с тяжелой дыркой.

В такой структуре определяющим (при отсутствии резонансного механизма) становится пороговый механизм, аналогичный механизму ОР в объемном полупроводнике. При таком механизме ОР один из возбужденных электронов остается на основном уровне энергии в яме; при этом изменяется только его продольная составляющая квазиимпульса, лежащая в плоскости ямы. В направлении, параллельном плоскости ямы, система является однородной, а следовательно, в этом направлении выполняется закон сохранения импульса, который с учетом закона сохранения энергии и накладывает ограничение (порог) на темп ОР в этом процессе.

Итак, для коэффициента порогового СНСС-процесса ОР имеем [4]

$$C_1 \approx \frac{2048\pi^2}{3} \frac{E_B}{\hbar} \lambda_g^2 \frac{a}{(a + 2/\kappa_c)^3} \times \left\langle \frac{q_{th}^2}{q_{ht}^2} \frac{q_c^2}{(q_{th}^2 + k_h^2)^3} \exp(-q_{th}^2/q_{ht}^2) \alpha^2 \right\rangle_n. \quad (13)$$

В последнем выражении усреднение производится только по дискретным квантовым состояниям тяжелых дырок и импульсам электронов. Пороговое значение импульса q_{th} находится из закона сохранения энергии и продольной компоненты импульса:

$$E_f(\sqrt{k_f^2 + q_{th}^2}) = E_g + \frac{\hbar^2(q_{th}^2 + k_h^2)}{2m_h} + \frac{\hbar^2(k_{c1}^2 + k_{c2}^2)}{2m_c}.$$

Для простоты мы пренебрегли начальными продольными импульсами электронов при определении пороговой энергии, поскольку они малы по сравнению с импульсами дырок, однако учли энергию размерного квантования электронов, изменяющую эффективное значение ширины запрещенной зоны в квантовой яме. Если разложить энергию возбужденного электрона E_f в ряд по импульсам вблизи $q_{th} = Q$, где Q — значение импульса электрона, соответствующего энергии, равной E_g (т.е. $Q \approx \sqrt{4m_c E_g / \hbar^2}$), то можно получить следующую оценку для величины порогового импульса:

$$q_{th} \approx \sqrt{\frac{4m_c E_g}{\hbar^2} + k_c^2}. \quad (14)$$

В выражении (13) q_{th} — тепловой импульс тяжелой дырки.

Все вышеизложенные рассуждения справедливы и для СННС-процесса, если учесть, что в начальном состоянии находятся не электроны, а две тяжелые дырки.

Основной вклад в СННС-процесс вносит беспороговый механизм. Коэффициент беспорогового механизма дается выражением [5,6]

$$C_2 \approx \frac{2\pi^2 e^4 V_c}{\kappa_0^2 \hbar} \frac{V_c}{E_g} \frac{k_c^2 \kappa_c^2}{(k_c^2 + \kappa_c^2)^2} \frac{\tilde{F}(\Delta_{so}/E_g)}{a^2(a + 2/\kappa_c)} \frac{\hbar^3}{m_{so}^3(E_g - \Delta_{so})^3} \times \left\langle \frac{k_{h1}^2 k_{h2}^2 q_{h1}^2 (q_{h1}^2 + q_{h2}^2)}{(q_{h1}^2 + k_{h1}^2)^3 (q_{h1}^2 + k_{h2}^2)} \right\rangle, \quad (15)$$

где

$$\tilde{F}(x) = \frac{[2x + 3(1-x)(1 - m_{so}/m_h)]^2}{2x^2 + [x + 3(1-x)(1 - m_{so}/m_h)]^2} \frac{1 + 2x/3}{1 + x}.$$

В последнем случае усреднение производится по функциям распределения двух тяжелых дырок, также предполагается, что $E_g - \Delta_{so} \gg kT(m_h/m_{so})$.

5. Оценка коэффициента резонансного СНСС-процесса оже-рекомбинации

Резонансным СНСС-процессом ОР будем называть процесс, при котором один из электронов, находившихся в начальном состоянии (на первом энергетическом уровне в квантовой яме зоны проводимости), после взаимодействия со вторым электроном переходит на более высокий энергетический уровень размерного квантования, а второй электрон рекомбинирует с тяжелой дыркой в валентной зоне.

Вообще говоря, такой процесс является пороговым, так как если энергия СН-перехода E_1 больше, чем расстояние $\Delta\epsilon_n$, то для правомочности такого процесса необходимо выполнение закона сохранения продольной составляющей q_c квазиимпульса электрона. Нетрудно найти пороговую энергию данного перехода, используя

законы сохранения энергии и продольной составляющей квазиимпульса электрона и тяжелой дырки

$$E_{th} = (E_1 - \Delta\epsilon_n) \frac{m_c}{m_{hh}} \quad (16)$$

и пороговый импульс

$$q_{th} = \sqrt{\frac{2m_c}{\hbar^2} (E_1 - \Delta\epsilon_n)}. \quad (17)$$

При определении пороговой энергии и импульса резонансного СНСС-процесса, как и в случае с пороговым механизмом, мы пренебрегли продольными импульсами электронов.

Продольный импульс возбужденного электрона дается выражением

$$q_{cf} = \sqrt{\frac{2m_c}{\hbar^2} \left(E_1 - \Delta\epsilon_n + \frac{\hbar^2 q_c^2}{m_c} + \frac{\hbar^2 q_h^2}{m_{hh}} \right)}. \quad (18)$$

В значительном диапазоне ширины квантовой ямы (начиная со 100 \AA) значение q_{th} существенно меньше значения теплового импульса тяжелой дырки. Например, для $a = 120 \text{ \AA}$ тепловой импульс превышает пороговый почти в 5 раз. Поэтому в дальнейшем за продольную составляющую импульса тяжелой дырки будет приниматься ее тепловой импульс q_{ht} . Прогнозируемое совпадение q_{th} и q_{ht} возможно при ширине ямы около 180 \AA . Однако в таких широких квантовых ямах вероятно появление следующих уровней квантования энергии, и анализ становится гораздо более сложным. Такие системы в данной работе не рассматриваются.

Если мы для простоты возьмем за продольную составляющую квазиимпульса невозбужденного электрона его тепловой импульс q_{ct} , то суммирование в формуле (5) по волновым векторам всех участвующих в процессе частиц сведется к умножению на произведение $n^2 p$, а δ -функция, характеризующая собой закон сохранения энергии в данном процессе, даст значение продольной составляющей квазиимпульса возбужденного электрона, определяемое выражением (18). В последнем необходимо заменить продольные импульсы электрона и дырки их тепловыми значениями ($q_{ct} = \sqrt{2m_c kT/\hbar^2}$ и $q_{ht} = \sqrt{2m_{hh} kT/\hbar^2}$ соответственно).

В связи с громоздкостью вычисления матричного элемента мы ограничимся вычислением лишь нескольких значений коэффициента оже-рекомбинации резонансного процесса.

Как видно из рис. 4, коэффициент ОР такого процесса слабо зависит от ширины квантовой ямы. Поэтому его зависимость от a с высокой степенью точности можно аппроксимировать линейной функцией

$$C_r(a) = \chi \cdot a + \xi, \quad (19)$$

где $\chi = -3.67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с}$, $\xi = 11.04 \cdot 10^{-14} \text{ см}^4/\text{с}$.

Если подходить формально, то зависимость $C_r(a)$ на рис. 4 имеет правильный вид (C_r убывает с ростом a). При вычислении значений коэффициента резонансного СНСС-процесса, из-за малости порогового импульса по сравнению с тепловым импульсом дырки, мы считали,

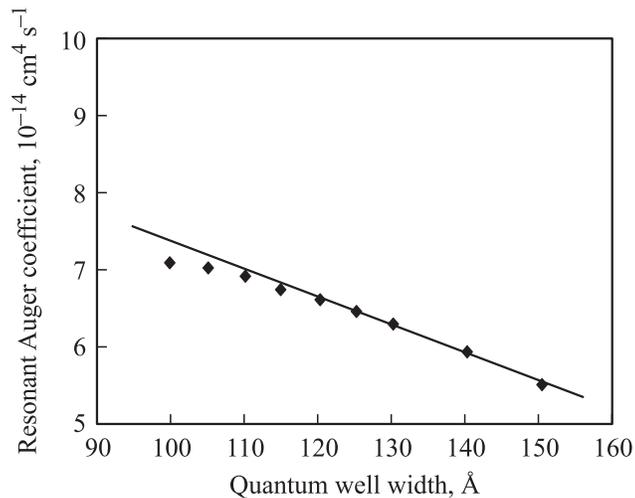


Рис. 4. Зависимость коэффициента резонансного СНСС-процесса оже-рекомбинации от ширины квантовой ямы.

что в нем участвуют все электроны и дырки, находящиеся в начальном состоянии. Однако, как отмечалось выше, резонансный СНСС-процесс является пороговым по своей природе. Поэтому для более точного подсчета необходимо учитывать, что с ростом ширины ямы (начиная со 100 \AA) разность $E_1 - \Delta \varepsilon_n$ увеличивается (рис. 2), а с ней увеличивается и пороговый импульс (17), что в свою очередь уменьшает количество частиц, способных участвовать в данном оже-процессе (т.е. частиц с продольными импульсами, ббльшими порогового). Вклад подобных частиц по аналогии с (13) должен определяться распределением $\propto \exp(-\frac{q_{th}^2}{q_{tr}^2})$. При этом зависимость C_r от a станет более резкой (не линейной). Однако это различие становится заметным лишь при больших значениях a и в целом не оказывает существенного влияния на величину коэффициента рекомбинации.

6. Полный коэффициент оже-рекомбинации и его зависимость от ширины квантовой ямы

В полный коэффициент ОР вносят вклады два процесса (СННС, СНСС). В последнем процессе выделяются два механизма — пороговый и резонансный:

$$C = C_1 + C_2 + C_r. \quad (20)$$

На рис. 5 представлена зависимость полного коэффициента оже-рекомбинации (по порядку величины) от ширины квантовой ямы. В первой области (I) преобладает беспороговый СННС-процесс, а также свой вклад вносит пороговый СНСС-процесс ОР. В области II происходит полное подавление СННС-процесса и определяющим становится более слабый пороговый СНСС-

процесс. В третьей области единственным процессом ОР становится резонансный СНСС-процесс, который является наиболее мощным каналом ОР в этой системе. Следует отметить тот факт, что коэффициент СННС-процесса изменяется с ростом a гораздо быстрее, чем коэффициент резонансного СНСС-процесса. Это связано с различной зависимостью энергии HS- и СС-переходов от ширины квантовой ямы по отношению к спектру СН-перехода (рис. 2, 3).

Исходя из приведенного на рис. 5 графика можно сделать вывод, что пороговый процесс является самым слабым (медленным) в нашей системе, коэффициент ОР такого процесса на 1–2 порядка меньше, чем у двух других процессов. Приведенный в разд. 3 расчет энергетических спектров различных оже-переходов показывает, что область II соответствует значению ширины квантовой ямы, лежащим в интервале $45\text{--}100 \text{ \AA}$. Будем называть этот интервал областью подавления оже-рекомбинации.

Таким образом, очевидно, что при правильном выборе параметров гетероструктуры (a, U_c, U_v) действительно возможно добиться существенного подавления безызлучательной оже-рекомбинации за счет исключения наиболее быстрых ее процессов.

Необходимо отметить, что график, приведенный на рис. 5, в известной степени идеализирован. В реальной ситуации границы между областями I и II, II и III являются не столь резкими (размытыми). Это связано с различными тепловыми эффектами, а также с технологическим несовершенством гетерограницы.

В заключение дадим оценку диапазона длин волн излучения для нашей гетероструктуры. Будем искать его исходя из формулы Планка

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E_1}, \quad (21)$$

где λ — длина волны излучения, E_1 — энергия излучаемого фотона (см. разд. 3), c — скорость света в вакууме.

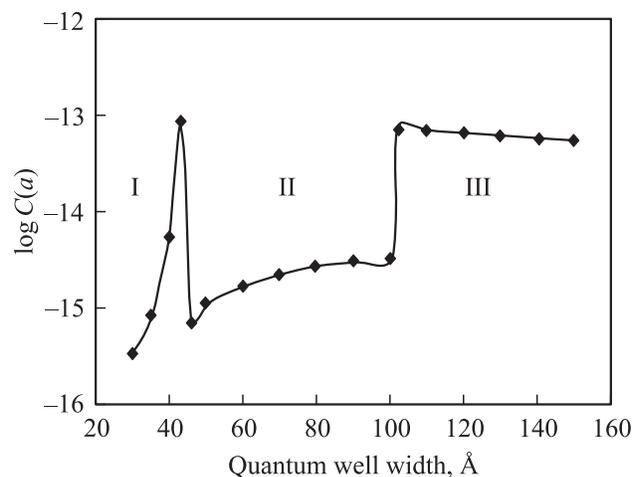


Рис. 5. Зависимость полного коэффициента оже-рекомбинации от ширины квантовой ямы (по порядку величины).

Как показывает расчет, длины волн излучения для исследуемой гетероструктуры с шириной квантовой ямы, принадлежащей области подавления, соответствуют значениям λ , лежащим в диапазоне 2–3.5 мкм.

7. Заключение

Основным результатом проведенной работы является подтверждение идеи использования гетероструктур с глубокими квантовыми ямами с целью снижения влияния безызлучательных оже-процессов при рекомбинации неравновесных носителей. Важно отметить, что эффективная ширина запрещенной зоны узкозонного материала структуры $\text{InAs}_{0.84}\text{Sb}_{0.16}/\text{AlSb}$ соответствует интервалу длин волн излучения 2–3.5 мкм, что отвечает среднему ИК-диапазону, а следовательно, данная гетероструктура может быть использована для создания ИК-лазера, работающего в этом диапазоне при комнатной температуре.

В ходе выполнения данной работы были также получены следующие результаты.

1. Рассчитаны энергетические уровни носителей внутри квантовой ямы и показана зависимость спектров рекомбинационных переходов от ширины ямы для двух основных процессов оже-рекомбинации.

2. Рассчитаны коэффициенты ОР основных процессов (СНСС, СННС) и механизмов (беспороговый, пороговый и резонансный) для рассматриваемой структуры. Продемонстрировано, что для узких квантовых ям ($a < 45 \text{ \AA}$) преобладает СННС-процесс ОР, для широких ям ($a > 100 \text{ \AA}$) основным каналом ОР является резонансный СНСС-процесс. Наиболее слабым процессом является пороговый СНСС-процесс ОР (для структуры с $45 < a < 100 \text{ \AA}$), коэффициент которого на несколько порядков меньше, чем соответствующие коэффициенты двух выше перечисленных процессов.

3. Показано, что интервал длин волн излучения в структуре с оптимизированными параметрами лежит в среднем ИК-диапазоне.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 05-02-16679, 07-07-00283), программы президиума РАН „Квантовые наноструктуры“ и гранта президента № НШ-5730.2006.2.

Список литературы

- [1] В.Н. Абакумов, И.В. Перель, И.Н. Ясевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Изд-во ПИЯФ РАН, 1997).
- [2] Г.Г. Зегря, В.А. Харченко. *ЖЭТФ*, **101**, 327 (1992).
- [3] G.G. Zegrya. In: *Antimonide Related Strained Layer Heterostructures*, ed. by M.O. Manasreh (Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam, 1997).
- [4] Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. *ЖЭТФ*, **113**, 1491 (1998).
- [5] A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya. *Phys. Rev. B*, **58**, 4039 (1998).

- [6] Н.А. Гунько, Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. *ФТП*, **34**, 464 (2000).

Редактор Л.В. Беляков

Theoretical investigation of Auger recombination processes in deep quantum wells

L.V. Danilov, G.G. Zegrya

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The principal processes and mechanisms of Auger recombination of nonequilibrium carriers in semiconductor heterostructures with deep quantum wells are investigated in this work. It is shown that the thresholdless Auger process with two heavy holes prevails in narrow quantum wells while the resonant process with two electrons dominates in wide quantum wells. The field of quantum well width is found at which the maximum suppression of Auger recombination takes place in this structure (the area of suppression). At this the threshold process with two electrons is become basic nonradiative recombination process. The probability of such a process is several orders less than probability of thresholdless and resonant mechanisms. In turn, the thresholdless mechanism with two electrons is exceeded due to large conduction band offset in investigated structure (considerably larger than gap bandwidth). Evaluation of the radiation wavelength range corresponding to the area of suppression is also made. It is shown that this area lies in the middle infrared range.