

Расчет коэффициентов оже-рекомбинации в гетероструктуре с квантовыми ямами InGaAsP/InP

© Н.А. Гунько, А.С. Полковников, Г.Г. Зегря

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

(Получена 24 марта 1999 г. Принята к печати 27 сентября 1999 г.)

Приводится численный расчет коэффициентов оже-рекомбинации в гетероструктурах с квантовыми ямами на основе InGaAsP/InP. Показано, что для узких квантовых ям основной вклад в коэффициент оже-рекомбинации вносят квазипороговый и беспороговый механизмы. Показано также, что в широком диапазоне температур коэффициенты оже-рекомбинации для процессов с участием двух электронов и тяжелой дырки (СНСС) и электрона и двух тяжелых дырок с переходом одной из них в спин-орбитально отщепленную зону (СННС) имеют слабую температурную зависимость. Исследована зависимость оже-коэффициентов от ширины квантовой ямы; установлено, что она является немонотонной.

1. Введение

В полупроводниках при высоких уровнях возбуждения носителей преобладают два процесса рекомбинации: излучательный процесс и безызлучательный оже-процесс [1,2]. Обычно процесс оже-рекомбинации (ОР) в узкозонных полупроводниках доминирует над излучательным при высоких концентрациях неравновесных носителей [2–9]. В частности, в длинноволновых лазерах ток оже-рекомбинации составляет значительную часть полного порогового тока [1]. Ток ОР влияет не только на значение порогового тока лазера, но и на его температурную зависимость (т. е. на характеристическую температуру T_0) [1,2]. Так, чем сильнее скорость ОР зависит от температуры, тем меньше характеристическая температура и тем ниже температурная стабильность лазера [1,2].

В однородных полупроводниках механизмы ОР исследованы многими авторами [3–8]. В гетероструктурах с квантовыми ямами механизмы ОР были теоретически исследованы авторами настоящей работы в [9,10], где было показано, что в квантовых ямах существуют три механизма оже-рекомбинации: пороговый, квазипороговый и беспороговый. В достаточно узких квантовых ямах доминируют последние два процесса. Поэтому зависимость суммарного коэффициента ОР от температуры является слабой, а сам процесс рекомбинации оказывается усиленным по сравнению с тем же процессом ОР в трехмерных полупроводниках. (Беспороговый механизм ОР в квантовых ямах был исследован в работе [11]). Однако в [9,10] не были представлены результаты численных расчетов коэффициентов ОР для конкретных структур. Между тем, такие расчеты вызваны необходимостью анализа влияния ОР на работу конкретных оптоэлектронных приборов с квантовыми ямами.

Настоящая работа посвящена численному расчету коэффициентов ОР в квантовых ямах. Представлены результаты для наиболее известных гетероструктур на основе соединения InGaAsP/InP. Представлена зависимость коэффициентов ОР от температуры и ширины квантовых ям.

2. Модель

Для корректного описания волновых функций электронов и дырок в полупроводниках $A^{III}B^V$ необходимо использовать модель Кейна. Подробно волновые функции и спектр носителей заряда в квантовых ямах исследованы в [9,10]. Здесь мы лишь отметим, что в приближении $m_h \gg m_c$ и $T, E_1 \ll (\Delta_{so}, E_g)$ тяжелые дырки не смешиваются с легкими и спин-орбитально отщепленными (m_h и m_c — массы тяжелой дырки и электрона, T — температура в энергетических единицах, E_1 — энергия размерного квантования электрона, Δ_{so} — константа спин-орбитального взаимодействия, E_g — ширина запрещенной зоны). Из-за относительно большой массы тяжелых дырок можно пренебречь проникновением последних в барьерные области.

Вывод матричного элемента оже-перехода для СНСС-процесса (с участием двух электронов и тяжелой дырки) подробно изложен в [9,10]. Там показано, что матричный элемент для перехода возбужденной частицы в непрерывный спектр разбивается на два слагаемых, отвечающих двум процессам ОР, беспороговому ($M^{(1)}$) и квазипороговому ($M^{(2)}$):

$$M = M^{(1)} + M^{(2)}, \quad (1)$$

где

$$M^{(1)} \approx \frac{8\pi e^2}{\varepsilon_0(q^2 + k_4^2)(q^2 + k_3^2)} \times \left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\varepsilon_0 - \tilde{\varepsilon}_0}{\varepsilon_0 + \tilde{\varepsilon}_0} \right) [\psi_4^*(a/2)\psi_1(a/2)] \times [\psi_3^*(a/2)\psi_2(a/2)]'(1 \pm e^{-qa}). \quad (2)$$

Здесь V_c , V_v — высоты барьеров для электронов и дырок соответственно; a — ширина квантовой ямы; q — компонента квазиимпульса тяжелых дырок в плоскости квантовой ямы; ε_0 , $\tilde{\varepsilon}_0$ — диэлектрические проницаемости полупроводников внутри квантовой ямы и в барьерной области соответственно;

$\psi_\alpha(x)$ — фурье-амплитуда волновой функции связанного электрона ($\alpha = 1, 2$), высоковозбужденного электрона ($\alpha = 4$) и дырки ($\alpha = 3$); k_3 — импульс размерного квантования тяжелой дырки, k_4 — компонента импульса возбужденного электрона, перпендикулярная плоскости ямы. Знаки "±" соответствуют четности произведения $\psi_3^*(x)\psi_2(x)$: "+" соответствует четному произведению, а "—" — нечетному. В случае $qa \gg 1$ экспонента в (2) близка к нулю, и тогда матричный элемент $M^{(1)}$ соответствует независимому расстоянию на двух гетерограницах. Слагаемое $(\varkappa_0 - \tilde{\varkappa}_0)/(\varkappa_0 + \tilde{\varkappa}_0)$ появляется из-за учета дополнительного кулоновского потенциала $\tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, связанного с наличием гетерограниц [10]. Следует отметить, что матричный элемент $M^{(1)}$ равен нулю, если четности произведений $\psi_3^*(x)\psi_2(x)$ и $\psi_4^*(x)\psi_1(x)$ различны. Для квазипорогового процесса было получено

$$M^{(2)} \approx \frac{\pi e^2}{\varkappa_0(q^2 + k_4^2)} e^{i\delta} \frac{\hbar\gamma}{E_g} \frac{1 + 2/3\alpha}{1 + \alpha} A_c A_f A_c A_h \times \frac{\sin(k_f - k_{c1} - k_{c2} - k_h)a/2}{k_f - k_{c1} - k_{c2} - k_h} \times \begin{cases} q_h k_c e^{i\phi_{2,3}} + q_c k_h, & \nu_c = \pm\nu_h, \\ q_c q_h \sin \phi_{2,3}, & \nu_c = \mp\nu_h. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь δ — несуществующий фазовый компонент, A_i обозначают нормировочные постоянные, ν_c и ν_h — спиновые индексы частиц, $\phi_{2,3}$ — угол между латеральными волновыми векторами электрона и дырки, γ — кейновский матричный элемент. Из (3) следует, что при $a \rightarrow \infty$ матричный элемент $M^{(2)}$ становится пропорциональным $\delta(k_f - k_1 - k_2 - k_h)$ и поэтому переходит в объемный матричный элемент. С другой стороны, $M^{(1)}$ не имеет никакого экстремума в том же пределе и обращается в нуль при $a \rightarrow \infty$. Поэтому оже-процессы, отвечающие $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$, названы беспороговым и квазипороговым соответственно.

Итак, матричный элемент оже-перехода разбивается на две части. Первая из них соответствует рассеянию на гетерограницах, а вторая — рассеянию на короткодействующем кулоновском потенциале с большой передачей импульса. Отметим, что как $M^{(1)}$, так и $M^{(2)}$ — по сути беспороговые матричные элементы. В самом деле, они не подчиняются законам сохранения импульса локализованных частиц k_1, k_2, k_3 . Однако механизмы, отвечающие за снятие закона сохранения импульса ($k_1 + k_2 \neq k_3 + k_4$) в $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$, различны. В $M^{(1)}$ несохранение импульса связано с рассеянием электронов на гетерограницах. Тот же механизм ответствен за беспороговый оже-процесс при рассеянии на одиночном гетеробарьере [12]. Причина нарушения закона сохранения импульса для $M^{(2)}$ заключается в локализации носителей в области квантовой ямы и, как следствие, в неопределенности их импульса порядка \hbar/a .

Пороговый оже-процесс связан с переходом возбужденного электрона в дискретный спектр. Ему соответствует матричный элемент $M^{(3)}$, который описывает

переход без изменения уровня размерного квантования электрона:

$$M^{(3)} \approx \frac{4\pi e^2}{\varkappa_0(q^2 + k_4^2)} \int_{-a/2}^{a/2} (\psi_4^* \psi_1)(\psi_3^* \psi_2) dx. \quad (4)$$

Как правило, пороговый оже-процесс для квантовых ям несуществен, поэтому явного выражения для $M^{(3)}$ мы здесь приводить не будем. Трех механизмам ОР соответствуют три коэффициента ОР:

$$C = C_1 + C_2 + C_3, \quad (5)$$

где слагаемое C_1 соответствует беспороговому процессу с матричным элементом $M^{(1)}$, C_2 — квазипороговому оже-процессу с матричным элементом $M^{(2)}$ и, наконец, C_3 — пороговому процессу с матричным элементом $M^{(3)}$.

Рассмотрим выражения для коэффициентов различных процессов ОР. Так, для СНСС-процесса имеем

$$C_1 \approx \frac{32\pi^2 e^4}{\varkappa_0^2} \frac{\hbar\gamma^2}{E_g^3} \frac{F(\Delta_{so}/E_g)}{a(a + 2/\varkappa_c)^2} \frac{k_c^2 \varkappa_c^2}{(k_c^2 + \varkappa_c^2)^2} \frac{V_c}{E_g} \times \left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\varkappa - \tilde{\varkappa}_0}{\varkappa_0 + \tilde{\varkappa}_0} \right) \left\langle \frac{q_h^2 k_h^2}{(q_h^2 + k_h^2)^3} \frac{1}{k_4(q_h)} \right\rangle, \quad (6)$$

где

$$F(x) = \left(\frac{1 + 2x/3}{1 + x} \right)^3 \frac{1 + 7x/9 + x^2/6}{(1 + x/2)(1 + 4x/9)},$$

$$x = \Delta_{so}/E_g.$$

Угловые скобки в выражении (6) и ниже обозначают усреднение по функции распределения тяжелых дырок.

Для СННС-процесса (с участием электрона и двух тяжелых дырок с переходом одной из них в спин-орбитально отщепленную зону) выражение для коэффициента C_1 принимает следующий вид:

$$C_1 \approx \frac{2\pi^2 e^4}{\varkappa_0^2 \hbar} \frac{V_c}{E_g} \frac{k_c^2 \varkappa_c^2}{(k_c^2 + \varkappa_c^2)^2} \frac{\tilde{F}(\Delta_{so}/E_g)}{a^2(a + 2/\varkappa_c)} \times \frac{\hbar^3}{m_{so}^3 (E_g - \Delta_{so})^3} \left\langle \frac{k_{h1}^2 k_{h2}^2 q_{h1}^2 (q_{h1}^2 + q_{h2}^2)}{(q_{h1}^2 + k_{h1}^2)^3 (q_{h2}^2 + k_{h2}^2)} \right\rangle, \quad (7)$$

где

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

В последнем случае усреднение производится по функциям распределения двух тяжелых дырок. При выводе (8) предполагалось, что $E_g - \Delta_{so} \gg T(m_h/m_{so})$.

Перейдем к рассмотрению квазипорогового механизма ОР. В случае СНСС-процесса для коэффициента C_2 можно получить

$$C_2 \approx \frac{\pi^2 e^4}{\varkappa_0^2} \frac{\hbar^3 \gamma^4}{E_g^5} \frac{F(\Delta_{so}/E_g)}{a(a+2/\varkappa_c)^2} \times \left\langle \frac{q_c^2 k_h^2 + q_h^2 [k_c^2 + (1/2)q_c^2]}{(q_h^2 + k_h^2)k_f} \times \frac{1 - \cos(k_f - k_h - 2k_c)a}{2(k_f - k_h - 2k_c)^2} \right\rangle. \quad (8)$$

Непосредственное вычисление C_2 для СННС-процесса приводит к громоздкому выражению. Поэтому мы ограничимся случаем сравнительно узких квантовых ям, где выполнено условие $k_c \gg q_c$:

$$C_2 \approx \frac{\pi^2 e^4}{4\varkappa_0^4} \frac{E_c}{E_g} \frac{\hbar^3}{m_{so}^2 (E_g - \Delta)^3} \frac{\tilde{F}(\Delta_{so}/E_g)}{a^2 (a + 2/\varkappa_c)} \times \left\langle \frac{1 - \cos(k_{so} - k_{h1} - k_{h2} - k_c)a}{2(k_{so} - k_{h1} - k_{h2} - k_c)^2} \times \frac{q_{h2}^2 \{ (k_{so}^2 + k_{h1}^2)q_{h1}^2 + q_{h2}^2 k_{h1}^2 + 2k_{h1}^2 (\mathbf{q}_{h1} \mathbf{q}_{h2}) + [\mathbf{q}_{h1} \times \mathbf{q}_{h2}]^2 \}}{(q_{h1}^2 + k_{h1}^2)(q_{h2}^2 + k_{h2}^2)k_{so}} \right\rangle. \quad (9)$$

Наконец, для коэффициента C_3 в случае СНСС-процесса имеем

$$C_3 \approx \frac{32\pi^2 e^4}{\varkappa_0^2 \hbar E_g} \frac{a}{(a + 1/\varkappa_c)^3} \frac{1 + (7/9)x + (1/6)x^2}{(1 + x/3)^2} \times \frac{1 + (2/3)x}{1 + x} \left\langle \frac{q_{th}^2}{q_T^2} \frac{q_c^2}{(q_{th}^2 + k_h^2)^3} e^{-q_{th}^2/q_T^2} \alpha^2 \right\rangle_n, \quad (10)$$

где α — множитель порядка единицы. В (10) усреднение проводится только по различным дискретным состояниям тяжелых дырок. Пороговое значение импульса находится из закона сохранения энергии и продольной компоненты импульса:

$$q_{th} \approx \sqrt{\frac{4m_c E_g}{\hbar^2} + \frac{3}{2} \left(k_c^2 + \frac{m_c k_h^2}{m_h} \right)}. \quad (11)$$

При ширине квантовой ямы, стремящейся к бесконечности, пороговый импульс стремится к своему объемному значению [4].

Отметим, что в узких квантовых ямах пороговый процесс значительно менее интенсивен, чем беспороговый и квазипороговый, и он практически не вносит никакого вклада в суммарный коэффициент ОР. По этим причинам мы не приводим соответствующие выражения для C_3 в случае СННС-процесса. Такое выражение может быть найдено в [9,10]. Квазипороговый и беспороговый коэффициенты слабо зависят от температуры и тем самым определяют слабую температурную зависимость суммарного оже-коэффициента.

3. Результаты численного расчета

Для численного анализа рассмотрим напряженную квантовую яму на основе соединения $\text{In}_{0.533}\text{Ga}_{0.467}\text{As}/\text{InP}$. (Результаты расчета для ряда других соединений приведены в базе данных [13]). В расчетах были использованы следующие значения параметров структуры: $x = 0.467$, $E_g = 0.75$ эВ, $V_c = 0.234$ эВ, $V_v = 0.366$ эВ, $\Delta_{so} = 0.32$ эВ, $\varkappa = 12.68$, $m_c = 0.041m_0$; $m_{so} = 0.144m_0$, $m_{hh} = 0.432m_0$, $m_{lh} = 0.052m_0$.

На рис. 1 представлена зависимость суммарного коэффициента ОР $C = C_1 + C_2 + C_3$ для СНСС-процесса от ширины квантовой ямы a при различных температурах T . Зависимость C от a имеет резко выраженный максимум. Важно отметить, что положение максимума практически не зависит от температуры. При малых значениях a и низких температурах основной вклад в коэффициент C дают беспороговый и квазипороговый процессы ОР. Беспороговый коэффициент ОР C_1 имеет более резкую зависимость от ширины квантовой ямы a , чем коэффициент C_2 для квазипорогового процесса. Коэффициент C_1 убывает с ростом a как $1/a^3$, $1/a^5$ или $1/a^7$. В любом случае, даже после перехода к трехмерному случаю (умножением на a^2), C_1 остается убывающей функцией ширины квантовой ямы. Поэтому беспороговый процесс может быть преобладающим только для достаточно узких квантовых ям. При $a \approx 1/\varkappa_c$ коэффициент C имеет максимум, связанный с тем, что при дальнейшем уменьшении ширины квантовой ямы становится малым перекрытие между волновыми функциями электронов и дырок. С ростом температуры возрастает относительная роль квазипорогового процесса ОР над беспороговым. В пределе $a \rightarrow \infty$ сумма квазипорогового и порогового коэффициентов ОР, умноженная на квадрат ширины квантовой ямы, $C_2 a^2 + C_3 a^2$, стремится к объемному значению C_{3D} [9,10]. На рис. 2 представлена зависимость коэффициент ОР от ширины квантовой ямы для СННС-процесса. Характер зависимости $C(a)$ качественно совпадает с этой же зависимостью для СНСС-процесса.

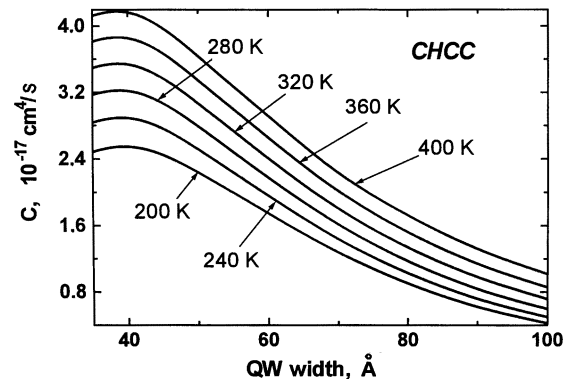


Рис. 1. Зависимость коэффициента ОР C от ширины квантовой ямы (QW) для СНСС-процесса при различных значениях температуры.

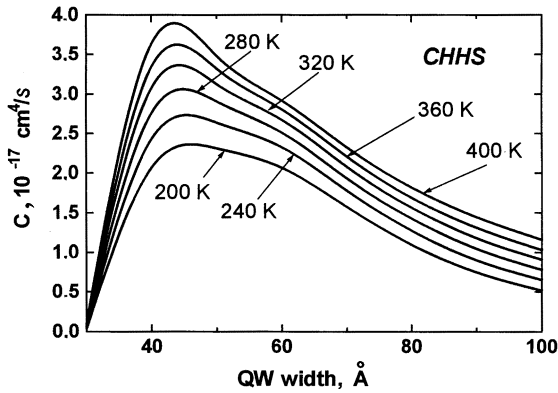


Рис. 2. Зависимость коэффициента ОР C от ширины квантовой ямы (QW) для СННС-процесса при различных значениях температуры.

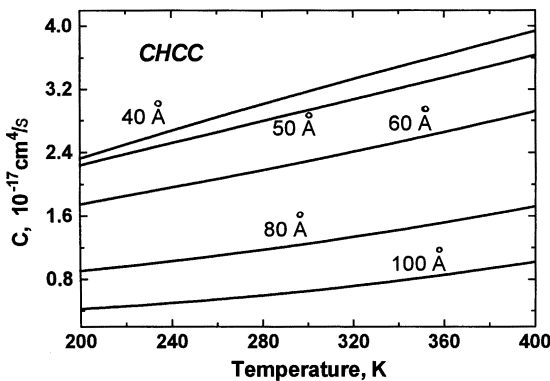


Рис. 3. Зависимость коэффициента ОР C от температуры для СНСС-процесса при различных значениях ширины квантовой ямы.

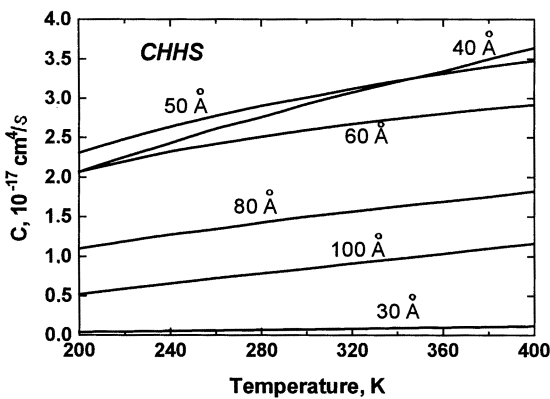


Рис. 4. Зависимость коэффициента ОР C от температуры для СННС-процесса при различных значениях ширины квантовой ямы.

Однако при малых значениях a коэффициент ОР для СННС-процесса убывает быстрее с уменьшением a , чем для СНСС-процесса.

На рис. 3 представлена температурная зависимость суммарного коэффициента ОР при различных ширинах

квантовой ямы для СНСС-процесса. Видно, что для всех рассмотренных толщин ямы зависимость оже-коэффициента от температуры является слабой в согласии с приведенным ранее анализом. Характер зависимости коэффициента ОР от температуры для СННС-процесса качественно не отличается от того, что наблюдается при СНСС-процессе (рис. 4).

4. Заключение

Проведенное нами исследование показало, что в гетероструктурах с квантовыми ямами основной вклад в коэффициент ОР вносят квазипороговый и беспороговый механизмы ОР. Для достаточно узких квантовых ям значения двумерного коэффициента ОР, умноженного на a^2 , больше трехмерного значения именно из-за преобладания беспорогового и квазипорогового процессов ОР. Таким образом, процесс ОР в квантовых ямах оказывается усиленным по сравнению с однородным полупроводником. Это усиление оказывается более существенным при более низких температурах. При этих условиях трехмерный коэффициент ОР C_{3D} мал из-за наличия малого экспоненциального множителя [9,10]. Более подробные вычисления коэффициентов ОР для гетероструктур с квантовыми ямами приводятся в базе данных [13].

Работа частично поддержана грантами РФФИ (гранты N 98-07-09336, N 97-02-18151, N 99-02-16796) и программой "Физика твердотельных наноструктур" (гранты N 97-0003, N 97-1035).

Список литературы

- [1] G.P. Agrawal, N.K. Dutta. *Long-Wavelength Semiconductor Lasers* (Van Nostrand Reinhold, N.Y., 1993).
- [2] *Quantum Well Lasers*, ed. by P.S. Zory, Jr. (Academic Press, Inc., 1993).
- [3] A.R. Beattie, P.T. Landsberg. Proc. Roy. Soc., **A249**, 16 (1959).
- [4] Б.Л. Гельмонт. ЖЭТФ, **75**, 536 (1978).
- [5] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Изд-во ПИЯФ РАН, 1997).
- [6] Б.Л. Гельмонт, З.Н. Соколова. ФТП, **16**, 1670 (1982); Б.Л. Гельмонт, З.Н. Соколова, И.Н. Ясевич. ФТП, **18**, 1803 (1984); Б.Л. Гельмонт, З.Н. Соколова, В.Б. Халфин. ФТТ, **29**, 2351 (1987).
- [7] A. Naug. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **16**, 4159 (1983).
- [8] M. Takeshima. Phys. Rev. B, **28**, 2039 (1983).
- [9] Г.Г. Зегря, А.С. Полковников. ЖЭТФ, **113**, 1491 (1998).
- [10] A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya. Phys. Rev. B, **58**, 4039 (1998).
- [11] M.I. Dyakonov, V.Yu. Kachorovskii. Phys. Rev. B, **49**, 17 130 (1994).
- [12] Г.Г. Зегря, В.А. Харченко. ЖЭТФ, **101**, 327 (1992).
- [13] *Интерактивная база данных "Новые полупроводниковые материалы. Характеристики и свойства"* /http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/.

Редактор Л.В. Шаронова

A numerical calculation of Auger recombination coefficients in InGaAsP/InP quantum well heterostructure

N.A. Gun'ko, A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya

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

Abstract Numerical calculation of Auger recombination coefficients in InGaAsP/InP heterostructures with quantum wells is presented. It is shown that the thresholdless and quasi-threshold mechanisms make the main contribution to Auger coefficient. Both CHCC and CHHS Auger coefficients are shown to have weak temperature dependence in a wide temperature range. Also studied is the dependence of Auger coefficient on quantum well width. It is demonstrated that this dependence is nonmonotonic.