

©1995 г.

МНОГОФОНОННЫЙ ЗАХВАТ НОСИТЕЛЕЙ НА ГЛУБОКИЕ ЦЕНТРЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

А.А.Пазомов, И.Н.Ясевич

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

(Получена 28 июля 1994 г. Принята к печати 30 августа 1994 г.)

Рассчитана зависимость вероятности многофононного безызлучательного захвата носителя на дефект с глубоким уровнем от положения дефекта внутри квантовой ямы. Показано, что эта зависимость может быть описана с помощью некоторой универсальной функции положения дефекта.

1. Введение

Как известно, многофононные процессы захвата представляют собой один из основных механизмов безызлучательной рекомбинации при температурах выше азотной. В существующих теоретических работах влияние размерного квантования носителей на скорость многофононных переходов сводилось к учету увеличения энергии ионизации дефекта на величину энергии размерного квантования ϵ_L (см., например, [1,2]).

Теоретическое значение величины и температурной зависимости сечения захвата определяется величиной и формой барьера в конфигурационном пространстве, который нужно преодолеть колебательной подсистеме дефекта при переходе, сопровождающемся захватом носителя. Основную роль здесь играет такая конфигурация решетки в окрестности дефекта, которая соответствует малой (по сравнению с энергией локализации) энергии связи носителя на дефекте.

В работе [3] было показано, что в этой области адиабатические потенциалы дефектов, расположенных вблизи интерфейса, резко изменяются по сравнению с объемным случаем. В данной работе будет показано, что аналогичный эффект имеет место и в квантово-размерных структурах, причем его вклад в величину и температурную зависимость сечения захвата соизмерим со вкладом от увеличения энергии ионизации дефекта.

2. Электронные состояния и адиабатические потенциалы дефекта в квантовой яме

Для определения высоты и формы барьера в конфигурационном пространстве необходимо знать зависимость энергии связи электрона от конфигурационной колебательной координаты. Мы найдем эту зависимость в рамках точно решаемой модели потенциала нулевого радиуса, которая хорошо описывает электронное состояние при малых энергиях связи (что имеет место при большой деформации решетки).¹

Задача об электронных состояниях в потенциале нулевого радиуса, помещенном в квантовую яму с бесконечно высокими стенками, рассматривалась ранее в [5]. Далее мы решим эту задачу несколько другим способом, исправив при этом ряд неточностей работы [5].

Волновая функция электрона с энергией связи ε_{0L} , локализованного на потенциале нулевого радиуса в квантовой яме.

$$\Psi_\varepsilon(\rho, z, z_0) = AG_\varepsilon(\rho, z, z_0), \quad (1.1)$$

где G_ε — функция Грина свободного электрона с энергией $\varepsilon = -\varepsilon_{0L}$, с источником, расположенным в точке $\mathbf{R}_0 = (0, 0, z_0)$ в квантовой яме. Ось z направлена перпендикулярно плоскости квантовой ямы, $\rho = (x, y)$ — координата в плоскости квантовой ямы (рис. 1). Поскольку граничные условия на стенках ямы не могут сказываться на характере поведения электронной волновой функции в области действия короткодействующего потенциала, должно выполняться граничное условие при $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0| \rightarrow 0$ [6]:

$$\Psi_\varepsilon = C \left[\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|} - \kappa \right] + O(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|), \quad (1.2)$$

где C — произвольная константа, а κ — параметр, характеризующий потенциал дырки и определяющий энергию связи дефекта в объемном полупроводнике: $\varepsilon_0 = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$. Используя цилиндрическую симметрию задачи, функцию Грина можно представить в виде

$$G_\varepsilon(\rho, z, z_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk J_0(k\rho) g \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, z, z_0 \right), \quad (1.3)$$

где g -функция Грина одномерного уравнения Шредингера, учитывающего граничные условия на стенках ямы, J_0 — функция Бесселя нулевого порядка.

Аналогично [5] рассмотрим случай квантовой ямы с бесконечно высокими стенками. Применимость такого приближения мы обсудим в п. 5. Этот случай, соответствующий нулевым граничным условиям

¹ Существует характерная величина энергии связи, при которой происходит многофононный переход. ε_m , которая всегда меньше энергии ионизации дефекта [3,4].

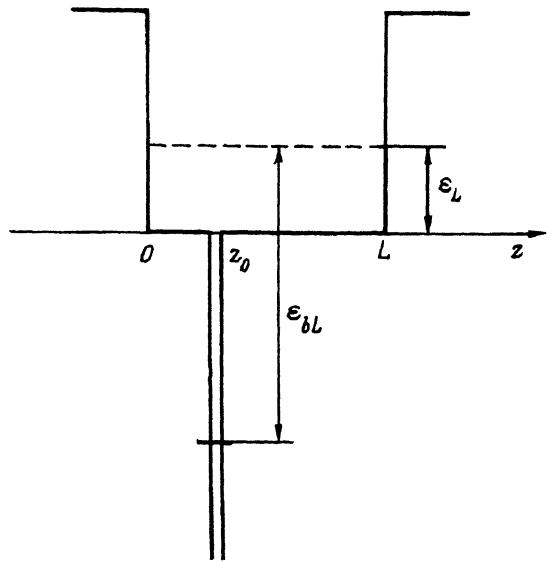


Рис. 1. Дефект с глубоким уровнем в квантовой яме, ε_L — энергия размерного квантования.

для волновой функции на стенках ямы (при $z = 0$ и $z = L$), приводит к простому выражению для функции Грина:

$$g\left(-\varepsilon_{0L} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, z, z_0\right) = \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + k^2}} \left\{ e^{-\sqrt{\alpha^2 + k^2} |z - z_0|} - \frac{1}{\text{sh} L \sqrt{\alpha^2 + k^2}} \times \right. \\ \left. \times \left[\text{sh}(z \sqrt{\alpha^2 + k^2}) e^{-(L - z_0) \sqrt{\alpha^2 + k^2}} + \text{sh}((L - z) \sqrt{\alpha^2 + k^2}) e^{-z_0 \sqrt{\alpha^2 + k^2}} \right] \right\}, \quad (1.4)$$

где $\varepsilon_{0L} = \hbar^2 \alpha^2 / 2m$, L — ширина ямы. Подставляя (1.4) в (1.2) и пользуясь соотношением

$$\int_0^\infty \frac{k dk}{\sqrt{\alpha^2 + k^2}} J_0(k\rho) e^{-\sqrt{\alpha^2 + k^2} |z - z_0|} = \frac{e^{-\alpha \sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}}}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (1.5)$$

приходим к следующему уравнению для определения энергии связи электрона на дефекте в квантовой яме:

$$\alpha + \int_\alpha^\infty \frac{k dk}{\text{sh} Lt} \left[\text{sh} z_0 t e^{-t(L - z_0)} + \text{sh}(L - z_0) t e^{-z_0 t} \right] = \kappa. \quad (1.6)$$

Уравнение (1.6) впервые было получено в работе [5].

Для дальнейших вычислений особый интерес представляет вычисление тех значений κ , при которых энергия связи электрона обращается в нуль. В работе [5] ошибочно предполагалось, что таким критическим значением является $\alpha = 0$. На самом деле очевидно, что исчезновение связанных состояний должно происходить при слиянии

уровня с границей первой подзоны размерного квантования, что имеет место при отрицательных κ и мнимых α . Для случая мнимых α контур интегрирования удобно выбрать в виде отрезка мнимой оси от точки $\alpha = i\eta$ до нуля и положительной вещественной полуоси. После несложных преобразований уравнение (1.6) можно привести к виду

$$\int_0^{\eta} \frac{d\tau}{\sin L\tau} [\cos(L - 2z_0)\tau - \cos L\tau] = \kappa_L - \kappa, \quad (1.7)$$

где $\kappa_L(L, z_0)$ — значение параметра κ , при котором уровень пересекает дно квантовой ямы:

$$\kappa_L = \int_0^{\infty} \frac{dt}{\text{sh} Lt} [\text{sh}(z_0 t) \exp(-t(L - z_0)) + \text{sh}((L - z_0)t) \exp(-tz_0)]. \quad (1.8)$$

Интересно отметить важные физические следствия проведенного рассмотрения. Отрицательным значениям κ в объемном материале соответствуют так называемые виртуальные состояния, которые не могут локализовать электрон, а лишь являются источником рассеяния. В квантовой яме такие состояния становятся локализованными с энергией, лежащей между дном первой подзоны размерного квантования и дном квантовой ямы. Известно, что модель потенциала нулевого радиуса хорошо применима для описания изоэлектронных примесей в полупроводниках. Часто изоэлектронным примесям замещения в объемных материалах соответствуют лишь виртуальные состояния (например, In в GaAs). Проведенные рассуждения показывают, что наличие таких примесей в квантово-размерной структуре должно приводить к образованию локальных уровней, глубина которых зависит как от параметра κ , так и от положения примеси в яме z_0 . Соответственно, мелкомасштабные флуктуации состава твердых растворов должны приводить к образованию «хвоста» локализованных состояний в квантовой яме вблизи первой подзоны размерного квантования. Физическая причина этого явления состоит в том, что при малых энергиях связи состояния становятся фактически двумерными и условиями локализации смягчаются. Детальному рассмотрению этих эффектов планируется посвятить отдельную работу.

Качественная картина зависимости энергии связи от параметра κ приведена на рис. 2,а. При больших отрицательных κ уровень асимптотически приближается к дну первой подзоны размерного квантования $\eta \rightarrow \pi/L$. При больших положительных κ энергия связи приближается к своему объемному значению: $\alpha \rightarrow \kappa$. Точное решение уравнения (1.7) для дефекта, расположенного в середине квантовой ямы, приводится в *Приложении I*.

Используем полученные результаты построения системы термов в квантовой яме. Для простоты будем использовать одномодовое приближение, когда конфигурацию решетки можно характеризовать одной координатой x . Пусть дефекту без электрона в объемном материале соответствует адиабатический потенциал $U_2(x)$. Энергия связи ε_b в адиабатическом потенциале зависит от координаты x и, соответственно, адиабатический потенциал дефекта со связанным электроном

в объемном материале имеет вид

$$U_1 = U_2 - \varepsilon_b(x) = U_2 - \frac{\hbar^2 k^2(x)}{2m}. \quad (1.9)$$

Заметим, что, как показано в [4], в окрестности точки x_c , в которой энергия связи обращается в нуль, в рамках модели потенциала нулевого радиуса \varkappa является линейной функцией конфигурационной координаты:

$$\varkappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\beta M m \omega^2} (x_c - x). \quad (1.10)$$

Здесь линейная зависимость $\varkappa(x)$ параметризована, согласно [4], путем введения безразмерной константы β , характеризующей силу электрон-фононного взаимодействия, M и ω — эффективная масса и частота колебаний дефекта в состоянии 2 (без электрона) в окрестности положения равновесия. В рамках модели касания адиабатических потенциальных кривых [4] параметр β может быть выражен через термическую и оптическую энергии ионизации дефекта: $\beta = (\varepsilon_{\text{opt}} - \varepsilon_T) / \varepsilon_{\text{opt}}$. В квантовой яме адиабатический потенциал системы «пустой» дефект+электрон с нулевой кинетической энергией на первом уровне имеет вид

$$U_{2L}(x) = U_2(x) + \varepsilon_L, \quad (1.11)$$

а для дефекта со связанным электроном

$$U_1(x) = U_2(x) - \xi_{bL}(x), \quad (1.12)$$

где

$$\xi_{bL}(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 \eta^2(x)}{2m}, & \varkappa \leq 0 \\ \frac{\hbar^2 \alpha^2(x)}{2m}, & \varkappa \geq 0, \end{cases} \quad (1.13)$$

при этом энергия связи электрона на дефекте в квантовой яме равна

$$\varepsilon_{bL}(x) = \varepsilon_L + \xi_{bL}(x). \quad (1.14)$$

Зависимости $\alpha(x)$ и $\eta(x)$ в неявном виде определяются через зависимость $\varkappa(x)$ формулами (1.6) и (1.7). На рис. 2 показаны основные качественные отличия адиабатических термов для дефекта в квантовой яме и в объемном полупроводнике. Встреча адиабатических термов, соответствующих свободному и локализованному состояниям электрона, происходит в точке $x = \infty$. Это связано с тем, что при малых энергиях связи $\varepsilon_{bL} \ll \varepsilon_L$ волновая функция локализованного состояния «зажата» между стенками квантовой ямы и влияние близкой границы сплошного спектра на локализованное состояние носит практически двумерный характер. Заметим, что искажение трема $U_{1L}(x)$ по сравнению с «объемным» термом U_1 в предыдущих работах не учитывалось. Далее будет показано, что это искажение играет существенную роль в многофононных безызлучательных переходах.

3. Вероятности безызлучательных переходов

В этом разделе мы с экспоненциальной точностью вычислим поправки к вероятностям многофононных переходов, связанных с размерным квантованием. При температурах, удовлетворяющих неравенству $kT \leq \hbar\omega$ энергии кванта локальных колебаний, переходы колебательной системы происходят путем термостимулированного туннелирования [4]. Вероятность туннельного перехода дефекта с энергией колебаний E , расположенного в точке z_0 в квантовой яме шириной L , определяется соотношением [7]

$$W(E, z_0, L) \propto \exp \left\{ \frac{2}{\hbar} \text{Im} S_L(E, z_0, L) \right\}, \quad (2.1)$$

где $\text{Im} S_L(E, z_0)$ — мнимая часть действия, вычисленная по туннельной траектории в конфигурационном пространстве, соединяющей точки поворота на термах $1L$ и $2L$ и проходящей через точку $x = \infty$, в которой термы 1 и 2 сливаются:

$$\text{Im} S_L(E, z_0) = \sqrt{2M} \left\{ \int_{a_{1L}}^{\infty} dx \sqrt{U_{1L} - E} + \int_{\infty}^{a_{2L}} dx \sqrt{U_{2L}(x) - E} \right\}. \quad (2.2)$$

Аналогичные выражения для вероятности перехода можно получить в случае, когда энергия туннелирования E удовлетворяет неравенству

$$\varepsilon_2 - E \gg \varepsilon_L, \quad (2.3)$$

где ε_2 — высота барьера в конфигурационном пространстве для дефекта в объемном полупроводнике (рис. 2). В этом случае основной

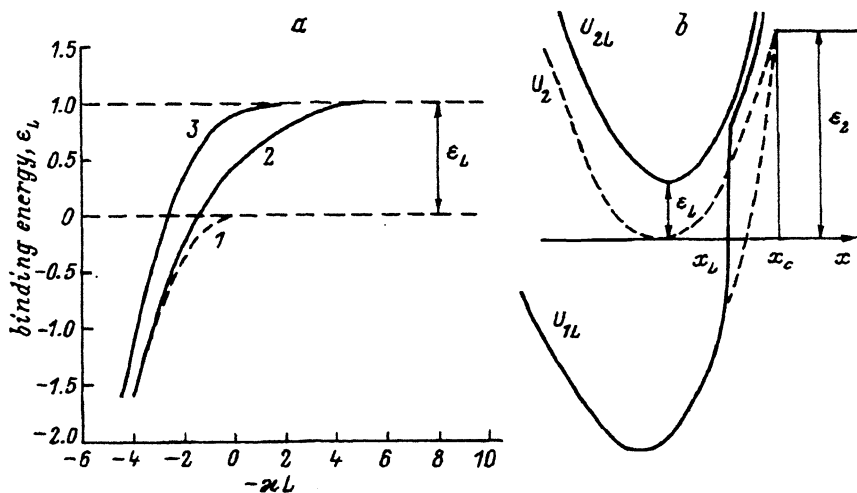


Рис. 2. а — зависимость энергии связи дефекта от параметра x , характеризующего энергию связи дефекта в объеме: 1 — в объемном материале, 2 — при $z_0/L = 0.5$, 3 — при $z_0/L = 0.8$. б — адиабатические потенциалы для дефекта в квантовой яме. Пунктир — адиабатические потенциалы для дефекта в объеме.

эффект вызван уходом точки встречи термов на бесконечность и изменением хода адиабатических термов при больших значениях конфигурационной координаты x . Влиянием же размерного квантования на точки поворота можно пренебречь. Поправку к действию можно найти вычитая из (2.2) мнимую часть действия, описывающую переходы в объемном материале

$$\text{Im}S_0(E) = \sqrt{2m} \left\{ \int_{a_1}^{x_c} \sqrt{U_1(x) - E} dx + \int_{x_c}^{a_2} \sqrt{U_2(x) - E} dx \right\}, \quad (2.4)$$

где x_c — точка встречи термов U_1 и U_2 . В результате поправку к мнимой части действия можно представить в виде

$$\delta(\text{Im}S) = \text{Im}[S(E, z_0, L)] - \text{Im}S_0(E) = -\delta S_1 - \delta S_2 + \delta S_3, \quad (2.5)$$

где

$$\delta S_1 = \sqrt{2M} \left\{ \int_{a_{2L}}^{x_c} \sqrt{U_2(x) + \varepsilon_L - E} dx - \int_{a_2}^{x_c} \sqrt{U_2(x) - E} dx \right\}, \quad (2.6a)$$

$$\delta S_2 = \sqrt{2M} \int_{x_c}^{\infty} \left(\sqrt{U_2 + \varepsilon_L - E} - \sqrt{U_2 - \varepsilon_{bL} - E} \right) dx, \quad (2.6b)$$

$$\delta S_3 = \sqrt{2M} \left\{ \int_{a_1}^{x_c} \sqrt{U_2 - \varepsilon_b - E} dx + \int_{a_{1L}}^{x_c} \sqrt{U_2 - \varepsilon_{bL} - E} dx \right\}. \quad (2.6в)$$

Поправки δS имеют наглядный смысл. Первая из них, δS_1 , связана с увеличением показателя туннельной экспоненты за счет увеличения энергии локализации ε_{bL} в квантовой яме. Поправка δS_2 связана с увеличением высоты потенциального барьера в конфигурационном пространстве, а поправка δS_3 — с его уточнением. Раскладывая выражение (2.6a) по степеням ε_L , имеем

$$\delta S_1 = \tau_2 \varepsilon_L,$$

где

$$\tau_2 = \int_{a_2}^{x_c} \sqrt{\frac{M}{2}} \frac{dx}{\sqrt{U_2 - E}} \quad (2.7)$$

определяет мнимое время туннелирования колебательной системы от точки a_2 до точки x_c .

Поправки (2.6a) впервые были вычислены Карпусом и Перелем [8]. Заметим, что величину τ_2 можно определить экспериментально, используя зависимость вероятности термической ионизации дефекта от электрического поля [8].

Поправки δS_2 и δS_3 можно вычислить, используя тот факт, что энергия связи ε_{bL} экспериментально приближается к значению ε_L при $x > x_c$ и к значению $\varepsilon_b(x)$ при $x < x_c$ с характерным масштабом ε_L . Используя неравенство (2.3), эти поправки можно представить в виде

$$\delta S_2 = \frac{1}{v_2(x_c)} \int_{x_c}^{\infty} \left(\varepsilon_L - \frac{\hbar^2 \eta^2(x)}{2m} \right) dx, \quad (2.8a)$$

$$\delta S_3 = -\frac{1}{v_2(x_c)} \int_{-\infty}^{x_c} \left[\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} - \xi_{bL}(x) \right] dx, \quad (2.8б)$$

где $v_2(x_c) = \sqrt{\frac{2}{M}(\varepsilon_2 - E)}$ — скорость движения по туннельной траектории в точке x_c , а $\xi_{bL}(x)$ определяется формулой (1.13). При выводе соотношений (2.8a,б) используется тот факт, что подынтегральное выражение экспоненциально убывает по мере удаления от точки x_c , а при этом, используя выражение (1.12) для $\varepsilon_{bL}(x)$, интегралы (2.8a,б) можно преобразовать к виду

$$\delta S_3 - \delta S_2 = \frac{\varepsilon^{3/2}}{\omega \sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E)}} [f_3(z_0/L) - f_2(z_0/L)], \quad (2.9)$$

где f_2 и f_3 — безразмерные функции, зависящие лишь от положения дефекта в квантовой яме:

$$f_2(y) = \int_0^1 \frac{(1 - \xi^2)}{\sin \xi} \{ \cos[(1 - 2y)\pi\xi] - \cos \pi\xi \} d\xi, \quad (2.10a)$$

$$f_3(y) = \int_0^{\infty} \frac{1 + \xi^2}{\operatorname{sh} \pi\xi} \{ \operatorname{ch}[(1 - 2y)\pi\xi] - e^{-\pi\xi} \} d\xi. \quad (2.10б)$$

Детали этих преобразований приведены в *Приложении II*.

Таким образом, итоговое выражение для вероятности многофононных переходов в квантовой яме имеет вид

$$W(E) = W_0(E) \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \tau_2(E) \varepsilon_L + \frac{2\varepsilon_L^{3/2}}{\hbar\omega} \frac{1}{\sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E)}} \varphi \left(\frac{z_0}{L} \right) \right\}, \quad (2.11)$$

где

$$\varphi \left(\frac{z_0}{L} \right) = f_3 \left(\frac{z_0}{L} \right) - f_2 \left(\frac{z_0}{L} \right). \quad (2.12)$$

График функции $\varphi(y)$ приведен на рис. 3. Видно, что по мере приближения дефекта к стенке квантовой ямы вероятность многофононных переходов резко возрастает в соответствии с результатом работы [3].

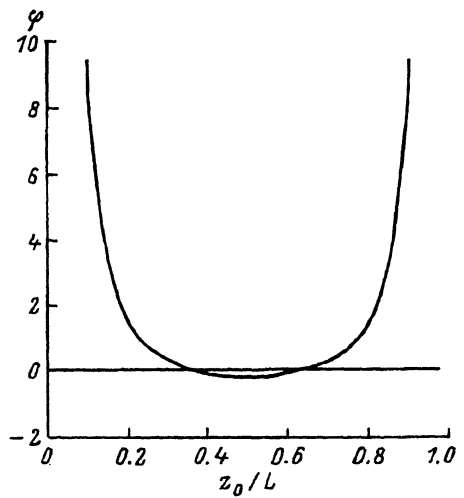


Рис. 3. График функции $\varphi(z_0/L)$, характеризующей зависимость вероятности захвата носителей на дефект от положения дефекта в яме.

Для нахождения сечения многофононного захвата $\sigma(T)$ выражение (2.11) нужно усреднить по равновесному термодинамическому распределению:

$$\sigma(T) \propto \int_0^{\infty} W(E) e^{-\frac{E}{kT}} dE. \quad (2.13)$$

Оптимальная энергия многофононного перехода E_0 определяется точкой перевала интеграла (2.13), что приводит к уравнению

$$\frac{1}{kT} = \frac{2}{\hbar} (\tau_2 - \tau_1), \quad (2.14)$$

где

$$\tau_{1,2} = \sqrt{\frac{M}{2}} \int_{a_{1,2}}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{U_{1,2L} - E}} \quad (2.15)$$

— мнимое время туннелирования колебательной системы от точек поворота до точки встречи термов $x = \infty$. В случае когда оптимальная энергия перехода E_0 удовлетворяет неравенству (2.3), выражение для сечения захвата можно с учетом (2.11) представить в виде

$$\sigma(T) \propto \exp \left\{ -\Phi_0(T) - \frac{2}{\hbar} \tau_1(E_0(T)) \varepsilon_L + \frac{2\varepsilon_L^{3/2}}{\hbar\omega \sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E_0(T))}} \varphi\left(\frac{z_0}{L}\right) \right\}, \quad (2.16)$$

где $\Phi_0(T)$ определяет температурную зависимость сечения захвата в объемном материале. Поправками $E_0(T)$ за счет размерного квантования можно пренебречь и использовать для определения температурной зависимости выражение, полученное для дефекта в объеме (см., например, [4]). Особенно простой вид формула (2.16) приобретает в случае

низких температур, когда $E_0 \ll \varepsilon_2$. В этом пределе величина $\tau_1(E_0)$ практически не зависит от температуры [9] и мы имеем

$$\sigma \approx \exp \left\{ -\Phi_0(0) - \frac{2\tau_1}{\hbar} \varepsilon_L + \frac{2\varepsilon_L^{3/2}}{\hbar\omega\sqrt{\beta\varepsilon_2}} \varphi \left(\frac{z_0}{L} \right) \right\}. \quad (2.17)$$

4. Вероятность безызлучательного перехода при высоких температурах

В этом разделе мы обсудим многофононные переходы в пределе высоких температур. В объемном материале оптимальная энергия перехода в колебательной системе дефекта при захвате электрона E_0 совпадает с высотой потенциального барьера ε_2 (энергия встречи термов U_1 и U_2) и температурная зависимость сечения захвата имеет место чисто активационный вид:

$$\sigma(T) \propto \exp \left(-\frac{\varepsilon_2}{kT} \right). \quad (3.1)$$

Для дефекта в квантовой яме точка встречи термов уходит на бесконечность, барьер становится бесконечно высоким и туннелирование имеет место при любой температуре. Для определения температурной зависимости вероятности перехода при высоких температурах нам необходимо знать вероятность туннелирования колебательной системы дефекта при больших энергиях колебаний $E \geq \varepsilon_2$, когда ширина барьера становится экспоненциально малой (рис. 2,б). В этом случае выражение (2.2) можно приближенно представить в виде

$$\text{Im} S_L(E, z_0) \approx \sqrt{\frac{M}{2}} \int_{a_{2L}(E)}^{\infty} dx \frac{\varepsilon_{bL}(x)}{\sqrt{U_2(x) + \varepsilon_L - E}}. \quad (3.2)$$

При малых энергиях связи $\varepsilon_{bL}(x)$, т.е. когда электронный уровень дефекта приближается к первому уровню размерного квантования ($\eta \rightarrow \pi/L$), можно получить приближенное аналитическое выражение для величины $\varepsilon_{bL}(x)$. Ограничиваясь в (2.7) вкладом полюсного члена при $\eta \rightarrow \pi/L$, имеем

$$\varepsilon_{bL}(x) \approx 2\varepsilon_L \exp \left\{ \frac{(\kappa(x) - \kappa_L)L}{2 \sin^2 \left(\frac{\pi z_0}{L} \right)} \right\}. \quad (3.3)$$

Заметим, что решение задачи при $z_0 = L/2$ приводит к отличию от (3.3) на множитель $1/\pi$ (см. Приложение I). Далее будет показано, что предэкспоненциальный множитель входит в итоговое выражение под знаком логарифма, так что это отклонение практически не меняет ответ. Сравнительно простые аналитические выражения для вероятностей перехода удастся получить при энергии размерного квантования ε_L , много меньшей энергии активации для дефекта в объеме $\varepsilon_L \ll \varepsilon_2$. В этом случае можно приближенно считать, что движение дефекта в состоянии 2 (без электрона) происходит под действием постоянной силы

$F = -(dU_2/dx)_{x=x_c}$, где x_0 — точка встречи термов в объемном материале ($U_2(x_c) = \varepsilon_2$). Подкоренное выражение в (3.2) можно при этом представить в виде

$$U_2(x) + \varepsilon_L - E \approx \varepsilon_{2L} + |F|(x - x_L) - E. \quad (3.4)$$

Здесь $\varepsilon_{2L} \equiv U_2(x_L) + \varepsilon_L$, x_L — конфигурация решетки, при которой уровень пересекает дно квантовой ямы ($\kappa(x_L) = \kappa_L$, рис. 2). В соответствии с неравенством $\varepsilon_L \ll \varepsilon_2$ мы предполагаем, что точка x_L находится достаточно близко от точки x_c , так что изменением силы можно пренебречь. Линейная аппроксимация (3.4) оправдана, так как подынтегральное выражение убывает на масштабе меньшим, чем характерный масштаб изменения силы F . Для точки поворота имеем

$$a_{2L}(E) \approx x_L + \frac{E - \varepsilon_{2L}}{|F|}. \quad (3.5)$$

Используя явный вид зависимости $\kappa(x)$ (1.10) имеем

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\beta M m \omega^2} (x_L - x) + \kappa_L. \quad (3.6)$$

В дальнейшем для простоты мы будем использовать параболическое приближение для адиабатического потенциала дефекта без электрона: $U_2(x) = M\omega^2 x^2/2$, так что

$$|F| = \sqrt{2M\omega^2\varepsilon_2}. \quad (3.7)$$

Подставляя (3.3), (3.4) в (3.2), получаем с использованием (3.5)–(3.7)

$$\text{Im} S_L(E, z_0) \approx 2 \sin\left(\frac{\pi z_0}{L}\right) \frac{\varepsilon_L}{\omega} \left(\frac{\varepsilon_L}{\beta \varepsilon_2}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{\pi\sqrt{\beta}}{4 \sin^2\left(\frac{\pi z_0}{L}\right)} \cdot \frac{E - \varepsilon_{2L}}{\sqrt{\varepsilon_2 \varepsilon_L}}\right\}. \quad (3.8)$$

В соответствии с (2.13) температурная зависимость сечения захвата определяется соотношением

$$\sigma(T) \propto \exp\{-\Phi_L[E_0(T)]\}, \quad (3.9)$$

где

$$\Phi_L(E) = \frac{E}{kT} + \frac{2}{\hbar} \text{Im} S_L(E, z_0), \quad (3.10)$$

а оптимальная энергия перехода определяется из условия минимума $\Phi_L(E)$: $\Phi'_L(E_0) = 0$. Используя (3.8), (3.10), получаем

$$E_0 = \varepsilon_{2L} + \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_L}{\beta}} \sin^2 \frac{\pi z_0}{L} \ln \left[\frac{\pi \beta^{1/4}}{\sin\left(\frac{\pi z_0}{L}\right)} \frac{kT}{\hbar \omega} \left(\frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_2}\right)^{3/4} \right]. \quad (3.11)$$

Выражение для оптимальной энергии перехода E_0 (3.11) справедливо в случае высоких температур, удовлетворяющих неравенству

$$kT > \frac{\hbar\omega}{\beta^{1/4}} \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_L} \right)^{3/4}, \quad (3.12)$$

когда логарифм в (3.11) положителен. Используя приближенное соотношение

$$\varepsilon_{2L} \approx \varepsilon_2 - |F|(x_c - x_L) \quad (3.13)$$

и уравнения (1.6), (1.8), (3.6), итоговое выражение для температурной зависимости сечения захвата можно представить в виде

$$\sigma(T) \propto \exp \left\{ -\frac{\varepsilon_a^*}{kT} \right\}, \quad (3.14)$$

где

$$\varepsilon_a^* = \varepsilon_2 - \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_L}{\beta}} \left\{ \sqrt{2\chi\left(\frac{z_0}{L}\right) - 4 \sin^2 \frac{\pi z_0}{L}} \cdot \left[1 + \ln \frac{\pi \beta^{1/4}}{\sin\left(\frac{\pi z_0}{L}\right)} \frac{kT}{\hbar\omega} \left(\frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_2}\right)^{3/4} \right] \right\}, \quad (3.15)$$

$$\chi(y) = -\frac{1}{2}[\psi(y) + \psi(1-y) + 2c],$$

где ψ — логарифмическая производная гамма-функции, $c \approx 0.577$ — постоянная Эйлера.

Отметим, что при приближении дефекта к стенке квантовой ямы ($z_0 \rightarrow 0$ или $z_0 \rightarrow L$) функция $\chi(y)$ стремится к бесконечности по закону $1/2y$ или $1/2(1-y)$ соответственно, в то время как член, пропорциональный $\sin^2(\pi z_0/L)$ и связанный с туннельными переходами дефекта, стремится к нулю. В результате эффективная энергия активации ε_a^* принимает вид

$$\varepsilon_a^* = \varepsilon_2 - \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_L}{2\beta}} \left(\frac{L}{z_0} \right), \quad z_0 \rightarrow 0, \quad (3.16)$$

который в рамках принятого нами приближения постоянной силы совпадает с результатом [4], полученным для дефекта вблизи одиночного интерфейса.

Из (3.14) видно, что эффективная энергия активации ε_a^* существенно зависит от положения дефекта в яме. Когда дефект приближается к границе ямы, энергия ε_a^* уменьшается по сравнению с объемным значением ε_2 . Если же дефект лежит посередине квантовой ямы, то энергия активации равна

$$\varepsilon_a^* = \varepsilon_2 + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_L \varepsilon_2}{\beta}} \left[2.04 + 4 \ln \beta^{1/4} \frac{kT}{\hbar\omega} \left(\frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_2} \right)^{3/4} \right], \quad (3.17)$$

т.е. превышает объемное значение ε_2 .

5. Заключение

Результаты вычислений, проведенные в п. 2 и 4, показывают, что вероятности многофононной эмиссии и захвата неравновесных носителей дефектами в квантовой яме существенно зависят от положения дефекта в яме. Поэтому наблюдаемые значения времени жизни неравновесных носителей должны быть весьма чувствительны к распределению дефектов по толщине ямы. В связи с этим большой интерес представляет исследование квантовых ям с δ -легирование глубокими центрами.

К настоящему времени получено большое количество экспериментальных данных, свидетельствующих о важной роли многофононных безызлучательных процессов в квантово-размерных структурах [10-12]. Так, например, в [12] наблюдалась температурная зависимость времени жизни неравновесных носителей, типичная для многофононных переходов (активационная зависимость при высоких температурах и насыщение при понижении температуры). Наблюдалась также зависимость безызлучательного времени жизни от толщины ямы. Однако отсутствие информации о типе глубоких центров и их распределении существенно затрудняет сравнение теории с экспериментом.

При сравнении теории с экспериментом следует учесть также возможность захвата на дефекты, расположенные вне квантовой ямы, путем выброса носителей из ямы или прямого туннельного перехода на такие дефекты. Переходы, связанные с выбросом носителей из ямы, особенно существенны для узких квантовых ям, для которых энергия активации выброса электрона может оказаться меньше энергии активации для захвата электрона на дефект в яме.

Авторы благодарны К.В. Халипову за помощь в подготовке рукописи. Данная работа была частично поддержана грантом R6D000 Международного научного фонда.

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Энергия связи электрона на дефекте в середине квантовой ямы

В Приложении I мы приведем асимптотические выражения для зависимости энергии связи электрона на дефекте, расположенном в середине квантовой ямы, от параметра κ , характеризующего короткодействующий потенциал дефекта и взаимодействие носителя с локальными колебаниями. При $z_0 = L/2$ интегралы, входящие в (1.6) и (1.7), легко вычисляются. В результате имеем

$$\alpha = \frac{2}{L} \operatorname{Arch} \frac{1}{2} e^{\kappa L/2} \quad \kappa > 0, \quad (\text{П.И, 1a})$$

$$\eta = \frac{2}{L} \operatorname{Arccos} \frac{1}{2} e^{\kappa L/2} \quad \kappa < 0. \quad (\text{П.И, 1б})$$

Выражение (П.И,1a) впервые было получено в [5].

Приведем также асимптотическое выражение для энергии связи носителя на дефекте при $\kappa \rightarrow -\infty$, т.е. когда уровень приближен к первой подзоне размерного квантования. Из (П.1,16) имеем

$$\eta = \frac{1}{L} \left(\pi - e^{\kappa L/2} \right), \quad \kappa \rightarrow -\infty. \quad (\text{П.1,2})$$

Энергия связи электрона определяется соотношением

$$\varepsilon_{bL} = \varepsilon_L - \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi}{mL^2} e^{\kappa L/2} = \frac{2}{\pi} \varepsilon_L e^{\kappa L/2}. \quad (\text{П.1,3})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ II

Вывод соотношения (2.9)

Выражение для разности поправок к действию δS_2 и δS_3 удобно преобразовать к интегрированию по переменной κ с помощью соотношений (1.7), (1.10). После элементарных преобразований имеем

$$\begin{aligned} \delta S_3 - \delta S_2 = & \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \frac{1}{\omega \sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E)}} \left\{ \int_{-\infty}^{\kappa L} \left[\left(\frac{\pi}{L} \right)^2 - \eta^2(\kappa) \right] d\kappa - \right. \\ & \left. - \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \kappa_L - \frac{\kappa_L^3}{3} - \int_0^{\infty} [\kappa^2 - \alpha^2(\kappa)] d\kappa \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.11,1})$$

Переходя в первом интеграле к интегрированию по η с помощью формулы (1.7), а во втором интеграле к интегрированию по α с помощью соотношения (1.6), получим

$$\begin{aligned} \delta S_3 - \delta S_2 = & \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \frac{1}{\omega \sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E)}} \left\{ - \int_0^{\pi/L} \left[\left(\frac{\pi}{L} \right)^2 - \eta^2 \right] \frac{d\kappa}{d\eta} d\eta - \right. \\ & \left. - \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \kappa_L - \frac{\kappa_L^3}{3} - \int_0^{\infty} (I^2 + 2\alpha I) \left(1 + \frac{dI}{d\alpha} \right) d\alpha \right\}, \end{aligned} \quad (\text{П.11,2})$$

где

$$I(\alpha) = \int_{\alpha}^{\infty} dt \frac{\text{ch}(L - 2z_0)t - e^{-t}}{\text{sh } t} \quad (\text{П.11,3})$$

— интеграл, входящий в уравнение (1.6). Используя соотношения

$$\int_0^{\infty} (I^2 + 2\alpha I) \frac{dI}{d\alpha} d\alpha = -\frac{I^3(0)}{3} - \int_0^{\infty} I^2 d\alpha \quad (\text{П.11,4})$$

$$\kappa_L = I(0) = - \int_0^{\infty} \frac{dI}{d\alpha} d\alpha, \quad (\text{П.И, 5})$$

приходим к следующему выражению:

$$\delta S_3 - \delta S_2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \frac{1}{\omega \sqrt{\beta(\varepsilon_2 - E)}} \left\{ - \int_0^{\pi/L} \left[\left(\frac{\pi}{L} \right)^2 - \eta^2 \right] \frac{d\kappa}{d\eta} d\eta + \right. \\ \left. + \int_0^{\infty} \left[\left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \frac{dI}{d\alpha} - 2\alpha I \right] d\alpha \right\}. \quad (\text{П.И, 6})$$

Интегрируя по частям второе слагаемое в интеграле по α , используя явные выражения для производных $dI/d\alpha$ и $d\kappa/d\eta$, которые можно получить дифференцируя соотношения (П.И,3) и (1.7), и переходя к безразмерным переменным интегрирования $\frac{L}{\pi}\alpha$, $\frac{L}{\pi}\eta$, приходим к соотношению (2.9).

Список литературы

- [1] C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan. In: *Mater. Sci. Forum*, **143-147**, 1463 (1994).
- [2] S.L. Feng, J.C. Bourgoin, A. Manger. *Phys. Rev. B*, **39**, 13252 (1989).
- [3] А.А. Пахомов, И.Н. Ясевич. *ФТП*, **27**, 482 (1992).
- [4] V.N. Abakumov, V.I. Perel, I.N. Yassievich. In: *Nonradiative recombination in semiconductors* (Amsterdam, 1991) P. 314.
- [5] В.Д. Кревчик, Э.З. Имамов. *ФТП*, **17**, 1235 (1983).
- [6] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. *Методы потенциалов нулевого радиуса в атомной физике* (Л., ЛГУ, 1975).
- [7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука 1989).
- [8] В. Карпус. Автореф. канд. дис. (Л., ФТИ, 1986).
- [9] В. Карпус, В.И. Перель. *ЖЭТФ*, **91**, 2319 (1986).
- [10] T. Matsusue, H. Sakaki. *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 1429 (1987).
- [11] M. Guriolo, A. Vinattieri, M. Colocci, C. Deparis, J. Massies, G. Neu, A. Bosacchi, S. Franchi. *Phys. Rev. B*, **44**, 3115 (1991).
- [12] J.P. Bergman, P.O. Holtz, B. Monemar, M. Sundaram, J.L. Merz, A.C. Gossard. In: *Mater. Sci. Forum*, **143-147**, 629 (1994).

Редактор В.В. Чалдышев