

03,08

## Рассеяние электронов и дырок глубокими примесями в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами

© Ю.А. Померанцев

Воронежский государственный педагогический университет,  
Воронеж, Россия

E-mail: pomerant\_yu@mail.ru

Поступила в Редакцию 17 апреля 2020 г.

В окончательной редакции 17 апреля 2020 г.

Принята к публикации 2 июня 2020 г.

Исследовано рассеяние электронов и дырок системой глубоких примесей в полупроводниковых гетероструктурах на основе арсенида галлия с двумя квантовыми ямами в приближении предельно локализованного потенциала при произвольном профиле легирования. Показано, что зависимости вероятностей рассеяния в единицу времени для электронов и дырок от энергии носителя повторяют кусочно-постоянный вид плотности состояний подзон размерного квантования гетероструктуры с учетом вклада интеграла перекрытия волновых функций носителя. Для дырочных подзон с отрицательной эффективной массой вероятности рассеяния в единицу времени у краев подзон имеют сингулярности, характерные для одномерных систем.

**Ключевые слова:** полупроводниковые гетероструктуры, глубокие примеси, эффективная масса электрона, короткодействующий потенциал примеси.

DOI: 10.21883/FTT.2020.10.49903.092

### 1. Введение

Глубокими примесями определяются многие электронные, оптические и магнитные свойства полупроводников, поэтому проблеме глубоких примесных центров уделяется большое внимание [1–4]. Соединения GaNAs, GaInNAs и GaInNAsSb за последние два десятилетия привлекают большое внимание исследователей из-за их уникальных свойств и потенциала применения в современных оптоэлектронных устройствах, особенно в высокоэффективных многопереходных солнечных элементах, инфракрасных лазерах и фотоприемниках. Основная задача таких исследований — объяснение влияния глубокоуровневых дефектов на производительность и параметры будущих устройств [5,6]. Несмотря на это, продвижение в направлении получения количественных результатов, относящихся к конкретным примесям или иным точечным дефектам, например, вакансиям, пока незначительно. Моделирование точечных дефектов представляет чрезвычайно трудную задачу, и соответствующие результаты, как правило, не в состоянии дать сколько-нибудь полного и надежного описания поведения дефектов в полупроводниках.

С другой стороны, для полупроводниковой гетероструктуры (ГС) имеется физически наглядная картина формирования электронного энергетического спектра и квантовых состояний, обусловленных наличием примеси, в связи с особенностями зонной структуры полупроводника [7], основанная на последовательном учете вкладов различных энергетических зон в величину энергии связи электрона (или дырки) на примеси, что позволяет

сформулировать полуфеноменологическое описание глубоких примесных состояний в рамках известного метода потенциала нулевого радиуса [8].

Целью настоящей работы является вычисление зависимостей вероятностей рассеяния в единицу времени (обратных времен релаксации) на глубокой примеси для электрона и дырки в нижних подзонах размерного квантования полупроводниковых ГС от энергии носителя в приближении предельно локализованного потенциала примеси с учетом межподзонного рассеяния носителей.

### 2. Вероятность рассеяния электрона и дырки в единицу времени на глубоком примесном центре

Рассмотрим переходы между электронными состояниями полупроводниковой ГС в 2D-подзонах размерного квантования, вызываемые наличием короткодействующего потенциала примесных атомов, который запишем как

$$U(r) = -U_0 a^3 \sum_l q_l \delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_l) \delta(z - z_{0l}). \quad (1)$$

Здесь:  $U_0$  — глубина потенциальной ямы примесного центра,  $a$  — постоянная решетки ГС, индекс  $l$  пробегает по всем элементарным ячейкам кристалла, случайная функция  $q_l$  равна единице, если в  $l$ -й ячейке находится примесный атом, и нулю — в противном случае,  $z_{0l}$  — координата примеси вдоль оси  $z$  ГС,  $\boldsymbol{\rho}$  — поперечный (в плоскости  $xy$ ) радиус-вектор носителя.

Огибающие функции одноэлектронных волновых функций в ГС с квантовыми ямами (КЯ) могут быть записаны в виде [9]:

$$|\lambda k\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik\rho) f_{\lambda k}(z), \quad (2)$$

где  $S$  — нормировочная площадь ГС; индекс  $\lambda \equiv \{s, n\}$  определяет принадлежность к данной  $s$ -зоне объемных состояний и одновременно указывает номер  $n$  подзоны размерного квантования для данной  $s$ -зоны;  $k$  — поперечная составляющая квазиимпульса носителя. Функции  $f_{\lambda k}(z)$  являются решением простого одномерного уравнения Шредингера, в котором потенциальная энергия моделируется соответствующим набором прямоугольных КЯ конечной глубины. Также предполагается, что на гетерограницах эти функции удовлетворяют граничным условиям, сохраняющим плотность потока вероятности, что и определяет энергетический спектр электронов и дырок ГС. Зависимость 1D огибающей функции в (2) от 2D-квазиимпульса будем пренебрегать, ограничивая таким образом, рассмотрение случаем малой передачи квазиимпульса при рассеянии,  $\Delta k \ll \pi/a$ .

Вероятность перехода в единицу времени (обратное время релаксации) из состояния  $|nk\rangle$  в состояние  $|n'k'\rangle$  с помощью золотого правила Ферми можно записать в виде

$$W_{n'n}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n'k'|U|nk\rangle|^2 \delta[E_{n'}(k') - E_n(k)]. \quad (3)$$

Здесь  $E_n(k)$  есть энергетический спектр одноэлектронных возбуждений в ГС с КЯ; матричный элемент, входящий в (3), в принятом здесь приближении записывается как

$$\langle n'k'|U|nk\rangle = \frac{U_0 a^3}{S} \sum_l q_l f_{n'}^*(z_{0l}) f_n(z_{0l}) \exp[i(k - k')\rho_l]. \quad (4)$$

Вероятность в единицу времени перехода носителя из состояния  $|nk\rangle$  в любое доступное состояние запишем в виде

$$W_n(k) = \sum_{n'k'} W_{n'k'}(k', k), \quad (5)$$

при этом предполагается, что концентрация примесей в  $n'$ -подзоне достаточно мала, так что ограничениями, связанными с принципом Паули, можно пренебречь.

С учетом того, что уровень легирования ГС может быть достаточно высок (при селективном легировании, например, концентрация примесей в отдельных слоях ГС может быть величиной, близкой к единице), представляет интерес рассмотрение рассеяния не каким-либо конкретным пространственным распределением, а, скорее, некоторым усредненным распределением, учитывающим среди прочих факторов межпримесные корреляции. Следовательно, произведения  $q_l q_{l'}$  в уравнении (5) необходимо заменить на соответствующие средние значения:  $q_l q_{l'} \Rightarrow \langle q_l q_{l'} \rangle$ . В дальнейшем, мы ограничимся рассмотрением наиболее интересного случая одномерно легированных слоев, которые перпендикулярны

к оси роста ГС. Кроме того, для удобства, можно ввести вместо дискретного аргумента случайной функции  $q_l$  непрерывные переменные:  $q_l \Rightarrow q(\rho, z)$ . Тогда функция  $q(z) = \int d^2\rho q(\rho, z)$  будет представлять собой среднюю атомную концентрацию примесных атомов в слое между  $z$  и  $z + a$ . Соответственно, флуктуация примесной концентрации в этом слое определится как  $\delta q(\rho, z) = q(\rho, z) - q(z)$ . Опуская случаи, которые соответствуют отсутствию рассеяния, мы можем переписать уравнение (5) в следующем виде:

$$W_n(k) = \frac{2\pi}{\hbar} (U_0 a)^2 \sum_{n'k'} \sum_{l'l'} \left\langle \delta q(k - k', z_{0l}) \delta q^*(k - k', z_{0l'}) \right\rangle \times R_{nn'}(z_{0l}, z_{0l'}) \delta(E_{n'}(k') - E_n(k)). \quad (6)$$

Здесь

$$R_{nn'}(z_{0l}, z_{0l'}) = f_n^*(z_{0l}) f_n(z_{0l}) f_{n'}(z_{0l'}) f_{n'}^*(z_{0l'}), \quad (7)$$

а 2D-фурье-компоненты примесных флуктуаций концентрации определяются выражением

$$\delta q(k, z) = \frac{1}{S} \int d^2\rho q(\rho, z) \exp(ik\rho). \quad (8)$$

Корреляционная функция, содержащаяся в уравнении (6), может быть представлена в виде суммы, включающей вклады двух различных видов: вклада, который соответствует идеальному твердому раствору и другого вклада, связанного со всеми корреляционными эффектами, как в слоях, так и вдоль оси роста ГС. Учитывая только первый вклад, мы можем переписать уравнение (6) в виде

$$W_n(k) = \frac{2\pi}{\hbar} U_0^2 a^3 \times \sum_{n'} \int dz \cdot q(z) [1 - q(z)] R_{nn'}(z) g_{n'}(E_n(k)). \quad (9)$$

Плотность состояний в  $n'$ -подзоне ГС определяется выражением

$$g_{n'}(E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k' \delta(E_{n'}(k') - E). \quad (10)$$

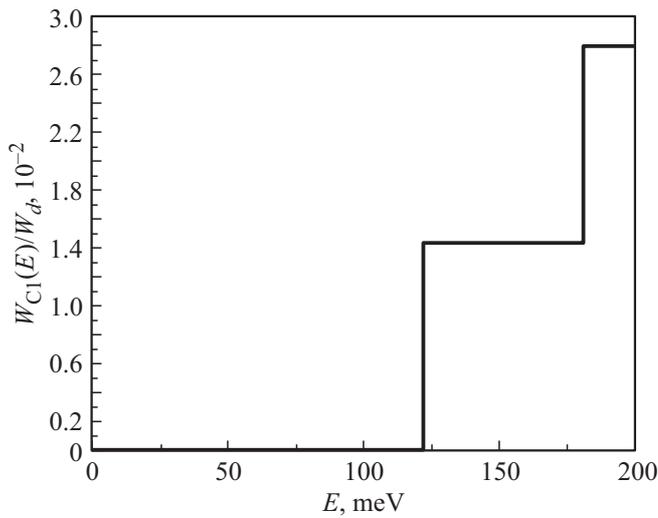
Для ГС при параболической аппроксимации закона дисперсии и положительной эффективной массе носителя  $m_\lambda$ , можно записать

$$E_\lambda(k) = E_\lambda^{(0)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\lambda}. \quad (11)$$

Тогда для плотности состояний (на единицу площади ГС) получаем

$$g^{(0)} = \sum_\lambda \frac{m_\lambda}{2\pi\hbar^2} \vartheta[(E) - E_\lambda^{(0)}]. \quad (12)$$

Здесь  $\vartheta(E)$  — единичная ступенчатая функция Хевисайда,  $E_\lambda^{(0)}$  — положение края (при  $k = 0$ )  $\lambda$ -подзоны, а



**Рис. 1.** Зависимость вероятности рассеяния в единицу времени  $W_{C1}(E)$  для электрона в нижней подзоне размерного квантования C1 ГС  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As-GaAs$  типа 4-4-4 на глубокой донорной примеси Te от энергии электрона  $E$ .  $W_d = (U_0^{(d)}a)^2 m_0 q / 4\hbar^3 = 1.59 \cdot 10^{10} s^{-1}$ ; обе КЯ ГС легированы глубокой примесью Te с постоянным профилем  $q$ , внутренний и внешние барьерные слои ГС — постоянным профилем  $0.1q$ ;  $q = 10^{-5}$  — средняя атомная примесная концентрация, соответствующая объемной концентрации  $10^{17} cm^{-3}$ .

$m_\lambda$  — соответствующая эффективная масса. В случае, когда для дырочной подзоны  $m_\lambda < 0$ , выражение для закона дисперсии (11) становится неприменимым, и при малых  $k$  закон дисперсии в такой подзоне можно аппроксимировать выражением

$$E_\lambda(k) = E_\lambda^{(0)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\lambda} + \frac{\hbar^2 b_\lambda^2}{2m_0} k^4. \quad (13)$$

Типичные значения феноменологического параметра  $b_\lambda$  могут быть заключены между  $10^{-7}$  и  $10^{-6} cm$  [9]. Вычисление интеграла (10) для плотности состояний (на единицу площади ГС) с законом дисперсии (13) приводит к выражению

$$g^{(-)}(E) = \frac{m_0 [E - E_\lambda^{(0)} + E_{\lambda,0}]^{-1/2}}{4\pi |m_\lambda| b_\lambda^2 E_{\lambda,0}^{1/2}} \times \begin{cases} 1, & E_\lambda^{(0)} - E_{\lambda,0} \leq E < E_{\lambda,0}, \\ 0.5, & E > E_{\lambda,0}. \end{cases} \quad (14)$$

Здесь:  $E_{\lambda,0} = (m_0/2m_\lambda)^2 \hbar^2 / 2m_0 b_\lambda^2$ .

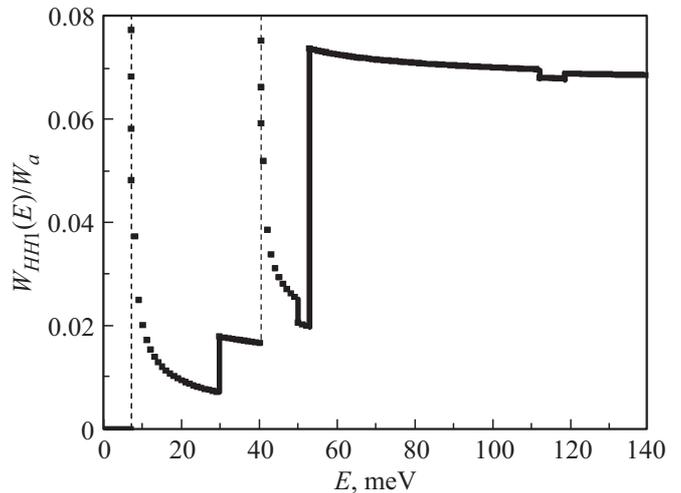
Профиль легирования ГС определяется 1D-примесной концентрацией  $q(z)$ , фактор  $[1 - q(z)]$  в уравнении (9) учитывает корреляцию примесных атомов внутри ячейки, то есть невозможность встраивать более одного примесного атома в одну и ту же элементарную ячейку. При условии, что  $q \ll 1$  уравнение (9) описывает суммарное некогерентное рассеяние, тогда как при  $q \rightarrow 1$

вероятность 2D-электронного рассеяния становится равной нулю, поскольку этот случай соответствует почти идеальной 2D-периодической структуре.

На рис. 1 приведен график зависимости вероятности рассеяния в единицу времени на глубокой донорной примеси для электрона  $W_{C1}(E)$  в подзоне размерного квантования C1 от энергии носителя  $E$  для симметричной полупроводниковой ГС  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As-GaAs$  типа 4-4-4 с двумя КЯ (ширина левой и правой КЯ равна  $4a$ , внутреннего барьера —  $4a$ ,  $a = 5.655 \cdot 10^{-8} cm$ ), полученный численным решением выражения (9) при  $n = C1$  и  $n' = C1, C2$ .

На рис. 2 приведен график зависимости вероятности рассеяния в единицу времени на глубокой акцепторной примеси для дырки  $W_{HH1}(E)$  в подзоне размерного квантования HH1 от энергии носителя  $E$  для полупроводниковой ГС  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As-GaAs$  типа 7-2-5 с двумя КЯ на основе численного решения выражения (9) при  $n = HH1$  и  $n' = HH1, HH2, HH3, LH1, LH2$ . Предполагается, что положение уровня Ферми и, следовательно, заполнение подзон размерного квантования в обеих ГС определяется, как обычно, уровнем легирования мелкими примесями, расположенными во внешних барьерных слоях и отделенными от системы КЯ спейсерами соответствующей ширины. Расчеты выполнены для случая предельно низких температур (4.2 К), когда темп примесного рассеяния может существенно превышать темп рассеяния на фонах.

Для нахождения вероятностей примесного рассеяния в единицу времени  $W_{C1}(E)$  и  $W_{HH1}(E)$  необходимо было



**Рис. 2.** Зависимость вероятности рассеяния в единицу времени  $W_{C1}(E)$  для дырки в нижней подзоне размерного квантования HH1 ГС  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As-GaAs$  типа 7-2-5 на глубокой акцепторной примеси Cu от энергии дырки  $E$ .  $W_a = (U_0^{(a)}a)^2 m_0 q / 7\hbar^3 = 2.05 \cdot 10^{10} s^{-1}$ ; обе КЯ ГС пролегированы глубокой примесью Cu с постоянным профилем  $q$ , внутренний и внешние барьерные слои ГС — постоянным профилем  $0.1q$ ;  $q = 10^{-5}$  — средняя атомная примесная концентрация, соответствующая объемной концентрации  $10^{17} cm^{-3}$ . Принято:  $b_{HH2} = b_{LH2} = 10^{-6} cm$ .

Значения энергий  $E$  (meV) краев подзон размерного квантования (при  $k = 0$ ) и соответствующие эффективные массы поперечного движения  $m_\lambda$  (в единицах  $m_0$ ) для электронов, тяжелых и легких дырок для двух типов ГС  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{-GaAs}$ : 4-4-4 и 7-2-5

ГС 4-4-4							
C1	C2	HH1	HH2	HH3	LH1	LH2	
121.81	180.75	57.16	65.23	–	84.97	131.10	$E, \text{meV}$
0.0750	0.0755	0.1364	0.1420	–	0.1654	0.1776	$m_\lambda/m_0$
ГС 7-2-5							
C1	C2	HH1	HH2	HH3	LH1	LH2	
74.66	154.23	29.68	49.86	118.63	52.85	111.92	$E, \text{meV}$
0.0705	0.0724	0.1407	-0.1002	0.0207	0.0443	-0.0302	$m_\lambda/m_0$

определить феноменологический параметр  $U_0$  для глубокой донорной и глубокой акцепторной примеси:  $U_0^{(d)}$  и  $U_0^{(a)}$  соответственно. Это сделано простым путем, используя экспериментально определенные значения энергий связи примесных состояний, которые принимались равными 100 meV для глубокой донорной примеси Te и 150 meV для глубокой акцепторной примеси Cu в квантовой яме GaAs [10,11].

В таблице приведены значения энергий краев подзон размерного квантования для электронов, тяжелых и легких дырок ГС  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As-GaAs}$  типов 4-4-4 и 7-2-5, отсчитанные от дна соответствующей КЯ и измеренные в meV, а также значения эффективных масс в единицах массы свободного электрона  $m_0$ . Эффективные массы дырок вычислялись с использованием известного гамильтониана Латтинджера [12] в модели  $(4 \times 4)$  [13], недиагональные по спиновым индексам элементы которого приводили к смешиванию состояний тяжелых и легких дырок ГС, вклад которых рассчитывался по теории возмущений до второго порядка включительно.

Зависимость вероятности рассеяния в единицу времени на глубокой примеси для электронов от энергии носителя повторила кусочно-постоянный вид плотности состояний подзон C1 и C2 размерного квантования ГС 4-4-4 с учетом вклада интеграла перекрытия волновых функций (7) при заданном профиле легирования  $q(z)$  ГС. Для ГС 7-2-5 дырочные подзоны HH2 и LH2 имеют отрицательные эффективные массы, а вероятности рассеяния в единицу времени на глубокой акцепторной примеси для дырок у краев этих подзон имеют сингулярности, характерные для одномерных систем; дырочные подзоны HH1, HH3, LH1 имеют положительные эффективные массы, вероятность рассеяния в единицу времени здесь снова повторяет кусочно-постоянный вид плотности состояний этих подзон.

### 3. Заключение

Оптические и кинетические свойства электронов и дырок в системах КЯ полупроводниковой ГС сильно зависят от параметров глубоких уровней, например, через изменение уровня Ферми и изменение характера

рассеяния носителей на примесях [14]. Кроме того, сама зонная структура полупроводника и симметрия глубокой примеси в явном виде определяют тип квантового состояния примеси, причем для полного описания состояния примеси нужно учитывать неблоховские состояния с энергиями в запрещенной зоне, которые соответствуют примесному ядру [15]. Недавние исследования термостимулированной проводимости ГС  $\text{InGaAs-GaAs}$  [2] показали, что глубокие ловушки могут играть заметную роль в процессе рекомбинации и механизме фотопроводимости. Формализм туннельного гамильтониана использован в [16] для расчета скоростей фотопроводимости в ГС с глубокими КЯ с зонной диаграммой типа I между состояниями в валентной зоне в КЯ и уровнями глубоких примесных центров. Показано, что скорость фотозарядки примесей резко возрастает, когда частота света превышает определенный порог. Исследование формирования резонансных состояний в зоне проводимости, индуцированных глубокими примесями вне КЯ ГС в [17] показало, что коэффициенты захвата и рассеяния могут изменяться на несколько порядков в узких энергетических интервалах, создавая ярко выраженный и сильный механизм рассеяния.

Отметим, что проведенное в настоящей работе исследование рассеяния электронов и дырок в прямозонных полупроводниковых системах КЯ на глубоких примесях в приближении короткодействующего потенциала примеси и метода эффективной массы, проводилось без каких-либо ограничений по профилю легирования ГС.

### Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Y. Zhang. Chin. Phys. B **27**, 117103-1 (2018).
- [2] S.A. Iliash, S.V. Kondratenko, A.S. Yakovliev, Vas.P. Kunets, Yu.I. Mazur, G.J. Salamo. Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron. **19**, 75 (2016).
- [3] Y. Zhang, J. Wang. Phys. Rev. B **90**, 155201 (2014).

- [4] P.M. Koenrad, M.E. Flatté. *Nature Mater.* **10**, 91 (2011).
- [5] Ł. Gelczuk, M. Dabrowska-Szata, B. Sciana, D. Pucicki, D. Radziejewicz, K. Kopalko, M. Tłaczala. *Mater. Sci. Poland.* **34**, 726 (2016).
- [6] N. Miyashita, Y. He, N. Ahsan, Y. Okada. *J. Appl. Phys.* **126**, Art. № 143104 (2019).
- [7] Л.В. Келдыш. *ЖЭТФ* **45**, 364 (1964).
- [8] И.М. Лифшиц. *ЖЭТФ* **17**, 1017 (1947).
- [9] V.I. Belyavsky, Yu.V. Kopaev, N.V. Kornyaikov, Yu.A. Pomerantsev, S.V. Shevtsov. *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 460 (1998).
- [10] В.И. Белявский, Ю.В. Копасев, Н.В. Корняков, С.В. Шевцов. *Письма в ЖЭТФ* **61**, 1004 (1995).
- [11] В.И. Белявский, Ю.В. Копасев, Ю.А. Померанцев, С.В. Шевцов. *Письма в ЖЭТФ* **62**, 197 (1995).
- [12] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [13] L.C. Andreani, A. Pasquarello, F. Bassani. *Phys. Rev. B* **36**, 5887 (1987).
- [14] G. Bastard, J.A. Brum, R. Ferreira. *Solid State Phys.* **44**, 229 (1991).
- [15] J.C. Inkson. *J. Phys. C* **13**, 369 (2000).
- [16] E.Y. Perlin, A.A. Popov. *J. Opt. Technol.* **81**, 365 (2014).
- [17] A. Blom, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, K.A. Chao. *Phys. Rev. B Condens. Matter.* **65**, 155302 (2002).

*Редактор Т.Н. Василевская*