

# Многофононный захват носителей в параболических квантовых ямах в постоянном электрическом поле

© Э.П. Синявский, А.М. Русанов

Институт прикладной физики Академии наук Молдавии,  
MD-2028 Кишинев, Молдавия

(Поступила в Редакцию 31 октября 1997 г.)

В модели потенциала нулевого радиуса исследованы многофононные (безызлучательные) переходы на связанные состояния в параболической квантовой яме (ПКЯ) в постоянном электрическом поле, вектор напряженности которого направлен перпендикулярно поверхности ПКЯ. Показано, что поперечники теплового захвата существенным образом зависят от величины и направления электрического поля, от положения примеси в размерно-ограниченных системах.

1. В кристаллах захват носителей глубокими центрами экспоненциально возрастает по мере приближения дефекта к поверхности. Как показано в [1], заметное увеличение скорости рекомбинации достигается для примесных центров, удаленных от поверхности на расстояние  $R$ , составляющее не более чем  $10\text{--}20 \text{ \AA}$ . В ряде случаев увеличение захвата электронов может происходить и при  $R < 200 \text{ \AA}$ . Аналогичный эффект имеет место в размерно-ограниченных системах (квантовые пленки, одиночные квантовые ямы). Последовательная теория многофононного захвата носителей на глубокие центры в прямоугольных квантовых ямах была рассмотрена в [2]. Показано, что многофононный захват существенным образом зависит от положения примеси. В параболической квантовой яме (ПКЯ) в постоянном электрическом поле энергия связанного состояния (в модели потенциала нулевого радиуса [3]) для глубоких примесных центров зависит от положения дефекта  $z_0$ , величины напряженности электрического поля  $F$ , направленного вдоль оси пространственного квантования  $0z$  [4],

$$\varepsilon = -E_0 + \frac{m_c \omega^2}{2} (z_0 + d_0)^2. \quad (1)$$

Здесь  $\hbar\omega = \left[ \frac{8\hbar^2 E_c}{m_c d^2} \right]^{1/2}$  — энергия пространственного квантования,  $E_c$  — глубина квантовой ямы шириной  $d$ ,  $d_0 = \frac{|e|Fd^2}{8E_c}$  определяет смещение минимума потенциала  $V(z)$  ПКЯ в электрическом поле ( $V(z) = \frac{4E_c}{d^2}z^2 + |e|Fz$ ),  $E_0$  — глубина залегания примесного состояния для трехмерного кристалла. В дальнейших расчетах используем модель Хуанга и Рис, в которой адиабатические термы для связанного и свободного электронного состояний представляются одинаковыми параболой, сдвинутыми относительно друг друга. Область применения этой модели обсуждалась в [5].

Влияние положения примеси, величины напряженности постоянного электрического поля на многофононные процессы в размерно-ограниченных системах можно качественно понять из анализа поведения адиабатических потенциалов (рис. 1). Последующие вычисления проводятся при условии, что энергия размерного квантования в ПКЯ много меньше энергии активации для дефекта.

В этом приближении рассмотренное поведение адиабатических потенциалов от нормальных координат может быть оправдано [2]. Если поле отсутствует ( $F = 0$ ) и примесь расположена в центре КЯ ( $z_0 = 0$ ), то захват электрона из зоны проводимости (адиабатический потенциал 1) в основное состояние примесного центра (адиабатический потенциал 2) при высоких температурах носит активационный характер с энергией активации  $\Delta$  (рис. 1). В присутствии постоянного электрического поля энергетическое расстояние примесного состояния до зоны проводимости уменьшается при  $z_0 = 0$  на величину  $\frac{m_c \omega^2}{2} d_0^2$  (согласно соотношению (1)), и рекомбинационные процессы идут с энергией активации  $\Delta_1 < \Delta$ . Это обстоятельство должно приводить к заметному увеличению процессов с многофононной рекомбинацией. Уменьшение пути туннелирования ( $a_1 b_1 < ab$ ) в присутствии электрического поля приводит к тому, что и в области низких температур внешнее поле будет заметным образом стимулировать безызлучательный захват носителей на глубокие связанные состояния.

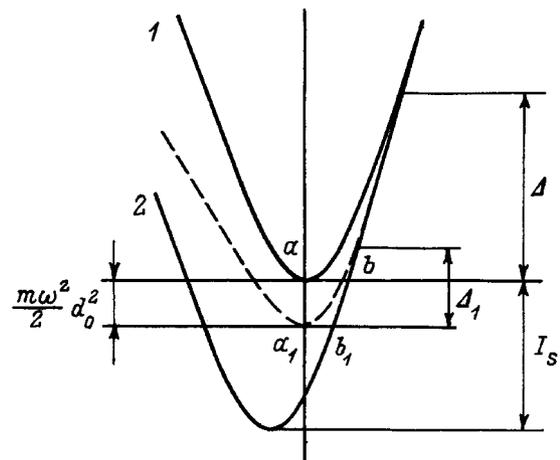


Рис. 1. Адиабатические потенциалы (1 и 2) для непрерывного спектра и локализованного состояния в размерно-ограниченных системах. Штриховыми линиями изображен адиабатический потенциал зонного электрона в электрическом поле.

2. Расчет поперечника многофононного захвата проведем для примесного центра в модели потенциала нулевого радиуса [3], волновые функции и энергия связанного состояния которого в ПКЯ в постоянном электрическом поле известны [4]. Вероятность многофононного перехода электрона из зоны проводимости ( $nk_{\perp}$ ) в связанное состояние локального центра ( $s$ ) при квазиклассическом описании колебаний кристаллической решетки с учетом некондоновских эффектов определяется соотношением [6]

$$W_{k_{\perp},n,s} = \frac{1}{2\hbar} \left[ \frac{\pi}{ak_0T} \right]^{1/2} \sum_{\mathcal{N}} |V_{\mathcal{N}nk_{\perp},s}|^2 \times (2N_{\mathcal{N}} + 1) \exp \left\{ -\frac{(I_{k_{\perp}ns} - a)^2}{4k_0Ta} \right\},$$

$$a = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{N}} \frac{|V_{\mathcal{N}ss}|^2}{\hbar\omega_{\mathcal{N}}},$$

$$I_{k_{\perp}n,s} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_c} + n\hbar\omega + I_s^0 - \frac{m_c\omega^2}{2}(z_0 + d_0)^2, \quad (2)$$

$V_{\mathcal{N}ss}$  — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия на волновых функциях локализованного состояния ПКЯ в постоянном электрическом поле,  $\hbar\omega_{\mathcal{N}}$  — энергия акустического фонона с волновым вектором  $\mathcal{N}$ ,  $N_{\mathcal{N}}$  — распределение фононов при температуре  $T$ ,  $\hbar k_{\perp}$  — квазиимпульс электрона массы  $m_c$  в плоскости, перпендикулярной оси пространственного квантования ( $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ),  $n$  — номер размерно-квантованной зоны проводимости,  $I_s$  — расстояние между минимумами адиабатических потенциалов (рис. 1).

Для ПКЯ размерное квантование проявляется при достаточно больших толщинах (например, при  $d = 10^3 \text{ \AA}$ ,  $\hbar\omega = 14.5 \text{ meV}$ ), поэтому можно рассматривать взаимодействие электрона с объемными колебаниями кристаллической решетки. Расчет параметра тепловыделения  $a$  проведем при учете взаимодействия электрона с акустическими колебаниями решетки, когда  $\hbar\omega/E_0 \ll 1$ . В этом приближении

$$a = \frac{E_1^2 m_c \mathcal{N}_D}{4\rho v^2 \hbar^2} E, \quad (3)$$

$E_1$  — константа деформационного потенциала,  $\mathcal{N}_D$  — дебаевская величина волнового вектора фонона,  $\rho$  — плотность кристалла,  $v$  — скорость звука в кристалле,  $E = E_0 - \frac{m_c\omega^2}{2}(z_0 + d_0)^2 \left( \frac{\hbar\omega}{4E_0} \right)^2$ . Параметр тепловыделения через  $E$  зависит от напряженности электрического поля и положения примеси, однако при  $\hbar\omega/E_0 \ll 1$  этой зависимостью можно пренебречь.

В дальнейшем рассмотрим случай, когда электроны находятся в самой нижней размерно-квантованной зоне проводимости ( $n = 0$ ). Это приближение справедливо, если  $\hbar\omega/k_0T > 1$ , и для типичных параметров ПКЯ ( $m_c = 0.06m_0$ ,  $E_0 = 0.255 \text{ eV}$ ),  $\hbar\omega = \frac{14.5}{d_0} \text{ (eV)}$

( $\tilde{d}_0$  — размер квантовой ямы в ангстремах) последнее неравенство при  $d_0 = 10^3 \text{ \AA}$  выполняется при  $T = 100 \text{ K}$ .

Расчет матричного элемента  $V_{\mathcal{N}0k_{\perp},s}$  электрон-фононного взаимодействия, смешивающего начальное и конечное электронные состояния, проводим при выполнении неравенств

$$\frac{eFd}{8E_c} \ll 1, \quad \sqrt{\frac{m_c\omega}{\hbar}} \frac{d}{2} > 1, \quad \frac{e^2 F^2 d^2}{E_c} < |E_0|. \quad (4)$$

Первое неравенство означает, что рассматриваются такие значения напряженности электрического поля, при которых в смещенном квадратичном потенциале КЯ еще сохраняется достаточно много уровней размерного квантования. Выполнение второго неравенства позволяет использовать для дальнейших расчетов волновые функции квантового осциллятора в постоянном электрическом поле. Последнее неравенство означает, что процессы туннелирования из связанного состояния в непрерывный спектр в электрическом поле отсутствуют. В результате ( $N_{\mathcal{N}} \approx \frac{k_0T}{\hbar\omega_{\mathcal{N}}}$ )

$$\sum_{\mathcal{N}} \frac{|V_{\mathcal{N}0k_{\perp},s}|^2}{\hbar\omega_{\mathcal{N}}} \approx \frac{E_1^2 d \mathcal{N}_D}{v 2\pi^4 \sqrt{\pi} \rho v^2 \sqrt{2}} \sqrt{\frac{E_0}{\hbar\omega}} e^{-\xi^2}, \quad (5)$$

$$\xi^2 = \frac{m_c\omega}{\hbar} (z_0 - d_0)^2, \quad (6)$$

$v$  — объем размерно-ограниченной системы.

Сечение безызлучательного захвата определяется из соотношения

$$\sigma = \frac{v \sum_{k_{\perp}} W_{k_{\perp}0,s} e^{-\beta\epsilon k_{\perp}}}{\frac{\hbar}{m_c} \sum_{k_{\perp}} k_{\perp} e^{-\beta\epsilon k_{\perp}}}, \quad \beta = \frac{1}{k_0T}, \quad \epsilon k_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_c}. \quad (7)$$

В рассматриваемом случае, когда  $\mathbf{F}$  направлено перпендикулярно поверхности КЯ, энергия зонного электрона равна [4]

$$E_{nk_{\perp}} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_c} + \hbar\omega(n + 1/2) - \frac{F^2 e^2 d^2}{16E_c}.$$

Следовательно, внешнее поле только смещает размерно-квантованные зоны, поэтому эффекты разогрева отсутствуют.

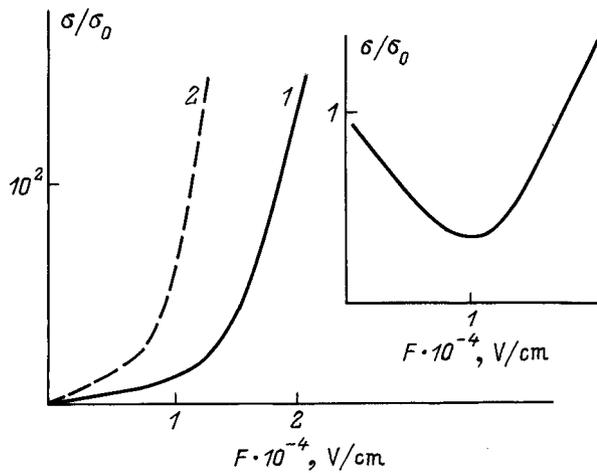
С учетом (2), (3), (5) окончательно получаем

$$\sigma(F) = \sigma_0 e^{-\xi^2} \exp\{-\beta(\Delta - \Delta_0)\},$$

$$\Delta = \frac{1}{4a} \left[ I_s^0 - \frac{\hbar\omega}{2} \xi^2 \right]^2, \quad \Delta_0 = \frac{1}{4a} (I_s^0)^2,$$

$$\sigma_0 = \left[ \frac{d^2 \mathcal{N}_D \hbar\omega}{\pi E_0^2 \rho v^2} \right]^{1/2} \frac{E_1}{\pi^4} e^{-\beta\Delta_0} \equiv \sigma(0) e^{-\beta\Delta_0}, \quad (8)$$

$\sigma_0$  — поперечник многофононного захвата в ПКЯ, когда примесь расположена в центре КЯ ( $z_0 = 0$ ) и  $F = 0$ .



**Рис. 2.** Зависимость поперечника многофононного захвата (в относительных единицах) от напряженности электрического поля. Кривая 1 получена при  $z_0 = 0$ , кривая 2 — при  $z_0 = 100 \text{ \AA}$ . На вставке приведена зависимость поперечника безызлучательного захвата от напряженности электрического поля при  $z_0 = -100 \text{ \AA}$ .

С ростом напряженности электрического поля минимум потенциальной квантовой ямы удаляется от примесного центра, и перекрывание волновых функций непрерывного спектра и связанного состояния уменьшается, что приводит к замедлению процессов многофононного захвата. Именно с этим обстоятельством связано появление множителя  $\exp(-\xi^2)$  в (8). При рассмотренных выше параметрах ПКЯ и  $E_1 = 5 \text{ eV}$ ,  $E_0 = 0.1 \text{ eV}$ ,  $\rho = 5 \text{ g/cm}^3$ ,  $v = 5 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ ,  $d \approx 10^3 \text{ \AA}$  получаем  $\sigma(0) = 4 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^2$ . Если примесь расположена в центре КЯ ( $z_0 = 0$ ), то с ростом  $F$  процессы многофононной рекомбинации активизируются. На рис. 2 приведена зависимость  $\sigma/\sigma_0$  при  $z_0 = 0$  от  $F$  (кривая 1).

Заметим, что изменение  $\sigma$  в зависимости от  $F$  главным образом определяется уменьшением энергии активации во внешнем поле, а не  $\exp(-\xi^2)$ . Основная зависимость исследуемого процесса от положения примеси и напряженности электрического поля определяется параметром  $\xi^2$  (6). Если примесь расположена в точке  $-z_0$ , то  $\xi^2$  немонотонным образом зависит от  $F$ :  $\xi^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \left( z_0 - \frac{|e|Fd^2}{8E_c} \right)^2$ . С ростом  $F$   $\xi^2$  уменьшается и становится равным нулю при  $z_0 = \frac{|e|Fd^2}{8E_c}$  (минимум потенциальной энергии ПКЯ находится в точке расположения примеси), а затем увеличивается (минимум потенциальной энергии удаляется от дефекта). Такое поведение  $\xi^2$  приводит к немонотонной зависимости поперечника теплового захвата от  $F$  (на вставке к рис. 2 приведена зависимость  $\sigma/\sigma_0$  от  $F$  при  $z_0 = -100 \text{ \AA}$ ). Если напряженность электрического поля направлена противоположно оси пространственного квантования (примесь расположена в точке  $z = -z_0$  и  $\xi^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \left( z_0 + \frac{|e|Fd^2}{E_c} \right)^2$ ), то с ростом  $F$   $\sigma$  увеличивается. В этом случае (в рамках

принятых приближений (4)) поперечник многофононного захвата с ростом  $F$  увеличивается быстрее, чем при  $z_0 = 0$ . Кривая 2 на рис. 2 приведена для  $z_0 = 100 \text{ \AA}$ .

Таким образом, скорость процесса многофононной рекомбинации в ПКЯ заметным образом зависит от положения примеси в одиночной КЯ, величины и направления напряженности внешнего электрического поля.

Рассмотрим случай низких температур, когда электроны взаимодействуют с оптическими колебаниями решетки. Параметр тепловыделения при  $E_0/\hbar\omega \gg 1$  легко вычисляется

$$a = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{N}} \frac{|V_{\mathcal{N}ss}|^2}{\hbar\omega_0} \cong \frac{2\sqrt{2}(\ln 2)E_0c_0e^2}{\hbar} \left[ \frac{m_c}{E_0 - \hbar\omega\xi^2/2} \right]^{1/2}, \quad (9)$$

$c_0 = \frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon_\infty}$ ,  $\hbar\omega_0$  — энергия предельного оптического фонона. Как непосредственно следует из (9),  $a$  зависит от напряженности электрического поля и положения примеси в КЯ, но при  $E_0/\hbar\omega \gg \xi^2/2$  этой зависимостью можно пренебречь. Для параметров кристалла типа GaAs ( $c_0 = 1.4 \cdot 10^{-2}$ ) при  $E_0 = 0.3 \text{ eV}$   $a = 10^{-2} \text{ eV}$ , т.е. при  $\hbar\omega_0 = 0.02 \text{ eV}$  получаем  $a/\hbar\omega_0 \approx 0.5$ .

Вероятность безызлучательного перехода носителя на локализованное состояние в эйнштейновской модели (слабой дисперсией частот оптических колебаний пренебрегаем) определяется обычными методами теории многофононных переходов [7]

$$W_{k_\perp, n, s} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathcal{N}m=-\infty}^{\infty} |V_{\mathcal{N}k_\perp, s}|^2 I_m(z) \times \left[ \frac{1+N}{N} \right]^{m/2} e^{\frac{a}{\hbar\omega_0}(1+2N)} \times \delta \left\{ -I_s + \frac{\hbar\omega\xi^2}{2} + (m-1)\hbar\omega_0 \right\},$$

$$z = 2\sqrt{N(N+1)}a_0, \quad a_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{N}} \frac{|V_{\mathcal{N}ss}|^2}{(\hbar\omega_0)^2}. \quad (10)$$

Здесь  $N$  — равновесное распределение оптических фононов,  $I_m(z)$  — модифицированная функция Бесселя. При низких температурах  $N \ll 1$  ( $z \ll 1$ ); с учетом (10), (7) поперечник безызлучательного захвата определяется соотношением

$$\sigma(F) = \sigma(0) \frac{\langle l-1 \rangle!}{\langle l_F-1 \rangle!} (a_0)^{\langle l_F-1 \rangle - \langle l-1 \rangle} e^{-\xi^2}. \quad (11)$$

Здесь  $l_F = \frac{I_s - (\hbar\omega/2)\xi^2}{\hbar\omega_0}$ ,  $l = \frac{I_s}{\hbar\omega_0}$ ,  $\langle l \rangle$  — целая часть  $l$ ,  $\sigma(0)$  — поперечник многофононного захвата в ПКЯ в отсутствие электрического поля, примеси расположены

в центре размерно-ограниченной системы ( $\xi = 0$ ),

$$\sigma(0) = \sigma^0 (a_0)^{\langle l-1 \rangle} \frac{1}{\langle l-1 \rangle!}, \quad \sigma^0 \cong \frac{4e^2 \hbar \omega_0 c_0 d}{\pi} \left( \frac{\beta}{2E_s} \right)^{1/2},$$

при  $E_s = 0.4 \text{ eV}$ ,  $d = 10^3 \text{ \AA}$ ,  $T = 4 \text{ K}$   $\sigma^0 = 2.3 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ . Если  $a_0 = 1$ , то при  $E_s = 0.4 \text{ eV}$  ( $l = 20$ ) и  $F = 2.8 \cdot 10^4 \text{ cm/V}$  ( $l_F = 19$ )  $\sigma(F)/\sigma(0) = 19$ . Если  $a_0 < 1$ , то увеличение поперечника многофононного захвата в электрическом поле может быть еще более заметным. Немонотонность изменения  $\xi^2$  с ростом поля приводит к тем же особенностям поведения  $\sigma(F)$ , которые характерны для поперечников безызлучательного захвата при квазиклассическом описании колебаний, рассмотренных выше.

Согласно принципу детального равновесия для тепловых переходов [7], вероятность ионизации  $W_{s,k_{\perp},n}$  простым образом связана с вероятностью многофононного захвата  $W_{k_{\perp},n,s}$

$$W_{s,k_{\perp},n} = W_{k_{\perp},n,s} \exp(-\beta I_{k_{\perp},ns}). \quad (12)$$

Соотношение (12) имеет место, поскольку процессы разогрева в продольном электрическом поле для ПКЯ отсутствуют и (в отличие от трехмерного случая [8]) при выполнении последнего неравенства в (4) процессы прямой туннельной ионизации глубоких примесей невозможны. Согласно (12), многофононная ионизация в ПКЯ, как и скорость теплового захвата, зависит от положения примесей в КЯ, величины и направления напряженности электрического поля.

## Список литературы

- [1] А.А. Пахомов, И.Н. Ясиевич. ФТП **27**, 3, 482 (1993).
- [2] А.А. Пахомов, И.Н. Ясиевич. ФТП **29**, 3, 511 (1995).
- [3] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л. (1975). 240 с.
- [4] Э.П. Синявский, Е.Ю. Канаровский. ФТТ **35**, 6, 1641 (1993).
- [5] В.Н. Абакумов, И.А. Меркулов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ **89**, 1472 (1985).
- [6] Э.П. Синявский, В.А. Коварский. ФТТ **9**, 5, 1464 (1967).
- [7] В.А. Коварский. Многоквантовые переходы. Штинца, Кишинев (1974). 228 с.
- [8] В. Карпус, В.И. Перель. ЖЭТФ **91**, 2319 (1986).