

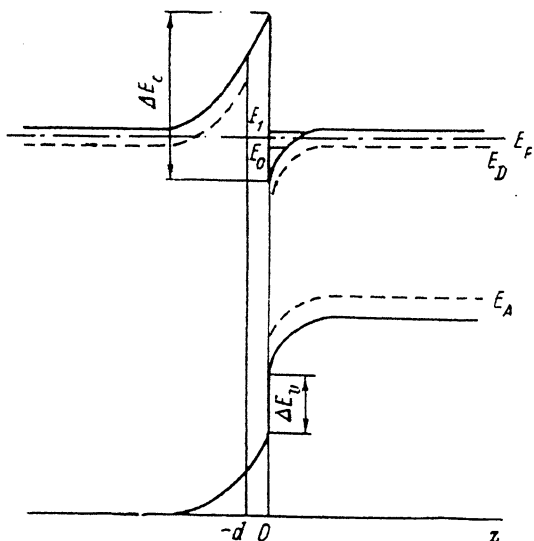
## ДВУМЕРНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ В ИЗОТИПНОМ ГЕТЕРОПЕРЕХОДЕ

Мезрин О. А., Трошков С. И., Шик А. Я.

Построена теория межзонной рекомбинации электронов с тяжелыми и легкими дырками в квантовой яме изотипного гетероперехода. Расчет уровней и волновых функций электронов в потенциальной яме такой гетероструктуры является существенно нелинейной задачей, так как именно электронная плотность заряда играет существенную роль в формировании квантовой потенциальной ямы. Поэтому расчет уровней энергии в ней проведен самосогласованным методом путем совместного численного решения уравнений Шредингера и Пуассона с учетом корреляционных поправок к потенциальной энергии. Рекомбинация электронов и дырок происходит на расстояниях от потенциальной ямы порядка длины волны дырки, поэтому становится существенным учет квантового поведения дырок вблизи нее. В статье вычислены концентрации и волновые функции тяжелых и легких дырок с помощью уравнения Шредингера и рассчитан спектр люминесценции с энергией излучаемого кванта, меньшей ширины запрещенной зоны узкозонного полупроводника.

Показано, что такой спектр имеет максимум. Его длинноволновый спад обусловлен туннелированием электронов и дырок, а коротковолновый определяется температурой.

*Введение.* В последние годы резко возрос интерес исследователей к так называемым квантовым гетероструктурам, содержащим узкие потенциальные ямы, в которых важную роль играет размерное квантование энергии носителей.



Простейшей такой структурой является одиночный резкий гетеропереход (ГП) (рис. 1), где роль квантовой ямы играет изгиб зон в узкозонном материале вблизи границы раздела. Расчет характеристик подобной ямы, в частности энергий уровней, представляет собой самосогласованную задачу, требующую совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Эта задача решалась

Рис. 1. Зонная диаграмма изотипного  $n-n$ -гетероперехода.

$d$  — толщина широкозонного спейсера;  $E_0$  и  $E_1$  — энергии уровней электронов в квантовой яме.

для анизотипного ГП [1-3], где квантовая яма представляет собой инверсионный слой. Данная работа посвящена расчету квантованного электронного газа в слое обогащения изотипных  $n-n$ -гетероструктур.

Задача о слое обогащения более сложна, чем о слое инверсии. Действительно, в последнем случае ход потенциала определяется в основном зарядом

ионов в слое обеднения и имеет известный квадратичный вид. Заряд электронов инверсионного слоя существен лишь у самой гетерограницы и определяет по существу лишь приповерхностное поле. Это заметно упрощает расчеты, позволяя, в частности, при расчете квантовых уровней в [1-3] использовать приближение треугольной потенциальной ямы. В слое же обогащения объемный заряд определяется свободными электронами и заранее (без учета самосогласования) не может быть найден.

Проблема самосогласованного расчета слоя обогащения рассматривалась в [4] в применении к изгибу зон у свободной поверхности полупроводника. Было показано, что в экранирование внешнего поля одинаково важный вклад вносят как связанные состояния в яме, так и электроны с непрерывным спектром,двигающиеся по всему объему полупроводника. При этом концентрация электронов не описывается классической формулой

$$n(z) = N_c F_{1/2} \left( \frac{\zeta_n - U(z)}{k_B T} \right)$$

[ $N_c = 2(m_n k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}$ ,  $\zeta_n$  — квазиуровень Ферми электронов,  $U(z)$  — потенциальная энергия,  $F_j$  — интеграл Ферми], а требует более строгого вычисления. Далее проведен самосогласованный расчет хода потенциала и квантовых уровней в изотипном ГП, в отличие от [4] не предполагающий малости изгиба зон и некоторых других допущений. Рассмотрен ГП как в состоянии равновесия, так и при стационарной подсветке излучением из области собственного поглощения узкозонного материала. В последнем случае вычислен также спектр люминесценции ГП.

## 1. Энергетический спектр и волновые функции электронов и дырок

Рассмотрим изображенный на рис. 1  $n-n$ -гетеропереход. Волновые функции связанных электронов в яме  $\psi(\mathbf{r}) = \Phi_i(z) \exp[i(k_x x + k_y y)]$  и уровни энергии  $\varepsilon_i < 0$  (отсчитанные от края зоны проводимости при  $z \rightarrow \infty$ ) определяются из решения уравнения Шредингера при  $z > 0$

$$\left[ -\frac{d^2}{dz^2} + U(z) - \varepsilon_i \right] \Phi_i(z) = 0, \quad \varepsilon_i < 0. \quad (1)$$

Здесь и далее мы будем пользоваться безразмерными единицами, измеряя энергию и потенциал в единицах  $k_B T$ , а длину — в единицах  $\hbar / \sqrt{2m_{n1} k_B T}$ . Граничные условия для (1) имеют вид

$$\Phi_i(z \rightarrow \infty) = 0, \quad (2)$$

$$\left[ \frac{1}{\Phi_i(z)} \frac{d\Phi_i(z)}{dz} \right]_{z=0} = \sqrt{\frac{m_{n1}}{m_{n2}}} \sqrt{\Delta\varepsilon_c - |U(0)| - \varepsilon_i}. \quad (3)$$

Выражение (3) есть условие сшивки с волновой функцией при  $z < 0$ , экспоненциально затухающей в глубь барьера. При различии эффективных масс это условие сводится к непрерывности  $\Phi_i$  и  $\frac{1}{m} \frac{d\Phi_i}{dz}$  на границе (см., например, [5]).

Большими буквами будем отмечать размерные энергии и потенциал, малыми — безразмерные в единицах теплового потенциала  $k_B T$ ;  $\Delta E_c$  и  $\Delta E_v$  — разрывы зоны проводимости и валентной зоны на гетерогранице;  $E_A$  и  $E_D$  — энергии акцепторов и доноров в узкозонном полупроводнике;  $N_c$ ,  $m_{n1}$  и  $N_v$ ,  $m_p$  — соответственно плотности состояний и эффективные массы в зоне проводимости и валентной зоне узкозонного полупроводника;  $m_{n2}$  — эффективная масса в зоне проводимости широкозонного полупроводника.

Как будет показано в разделе 2, для решения задач, поставленных в данной работе, знания электронных волновых функций непрерывного спектра с  $\varepsilon > 0$  не требуется и их вид обсуждаться нами не будет. Что касается волновых функ-

дый дырок, отвечающих энергиям  $\epsilon_p$ , отсчитываемым вниз от края валентной зоны при  $z \rightarrow \infty$ , то для их определения служит уравнение Шредингера

$$\left[ -\frac{m_{n1}}{m_p} \frac{d^2}{dz^2} - \xi(z) - \epsilon_p \right] \Phi_p(z) = 0. \quad (4)$$

Подчеркнем, что входящий сюда потенциал  $\xi(z)$ , вообще говоря, отличается от потенциала  $U(z)$ , действующего на электроны. Это связано с эффектами обмена и корреляции и будет обсуждаться далее.

## 2. Уравнение Пуассона

Для определения хода потенциальной энергии в ГП  $\xi(z)$  необходимо решить уравнение Пуассона. Будем считать, что в узкозонном полупроводнике имеются донорные примеси с концентрацией  $N_D$  и энергией связи  $\epsilon_D$  и акцепторы с концентрацией  $N_A < N_D$  и энергией связи  $\epsilon_A$ . Если описывать электроны в зоне проводимости и на донорах квазиуровнем Ферми  $\zeta_n$ , а дырки в валентной зоне и на акцепторах — квазиуровнем  $\zeta_p$  ( $\zeta_n$  и  $\zeta_p$  отсчитываются от краев соответствующих зон), то в области  $z > 0$  уравнение Пуассона имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \xi}{dz^2} = & x^2 \left\{ \frac{1}{\frac{1}{2} \exp(\zeta_n + \epsilon_D - \xi) + 1} + \frac{N_D}{N_p} F_{1/2}(\zeta_p + \xi) - \right. \\ & - \frac{N_A}{N_p} \frac{1}{\frac{1}{2} \exp(\zeta_p + \epsilon_A + \xi) + 1} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{N_c}{N_D} \int_{\sqrt{|\xi|}}^{\infty} \ln [1 + \exp(\zeta_n - \xi - y^2)] dy - \\ & \left. - \frac{1}{N_D} \sum_i n_{si} |\Phi_i(z)|^2 \right\}, \quad n_{si} = \frac{m_0 k_B T}{\pi \hbar^2} F_0(\zeta_n - \epsilon_i), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $x^2 = 2\pi e^2 \hbar^2 N_D / K_1 m_{n1} (k_B T)^2$ ,  $K_1$  — диэлектрическая проницаемость узкозонного полупроводника,  $N_p$  — эффективная плотность состояний в валентной зоне. В правой части (5) первые три члена описывают заряд донорных уровней, свободных дырок<sup>1</sup> и акцепторных уровней. Четвертый член описывает вклад электронов континуума с положительными энергиями, впервые вычисленный в [4]. Наконец, пятый член соответствует связанным электронам с  $\epsilon_i < 0$ .

Для численного решения (5) необходимо учесть возможность перехода от квантового характера поведения электронов к классическому. Такая процедура предложена в [6] и состоит во введении характерной длины  $l$  (по порядку величины равной длине свободного пробега); предполагается, что на расстояниях  $x < l$  от гетерограницы электроны практически не рассеиваются и формула (5) сохраняет справедливость, а при  $x > l$  электроны можно рассматривать классически, заменяя два последних члена (5) на  $\frac{N_c}{N_D} F_{1/2}(\zeta_n - \xi)$ . Длина  $l$  является дополнительным параметром задачи, но расчеты показывают, что за ее пределами, как правило,  $|\xi| < 1$ , и решение всей системы уравнений практически не чувствительно к выбору  $l$ .

При  $z=0$  решение для  $\xi(z)$  должно сшиваться с решением в области широкозонного полупроводника, в котором имеет место слой обеднения. Для такого слоя в работах [7, 8] при произвольных параметрах донорных и акцепторных центров получен первый интеграл уравнения Пуассона, связывающий между собой значения  $\xi$  и  $d\xi/dz$  в каждой точке слоя. Если широкозонный полупроводник легирован однородно, то эта связь может использоваться в качестве граничного условия при  $z=0$  для уравнения (5). Однако в гетероструктурах с модулированным легированием для повышения подвижности двумерных электронов зачастую оставляют нелегированным тонкий слой широкозонного полупроводника («спейсер») толщиной  $d$  вблизи границы. В нем концентрация примесей

<sup>1</sup> Законность использования написанного классического выражения для плотности заряда дырок будет обсуждаться в разделе 3.

пренебрежимо мала, но плотность заряда может иметь заметную величину за счет хвостов волновых функций  $\Phi_i$ , туннельно проникающих в широкозонный полупроводник и затухающих там по закону  $\Phi_i(z < 0) = \Phi_i(0) \times \exp \left[ \sqrt{\frac{m_{n2}}{m_{n1}} (\Delta \epsilon_c - |\xi(0)| - \epsilon_i) z} \right]$ . Последовательное интегрирование соответствующего уравнения Пуассона дает

$$\frac{d\xi}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{d\xi}{dz} \Big|_{z=-d} - \frac{2\sqrt{2} \pi e^2 m_{n1}}{\sqrt{k_B T m_{n1} h}} \sum_i \frac{n_{s1} |\Phi_i(0)|^2}{\sqrt{\Delta \epsilon_c - |\xi(0)| - \epsilon_i}}, \quad (6)$$

$$\xi(0) = \xi(-d) + d \frac{d\xi}{dz} \Big|_{z=-d} - \frac{\sqrt{2} \pi e^2 (m_{n1})^{3/2}}{m_{n2} h \sqrt{k_B T}} \sum_i \frac{n_{s1} |\Phi_i(0)|^2}{\Delta \epsilon_c - |\xi(0)| - \epsilon_i}, \quad (7)$$

$\Delta \epsilon_c = \Delta E_c / k_B T$  — безразмерный разрыв зоны проводимости на гетерогранице. Здесь  $\xi(-d)$  и  $d\xi/dz|_{z=-d}$  связаны уже упомянутыми формулами [7, 8] и с учетом этого выражения (6) и (7) дают связь между  $\xi(0)$  и  $d\xi/dz|_{z=0}$ , играющую роль граничного условия к (5) в гетероструктурах со спейсером.

Решение уравнения Пуассона (5) дает распределение электростатического потенциала в области узкозонного полупроводника. Но непосредственно подставлять полученное значение  $\xi(z)$  в качестве потенциальной энергии в уравнение Шредингера для электронов (1) было бы неточным, поскольку при этом игнорировались бы силы изображения и эффекты корреляции и обмена. Однако в реальных гетероструктурах (например, GaAs—Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As) различие диэлектрических проницаемостей компонент столь мало, что силы изображения несущественны. Что же касается корреляционных эффектов, то мы учтем их в приближении метода локальной плотности. При этом потенциал, действующий на электроны,  $U(z) = \xi(z) + u_s(n(z)) - u_s(n(\infty))$ , где  $n(z)$  — локальная плотность электронов, описываемая двумя последними членами в правой части (5), а  $u_s$  вычисляется по аппроксимационной формуле [9]

$$u_s(n) = - \frac{16.625}{K_1 (k_B T)_{\text{эВ}} r_s(n)} [1 + 0.0545 r_s(n) \ln(1 + 11.4/r_s(n))], \quad (8)$$

$$r_s(n) = 1.1727 \cdot 10^8 / n^{1/2}, \quad n \sim \text{см}^{-3}.$$

### 3. Энергетические уровни двумерных электронов

Написанные выше уравнения (1), (5), (8) с граничными условиями (2), (3), (6), (7) представляют собой самосогласованную систему, решение которой позволяет определить потенциальный профиль изогипного ГП  $\xi(z)$  и энергетические уровни двумерных электронов в нем  $\epsilon_i$ . Наличие в уравнениях двух различных квазиуровней химического потенциала для электронов и дырок  $\zeta_n$  и  $\zeta_p$  позволяет решать задачу не только в равновесных, но и в неравновесных условиях (например, при воздействии света из области собственного поглощения узкозонного материала). Однако при сопоставлении с экспериментами необходимо знать, как  $\zeta_n$  и  $\zeta_p$  связаны с непосредственно измеряемой величиной — концентрацией электронов (в том числе и неравновесных) в зоне проводимости узкозонного полупроводника вдали от ГП. Эта связь определяется обычной формулой для концентрации

$$n_\infty = \frac{1}{4\pi^{3/2}} F_{1/2}(\zeta_n) \quad (9)$$

и уравнением нейтральности

$$4\pi^{3/2} n_\infty + \frac{N_A}{N_c} \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\zeta_p + \epsilon_A} + 1} = \frac{N_p}{N_c} F_{1/2}(\zeta_p) + \frac{N_p}{N_c} \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\zeta_n + \epsilon_p} + 1}. \quad (10)$$

Всюду в дальнейшем заданной будет считаться величина  $n_\infty$ , а входящие в основные формулы параметры  $\zeta_n$  и  $\zeta_p$  будут определяться из (9), (10).

Самосогласованное решение системы уравнений (1), (5), (8) проводилось численно методом, описанным в [6], для ГП  $n\text{-GaAs}-n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с  $\Delta E_c = 0.25$  эВ при температуре 4.2 К. Характерная длина  $l$  выбиралась равной 1000 Å.

На рис. 2 показаны результаты расчетов для  $n_\infty = 10^{14}$  см $^{-3}$ . При выбранных значениях параметров в приграничной квантовой яме имеется одно связанное состояние. Если уменьшать  $n_\infty$ , то в яме появляется второй мелкий уровень (сходный результат был получен в свое время в [4]). Например, при  $n_\infty = 5.5 \cdot 10^{12}$  см $^{-3}$  уровней уже два с энергиями связи  $-13.05$  и  $-0.66$  мэВ (рис. 3) ( $\epsilon_0 = E_0/k_B T$ ,  $\epsilon_1 = E_1/k_B T$ ).

Изображенный на рис. 2, 3 ход потенциала отвечает действующей на электроны величине  $u(z)$ . Что же касается величины  $\xi(z)$ , действующей на дырки, то она

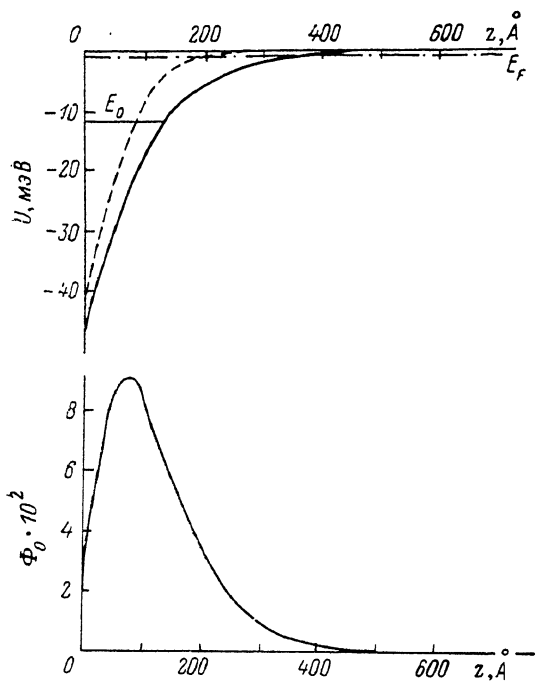


Рис. 2. Распределение потенциала  $U(z)$  и волновой функции  $\Phi_0(z)$  электронов, локализованных в квантовой яме ГП  $n\text{-GaAs}-n\text{-AlGaAs}$ , при фотовозбуждении электронов в GaAs.

Сплошная кривая — распределение эффективного потенциала [с учетом корреляционной добавки  $U_0(z)$ ], штриховая — распределения электростатического потенциала  $\xi(z)k_B T$ . Прямая  $E_0$  — положение единственного уровня в яме. Параметры расчета: концентрация фотогенерированных электронов  $n_\infty$  при  $z \rightarrow \infty$  равна  $10^{14}$  см $^{-3}$ ;  $T = 4.2$  К,  $\Delta E_c = 0.3$  эВ,  $\Delta E_v = 0.2$  эВ,  $m_{n1} = 0.067m_0$ ,  $m_{n2} = 0.1m_0$ ,  $N_{D1} = 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $N_A = 2 \cdot 10^{14}$  см $^{-3}$ ,  $N_{D2} = 3 \cdot 10^{16}$  см $^{-3}$  (концентрация доноров в AlGaAs),  $E_A = 26.7$  мэВ,  $E_D = 3.75$  мэВ,  $K_1 = 13.1$ ,  $K_2 = 11.9$  (диэлектрическая проницаемость AlGaAs).

существенно отличается от  $U(z)$  и показана на рисунках штрихами. Если же не учитывать корреляционных эффектов и подставлять в уравнение Шредингера (1) потенциал  $\xi(z)$ , то расчеты показывают, что процедура самосогласования приведет к тому, что вид его будет близок к полученному более строго  $U(z)$ . При этом волновые функции и энергии электронов получаются близкими к истинным, но волновые функции дырок существенно искажаются.

Поскольку вычисление спектров люминесценции, которое также является целью данной работы, требует знания точных волновых функций не только электронов, но и дырок, для нахождения последних решалось уравнение Шредингера (4), где в качестве  $\xi(z)$  брался уже вычисленный ранее самосогласованный потенциал. С помощью полученных волновых функций определялось точное распределение дырочной плотности, показанное на рис. 4 сплошными линиями. Там же штрихами представлена дырочная плотность, вычисленная для того же  $\xi(z)$  по классической формуле  $(N_p/N_D) F_{1/2}(\zeta_p + \xi)$ . Видно, что различие между точным и классическим решением становится заметным лишь там, где дырочная плотность заметно меньше электронной. Это оправдывает законность использования в уравнении Пуассона (5) классической формулы для дырочной плотности вместо точного решения, которое потребовало бы включения в самосогласованную процедуру уравнения Шредингера (4) и еще более усложнило бы расчеты.

Таким образом, можно высказать следующую рекомендацию. Если целью расчетов является определение энергий уровней и волновых функций лишь для основных носителей (электронов), то можно рассчитывать дырочную плотность по классической формуле и пренебрегать корреляционными эффектами.

Если же требуется расчет эффектов, определяемых неосновными носителями (например, люминесценции), то знание точного вида дырочных волновых функций является необходимым.

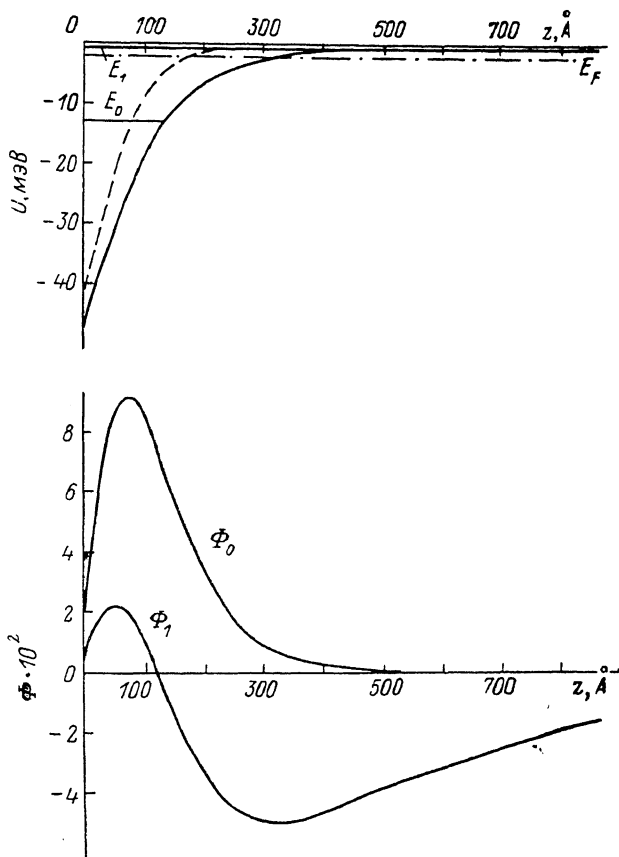


Рис. 3. Распределение потенциала  $U(z)$  и волновых функций  $\Phi_i(z)$  электронов, локализованных в квантовой яме ГП  $n\text{-GaAs}-n\text{-AlGaAs}$ , при фотовозбуждении электронов в GaAs.

Сплошная кривая — распределение эффективного потенциала [с учетом корреляционной добавки  $U_e(z)$ ], штриховая — распределение электростатического потенциала  $\xi(z)k_B T$ , прямые  $E_0$  и  $E_1$  — положения нулевого и первого уровней в яме. Параметры расчета: концентрация  $n_{\infty} = 5.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ; остальные параметры те же, что и на рис. 2.

#### 4. Спектр межзонной люминесценции

Знание потенциального профиля ГП  $\xi(z)$  и волновых функций  $\Phi_i$  и  $\Phi_p$  позволяет вычислить спектр межзонной люминесценции ГП. Данный вопрос особенно интересен в свете сообщений [10–13] о наблюдении «интерфейсной люминесценции». Это — полоса в спектре люминесценции, обусловленная наличием гетерограницы, отвечающая энергиям кванта  $\hbar\omega < E_g$  ( $E_g$  — ширина запрещенной зоны в узкозонном материале) и с ростом интенсивности фотовозбуждения сдвигающаяся в сторону более коротких волн. Для описания основных закономерностей такой люминесценции в анизотипных ГП может быть, по-видимому, использована теория туннельной излучательной рекомбинации в  $p-n$ -переходах [14–16]. Для изотипных же ГП, где интерфейсная люминесценция также наблюдается [10, 11, 13], ее адекватное теоретическое описание в литературе отсутствовало. Качественно оно было дано одним из авторов [12]. Далее приводится достаточно полное количественное описание.

В интересующей нас области спектра  $\hbar\omega < E_g$  межзонная люминесценция определяется туннельными хвостами волновых функций связанных электронов

$\Phi_i(z)^2$  и дырок  $\Phi_p(z)$ . Если говорить более строго, то  $\Phi_p$  представляет собой сумму волновых функций для тяжелых и легких дырок. Поэтому спектральная зависимость люминесценции равна

$$F(\omega) = F_h(\omega) + F_l(\omega),$$

$$F_h(\omega) \sim \int_0^\infty d\varepsilon_h \int_0^\infty dk_{\parallel} k_{\parallel}^2 \sum_i \int_{-\infty}^\infty dz \Phi_i^2(z) \Phi_h^2(z) \delta\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{k_B T} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_h k_B T} - \varepsilon_i - \varepsilon_h\right) \times$$

$$\times f_n\left(\varepsilon_i + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{n1} k_B T}\right) f_p\left(\varepsilon_p + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_h k_B T}\right) = \sum_i \int_0^\infty d\varepsilon_h \int_{-\infty}^\infty dz \Phi_i^2(z) \Phi_h^2(z) \times$$

$$\sqrt{\frac{\hbar\omega}{k_B T} - \varepsilon_i - \varepsilon_h} f_n\left(\varepsilon_i + \frac{M_h}{m_{n1}} \left[\frac{\hbar\omega}{k_B T} - \varepsilon_i - \varepsilon_h\right]\right) \times$$

$$\times f_p\left(\varepsilon_h + \frac{M_h}{m_h} \left[\frac{\hbar\omega}{k_B T} - \varepsilon_i - \varepsilon_h\right]\right), \quad (11)$$

$M_h = \left(\frac{1}{m_{n1}} + \frac{1}{m_h}\right)^{-1}$  — приведенная масса,  $k_{\parallel}$  — волновой вектор, параллельный гетерогранице,  $f_n$  и  $f_p$  — фермиевские функции с квазиуровнями  $\zeta_n$  и  $\zeta_p$ . Выра-

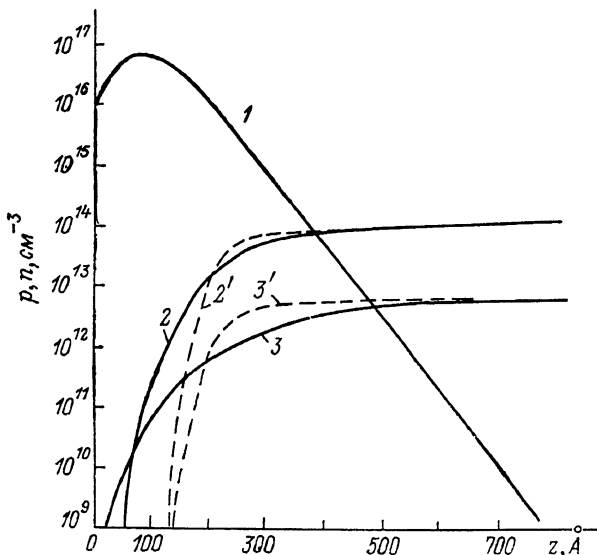


Рис. 4. Распределение концентрации электронов и дырок в изотипном ГП  $n$ -GaAs— $p$ -AlGaAs.

Параметры расчета те же, что и на рис. 2. Распределение концентрации: 1 — электронов, 2 — тяжелых, 3 — легких дырок, рассчитанных с помощью уравнения Шредингера (4); 2', 3' — те же величины, рассчитанные по классическим формулам.

жение для  $F_l(\omega)$  дается той же формулой (11) с заменой значка  $h$  на  $l$ . Таким образом, если самосогласованная система (1), (5), (8) нами решена и определены функции  $\xi(z)$ ,  $\Phi_i(z)$  и энергии  $\varepsilon_i$ , то, определяя далее волновые функции  $\Phi_h$ ,  $\Phi_l$  из уравнения (4) и подставляя  $\Phi_i$ ,  $\Phi_h$ ,  $\Phi_l$  и  $\varepsilon_i$  в формулы вида (11), можно вычислить интересующий нас спектр люминесценции. Для его численного расчета была использована следующая процедура. Были вычислены волновые функции  $\Phi_h$ ,  $\Phi_l$  непрерывного спектра тяжелых и легких дырок из уравнения (4) с соответствующими эффективными массами. Шаг по энергии  $\varepsilon_h$  (и  $\varepsilon_l$ ) непрерывного спектра составлял 0.01. После этого интеграл по этим энергиям в выражениях (11) заменялся на сумму. Полное число функций непрерывного

<sup>2</sup> Состояния электронов континуума дают обычную краевую полосу с  $\hbar\omega > E_g$ .

спектра было равно 1000. Далее вычислялась спектральная зависимость люминесценции по формулам вида (11) для тяжелых и легких дырок с учетом плотности состояний в этих зонах. Более подробно методика расчета этих функций с учетом спейсера будет описана в другой публикации.

Обсудим вначале некоторые качественные закономерности спектра люминесценции. Пусть в обогащающем изгибе зон имеется лишь одно связанное состояние с энергией  $E_c$ . Очевидно, что весь спектр люминесценции (если не учитывать акситонных эффектов и рекомбинации на примесях) лежит в области  $\hbar\omega > E_g - |E_c|$ . Длинноволновое крыло линии определяется рекомбинацией носителей

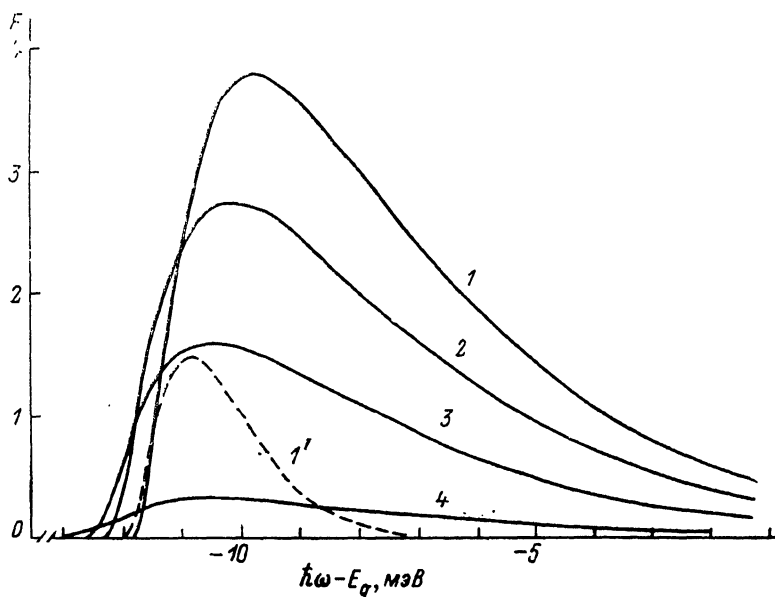


Рис. 5. Спектры фотолюминесценции изотипного ГП  $n$ -GaAs- $n$ -AlGaAs (в отн. ед.).

Параметры расчета те же, что и на рис. 2. 1-4 — спектры люминесценции, обусловленные рекомбинацией  $2D$ -электронов с тяжелыми дырками, 1' — с легкими дырками. Концентрация фотовозбужденных электронов  $n_\infty$ ,  $\text{см}^{-3}$ : 1, 1' —  $10^{14}$ , 2 —  $3 \cdot 10^{15}$ , 3 —  $10^{16}$ , 4 —  $5.5 \cdot 10^{16}$ . Спектры фотолюминесценции 1', 1-4 нормированы на концентрацию и плотность состояний соответствующих дырочных подзон, т. е. 1-4 умножены соответственно на 1, 3.3, 10, 17.8, а 1' — на  $(m_h/m_l)^{3/2} = 14.59$ .

с  $k_{||} \approx 0$ . Для фиксированного  $\hbar\omega$  это электроны с уровня  $E_0$  и дырки с энергией  $E_g - |E_0| - \hbar\omega$   

$$\epsilon_p = \frac{E_g - |E_0| - \hbar\omega}{k_B T}$$
 Если бы дырки не туннелировали, то длинноволновый спад люминесценции имел бы вид  $\Phi_0^2(z_0)$ , где  $z_0$  — корень уравнения  $\xi(z_0) = \frac{E_g - |E_0| - \hbar\omega}{k_B T}$ . Учет туннелирования дырок делает этот спад несколько более медленным. Коротковолновый спад линии определяется температурой, и полоса люминесценции имеет, как уже отмечалось в [12], несимметричную форму.

Очевидно, что с ростом интенсивности светового возбуждения изгиб зон в узкозонном полупроводнике, а следовательно, и энергия связи уровня  $|E_0|$  будут уменьшаться и полоса люминесценции — сдвигаться в коротковолновую сторону. Этот эффект также может быть получен из приведенных выше формул, поскольку величина  $n_\infty$ , определяющая квазиуровни  $\zeta_n$ ,  $\zeta_p$ , пропорциональна интенсивности возбуждения. Так как фотоэдс (т. е. изменение изгиба зон) в слоях обогащения зачастую пропорциональна логарифму интенсивности (см.; например, [17], стр. 158), сдвиг полосы люминесценции должен носить приблизительно логарифмический характер, в согласии с данными экспериментов [10, 18].

Результаты численного расчета спектров люминесценции по формуле (11) показаны на рис. 5. Приведенные спектры обусловлены в основном рекомбина-



цией электронов квантовых уровней с тяжелыми дырками. Поэтому вклад легких дырок в люминесценцию приведен только для одного уровня засветки. Малая эффективность рекомбинации  $2D$ -электронов с легкими дырками обусловлена особенностями поведения легких дырок вблизи потенциального барьера. Под потенциальным барьером полученной выше формы туннельная плотность электронов достаточно велика, и для рекомбинации достаточно встречного туннелирования дырок на весьма небольшое расстояние. Вероятность такого туннелирования для тяжелых дырок особенно велика, так как дырки начинают «чувствовать» потенциальный барьер на расстояниях порядка длины волны. Длина же волны тяжелых дырок существенно меньше, чем легких, что и обуславливает более раннее начало спада концентрации легких дырок при их приближении к барьеру, т. е. вблизи точки поворота (рис. 4), где происходит основная рекомбинация.

На рисунке также отчетливо виден упомянутый выше сдвиг линии люминесценции с ростом уровня возбуждения.

#### Список литературы

- [1] Ando T. // J. Phys. Soc. Japan. 1982. V. 51. N 12. P. 3893—3899.
- [2] Stern F., Das Sarma S. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 2. P. 840—848.
- [3] Кальфа А. А. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 6. С. 1025—1028.
- [4] Константинов О. В., Шик А. Я. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. В. 5. С. 1662—1674.
- [5] Wu C. M., Yang E. S. // Sol. St. Electron. 1979. V. 22. N 2. P. 241—245.
- [6] Мезрин О. А., Трошков С. И. // Письма ЖТФ. 1987. Т. 13. В. 1. С. 14—19.
- [7] Seiwatz R., Green M. // J. Appl. Phys. 1958. V. 29. N 7. P. 1034—1040.
- [8] Горкун Ю. И. // ФТТ. 1961. Т. 3. В. 4. С. 1061—1065.
- [9] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М., 1987. 330 с.
- [10] Yuan Y. R., Pudensi M. A. A., Vawter G. A., Herz J. L. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 1. P. 397—403.
- [11] Васильев А. М. и др. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 2. С. 353—356.
- [12] Гореленок А. Т., Корольков В. И., Мамутин В. В., Никитин Л. П., Рябов В. С., Мезрин О. А. // Тез. докл. IV Всес. конф. по физическим процессам в полупроводниковых гетероструктурах. Минск, 1986. Ч. 1. С. 180—181.
- [13] Айтиева Г. Т. и др. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 7. С. 1313—1317.
- [14] Morgan T. // Phys. Rev. 1966. V. 142. N 2. P. 890—903.
- [15] Юнович А. Э., Ормонт А. Б. // ЖЭТФ. 1966. Т. 51. В. 5. С. 1292—1305.
- [16] Casey H. C., Silversmith D. J. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 1. P. 241—246.
- [17] Semiconductor Surfaces. / Ed. by A. Mahy, Y. Goldstein, N. B. Grover. Amsterdam, 1965. 496 p.
- [18] Айтиева Г. Т., Бессолов В. Н., Волков А. С., Евстропов В. Н., Кочиев Г. Г., Царенков Б. В. // Тез. докл. IV Всес. конф. по физическим процессам в полупроводниковых гетероструктурах. Минск, 1986. Ч. 1. С. 108—109.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Получена 17.06.1986  
Принята к печати 14.11.1986