

Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых наногетероструктурах. Часть 1. Квантовые ямы (Обзор)

© Г.Г. Зегря, Н.Л. Баженов

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

E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 10 ноября 2025 г.

В окончательной редакции 18 ноября 2025 г.

Принята к публикации 18 ноября 2025 г.

Настоящий обзор посвящен механизмам оже-рекомбинации в полупроводниковых наногетероструктурах. Отличительной особенностью наногетероструктур является сильная пространственная неоднородность, обусловленная существованием гетерограниц. Гетерограницы оказывают принципиальное влияние на величину энергии и на поведение волновых функций носителей заряда в квантово-размерных гетероструктурах и, как показано в настоящем обзоре, существенно влияют на макроскопические свойства полупроводниковых наноструктур. Наличие гетерограницы воздействует на электрон-электронное (дыроочно-дыроочное) взаимодействие в квантовых структурах, и это воздействие носит фундаментальный характер. Гетерограница снимает ограничения, накладываемые на межэлектронные процессы столкновения законами сохранения энергии-импульса, что приводит к появлению беспороговых, слабо зависящих от температуры каналов оже-рекомбинации. В обзоре рассмотрены основные механизмы оже-рекомбинации неравновесных носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами (Часть 1), квантовыми нитями и квантовыми точками (Часть 2). Показано, что существуют три принципиально разных механизма оже-рекомбинации: беспороговый, квазипороговый и пороговый. Скорость беспорогового процесса слабо зависит от температуры. Пороговая энергия квазипорогового процесса существенно зависит от ширины квантовой ямы и близка к нулю для узких квантовых ям. Показано, что в узких квантовых ямах преобладают беспороговые и квазипороговые оже-процессы, в то время как в широких квантовых ямах преобладают пороговые и квазипороговые оже-процессы. Найдена критическая ширина квантовой ямы, при которой квазипороговый канал оже-рекомбинации трансформируется в трехмерный пороговый оже-процесс. Также выполнен анализ влияния фононов на процессы оже-рекомбинации в квантовых ямах. Показано, что для узких квантовых ям оже-процесс с участием фононов становится резонансным, что приводит к увеличению коэффициента оже-рекомбинации с участием фононов. Отдельно рассмотрен вопрос о влиянии процессов релаксации на механизмы оже-рекомбинации в однородных полупроводниках. Показано, что учет процессов релаксации приводит к снятию энергетического порога для процессов оже-рекомбинации.

Ключевые слова: полупроводниковые гетероструктуры, квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки, гетерограница, оже-рекомбинация, микроскопическая теория.

DOI: 10.61011/FTP.2025.09.62223.8766

1. Введение

Процессы рекомбинации неравновесных носителей в полупроводниках могут быть двух типов: 1) процессы излучательной рекомбинации и 2) процессы безызлучательной рекомбинации. Если при межзонной рекомбинации электрон-дырочной пары происходит испускание фотона, то в этом случае имеет место излучательная рекомбинация, в противном же случае рекомбинация электрона и дырки является безызлучательной. В полупроводниках существует большое количество различных механизмов безызлучательной рекомбинации [1]: рекомбинация через примеси и дефекты кристаллической решетки, многофононная эмиссия, поверхностная рекомбинация, оже-рекомбинация и др. При высоких уровнях возбуждения неравновесных носителей заряда основным процессом безызлучательной рекомбинации

в полупроводниках является оже-процесс [1,2]. В случае оже-рекомбинации (ОР) энергия рекомбинирующей электрон-дырочной пары передается третьему носителю (электрону или дырке), который, поглощая переданную ему энергию, переходит в высоковозбужденное состояние. В полупроводниках такое явление было названо оже-процессом по аналогии с известным оже-эффектом в атомах, открытый Пьером Оже (P. Auger) в 1925 году [3].

Процессы оже-рекомбинации в полупроводниках принято классифицировать по тому, к каким энергетическим зонам относятся начальные и конечные состояния участвующих в процессе рекомбинации частиц. В однородных полупроводниках различают следующие процессы оже-рекомбинации [1,4]: CHCC, CLCC, CHHS, CHNL и др.. Буквами C, H, L и S обозначены состояния электронов в зоне проводимости, тяжелых и легких

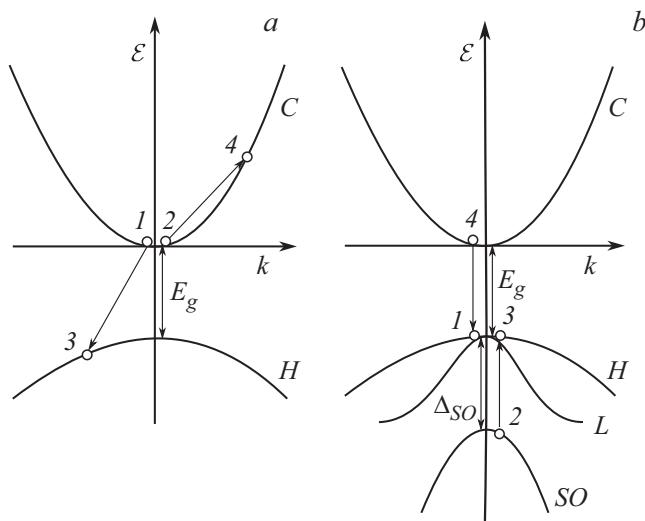


Рис. 1. Схема переходов электронов и дырок при оже-рекомбинации: *a* — переходы с передачей энергии электрону (СНСС-процессы), *b* — переходы с передачей энергии дырке при ее переходе в спин-орбитально отщепленную зону (СННС-процесс). Здесь Δ_{SO} — энергия спин-орбитального взаимодействия; „1“ и „2“ — начальные состояния частиц; „3“ и „4“ — конечные состояния.

дырок в валентной зоне и дырок в спин-отщепленной зоне соответственно. Например, при СНСС-процессе (рис. 1, *a*) в результате кулоновского взаимодействия двух электронов один из них рекомбинирует с тяжелой дыркой, а другой поглощает переданную ему энергию и переходит в высоковозбужденное состояние в зоне проводимости. При СННС-процессе (рис. 1, *b*) тяжелая дырка рекомбинирует с электроном, а вторая тяжелая дырка в результате кулоновского взаимодействия переходит в спин-отщепленную зону.

В однородных полупроводниках процесс оже-рекомбинации в большинстве случаев является пороговым, и скорость оже-рекомбинации G изменяется с температурой по экспоненциальному закону [1]. Следует подчеркнуть, что это утверждение справедливо для случая, когда процесс ОР рассматривается в рамках первого порядка теории возмущения по электрон-электронному (дырочно-дырочному) взаимодействию. При высоких уровнях возбуждения, благодаря электрон-электронным (дырочно-дырочным) процессам рассеяния ОР становится бесспоровым процессом, так как процессы релаксации снимают ограничения, налагаемые законами сохранения энергии и импульса при ОР. В объемном полупроводнике релаксационные процессы играют такую же роль, как и гетерограницы в полупроводниковых гетероструктурах [5]¹ (см. *Приложение I*). Влияние релаксационных процессов на механизм оже-рекомбинации впервые рассмотрено в работе [5]. В этой работе показано, что эффекты релаксации носителей

заряда на носителях изменяют не только величину коэффициента оже-рекомбинации, но и его зависимость от температуры.

Кроме того, бесспоровый случай составляют процессы оже-рекомбинации с переходом дырки в спин-отщепленную зону в полупроводниках, где величина спин-орбитального расщепления Δ_{SO} близка к ширине запрещенной зоны E_g . Такая ситуация имеет место в полупроводниках InAs и GaSb и гетероструктурах на основе CdHgTe. В этом случае оже-процесс имеет „резонансный“ характер, а скорость рекомбинации не имеет экспоненциальной зависимости от температуры.

Следует отметить, что в халькогенидах свинца (PbS, PbSe и PbTe) с линейным законом дисперсии оже-рекомбинация подавлена вследствие невыполнения в подобном процессе закона сохранения энергии и импульса.

Кратко рассмотрим природу образования порога оже-рекомбинации в однородных полупроводниках на примере СНСС-процесса (рис. 1, *a*). В случае такого процесса рекомбинации должны выполняться два фундаментальных закона сохранения квазимпульса и энергии:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4, \quad (1)$$

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и E_1 , E_2 — квазимпульсы и энергии частиц в начальных состояниях „1“ и „2“; \mathbf{k}_3 , \mathbf{k}_4 и E_3 , E_4 — квазимпульсы и энергии в конечных состояниях „3“ и „4“. Квазимпульс во многом аналогичен обычному импульсу частицы. В то же время между ними имеется существенное отличие, связанное с тем, что квазимпульс является величиной, определенной лишь с точностью до постоянного вектора обратной решетки $\hbar\mathbf{b}$. Значения импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, отличающиеся на такую величину $\hbar\mathbf{b}$, физически эквивалентны [6]. Требование одновременного выполнения законов сохранения (1) и (2) означает, что суммарная кинетическая энергия электронов „1“ и „2“ и дырки „4“ в начальном состоянии должна превышать некоторое пороговое значение E_{th} [1]. Следовательно, в однородном прямозонном полупроводнике в рамках 1-го порядка теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию процесс оже-рекомбинации является пороговым, а его скорость содержит экспоненциальную зависимость от температуры $G \propto \exp(-E_{th}/T)$, где $E_{th} = 2m_e/m_h E_g$, m_e — эффективная масса электрона, m_h — эффективная масса тяжелой дырки, T — температура в энергетических единицах. В работе [1] приводится алгоритм вычисления пороговой энергии для процесса оже-рекомбинации с учетом непарараболического закона дисперсии для возбужденного электрона. Интересно отметить, что множитель „2“ в выражении для E_{th} появляется благодаря „дираковскому“ спектру энергии для возбужденного электрона, т. е. непарараболичности закона дисперсии. Подробно это будет описано в следующем параграфе.

¹ Приложения I, II и III представлены во 2-й части статьи, см. Физика и техника полупроводников, 2025, том 59, вып. 10, с. 573–600.

В первых работах по оже-рекомбинации в однородных полупроводниках интегралы перекрытия между состояниями электронов и дырок рассматривались как константы, величины которых оценивались из различных упрощенных моделей ([7] и др.). Правильное вычисление интегралов перекрытия для оже-процессов на основе модели Кейна было проведено впервые в работах [8–10]. В работе [10] впервые получено правильное выражение для скорости оже-рекомбинации СНСС-процесса в рамках модели Кейна:

$$G_{3D} = 6\sqrt{2\pi^5} \frac{m_e e^4 \hbar^3}{\kappa_0} (E_g^{5/2} T^{1/2} m_e^{1/2} m_h^{3/2})^{-1} \times \exp\left(-\frac{2m_e E_g}{m_h T}\right), \quad (3)$$

где κ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость.

В этой работе показано, что в рамках простейшей двухзонной модели, как было рассмотрено в работе [7], интегралы перекрытия равны нулю. Таким образом, для вычисления скорости оже-рекомбинации необходимо использовать многозонную модель Кейна. Модель Кейна для однородных полупроводников изложена во многих учебниках [1].

Настоящий обзор посвящен механизмам оже-рекомбинации в полупроводниковых наногетероструктурах. Отличительной особенностью наногетероструктур, как уже было отмечено выше, является сильная пространственная неоднородность, обусловленная существованием гетерограниц. Гетерограницы оказывают принципиальное влияние на величину энергии и на поведение волновых функций носителей заряда в квантово-размерных гетероструктурах. Гетерограница снимает ограничения, накладываемые на межэлектронные процессы столкновения законами сохранения энергии-импульса, что приводит к появлению беспороговых, слабо зависящих от температуры каналов оже-рекомбинации.

В монографии авторитетных специалистов в области физики процессов ОР [1] отмечено, что расчет вероятности ОР в однородных полупроводниках — трудная задача. Это связано в первую очередь с необходимостью вычисления интегралов перекрытия блоховских амплитуд, относящихся к различным зонам. Как оказалось, расчет вероятности ОР в полупроводниковых наноструктурах — задача еще более сложная. Как отмечено выше, гетероструктуры пространственно неоднородны. Мы имеем качественно другую полупроводниковую среду. В наноструктурах качественно и количественно изменяются спектр и волновые функции носителей заряда, возникает задача о граничных условиях для волновых функций. В настоящем обзоре мы хотели обратить внимание на фундаментальные аспекты, касающиеся механизмов ОР в наногетероструктурах. Мы приводим подробный микроскопический анализ механизмов ОР в квантовых ямах, квантовых нитях и квантовых точках. Изложены детали расчета спектров, волновых функций и матричных элементов кулоновского взаимодействия

между частицами с учетом пространственной симметрии задачи. Такой стиль изложения материала делает обзор полезным для экспериментаторов, молодых, начинающих ученых и специалистов, работающих в области физики полупроводниковых наноструктур. Мы не претендуем на полный обзор публикаций на эту тему. В конце списка литературы мы приводим несколько публикаций по ОР, в которых используется идеология настоящего обзора для решения конкретных задач.

2. Влияние пространственной неоднородности гетерограницы на механизмы оже-рекомбинации. Новый механизм оже-рекомбинации в полупроводниковых гетероструктурах

В настоящее время основными объектами исследования физики полупроводников являются гетероструктуры, такие как одиночные гетеробарьеры, квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки, сверхрешетки и т. д. Отличительной особенностью таких структур, как уже было отмечено выше, является сильная пространственная неоднородность, обусловленная существованием гетерограниц. Ранее считалось, что эффективность безызлучательных оже-процессов в гетероструктурах соответствует обычным объемным оже-процессам [11,12]. Как будет показано далее, наличие гетерограниц качественно и количественно влияет на процессы электрон-электронного (дырочно-дырочного) взаимодействия в полупроводниковых квантовых структурах.

В настоящем разделе рассмотрен новый механизм оже-рекомбинации объемных состояний — так называемый беспороговый оже-процесс. Скорость протекания такого беспорогового процесса имеет степенную зависимость от температуры, а сам процесс является доминирующим механизмом безызлучательной рекомбинации неравновесных носителей заряда в гетероструктурах и в структурах нанометровых размеров (см. разд. 3, 4, 5). Дадим качественную трактовку нового механизма оже-рекомбинации [13].

1. Ограничения на процессы оже-рекомбинации, связанные с законом сохранения импульса, снимаются, если хотя бы одна из квазичастиц (электрон, для определенности) находится вблизи гетерограницы или в области подбарьерного движения. Волновая функция квазичастиц в этой области представляет собой волновой пакет с различными значениями квазимпульса, среди которых имеются импульсы, соответствующие конечному импульсу возбужденного оже-электрона.

2. Передача энергии от рекомбинирующей электрон-дырочной пары быстрому оже-электрону имеет резонансный характер. Импульс, необходимый для перехода в конечное высоковозбужденное состояние, электрон получает от взаимодействия с гетерограницей, но не

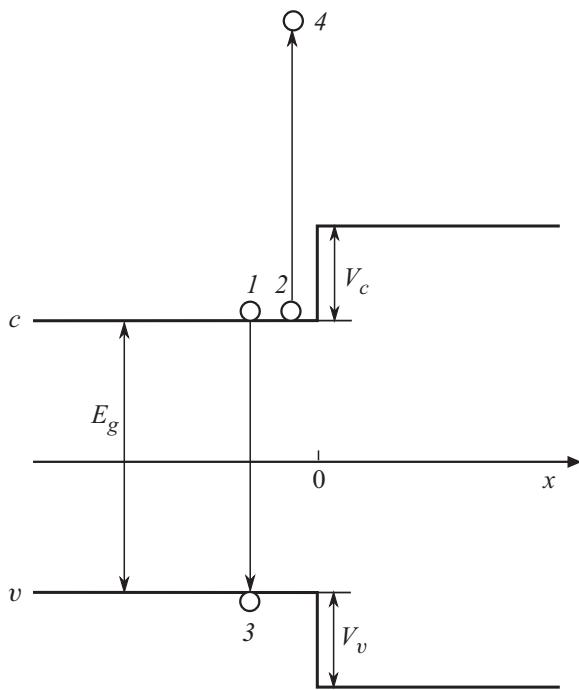


Рис. 2. Схематическое изображение зонной диаграммы гетероперехода. Здесь точка $x = 0$ соответствует гетерогранице, а „1“ и „2“ — начальные состояния для электронов; „3“ и „4“ — конечные состояния.

от взаимодействия с другим электроном. При этом в матричном элементе отсутствует закон сохранения импульса для компоненты, перпендикулярной гетерогранице, и, как следствие, скорость оже-перехода не имеет обычной для однородного полупроводника экспоненциальной температурной зависимости (см. формулу (3)).

3. Выброс быстрых оже-электронов происходит преимущественно в направлении оси, перпендикулярной гетерогранице, т. е. оси максимальной пространственной неоднородности в системе. Электроны выбрасываются над барьером в направлении, перпендикулярном гетерогранице, в узком интервале углов $\Delta\vartheta \sim (T/E_g)^{1/2} \ll 1$.

Здесь рассматривается случай, когда высота гетеробарьера для электрона V_c (или дырки V_v) меньше ширины запрещенной зоны узкозонного полупроводника (см. рис. 2).

В работе [13] проведен подробный анализ порогового и беспорогового механизмов оже-рекомбинации для одиночного гетеробарьера (рис. 2). Проанализированы условия, при которых беспороговый канал преобладает над пороговым. Для квантовых ям такой подробный анализ механизмов оже-рекомбинации приводится в разд. 3. В работе [14] проанализирована возможность снятия порога для процесса оже-рекомбинации в квантовых ямах при переходе возбужденных носителей в непрерывную часть спектра. Однако в этой работе отсутствует микроскопическая теория беспорогового процесса и нет теоретического анализа конкуренции между поро-

говым, квазипороговым и беспороговым механизмами оже-рекомбинации при различных температурах и при различной ширине квантовой ямы. В работах [15,16] рассмотрен только беспороговый канал оже-рекомбинации, который соответствует малым переданным импульсам при кулоновском взаимодействии частиц (для СНС-процесса) в пренебрежении спин-орбитального взаимодействия. Строгая теория для беспорогового канала оже-рекомбинации для случая квантовых ям, квантовых нитей и квантовых точек будет дана в разд. 3, 4 и 5. Первый прямой эксперимент по наблюдению беспорогового канала оже-рекомбинации при $T = 77$ К был выполнен в работе [17].

3. Механизм оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых ямах. Беспороговый и квазипороговый каналы оже-рекомбинации

Цель настоящего раздела состоит в теоретическом исследовании основных механизмов оже-рекомбинации неравновесных носителей в полупроводниковых квантовых ямах. Будет показано, что в квантовых ямах существует три принципиально различных механизма оже-рекомбинации: (i) пороговый механизм, аналогичный оже-процессу в однородном полупроводнике, (ii) квазипороговый механизм, пороговая энергия которого существенно зависит от ширины квантовой ямы, (iii) беспороговый механизм, отсутствующий в однородном полупроводнике. Для порогового процесса оже-рекомбинации в квантовой яме пороговая энергия близка к пороговой энергии однородного полупроводника. И наоборот, вследствие малости пороговой энергии скорость квазипорогового процесса в достаточно узких квантовых ямах слабо зависит от температуры. По этой причине в достаточно узких квантовых ямах нет четкого разделения между беспороговым и квазипороговым механизмами оже-рекомбинации и они сливаются в один беспороговый оже-процесс. С ростом ширины квантовой ямы пороговая энергия квазипорогового процесса возрастает и стремится к объемной величине. Совершенно иначе ведет себя беспороговый канал ОР. С ростом ширины квантовой ямы его скорость резко убывает, стремится к нулю, и при переходе к однородному полупроводнику данный механизм исчезает. В разделе будут получены условия, при которых беспороговый механизм оже-рекомбинации преобладает над пороговым. Также будет найдено критическое значение толщины квантовой ямы, при которой квазипороговый и пороговый механизмы оже-рекомбинации сливаются в один трехмерный оже-процесс.

3.1. Основные уравнения

Для анализа механизмов оже-рекомбинации и нахождения скорости оже-процесса необходимо иметь волновые функции носителей заряда. Как уже было установлено для объемных оже-процессов, волновые функции носителей необходимо вычислять в многозонном приближении [10]. Нами будет использована четырехзонная модель Кейна, наиболее точно описывающая волновые функции и спектр носителей в узкозонных полупроводниках $A^{III}B^V$ [18].

3.1.1. Волновые функции в однородном полупроводнике

Для большинства полупроводников $A^{III}B^V$ волновые функции зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна описываются представлением Γ_6^+ , а валентной зоны — представлениями Γ_7^+ и Γ_8^+ . Два первых из них дважды вырождены, а последнее — вырождено четырежды. Соответствующие им уравнения для волновых функций могут быть записаны в дифференциальной форме. Обычно базисные волновые функции зоны проводимости и валентной зоны берутся в виде собственных функций углового момента [18,19]. Однако для наших целей более подходящим является другое представление базисных функций:

$$|s\uparrow\rangle, |s\downarrow\rangle, |x\uparrow\rangle, |x\downarrow\rangle, |y\uparrow\rangle, |y\downarrow\rangle, |z\uparrow\rangle, |z\downarrow\rangle, \quad (4)$$

где $|s\rangle$ и $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ — блоховские функции s - и p -типа с угловым моментом 0 и 1 соответственно. Первые описывают состояние зоны проводимости, а последние — состояние валентной зоны в Γ -точке. Стрелками обозначено направление спина. Волновая функция носителей заряда ψ может быть представлена в виде

$$\psi = \Psi_s |s\rangle + \Psi |p\rangle,$$

где Ψ_s и Ψ — спиноры. Вблизи Γ -точки уравнения для огибающих Ψ_s и Ψ в сферическом приближении имеют следующий вид:

$$\begin{cases} (E_c - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ (E_v - \delta - E)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2)\nabla(\nabla\Psi) \\ - \frac{\hbar^2}{2m}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)\nabla\times[\nabla\times\Psi] + i\delta[\sigma\times\Psi] = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь γ — кейновский матричный элемент [19], имеющий размерность скорости, $\tilde{\gamma}_1$ и $\tilde{\gamma}_2 = \tilde{\gamma}_3$ — обобщенные параметры Латтинжера [19], $\delta = \Delta_{SO}/3$, E_c и E_v — энергии нижнего края зоны проводимости и верхнего края валентной зоны, m — масса свободного электрона, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули. Если вместо параметров Латтинжера феноменологически ввести массу тяжелых дырок, описывающую взаимодействие с высшими зонами, то уравнения (5) переходят в уравнения,

полученные в работе [20]. Можно убедиться, что уравнения (5) не отличаются от обычно используемых в литературе уравнений [19,21–23]. В первом уравнении системы (5) для электронов мы пренебрегаем слагаемым с тяжелой массой.

Дырочные состояния

Выражение для Ψ_s может быть найдено из первого уравнения системы (5). Подстановка Ψ_s во второе уравнение дает

$$-E\Psi + \frac{\hbar^2}{2m_l}\nabla(\nabla\Psi) - \frac{\hbar^2}{2m_h}\nabla\times[\nabla\times\Psi] + i\delta[\sigma\times\Psi] = 0, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} m_l^{-1} &= \frac{2\gamma^2}{E_g + \delta - E} + m^{-1}(\tilde{\gamma}_1 + 4\tilde{\gamma}_2), \\ m_h^{-1} &= m^{-1}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2). \end{aligned}$$

Здесь m_h совпадает с массой тяжелых дырок, а m_l — с массой легких дырок в случае, когда константа спин-орбитального взаимодействия равна нулю; $E_g = E_c - E_v$ — запрещенная зона полупроводника. Для удобства предполагается, что $E_v = \delta$. Этот выбор связан с возрастанием энергий тяжелой дырки и легкой дырки в точке Γ на δ и убыванием энергии дырки в спин-орбитально отщепленной зоне (SO) на 2δ под воздействием спин-орбитального взаимодействия (см. уравнение (10)). Уравнение (6) можно упростить, введя новые функции:

$$\phi = \text{div}\Psi \quad \text{и} \quad \eta = \sigma \text{rot}\Psi. \quad (7)$$

После взятия дивергенции и ротора от уравнения (6), умноженного на σ , оно превращается в систему двух дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} -E\phi + \frac{\hbar^2}{2m_l}\Delta\phi + i\delta\eta = 0, \\ -(E + \delta)\eta + \frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta\eta - 2i\delta\phi = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Фурье-преобразование этих уравнений дает спектр легких и so-дырок для однородного полупроводника

$$\begin{bmatrix} E + \frac{\hbar^2}{2m_l}k^2 & i\delta \\ -2i\delta & E + \frac{\hbar^2}{2m_h}k^2 + \delta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \eta \end{pmatrix} = 0. \quad (9)$$

Характеристическое уравнение имеет два корня

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= -\frac{\delta}{2} - \frac{\hbar^2 k^2}{4} \\ &\times (m_l^{-1} + m_h^{-1}) \pm \sqrt{2\delta^2 + \left(\frac{\delta}{2} - \frac{\hbar^2 k^2}{4}(m_l^{-1} - m_h^{-1})\right)^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Следует отметить, что m_l зависит от энергии (см. уравнение (6)). В точке Γ ($k = 0$) у нас имеются корни $E_1 = \delta$ и $E_2 = -2\delta$. Положительное решение соответствует легким дыркам, а с отрицательным знаком — со-дыркам.

В окрестности точки Γ энергии $E_{1,2}$ можно разложить в ряд по волновому вектору, чтобы связать эффективные массы легких и со-дырок m_l , m_{so} с параметрами Латтингера:

$$E_1 \approx \delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_l}, \quad E_2 \approx -2\delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}}, \quad (11)$$

где

$$m_l^{-1} = \frac{4\gamma^2}{3E_g} + \frac{(\tilde{\gamma}_1 + 2\tilde{\gamma}_2)}{m}, \quad m_{so}^{-1} = \frac{2\gamma^2}{3(E_g + 3\delta)} + \frac{\tilde{\gamma}_1}{m}.$$

Приближенный спектр легких дырок можно получить с помощью широко применяемого гамильтониана 4×4 [19]. Однако диапазон применимости довольно узок, так как обычно $m_l \sim 0.1 m_h$ и разложение (11) справедливо, только когда $E \ll \frac{m_l}{m_h} \Delta_{so}$. Кроме того, такая модель вообще не может описывать оже-переходы, поскольку базисные состояния носителей в различных зонах ортогональны. То же самое относится к спектру в зоне SO.

Фурье-амплитуды волновых функций как легких, так и со-дырок можно представить в виде (см. уравнение (6)):

$$\begin{aligned} \Psi &= \mathbf{k}f + \frac{i\delta}{E + \delta + \frac{\hbar^2 k^2(E)}{2m_h}} [\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma} f], \\ \Psi_s &= -\frac{\hbar\gamma k^2(E)}{E_g + \delta - E} f, \end{aligned} \quad (12)$$

где f — произвольный спинор, относящийся к ранее введенной функции ϕ посредством выражения $\phi = k^2(E)f$.

Третье решение в (6), относящееся к тяжелым дыркам, удовлетворяет условию $\operatorname{div} \Psi = 0$ (как результат $\Psi_s = 0$) и $\boldsymbol{\sigma} \operatorname{rot} \Psi = 0$. Это следует из (8), так как, если $\phi = 0$, то и $\eta = 0$ и наоборот. Легко видеть, что

$$[\boldsymbol{\sigma} \times \Psi_h] = -i\Psi_h.$$

Таким образом, закон дисперсии, описывающий спектр тяжелых дырок выглядит следующим образом:

$$E_h = \delta - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h}. \quad (13)$$

Компоненты волновой функции тяжелых дырок должны удовлетворять уравнениям:

$$\begin{cases} \Psi_{z\downarrow} = (\Psi_{x\uparrow} + i\Psi_{y\uparrow}) \\ \Psi_{z\uparrow} = (-\Psi_{x\downarrow} + i\Psi_{y\downarrow}) \end{cases} \Leftrightarrow [\boldsymbol{\sigma} \times \Psi] = -i\Psi, \quad (14)$$

$$\begin{cases} k_z \Psi_{z\uparrow} + k_x \Psi_{x\uparrow} + k_y \Psi_{y\uparrow} = 0 \\ k_z \Psi_{z\downarrow} + k_x \Psi_{x\downarrow} + k_y \Psi_{y\downarrow} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \operatorname{div} \Psi = 0. \quad (15)$$

Решая эти уравнения можно получить явные выражения для волновых функций дырок. Для квантовых ям они даны в *Приложении II*.

Электронные состояния

В принципе обычные уравнения для электронов имеют тот же вид, что и для дырок. Так как точка Γ в зоне проводимости вырождена только дважды и кристаллическое поле не приводит к дополнительному расщеплению, нет необходимости сохранять члены с параметрами $\tilde{\gamma}_i$. Кроме того, наличие этих членов в уравнениях для электронов является превышением точности. Таким образом, для электронов справедлива упрощенная модель:

$$\begin{cases} (E_c - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ (E_v - \delta - E)\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + i\delta[\boldsymbol{\sigma} \times \Psi] = 0. \end{cases} \quad (16)$$

Энергию электронов удобно измерять от нижнего края зоны проводимости ($E_c = 0$). Эту энергию обозначим как \mathcal{E} , чтобы не путать ее с полной энергией электрона E , отсчитываемой от того же уровня, что и энергия дырок. Вводя в (16) функции ϕ и η в том же виде, как и раньше (см. уравнение (7)), получаем

$$\begin{aligned} - (E_g + \delta + \mathcal{E})\phi + \frac{\hbar^2\gamma^2}{\mathcal{E}}\Delta\phi + i\delta\eta &= 0, \\ - (E_g + \mathcal{E} + 2\delta)\eta - 2i\delta\phi &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Переходя к преобразованиям Фурье, находим закон дисперсии для электронов

$$k^2 = \frac{\mathcal{E}}{\hbar^2\gamma^2} \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{E}(2E_g + 3\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{E_g + \mathcal{E} + 2\delta}. \quad (18)$$

Если $\mathcal{E} \ll E_g$, δ , тогда энергия зависит от квадрата волнового вектора:

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}, \quad (19)$$

где

$$m_c^{-1} = 2\gamma^2 \frac{E_g + 2\delta}{(E_g + 3\delta)E_g}.$$

Фурье-амплитуда волновой функции для электронов равна

$$\Psi_s = f, \quad \Psi = \frac{\mathcal{E}}{\hbar\gamma k^2(\mathcal{E})} \left[\mathbf{k}f + \frac{i\delta}{\mathcal{E} + E_g + 2\delta} [\mathbf{k} \times (\boldsymbol{\sigma} f)] \right], \quad (20)$$

где f — произвольный спинор (см. (12)).

3.1.2. Поток вероятности и уравнения вблизи гетерограницы

Выражение для потока вероятности можно вывести из уравнения (5) подстановкой $E \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, а затем используя процедуру, аналогично используемой в квантовой механике [24]. Его можно также получить кр-методом во 2-ом порядке теории возмущений. В результате для

потока вероятности в случае дырок получаем следующее выражение:

$$\mathbf{j}_h = \frac{E_g + \delta - E}{2m_h\gamma} [\Psi_s \Psi^* + \Psi_s^* \Psi] - \frac{i\hbar}{2m_h} (\Psi \times \text{rot } \Psi^* - \Psi^* \times \text{rot } \Psi). \quad (21)$$

Для электронов в зоне проводимости это выражение имеет более простой вид

$$\mathbf{j}_e = \gamma [\Psi_s \Psi^* + \Psi_s^* \Psi]. \quad (22)$$

Вопрос о граничных условиях для волновых функций до сих пор остается открытым. В последние годы были разработаны приближенные методы решения данной проблемы [19]. Мы будем использовать приближение $\gamma = \text{const}$, что является хорошим приближением для полупроводниковых гетероструктур на основе соединений Al^{III}B^V [19].

Расхождение параметра γ в квантовой яме и области барьера приводит в результате к небольшому изменению коэффициента Оже. Следуя методу, разработанному в работе [21], и предполагая непрерывность кейновского параметра, мы получаем из системы (5) кейновские уравнения, которые можно проинтегрировать через гетеробарьер:

$$\begin{cases} (E_g + \delta - E)\Psi_s - i\hbar\gamma\nabla\Psi = 0, \\ -E\Psi - i\hbar\gamma\nabla\Psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla[6\tilde{\gamma}_2\nabla\Psi] \\ + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x_k}(\tilde{\gamma}_1 - 2\tilde{\gamma}_2)\frac{\partial}{\partial x_k}\Psi + i\delta[\boldsymbol{\sigma} \times \Psi] = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Используя эти уравнения и закон сохранения плотности потока вероятности, мы получаем граничные условия для огибающих волновых функций (см. *Приложение II*).

3.1.3. Состояния носителей в квантовой яме

Волновые функции в квантовой яме можно найти, используя свойства симметрии Гамильтониана. Без учета спина Гамильтониан \mathcal{H}_0 инвариантен при замене $x \rightarrow -x$. Рассмотрим оператор \mathcal{R} , такой что

$$\mathcal{R} : (x, y, z) \rightarrow (-x, y, z), \quad \mathcal{R} = \mathcal{I}\mathcal{C}_{\pi x}, \quad (24)$$

$$\mathcal{H}_0\mathcal{R} = \mathcal{R}\mathcal{H}_0,$$

где \mathcal{I} — оператор инверсии, а $\mathcal{C}_{\pi x}$ — оператор поворота на угол π относительно оси x , перпендикулярной к плоскости квантовой ямы.

С учетом спин-орбитального взаимодействия Гамильтониан может быть записан в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{\hbar}{4m^2c^2} [\nabla V \times \mathbf{p}] \boldsymbol{\sigma}, \quad (25)$$

где \mathbf{p} — оператор импульса и V — потенциальная энергия электрона в кристалле. Последнее слагаемое не

коммутирует с \mathcal{R} . Следовательно, оператор симметрии \mathcal{D} может быть найден как произведение оператора \mathcal{R} и некоторой спиновой матрицы S , т. е. $\mathcal{D} = \mathcal{R} \otimes S$. Так как инверсия оставляет неизменным знак векторного произведения, матрица S должна удовлетворять соотношениям

$$\begin{cases} S\sigma_x = \sigma_x S \\ S\sigma_y = -\sigma_y S, \\ S\sigma_z = -\sigma_z S \end{cases}$$

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Очевидно, в качестве матрицы S можно взять спиновую матрицу Паули σ_x : $S = \sigma_x$.

Функции $\Psi(x, y, z)$ и $\mathcal{D}\Psi(-x, y, z)$ удовлетворяют одному и тому же уравнению. Поэтому собственные функции Гамильтониана можно искать как собственные функции оператора \mathcal{D} :

$$\Psi(x, y, z) = v \mathcal{D}\Psi(-x, y, z), \quad (27)$$

где $v = \pm 1$. Величины $v = \pm 1$ соответствуют состояниям носителей с различной симметрией. При таком выборе волновых функций граничные условия можно удовлетворить только на одной гетерогранице, так как на другой они будут удовлетворены автоматически. Решая уравнение (27), мы находим необходимые условия для различных компонент симметризованной волновой функции:

$$\begin{aligned} \Psi_{s\uparrow}(x, y, z) &= \pm \Psi_{s\downarrow}(-x, y, z), \\ \Psi_{x\uparrow}(x, y, z) &= \mp \Psi_{x\downarrow}(-x, y, z), \\ \Psi_{y\uparrow}(x, y, z) &= \pm \Psi_{y\downarrow}(-x, y, z), \\ \Psi_{z\uparrow}(x, y, z) &= \pm \Psi_{z\downarrow}(-x, y, z), \end{aligned}$$

где знак „+“ соответствует $v = 1$, а „-“ соответствует $v = -1$ для компонентов s, y, z и наоборот для компоненты x . Соответствующие выражения для компонент волновых функций электронов и дырок даны в *Приложении II*.

3.2. Матричный элемент оже-рекомбинации

Вероятность оже-рекомбинации в единицу времени вычисляется в рамках 1-го порядка теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} M_{fi} = & \langle \Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nu_1, \nu_2) \left| \frac{e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right| \\ & \times \Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nu_1, \nu_2) \rangle \end{aligned} \quad (29)$$

— матричный элемент электрон-электронного взаимодействия, \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — координаты носителей, ν_1 и ν_2 —

спиновые переменные (см. (27)), $\tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — дополнительный потенциал, возникающий из-за различия диэлектрических постоянных квантовой ямы и барьера. Явное выражение для $\tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ приведено в *Приложении III*.

С учетом антисимметризации волновых функций матричный элемент оже-перехода можно представить в виде

$$M_{fi} = M_I - M_{II}, \quad (30)$$

где

$$M_I = \langle \Psi_3(\mathbf{r}_1, \nu_1) \Psi_4(\mathbf{r}_2, \nu_2) \left| \frac{e^2}{\kappa_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right| \times \Psi_1(\mathbf{r}_1, \nu_1) \Psi_2(\mathbf{r}_2, \nu_2) \rangle. \quad (31)$$

Выражение для M_{II} можно получить из (31) заменой индексов 1 и 2 в волновых функциях Ψ_1 и Ψ_2 . Далее индексы I и II в выражениях для матричных элементов будут опущены. Здесь M_I — прямой кулоновский матричный элемент, а M_{II} — обменный.

Мы рассмотрим два процесса оже-рекомбинации, CHCC и CHHS, так как фактически именно они определяют скорость оже-рекомбинации. Строго говоря, такая терминология неприменима к квантовой яме, так как имеет место смешивание подзон тяжелых дырок, легких дырок и со-дырок. Однако, как отмечено выше, в случае $m_c \ll m_h$ степень смешивания между тяжелыми и легкими дырками мала, а смешивание со-дырок с тяжелыми и легкими дырками при $\Delta_{so} \gg T$ ничтожно. Последнее условие почти всегда выполняется для полупроводников $A^{III}B^{V}$. Поэтому мы можем использовать терминологию, приведенную выше.

Оценка матричных элементов для оже-процессов CHCC и CHHS аналогична. Для простоты далее в этом разделе будут в основном рассмотрены матричные элементы оже-переходов CHCC. Однако в следующем разделе приближенные выражения для оже-коэффициента будут даны как для CHCC, так и для CHHS-процесса. Матричный элемент электрон-электронного кулоновского взаимодействия удобнее всего вычислять, используя представление Фурье. Мы учтем, что волновые функции носителей в квантовой яме представляют собой плоские волны в продольном направлении (см. *Приложение II*):

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(x, \mathbf{q}_i) e^{i\mathbf{q}_i \cdot \rho},$$

где \mathbf{q} и ρ — продольная компонента волнового вектора и продольная координата соответственно. Явное выражение для волновых функций электронов и дырок ψ_i даны в *Приложении II*. Тогда

$$M = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \frac{1}{2q} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-\infty}^{a/2} \int_{-a/2}^{a/2} \psi_4^*(x_1) \psi_3^*(x_2) \times \left(e^{-q|x_1-x_2|} + \tilde{\phi}(x_1, x_2, q) \right) \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) dx_1 dx_2, \quad (32)$$

$q = |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_4| = |\mathbf{q}_3 - \mathbf{q}_2|$ — импульс, переданный в плоскости квантовой ямы при кулоновском взаимодействии, a — ширина квантовой ямы, ϕ , выражение для которой дано в *Приложении III*, соответствует потенциалу $\tilde{\Phi}$. Интегрирование по x_2 ограничено областью квантовой ямы благодаря тому факту, что тяжелые дырки из-за их относительно большой массы обычно строго локализованы внутри ямы. Здесь x и ρ обозначают координаты, ортогональные и параллельные плоскости квантовой ямы, \mathbf{q} и k — продольные и x -компоненты квазимпульса частиц.

Как видно из уравнения (32), оже-рассеяние происходит на одномерном экспоненциально убывающем потенциале, который зависит от поперечного переданного импульса. Состояние возбужденной частицы может находиться как в непрерывном, так и дискретном спектре, причем последний вариант возникает, когда продольный импульс частицы значительно превышает поперечный импульс. (Мы, как обычно, предполагаем, что $(V_c, V_v) < E_g$). При определении скорости оже-рекомбинации как локализованные, так и делокализованные состояния должны рассматриваться как конечные состояния возбужденной частицы. Вероятность перехода электрона (дырки) в локализованное или свободное состояние приводит к существованию различных механизмов оже-рекомбинации в квантовых ямах.

3.2.1. Вычисление матричного элемента оже-рекомбинации для переходов возбужденной частицы в непрерывный спектр

Для вычисления матричного элемента воспользуемся приближением $V_c, V_v \ll E_g$. Очевидно, это приближение также предполагает, что $k_4^2 + q^2 \gg k_1^2$, т. е. полный импульс возбужденного электрона значительно превышает импульс локализованного электрона. Интеграл по координате x_1 можно вычислить интегрированием по частям. Здесь n -ая первообразная функции $\psi_4 e^{-qx}$ равна:

$$F_4^n(q, x) = (-1)^n \frac{(e^{qx} \psi_4(x))^{(n)}}{(k_4^2 + q^2)^n} e^{-2qx}.$$

Тогда получаем приближенное выражение для матричного элемента M_I :

$$M \approx M^{(1)} + M^{(2)}, \quad (33)$$

где

$$M^{(1)} = - \frac{4\pi e^2}{\kappa_0 (q^2 + k_4^2)} \left(\mathcal{F}(a/2) \int_{-a/2}^{a/2} e^{qx_2} \psi_3^*(x_2) \psi_2(x_2) dx_2 - \mathcal{F}(-a/2) \int_{-a/2}^{a/2} e^{-qx_2} \psi_3^*(x_2) \psi_2(x_2) dx_2 \right). \quad (34)$$

Здесь

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(a/2) &= e^{-qa/2} \psi_{4s}^*(a/2) \psi_{1s}(a/2) \\ &\times \left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right). \quad (35)\end{aligned}$$

Индекс s в ψ_{4s} и ψ_{1s} означает, что берется только s -ая компонента волновой функции, $\tilde{\kappa}_0$ — диэлектрическая постоянная в области барьера.

$$M^{(2)} = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)} \int_{-a/2}^{a/2} \psi_4^*(x) \psi_3^*(x) \psi_2(x) \psi_1(x) dx. \quad (36)$$

Отметим, что так как волновые функции представляют собой спиноры, компоненты ψ_4^* следует домножить на компоненты ψ_1 , и наоборот, компоненты ψ_3^* следует домножить на компоненты ψ_2 .

Таким образом, оказывается, что матричный элемент ОР распадается на две части. Первая из них $M^{(1)}$ связана с присутствием гетерограниц, а вторая $M^{(2)}$ соответствует короткодействующему кулоновскому рассеянию. Последнее легко понять, так как в процессе оже-перехода происходит передача большого импульса от локализованного электрона возбужденному, а это возможно, лишь если рассеивающиеся частицы находятся очень близко друг от друга. Отметим, что как $M^{(1)}$, так и $M^{(2)}$ и, соответственно, сам матричный элемент M фактически являются беспороговыми матричными элементами. Действительно, на них не распространяются никакие ограничения, налагаемые на начальные импульсы носителей k_1, k_c, k_h законами сохранения квазиимпульса. Однако механизмы, приводящие к несохранению квазиимпульса $k_1 + k_2 \neq k_3 + k_4$ в компонентах $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$ различны. В $M^{(1)}$ несохранение связано с рассеянием носителей на гетерограницах, и этот же механизм приводит к появлению беспорогового оже-процесса при рассеянии на одиночном гетеробарье-ре [13]. В $M^{(2)}$ причиной нарушения закона сохранения является ограничение объема интегрирования по x областью квантовой ямы, что приводит к появлению функции типа $\frac{\sin(ka/2)}{k}$ вместо δ -функции $\delta(k)$. Подставляя (35) в (34), и интегрируя по x_2 , имеем

$$\begin{aligned}M^{(1)} &\approx \frac{8\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)(q^2 + k_3^2)} \left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right) \\ &\times (\psi_4^*(a/2) \psi_1(a/2)) (\psi_3^*(a/2) \psi_2(a/2))' (1 \pm e^{-qa}). \quad (37)\end{aligned}$$

Знак \pm в последних скобках выбран согласно четности произведения $\psi_3^*(x) \psi_2(x)$, знак „+“ соответствует четному произведению, а знак „-“ соответствует нечетному. В случае $qa \gg 1$ этой экспонентой можно пренебречь, и матричный элемент $M^{(1)}$ соответствует независимому рассеянию на двух гетерограницах. Член $(\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0)/(\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0)$ в уравнении (37) возникает из-за

учета дополнительного потенциала $\tilde{\Phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (см. уравнение (31)). Отметим, что матричный элемент $M^{(1)}$ равен нулю, если четности в произведениях $\psi_3^*(x) \psi_2(x)$ и $\psi_4^*(x) \psi_1(x)$ различны.

Перейдем к анализу $M^{(2)}$. Интеграл, входящий в $M^{(2)}$, пропорционален сумме

$$\int_0^a \psi_4^*(x) \psi_3^*(x) \psi_1(x) \psi_2(x) dx \propto \sum \pm \frac{\sin(k_4 - k)a/2}{k_4 - k}, \quad (38)$$

где k пробегает восемь различных значений $k = \pm k_1 \pm k_2 \pm k_3$. Из всех членов в сумме (38) наибольший тот, для которого $k = k_1 + k_2 + k_3$. Причина в том, что этот член имеет наименьшую пороговую энергию. Под пороговой энергией мы понимаем среднюю энергию тяжелой дырки, участвующей в оже-переходе. Вклад в сумму от остальных членов менее существен, и для простоты им пренебрежем. Тогда выражение для матричного элемента для квазипорогового оже-процесса принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}M^{(2)} &\approx \frac{\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)} e^{i\delta} \frac{\hbar\gamma}{E_g} \frac{1 + 2/3\alpha}{1 + \alpha} A_c A_f A_c A_h \\ &\times \frac{\sin(k_f - k_{c1} - k_{c2} - k_h)a/2}{k_f - k_{c1} - k_{c2} - k_h} \\ &\times \begin{cases} q_h k_c e^{i\phi_{2,3}} + q_c k_h, & v_c = \pm v_h, \\ q_c q_h \sin \phi_{2,3}, & v_c = \mp v_h. \end{cases} \quad (39)\end{aligned}$$

Здесь δ — несущественный фазовый множитель, A_i обозначает постоянную нормировку, v_c и v_h — спиноевые индексы, введенные согласно (27), $\phi_{2,3}$ — угол между поперечным импульсом электрона и дырки. Как следует из (39), в пределе $a \rightarrow \infty$ матричный элемент $M^{(2)}$ становится пропорционален $\delta(k_f - k_1 - k_2 - k_h)$, а следовательно, стремится к матричному элементу для объемного случая. Напротив, $M^{(1)}$ в пределе $a \rightarrow \infty$ стремится к нулю. Поэтому $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$ мы называем беспороговым и квазипороговым процессами соответственно.

3.2.2. Вычисление матричного элемента оже-рекомбинации для переходов возбужденного носителя в дискретный спектр

Обратимся теперь к анализу матричного элемента оже-переходов, в которых высоконаправленная частица остается в связанном состоянии ψ_4 . Этот случай соответствует приближению $q_4 \gg k_4$. Матричный элемент можно вычислить аналогично тому, как это сделано выше для $M^{(2)}$:

$$M^{(3)} \approx \frac{4\pi e^2}{\kappa_0(q^2 + k_4^2)} \int_{-a/2}^{a/2} (\psi_4^* \psi_1)(\psi_3^* \psi_2) dx. \quad (40)$$

Этот интеграл легко вычислить; однако общая формула очень громоздка и здесь приведена не будет. Мы лишь сделаем оценку $M^{(3)}$, справедливую в случае, когда носители находятся в основном квантовом состоянии. Тогда имеем

$$M^{(3)} \approx \frac{1}{q^2 + k_4^2} e^{i\delta} \frac{\hbar\gamma}{Z} \times A_c A_f A_c A_h a / 2\alpha q_c q_h \sin \phi_{2,3} \quad (\nu_c = -\nu_h). \quad (41)$$

Здесь $\phi_{2,3}$ — угол между поперечными компонентами квазимпульса электрона и тяжелой дырки и α — множитель порядка единицы, возникающий от интегрирования произведения огибающих волновых функций носителей в области квантовой ямы:

$$\int_0^{a/2} f_1 f_2 f_3 f_4 dx \approx a/2\alpha, \quad (42)$$

где $f_i = \cos k_i x$, i нумерует начальные и конечные состояния частиц, участвующих в процессе оже-рекомбинации.

Отметим, что α отлично от нуля только в том случае, когда четности попарных произведений $\Psi_1 \Psi_4$ и $\Psi_c \Psi_h$ совпадают. Для широких квантовых ям, когда частицы могут находиться в различных связанных квантовых состояниях, α переходит в выражение

$$\alpha = \frac{1}{16} \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4=0,1} (-1)^{\nu_i \sigma_i} \frac{\sin((-1)^{\nu_i} k_i a/2)}{(-1)^{\nu_i} k_i a/2}. \quad (43)$$

Здесь подразумевается суммирование по индексу i от 1 до 4, σ_i — характеризует четность функции f_i ($\sigma_i = 1$ для нечетной функции и $\sigma_i = 0$ — для четной).

3.3. Коэффициент оже-рекомбинации

Для вычисления скорости оже-рекомбинации необходимо просуммировать вероятность оже-перехода в единицу времени (28) по всем начальным и конечным состояниям носителей с соответствующими весами — числами заполнения.

$$G = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \langle M^2 \rangle \cdot f_1 f_2 (1 - f_3)(1 - f_4) \times \delta(E_3 + E_4 - E_1 - E_2). \quad (44)$$

Здесь f_1 и f_2 — фермиевские функции распределения носителей в начальном, а f_3 и f_4 — в конечном состоянии,

$$\langle M^2 \rangle = \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4} |M_{fi}|^2$$

— квадрат матричного элемента, просуммированный по спинам частиц в начальном и конечном состояниях. Для высоко возбужденных состояний функцию распределения f_4 можно положить равной нулю. Следует отметить,

что вместо $1 - f_3$ мы можем написать \tilde{f}_3 , где \tilde{f}_3 — функция распределения для носителей противоположного знака: дырок для процесса CHCC и электронов для процесса CHHS.

Вклады в скорость оже-рекомбинации от матричных элементов $M^{(1)}$ $M^{(2)}$ и $M^{(3)}$ можно разделить, так как возбужденная частица в таких процессах лежит в различных квантовых состояниях. Матричные элементы $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$, с одной стороны, и $M^{(3)}$, с другой стороны, описывают переходы, в которых возбужденная частица занимает состояния в непрерывном и дискретном спектре соответственно. Сложнее разделить вклады от $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$. Несмотря на то, что физическое различие между ними и сохраняется, однако имеется член, описывающий интерференцию между ними. При малых значениях ширины квантовой ямы интерференция является существенной, поскольку оба процесса являются фактически беспороговыми; однако даже если этой интерференцией пренебречь, мы все еще получаем правильный по порядку величины результат, отражающий все основные особенности коэффициента оже-рекомбинации как функции температуры и параметров структуры с квантовой ямой.

Для достаточно широкой квантовой ямы интерференцией между $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$ можно пренебречь. Действительно, если $M^{(1)}$ как функция квазимпульсов не имеет никаких особенностей, то $M^{(2)}$ имеет максимум по модулю в точке $k_4(q) + k_3 = k_1 + k_2$. При ширине квантовой ямы, стремящейся к бесконечности, максимум в этой точке имеет характер δ -функции. При уменьшении толщины квантовой ямы максимумы этих вероятностей приближаются друг к другу и возрастает область перекрытия между этими матричными элементами.

Вероятности оже-рекомбинации для процесса CHCC, соответствующие матричным элементам $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$, показаны на рис. 3 в зависимости от продольного импульса тяжелой дырки при различной ширине квантовой ямы. Из рисунка видно, что интерференция между беспороговым процессом, отвечающим $M^{(1)}$, и квазипороговым процессом, отвечающим $M^{(2)}$, в соответствии со сказанным выше имеет место только в узких квантовых ямах. Следует отметить, что вероятности ОР являются достаточно плавными функциями продольного импульса тяжелой дырки, так как при их вычислении было проведено суммирование по дискретным квантовым состояниям носителей. При q , близком к максимальному значению, которое определяется законом сохранения продольного импульса и энергии, вероятность ОР имеет корневую расходимость, устранимую при интегрировании по q , т. е. при вычислении скорости оже-рекомбинации. Вероятность оже-переходов для процесса CHHS имеет вид, аналогичный выражению для процесса CHCC.

В соответствии с вышесказанным представим скорость оже-рекомбинации в виде

$$G = G_1 + G_2 + G_3, \quad (45)$$

где скорость G_1 соответствует беспороговому каналу ОР с матричным элементом $M^{(1)}$, скорость G_2 — ква-

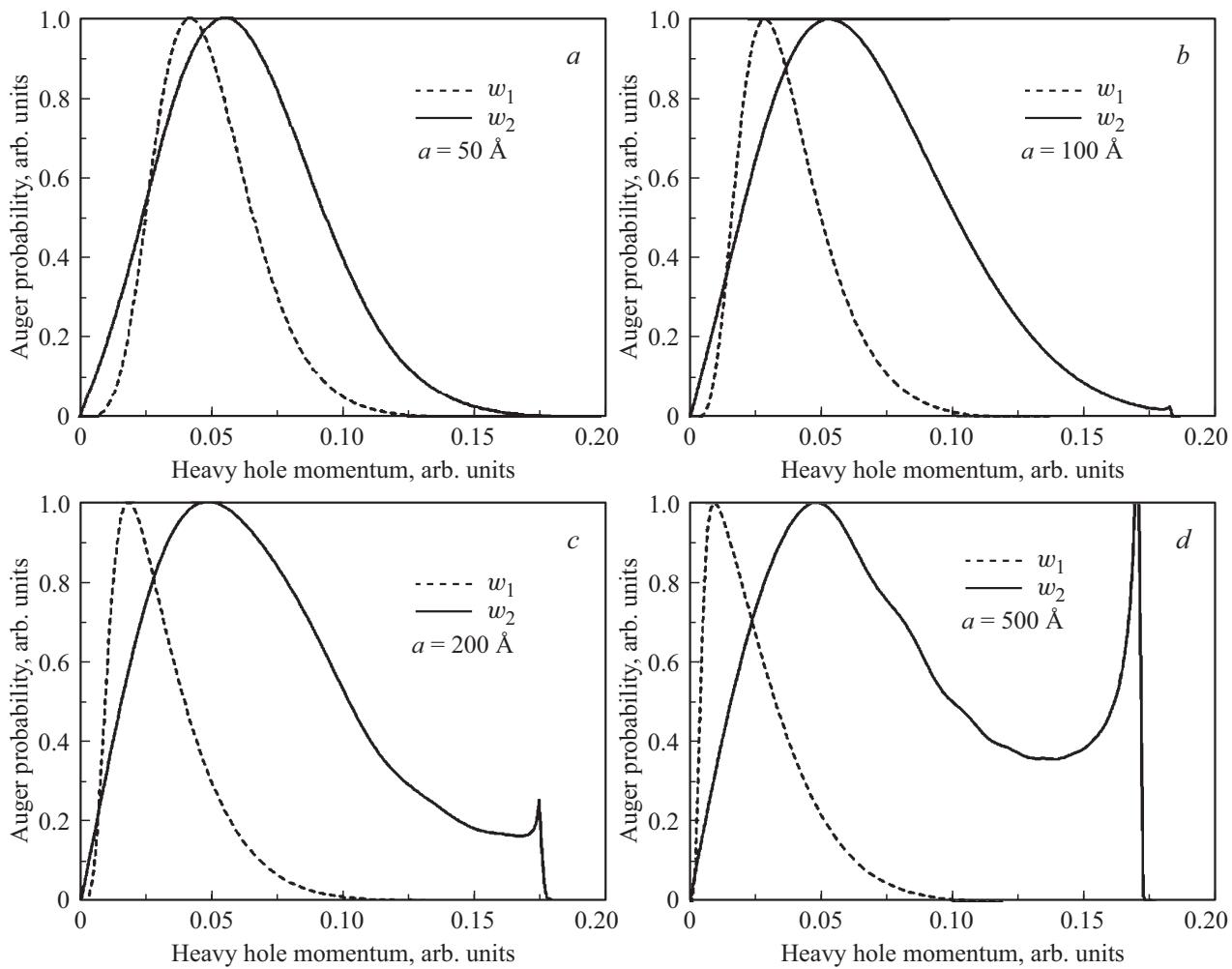


Рис. 3. Вероятности оже-переходов w_1 и w_2 , соответствующие беспороговому и квазипороговому матричным элементам $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$, в зависимости от продольного импульса тяжелой дырки при $T = 300$ К для различной ширины квантовой ямы a , Å: $a = 50$, $b = 100$, $c = 200$, $d = 500$.

зипороговому каналу ОР с матричным элементом $M^{(2)}$ и скорость G_3 — пороговому каналу ОР с матричным элементом $M^{(3)}$.

Выражения для скоростей G_1 и G_2 можно получить с помощью формулы (44), заменив в ней суммирование по k_4 интегрированием и перейдя от δ -функции по энергии к δ -функции по импульсу. В дальнейшем мы будем исследовать коэффициент оже-рекомбинации C , который связан со скоростью G соотношением

$$G = Cn^2p \quad \text{и} \quad G = Cp^2n$$

для оже-процессов CHCC и CHHS соответственно. Здесь n и p обозначают двумерные концентрации электронов и дырок соответственно. Для беспорогового процесса CHCC имеем

$$C_1 \approx \frac{32\pi^2 e^4 \hbar \gamma^2}{\kappa_0^2 E_g^3} \frac{F(\Delta_{\text{so}}/E_g)}{a(a+2/\kappa_c)^2} \frac{k_c^2 \kappa_c^2}{(k_c^2 + \kappa_c^2)^2} \frac{V_c}{E_g} \\ \times \left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^2 \left\langle \frac{q_h^2 k_h^2}{(q_h^2 + k_h^2)^3} \frac{1}{k_4(q_h)} \right\rangle, \quad (46)$$

где

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

— коэффициент порядка единицы, $x = \Delta_{\text{so}}/E_g$.

Отметим, что если кейновский параметр γ терпит разрыв, то к члену в (46)

$$\left(\frac{3V_c + V_v}{4E_g} - \frac{\kappa_0 - \tilde{\kappa}_0}{\kappa_0 + \tilde{\kappa}_0} \right)^2$$

следует добавить выражение

$$\frac{E_{0c}}{2E_g} \left(\frac{\delta\gamma}{\gamma} \right)^2,$$

где E_{0c} — энергия размерного квантования для электрона и $\delta\gamma = \gamma - \tilde{\gamma}$ — разность между кейновским параметром в квантовой яме и областью барьера. Однако эта добавка обычно пренебрежимо мала. Угловые скобки

в (46) и далее обозначают усреднение по функции распределения тяжелых дырок. В случае распределения Больцмана, которое обычно имеет место для дырок, это усреднение имеет вид

$$\langle f(q_h, k_h) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \int_0^\infty q_h f(q_h, k_{hn}) e^{-\frac{k_{hn}^2 + q_h^2}{q_T^2}} dq_h,$$

где

$$Z = \frac{2}{q_T^2} \sum_n e^{-\frac{k_{hn}^2}{q_T^2}},$$

$q_T = \sqrt{2m_h T}/\hbar$ — тепловой импульс тяжелых дырок, k_{hn} — волновой вектор, соответствующий n -му уровню размерного квантования для тяжелых дырок.

Для беспорогового процесса CHHS можно получить следующее выражение: для C_1 :

$$C_1 \approx \frac{2\pi^2 e^4}{\kappa_0^2 \hbar} \frac{V_c}{E_g} \frac{k_c^2 \kappa_c^2}{(k_c^2 + \kappa_c^2)^2} \frac{\tilde{F}(\Delta_{so}/E_g)}{a^2(a+2/\kappa_c)} \frac{\hbar^3}{m_{so}^3(E_g - \Delta_{so})^3} \\ \times \left\langle \frac{k_{h1}^2 k_{h2}^2 q_{h1}^2 (q_{h1}^2 + q_{h2}^2)}{(q_{h1}^2 + k_{h1}^2)^3 (q_{h2}^2 + k_{h2}^2)} \right\rangle, \quad (47)$$

где

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

Угловые скобки в (47) обозначают усреднение по функции распределения двух тяжелых дырок. При выводе (47) мы предполагали, что $E_g - \Delta_{so} \gg m_h/m_{so} T$.

Аналогично для квазипорогового процесса CHCC мы получаем следующее выражение для C_2 :

$$C_2 \approx \frac{\pi^2 e^4 \hbar^3 \gamma^4}{\kappa_0^2 E_g} \frac{F(\Delta_{so}/E_g)}{a(a+2/\kappa_c)^2} \\ \times \left\langle \frac{q_c^2 k_h^2 + q_h^2 (k_c^2 + \frac{1}{2} q_c^2)}{(q_h^2 + k_h^2) k_4(q_h)} \frac{1 - \cos(k_f - k_h - 2k_c)a}{2(k_f - k_h - 2k_c)^2} \right\rangle. \quad (48)$$

Непосредственное вычисление оже-коэффициента C_2 для квазипорогового процесса CHHS дает громоздкое выражение. Далее приводится упрощенное выражение для достаточно узких квантовых ям при $k_c \gg q_c$:

$$C_2 \approx \frac{\pi^2 e^4}{4\kappa_0^2} \frac{E_c}{E_g} \frac{\hbar^3}{m_{so}^2(E_g - \Delta)^3} \frac{\tilde{F}(\Delta_{so}/E_g)}{a^2(a+2/\kappa_c)} \\ \times \left\langle \frac{1 - \cos(k_{so} - k_{h1} - k_{h2} - k_c)a}{2(k_{so} - k_{h1} - k_{h2} - k_c)^2} \right. \\ \left. \times \frac{q_{h2}^2 ((k_{so}^2 + k_{h1}^2)q_{h1}^2 + q_{h2}^2 k_{h1}^2 + 2k_{h1}^2 (\mathbf{q}_{h1} \cdot \mathbf{q}_{h2}) + [\mathbf{q}_{h1} \times \mathbf{q}_{h2}]^2)}{(q_{h1}^2 + k_{h1}^2)(q_{h2}^2 + k_{h2}^2)k_{so}} \right\rangle. \quad (49)$$

И наконец, для порогового процесса CHCC мы имеем следующее выражение для C_3 :

$$C_3 \approx \frac{32\pi^2 e^4}{\kappa_0^2 \hbar E_g} \frac{a}{(a+1/\kappa_c)^3} \frac{1 + \frac{7}{9}x + \frac{1}{6}x^2}{(1+x/3)^2} \frac{1 + \frac{2}{3}x}{1+x} \\ \times \left\langle \frac{q_{th}^2}{q_T^2} \frac{q_c^2}{(q_{th}^2 + k_h^2)^3} e^{-\frac{q_{th}^2}{q_T^2} \alpha^2} \right\rangle. \quad (50)$$

Здесь α — множитель, входящий в выражение (41). В (50) мы усредняем только по дискретным квантовым состояниям тяжелых дырок. Пороговый импульс q_{th} находится из закона сохранения энергии и продольной компоненты квазимпульса:

$$E_f(\sqrt{k_f^2 + q_{th}^2}) = E_g + \frac{\hbar^2(q_{th}^2 + k_h^2)}{2m_h} + \frac{\hbar^2(k_{c1}^2 + k_{c2}^2)}{2m_c}.$$

Для простоты здесь мы пренебрегли продольными импульсами электронов при определении пороговой энергии вследствие их малости. Однако мы учитываем энергию размерного квантования электронов, так как она меняет эффективную ширину запрещенной зоны в квантовой яме. Если разложить энергию возбужденного электрона E_f в ряд по импульсам вблизи $q_{th} = Q$, где Q — значение импульса электрона, соответствующего энергии, равной E_g ($Q \approx \sqrt{\frac{4m_c E_g}{\hbar^2}}$), то можно получить следующую оценку для величины порогового импульса:

$$q_{th} \approx \sqrt{\frac{4m_c E_g}{\hbar^2} + \frac{3}{2} \left(k_c^2 + \frac{m_c}{m_h} k_h^2 \right)}. \quad (51)$$

Если ширина квантовой ямы стремится к бесконечности, то пороговый импульс стремится к своему объемному значению [10]. Кроме того, необходимо учитывать, что для широких квантовых ям с большим числом уровней введенный множитель α (см. (43)) стремится к δ -функции, выражющей закон сохранения поперечной компоненты квазимпульса:

$$\alpha^2 \longrightarrow \frac{\pi}{128} a \sum \delta(k_h \pm k_{c1} \pm k_{c2} \pm k_{c4}).$$

Для узких квантовых ям пороговая энергия для процесса CHCC возрастает (см. (51)), и коэффициент оже-рекомбинации C_3 (50) уменьшается по сравнению с объемным значением на множитель

$$\exp\left(\frac{3k_c^2}{2q_T^2}\right) \approx \exp\left(\frac{3m_c}{2m_h} \frac{E_{0c}}{T}\right).$$

Легко оценить характерную ширину квантовой ямы, для которой этот эффект становится существенным, из условия равенства единицы показателя экспоненты:

$$E_{0c} \approx T \frac{2m_h}{3m_c} \Leftrightarrow a \approx \pi \frac{1}{q_T}. \quad (52)$$

Таким образом, при ширинах квантовой ямы a , меньших нескольких обратных тепловых импульсов

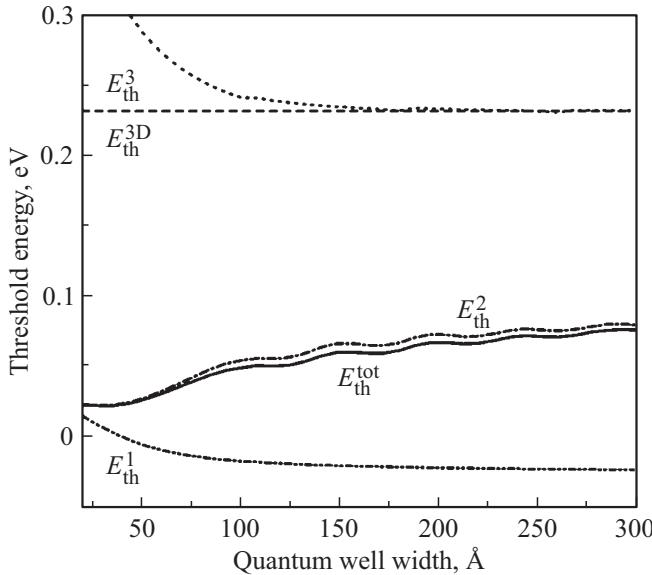


Рис. 4. Зависимость пороговой энергии для CHCC-процесса от ширины квантовой ямы для трех механизмов оже-рекомбинации: беспорогового (E_{th}^1), квазипорогового (E_{th}^2) и порогового (E_{th}^3) при $T = 300$ К. Сплошная кривая соответствует пороговой энергии $E_{\text{th}}^{\text{tot}}$ для суммарного коэффициента оже-рекомбинации $C = C_1 + C_2$. Горизонтальная пунктирная линия соответствует пороговой энергии E_{th}^{3D} для трехмерного оже-процесса.

$a \lesssim \pi/q_T$ пороговая энергия $E_{\text{th}}^3(a)$ становится существенно больше объемного значения E_{th}^{3D} (см. рис. 4). Для полупроводниковых соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ при комнатной температуре равенство (52) достигается при ширине квантовой ямы ~ 100 Å.

Для порогового процесса CHHS импульсы тяжелых дырок не определяются пороговыми условиями и поэтому приходится произвести интегрирование по ним. При этом оказывается невозможным получить точное аналитическое выражение для оже-коэффициента C_3 для процесса CHHS вследствие того, что матричный элемент M_3 очень громоздкий. Однако легко получить приближенное выражение, вынося усредненный квадрат матричного элемента за знак интегрирования:

$$C_3 \approx \frac{2\pi}{\hbar} \langle M_3^2 \rangle \frac{1}{2\pi^2 q_T^4} \int q_{h1} dq_{h1} q_{h2} dq_{h2} d\phi_{h1} d\phi_{h2} e^{-\frac{q_{h1}^2 + q_{h2}^2}{q_T^2}} \times \delta \left(\tilde{E}_g - \Delta - \frac{\hbar^2(\mathbf{q}_{h1} + \mathbf{q}_{h2})^2}{2m_{\text{so}}} + \frac{\hbar^2 q_{h1}^2}{2m_h} + \frac{\hbar^2 q_{h2}^2}{2m_h} \right). \quad (53)$$

Здесь $\tilde{E}_g = E_g + E_{0e} + 2E_{0h} - E_{0\text{so}}$, где E_{0e} , E_{0h} — энергии размерного квантования для электронов, дырок и so-дырок соответственно. Введем пороговый импульс, положив его равным

$$Q_{\text{th}}^2 = \frac{2(\tilde{E}_g - \Delta_{\text{so}})m_{\text{so}}}{\hbar^2(2 - \mu_{\text{so}})},$$

где $\mu_{\text{so}} = m_{\text{so}}/m_h$. Тогда выражение для C_3 принимает вид

$$C_3 \approx \frac{2m_{\text{so}}}{\hbar^3 Q_{\text{th}}^2} e^{-\frac{Q_{\text{th}}^2}{q_T^2}} \langle M_3^2 \rangle. \quad (54)$$

Учитывая, что $Q_{\text{th}} \gg k_{\text{so}}$, получаем

$$\begin{aligned} C_3 &\approx \frac{256m_{\text{so}}\pi^2 e^4}{\hbar^3 \kappa_0^2} \frac{Q_{\text{th}}^2}{(Q_{\text{th}}^2 + 2k_h^2)^4} \\ &\times \frac{V_c}{E_g} \frac{k_c^2}{k_c^2 + \kappa_c^2} \frac{(1 - \lambda_{\text{so}})^2}{1 + 2\lambda_{\text{so}}^2} \tilde{\alpha}^2 e^{-\frac{Q_{\text{th}}^2}{q_T^2}}, \end{aligned} \quad (55)$$

где $\tilde{\alpha}$ — множитель, определенный как в случае процесса CHCC (см. (41)), λ_{so} получена из выражения для λ_l (см. (П.П.3)) подстановкой k_{so} вместо k_l .

Рассмотрим подробнее коэффициент оже-рекомбинации C_2 для квазипорогового процесса CHCC. При $a \rightarrow \infty$ в усредняемой функции в (48) можно произвести замену:

$$\frac{1 - \cos(k_f - k_h - 2k_c)a}{2(k_f - k_h - 2k_c)^2} \longrightarrow \frac{\pi a}{2} \delta(k_f - k_h - 2k_c). \quad (56)$$

Из этой формулы отчетливо видно наличие порога в этом пределе из-за закона сохранения квазимпульса, и коэффициент C_2 после домножения на a^2 переходит в трехмерное выражение. Для сравнения мы приведем результат работы [10] для C_{3D} и наше предельное выражение:

$$C_{3D} = 6\sqrt{2\pi^5} \frac{e^4 m_c \hbar^3}{\kappa_0^2} \frac{1}{E_g^{5/2} T^{1/2} m_c^{1/2} m_h^{3/2}} e^{-\frac{2m_c}{m_h} \frac{E_g}{T}}, \quad (57)$$

$$C_2 \cdot a^2 = 6 \frac{16\sqrt{2\pi^5}}{27} \frac{e^4 m_c \hbar^3}{\kappa_0^2} \frac{1}{E_g^{5/2} T^{1/2} m_c^{1/2} m_h^{3/2}} e^{-\frac{2m_c}{m_h} \frac{E_g}{T}}. \quad (58)$$

Множитель 4 в (58) возникает из-за того, что при вычислении M_2 согласно (39) необходимо учитывать не только слагаемое с $k = k_{c1} + k_{c2} + k_h$, но также и слагаемые с $k = k_{c1} - k_{c2} + k_h$, $k = -k_{c1} + k_{c2} + k_h$, и $k = -k_{c1} - k_{c2} + k_h$. При стремлении ширины квантовой ямы к бесконечности, все четыре слагаемых дают одинаковый вклад в C_2 . Как видно, различие между выражениями (57) и (58) имеется только в численном множителе. Небольшое расхождение в $\approx 2/3$ раза связано с тем, что при наличии большого числа электронных уровней необходимо различать импульсы размерного квантования электронов между собой, $k_{c1} \neq k_{c2}$. Кроме того, выражение (57) было получено для упрощенной модели, когда величина спин-орбитального расщепления предполагается бесконечно большой. При выводе же (58) использовалось условие $\Delta_{\text{so}} \leq E_g$, которое выполняется для большинства узкозонных полупроводников $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. При вычислении (58) мы пренебрегли величиной V_c по сравнению с E_g .

В общем случае вместо $C_2 a^2$ необходимо использовать $(C_2 + C_3)a^2$, и выражение (58) останется справедливым. Однако предельный переход от квазипорогового к пороговому процессу (см. (56)) можно осуществить только для очень широких квантовых ям. Качественный критерий этого перехода можно получить из анализа вероятности оже-перехода как функции импульса тяжелой дырки. Как уже отмечалось выше, в широких квантовых ямах доминирует квазипороговый процесс с коэффициентом C_2 . Вероятность этого процесса имеет два характерных экстремума (см. 48). Первый из них соответствует максимуму квадрата матричного элемента перехода вблизи порогового значения импульса тяжелой дырки. Ширина этого максимума порядка обратной ширины квантовой ямы. Второй лежит вблизи значения теплового импульса дырки q_T . Тогда

$$C_2 \approx C_2^{\text{th}}(Q_h \approx q_{\text{th}}) + C_2^T(Q_h \approx q_T), \quad (59)$$

где Q_h — значение импульса тяжелой дырки: $Q_h^2 = k_h^2 + q_h^2$;

$$\frac{C_2^T}{C_2^{\text{th}}} \approx \frac{\lambda_{E_g}}{a} \left(\frac{T}{E_{\text{th}}} \right)^{3/2} e^{\frac{E_{\text{th}}}{T}}. \quad (60)$$

Здесь $\lambda_{E_g} \approx 2\pi/q_{\text{th}}$ — характеристическая длина волны электрона с энергией, близкой к E_g . Из сравнения членов C_2^{th} и C_2^T можно получить критерий перехода квазипорогового процесса ОР в трехмерный пороговый процесс:

$$a \gg a_c,$$

где

$$a_c = \lambda_{E_g} \left(\frac{T}{E_{\text{th}}} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{E_{\text{th}}}{T} \right). \quad (61)$$

Для полупроводников с шириной запрещенной зоны ~ 1 эВ при комнатной температуре критическая толщина (a_c) может достигать нескольких тысяч ангстрем. Однако величина a_c значительно больше, чем длина свободного пробега носителей в полупроводниках. Это с очевидностью показывает, что правильный расчет оже-коэффициента в однородных полупроводниках должен включать процессы межчастичного рассеяния, если критическая ширина a_c превышает длину свободного пробега носителей (см. Приложение I).

При уменьшении ширины квантовой ямы максимум вероятности w_2 как функции импульса тяжелых дырок сдвигается в длинноволновую сторону (см. рис. 3). Это приводит к уменьшению пороговой энергии этого процесса и, как следствие, к ослаблению температурной зависимости коэффициента оже-рекомбинации.

На рис. 4 представлены зависимости пороговой энергии для процесса СНСС от ширины квантовой ямы для всех трех механизмов оже-рекомбинации C_1 , C_2 и C_3 в отдельности и для суммарного процесса оже-рекомбинации $C = C_1 + C_2 + C_3$, определенных по формуле

$$E_{\text{th}}^i(T) = T^2 \frac{d \ln C_i}{dT}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (62)$$

Пороговая энергия для квазипорогового процесса меньше ее трехмерного значения, поскольку значение критической толщины $a_c \approx 1000$ Å больше максимальной ширины квантовой ямы (см. рис. 4). Для беспорогового оже-процесса пороговая энергия убывает с ростом ширины квантовой ямы и при определенной толщине становится отрицательной. Такое поведение пороговой энергии связано с тем, что для достаточно широких квантовых ям коэффициент оже-рекомбинации C_1 становится убывающей функцией температуры (см. рис. 5). С ростом ширины квантовой ямы пороговая энергия для суммарного оже-процесса стремится к своему предельному значению E_{th}^{3D} , отмеченному на рис. 4.

Перейдем к рассмотрению беспорогового оже-процесса. Как уже отмечалось выше, вероятность беспорогового оже-перехода не имеет никаких особенностей как функция импульса тяжелой дырки. Поэтому коэффициент C_1 имеет слабую неэкспоненциальную температурную зависимость. Впервые это было подробно исследовано в работе [13]. Кроме того, функция $C_1(T)$ немонотонна и имеет максимум. Наличие такого максимума легко объяснить. При малых температурах и, соответственно, малых продольных импульсах носителей их волновые функции почти ортогональны и значение C_1 мало. С ростом температуры возрастает характерный импульс, переданный при кулоновском взаимодействии (он приблизительно равен тепловому импульсу тяжелой дырки). Поэтому при низких температурах оже-коэффициент является возрастающей функцией температуры. При дальнейшем росте температуры коэффициент оже-рекомбинации $C_1(T)$ достигает максимума и начинает убывать, так как кулоновское дальнодействующее взаимодействие, ответственное за оже-процесс, мало для больших переданных импульсов.

Температуру, при которой коэффициент ОР имеет максимум, легко оценить из соображений равенства энергии размерного квантования дырок температуре $T \approx \hbar^2 \pi^2 / 2m_h a^2$. Отметим, что этого максимума не было бы, если бы мы считали интеграл перекрытия I_{th} пропорциональным переданному импульсу. Такое приближение, применяемое для большинства исследуемых структур, на наш взгляд, является ничем не оправданным допущением, хотя часто используемым в литературе (см., например, [25], и приводит к неправильным выражениям для скорости оже-рекомбинации и к неправильным ее зависимостям от температуры и параметров квантовой ямы).

Оже-коэффициент C_1 имеет очень резкую зависимость от ширины квантовой ямы a . Для широких квантовых ям, даже после умножения на a^2 , $C_1 a^2$ остается убывающей функцией ширины квантовой ямы. Поэтому такой процесс может быть преобладающим только для достаточно узких квантовых ям. При $a \approx 1/k_c$ коэффициент C_1 имеет максимум, связанный со слабым перекрытием волновых функций носителей заряда. При дальнейшем уменьшении ширины квантовой ямы скорость беспорогового оже-процесса плавно убывает из-за уменьшения

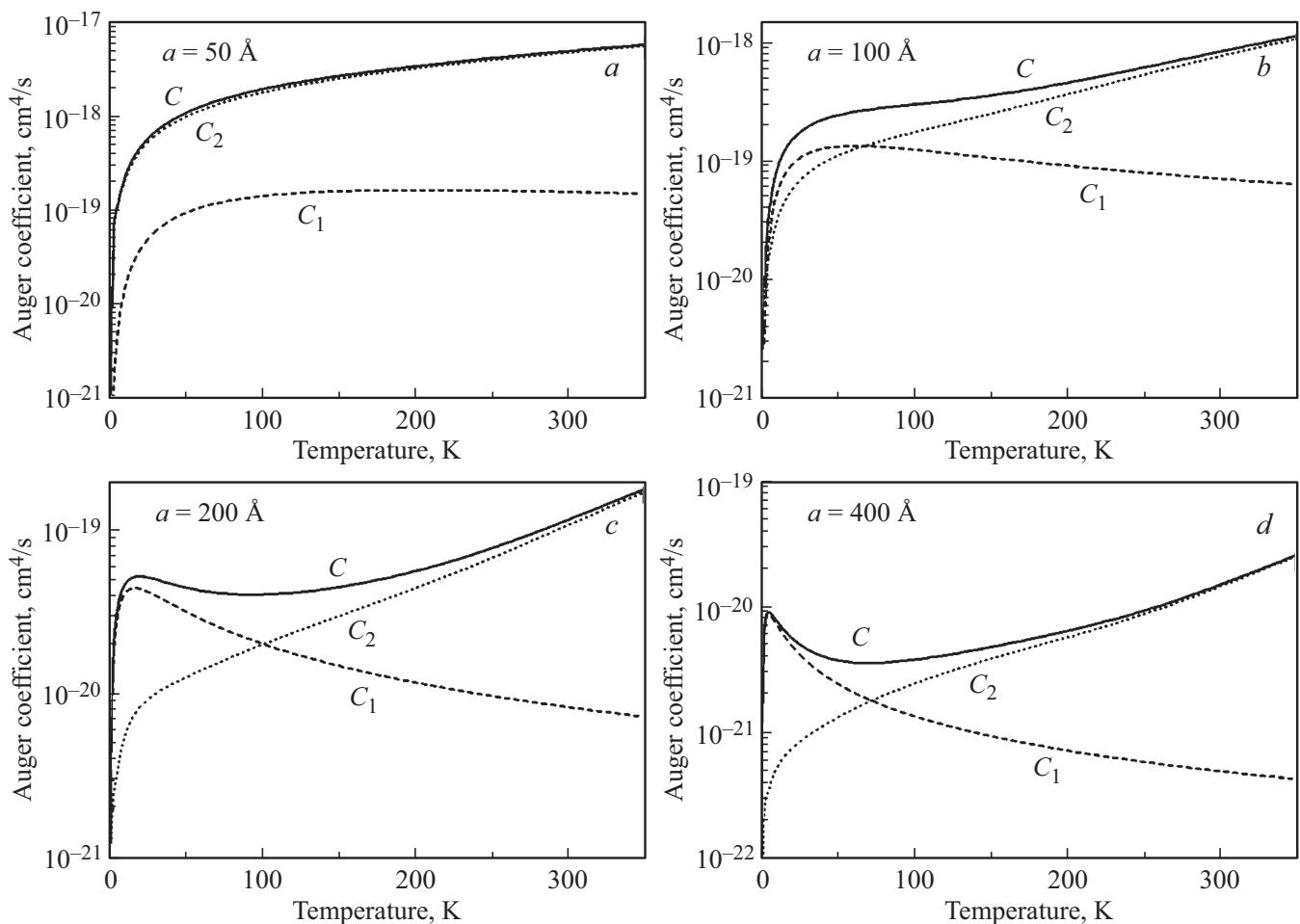


Рис. 5. Температурные зависимости полного оже-коэффициента и парциальных вкладов беспорогового и квазипорогового механизмов при различных ширинах квантовой ямы.

перекрытия волновых функций электронов и дырок. Аналогичное выражение для C_1 для процесса CHCC получено в работах [15,16].

На рис. 6 приведены зависимости коэффициентов оже-рекомбинации C_1 и C_2 от ширины квантовой ямы при различных температурах для модельной структуры на основе соединения InGaAsP. Видно, что все кривые демонстрируют резко выраженный максимум. Положения этих максимумов для C_1 и C_2 практически не зависят от температуры. Максимум для порогового процесса (C_3) достигается при больших значениях ширины квантовой ямы, чем для квазипорогового и беспорогового процессов, и его положение смещается с ростом температуры. Это в первую очередь связано с уменьшением пороговой энергии для порогового процесса с увеличением ширины квантовой ямы (см. рис. 4), а не фактором перекрытия волновых функций.

На рис. 5 представлена температурная зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации и парциальные вклады беспорогового и квазипорогового механизмов при различной ширине квантовой ямы. Из этого рисунка видно, что для достаточно широких квантовых

ям при низких температурах преобладает беспороговый оже-процесс ($C_1 > C_2$), а при высоких температурах, наоборот, величина квазипорогового процесса становится больше ($C_2 > C_1$). Поэтому зависимость суммарного коэффициента оже-рекомбинации от температуры имеет характерный вид с максимумом и минимумом. С ростом ширины квантовой ямы и максимум и минимум коэффициента оже-рекомбинации смещаются в сторону низких температур и в пределе квантовой ямы бесконечной ширины исчезают. Таким образом, в случае однородного полупроводника коэффициент оже-рекомбинации есть монотонная функция температуры. Заметим, что при вычислении зависимости коэффициентов оже-рекомбинации от температуры использовалось Больцмановское распределение носителей. При низких температурах электроны и дырки, как правило, подчиняются статистике Ферми–Дирака. Следовательно, средние импульсы электронов и дырок, участвующих в оже-процессе, слабо зависят от температуры. В результате коэффициент оже-рекомбинации имеет более плавную зависимость от температуры и не обращается в нуль при $T \rightarrow 0$.

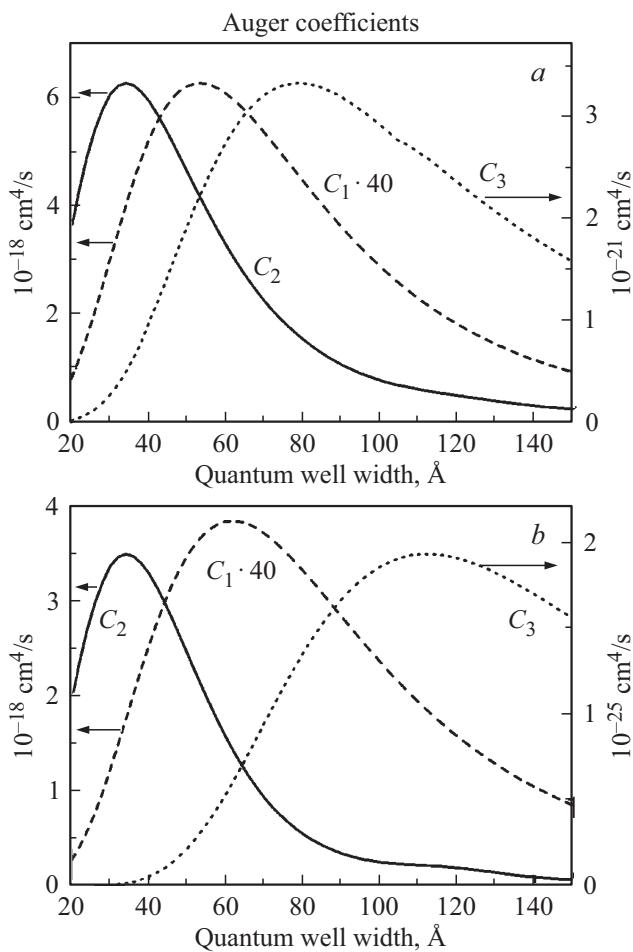


Рис. 6. Оже-коэффициенты C_1 , C_2 и C_3 для беспорогового, квазипорогового и порогового процессов в зависимости от ширины квантовой ямы при различных температурах T , К: $a = 150$, $b = 300$.

На рис. 7 представлена зависимость беспорогового коэффициента оже-рекомбинации C_1 от температуры при различных значениях энергии Ферми дырок для квантовых ям различной ширины. Существенные различия между коэффициентами оже-рекомбинации для распределений Ферми–Дирака и Больцмана имеются в случае $T \ll E_F$, где E_F — энергия Ферми дырок. Это условие обычно реализуется только в случае очень низких температур, при которых процесс оже-рекомбинации не актуален.

3.4. Процесс оже-рекомбинации в квантовых ямах с участием фононов

При высоких температурах в однородных полупроводниках пороговый процесс оже-рекомбинации преобладает ($C^{3D} \propto e^{-\frac{E_{\text{th}}}{T}}$). Однако при достаточно низкой температуре такой процесс становится экспоненциально слабым. В этом случае скорость оже-рекомбинации больше не определяется рассеянием двух электронов

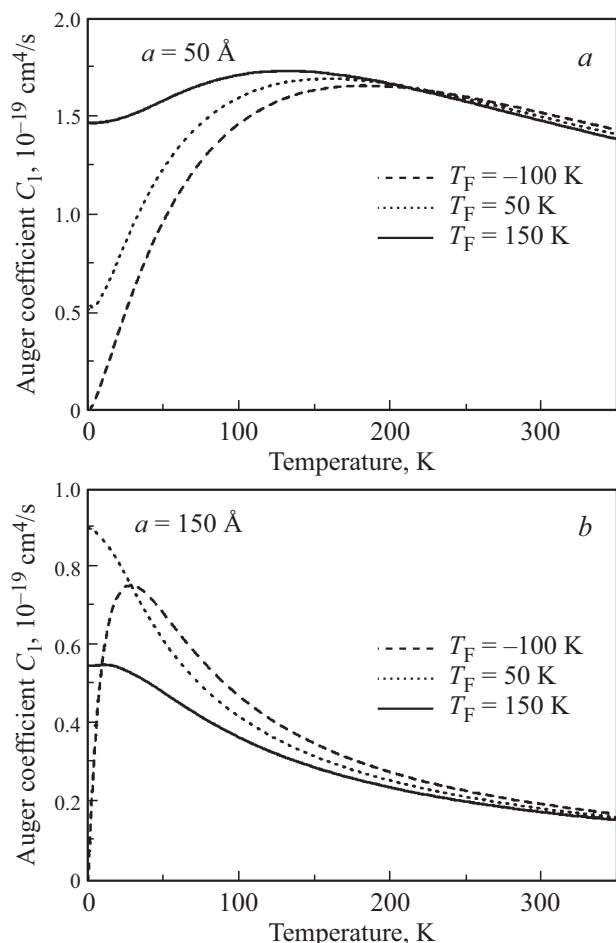


Рис. 7. Сравнение зависимостей беспорогового коэффициента оже-рекомбинации C_1 от температуры при различных значениях энергии Ферми дырок для двух различных значений ширины квантовой ямы a , Å: $a = 50$, $b = 150$. На рисунке T_F обозначает энергию Ферми, выраженную в градусах. Кривая с $T_F = -100\text{ K}$ приближенно соответствует статистике Больцмана.

(двух дырок). Следует учитывать механизмы, приводящие к снятию порога. Считается, что главным механизмом такого рода является испускание и поглощение виртуального оптического фонона. За счет передачи большого импульса фонону порог ОР для тяжелых дырок снимается и скорость такого оже-процесса представляет собой степенную функцию температуры [26–28]. Вероятность оже-рекомбинации с участием фононов рассчитывается во 2-м порядке теории возмущений для электрон-электронного (дырочно-дырочного) и электрон-фононного (дырочно-фононного) взаимодействия [29].

Для квантовых ям ситуация сильно отличается от объемного случая даже в 1-м порядке теории возмущений благодаря наличию беспорогового процесса. Поэтому *a priori* очевидно, что условия, при которых фононный оже-процесс в квантовой яме доминирует над бесфононным, сильно зависят от ширины квантовой ямы.

Как уже отмечалось, в квантовой яме существуют три процесса оже-рекомбинации: пороговый, квазипороговый и беспороговый. Коэффициент оже-рекомбинации для порогового процесса с участием фононов довольно легко вычисляется при выполнении условий [28]:

$$E_g \gg 2\mu E_g \gg \hbar\omega_{lo}, \quad (63)$$

где ω_{lo} — частота оптического фона, $\mu = m_e/m_h$. Можно показать, что коэффициент фононного оже-процесса выражается через ранее рассчитанный для прямого процесса (50) следующим образом:

$$C_{ph}^3 \approx C_3 \frac{e^2 \hbar \omega_{lo}}{2\bar{\kappa}a} \frac{T}{E_{th}^{2D}} g(a, k_{th}) \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{lo}}{T}} - 1} \times \left[\frac{e^{\frac{\hbar\omega_{lo}}{T}}}{(E_{th}^{2D} - \hbar\omega_{lo})^2} + \frac{1}{(E_{th}^{2D} + \hbar\omega_{lo})^2} \right] e^{E_{th}^{2D}/T}, \quad (64)$$

где $\bar{\kappa} = \frac{\kappa_0 \kappa_\infty}{\kappa_0 - \kappa_\infty}$; κ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость среды; $g(a, k_{th})$ — множитель, отражающий двумерный характер дырок в квантовой яме [30]:

$$g(a, k_{th}) = k_{th}^2 a^2 \left[\frac{1}{2k_{th}^2 a^2} + \frac{1}{4(\pi^2 + k_{th}^2 a^2)} \right] \times \left[1 - \frac{1 - e^{-2k_{th}a}}{2k_{th}a} \frac{2\pi^4}{(\pi^2 + k_{th}^2 a^2)(2\pi^2 + 3k_{th}^2 a^2)} \right]. \quad (65)$$

Для сравнения удобно привести соответствующее трехмерное выражение для коэффициента оже-рекомбинации с участием фононов:

$$C_{ph}^{3D} \approx C^{3D} \frac{e^2 \hbar \omega_{lo}}{2\sqrt{\pi}\bar{\kappa}} \left(\frac{T}{E_{th}^{3D}} \right)^{3/2} \frac{k_{th}}{e^{\hbar\omega_{lo}/T} - 1} \times \left[\frac{e^{\frac{\hbar\omega_{lo}}{T}}}{(E_{th}^{3D} - \hbar\omega_{lo})^2} + \frac{1}{(E_{th}^{3D} + \hbar\omega_{lo})^2} \right] e^{E_{th}^{3D}/T}. \quad (66)$$

Результаты расчетов для двумерного и трехмерного процессов оже-рекомбинации с участием фононов с пороговыми матричными элементами электрон-электронного взаимодействия весьма близки. Существенное отличие для узких квантовых ям состоит в увеличении пороговой энергии E_{th}^{2D} из-за наличия уровней размерного квантования носителей заряда (51). Соответственно критерий преобладания фононного процесса оже-рекомбинации (C_{ph}^3) над бесфононным пороговым оже-процессом (C_3) в квантовых ямах выполняется при несколько больших температурах, чем в трехмерном случае. Однако, как уже отмечалось выше, пороговый оже-процесс в узких квантовых ямах сам по себе на несколько порядков слабее, чем беспороговый и квазипороговый процессы [$C_3 \ll (C_1, C_2)$]. Поэтому процесс ОР с участием фононов с пороговым матричным элементом электрон-электронного взаимодействия (M_{ee}) также не может составить конкуренцию беспороговому и квазипороговому процессам [$C_{ph}^3 \ll (C_1 C_2)$].

Рассмотрим теперь фононный оже-процесс с беспороговым матричным элементом ($M_{ee} = M^{(1)} + M^{(2)}$) для СНСС-процесса. Для простоты мы будем использовать приближение сохранения импульса при рассеянии дырки на оптическом фононе [31]. В этом случае состояние виртуальной дырки фиксировано и можно получить следующее выражение для вероятности оже-рекомбинации с участием фононов:

$$w_{i \rightarrow f} = \pm \frac{2\pi}{\hbar} \sum_s \frac{|M_{ee}|^2 |M_{ph}|^2}{(E_s \mp \hbar\omega_{LO} - E_h)^2} \frac{e^{\pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{\tau}}}{e^{\pm \frac{\hbar\omega_{LO}}{\tau}} - 1} \times \delta(E_i - E_f) d\nu_f, \quad (67)$$

где E_s — энергия виртуальной тяжелой дырки, M_{ph} — матричный элемент рассеяния виртуальной дырки на оптическом фононе; знаки „+“ и „-“ соответствуют процессам испускания и поглощения фононов соответственно. Легко видеть, что в выражении (67) имеется сингулярность, когда знаменатель обращается в нуль. Для устранения этой расходимости необходимо учитывать переходы не в стационарные, а в квазистационарные состояния тяжелой дырки, т.е. в состояния с комплексной энергией. В этом случае полюс в (67) перейдет в область комплексных энергий, тогда вероятность пропорциональна знаменателю:

$$w_{i \rightarrow f} \propto \frac{1}{(E_s \mp \hbar\omega_{LO} - E_h)^2 + \Gamma^2},$$

где $\Gamma = \hbar/\tau$. Характерные времена жизни τ , соответствующие этим состояниям, могут изменяться в широких пределах в зависимости от температуры, концентрации свободных носителей и т.д. Рассматривать резонансный процесс с участием фононов во 2-ом порядке теории возмущений имеет смысл только тогда, когда полуширина квазистационарных дырочных и фононных состояний меньше энергии оптического фона ($\hbar\omega_{lo}$). В противном случае необходимо вычислять оже-коэффициент в 1-ом порядке теории возмущений, используя функцию Лоренца

$$f(\Delta E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\Delta E^2 + \Gamma^2}$$

вместо δ -функции, выражающей закон сохранения энергии. Для процесса оже-рекомбинации с участием фононов с квазипороговым матричным элементом электрон-электронного взаимодействия возможны как резонансный, так и виртуальный оже-процессы, при этом в случае узких квантовых ям преобладает первый из них, а в случае достаточно широких — второй.

В общем случае оже-коэффициент для процесса с участием фононов может быть представлен в виде

$$C_{ph} = C_{ph}^1 + C_{ph}^2, \quad (68)$$

где

$$\begin{aligned} C_{\text{ph}}^{1,2} = & \pm \frac{\pi \omega e^2}{\kappa Z} \frac{\exp(\pm \hbar \omega_{\text{lo}} / k_B T)}{\exp(\pm \hbar \omega_{\text{lo}} / k_B T) - 1} \\ & \times \sum_{m,n,\nu_n} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \frac{d^2 q_h}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial E_4}{\partial k_4} \right)^{-1} \\ & \times \frac{|M_{ee}(n, \nu_n, \mathbf{q}_h) + \mathbf{Q}|^2}{\left(\frac{\hbar^2(m^2-n^2)\pi^2}{2a^2m_h^2} - \frac{\hbar^2(\mathbf{q}_h+\mathbf{Q})^2}{2m_h} + \frac{\hbar^2q_h^2}{2m_h} \pm \hbar \omega_{\text{lo}} \right)^2 + \Gamma^2} \\ & \times J_{n,m}(Q) f_h(m, q_h). \end{aligned} \quad (69)$$

Здесь:

$$\begin{aligned} Z = & \sum_m \int \frac{dq_h}{(2\pi)^2} f_h(m, \mathbf{q}_h), \\ J_{n,m}(Q) \approx & \frac{a}{2} \\ & \times \frac{(1 + \delta_{m,n})[(m+n)^2\pi^2 + Q^2a^2] + (m-n)^2\pi^2 + Q^2a^2}{[(m+n)^2\pi^2 + Q^2a^2][(m-n)^2\pi^2 + Q^2a^2]}, \end{aligned}$$

$f(m, q_h)$ — функция распределения дырок на m -м квантовом уровне.

Функция $J_{n,m}(Q)$ вычислена в работе [31] для невырожденной зоны. В случае рассеяния фононов на тяжелых дырках ее величина будет несколько меньше. Однако для наших целей это обстоятельство не является существенным. В (69) в качестве импульсов связанных электронов в матричный элемент электрон-электронного взаимодействия необходимо подставить их средние тепловые импульсы. Оже-коэффициенты C_{ph}^1 (знак „+“) и C_{ph}^2 (знак „-“) отвечают процессам испускания и поглощения фонона соответственно. Независимо от того, какой вид имеет матричный элемент кулоновского взаимодействия, фононный оже-процесс является беспороговым. Это соответствует тому, что основной вклад в оже-коэффициент C_{ph} вносят импульсы дырок, по порядку величины равные тепловым импульсам. Поэтому при вычислении C_{ph} в качестве продольного импульса дырки q_h можно подставить его среднее тепловое значение.

Выражение (69) легко проанализировать, если температура намного меньше энергии оптических фононов. В этом случае тепловым импульсом дырок q_h можно пренебречь по сравнению с импульсом фонона Q , который приближенно равен импульсу виртуальной дырки. Легко видеть, что вероятность оже-перехода как функции Q имеет две особенности. Первая из них соответствует минимуму знаменателя в (69) и резонансному переходу. Заметим, что для процесса, связанного с поглощением фонона, такая особенность фактически отсутствует и резонансный процесс не идет. Вторая особенность соответствует максимуму квадрата матричного элемента и, как правило, отвечает виртуальному оже-переходу. При достаточно широких квантовых ямах матричный элемент электрон-электронного взаимодействия как функция импульса тяжелой дырки имеет вид,

близкий к δ -функции. В этом случае второй экстремум преобладает, и процесс рассеяния на фононах является виртуальным. При уменьшении ширины квантовой ямы δ -функция уширяется для квазипорогового матричного элемента и, кроме того, возрастает роль беспорогового матричного элемента, слабо зависящего от Q . Это приводит к усилению резонансного оже-перехода и ослаблению виртуального. Для узких квантовых ям матричный элемент кулоновского электрон-электронного взаимодействия слабо зависит от Q , поэтому для них резонансный процесс является доминирующим. Как можно показать, в этом случае справедлива следующая оценка величины коэффициента оже-рекомбинации для фононного оже-процесса:

$$C_{\text{ph}} \approx \frac{\omega_{\text{lo}} e^2 m_h a}{8\tilde{\kappa}\hbar\Gamma} J_{1,1}(Q_0) \frac{2\pi}{\hbar} \frac{3k(E_g)}{4E_g} |M_{ee}(Q_0)|^2, \quad (70)$$

где $Q_0 = \sqrt{\frac{2m_h\omega_{\text{lo}}}{\hbar}}$. Отсюда сразу же следует, что отношение фононного коэффициента оже-рекомбинации к бесфононному имеет вид:

$$\frac{C_{\text{ph}}}{C} \approx \frac{\Gamma_{\text{ph}}}{\Gamma} \frac{(M_{ee}(Q_0))^2}{(M_{ee}(q_T))^2}, \quad (71)$$

где $C = C_1 + C_2$ — оже-коэффициент для прямого оже-процесса, $\Gamma_{\text{ph}} = \hbar/\tau_{\text{ph}}$, τ_{ph} — время рассеяния дырки на оптическом фононе, q_T — тепловой импульс дырок.

Видно, что фононный оже-процесс может доминировать над бесфононным процессом только в том случае, когда близки значения величин Γ_{ph} и Γ , или в случае предельно низких температур, когда велико отношение матричных элементов, взятых при импульсах Q_0 и q_T . Заметим, что при высоких концентрациях неравновесных носителей, когда процесс оже-рекомбинации вообще становится существенным, дырочно-дырочное рассеяние, как правило, оказывается значительно более эффективным механизмом релаксации, чем дырочно-фононное. Это приводит к тому, что отношение $\Gamma_{\text{ph}}/\Gamma$ оказывается малым и бесфононный процесс оже-рекомбинации преобладает над фононным вплоть до очень низких температур. На рис. 8 продемонстрирована зависимость коэффициента оже-перехода с участием фонона как функции температуры при различной ширине квантовой ямы. В качестве полуширины Γ взята величина 20 мэВ — характерное значение, соответствующее дырочно-дырочному рассеянию.

3.5. Обсуждение результатов

Проведенный нами анализ показал, что для процессов оже-рекомбинации CHCC и CHHS в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами имеются три различных механизма оже-рекомбинации: беспороговый, квазипороговый и пороговый. Первый из них слабо зависит от температуры. Эффективная пороговая энергия для

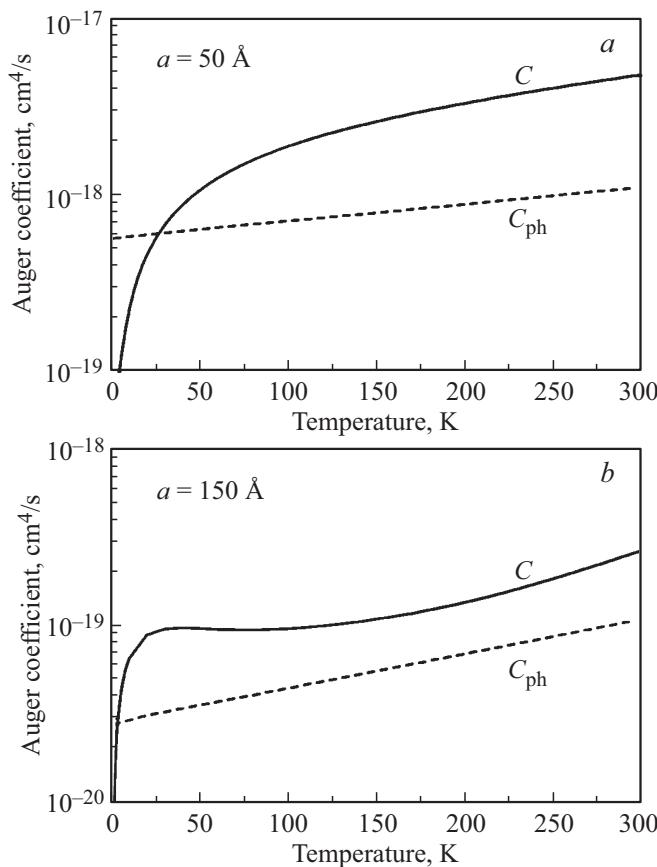


Рис. 8. Зависимость коэффициентов оже-рекомбинации для прямого беспорогового C и фононного C_{ph} процессов от температуры при различной ширине квантовой ямы.

второго процесса существенно зависит от ширины квантовой ямы (см. рис. 4). А именно она стремится к нулю для существенно узких квантовых ям и приближается к объемному значению в пределе $a \rightarrow \infty$. Поэтому не имеется четких различий между беспороговым и квазипороговым механизмами ОР в узких квантовых ямах, и их можно рассматривать как один беспороговый процесс ОР. Третий, пороговый, процесс ОР аналогичен тому, который имеет место в объемных полупроводниках. Единственное различие состоит в том, что его пороговая энергия несколько выше, чем в объемном полупроводнике, из-за роста эффективной ширины запрещенной зоны (51). В узких квантовых ямах скорость порогового процесса мала по сравнению со скоростями первых двух процессов G_1 и G_2 . В пределе $a \rightarrow a_c$ квазипороговый и пороговый оже-процессы сливаются и образуют процесс объемной оже-рекомбинации $C_2a^2 + C_3a^2 \rightarrow C^{3D}$. Критическая ширина КЯ сильно (экспоненциально) зависит от температуры и может достигать нескольких сотен ангстрем при комнатной температуре для полупроводника с $E_g \approx 1$ эВ. Скорость беспорогового процесса при переходе к объемному полупроводнику стремится к нулю. Для узких КЯ двумерный оже-коэффициент, умноженный на a^2 , превышает значение для объемного

оже-процесса вследствие доминирования беспорогового и квазипорогового процессов (рис. 9). Таким образом, процесс оже-рекомбинации в квантовых ямах оказывается усиленным по сравнению с однородным полупроводником. При низких температурах это усиление оказывается тем более существенным. Отметим, что весь анализ зависимостей коэффициентов оже-рекомбинации (C_1 , C_2 , C_3) от температуры и параметров квантовой ямы качественно применим в равной мере и к CHCC-, и CHHS-оже-процессам. Однако, поскольку мы не конкретизировали модельные структуры с квантовыми ямами, мы проиллюстрировали эти зависимости на примере CHCC-процесса.

Заметим, что существенное подавление процессов оже-рекомбинации в квантовых ямах возможно при выполнении условий $(V_c, V_v) > E_g$ и $E_2 - E_1 > E_g$ (E_1 и E_2 — энергии первого и второго уровня размерного квантования носителей) [32]; т.е. в том случае, когда энергии возбужденной частицы недостаточно для перехода в непрерывный спектр или на следующий уровень размерного квантования. Для выполнения этих условий необходимо создание структур с глубокими и узкими квантовыми ямами как для электронов, так и для дырок. Существующие в настоящее время технологии позволяют создавать подобные структуры на основе материалов InAs/AlSb [33] и InAs/GaSb/AlSb [34]. В таких глубоких

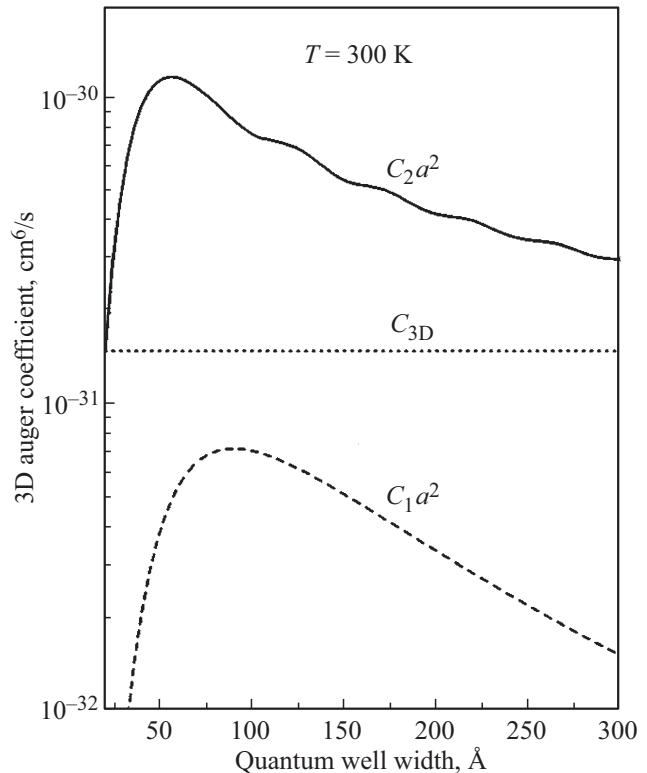


Рис. 9. Зависимость трехмерных значений (3D) оже-коэффициентов C_1a^2 и C_2a^2 от ширины квантовой ямы при $T = 300$ К. Горизонтальная линия соответствует объемному оже-коэффициенту C_{3D} .

квантовых ямах существует только пороговый процесс оже-рекомбинации, соответствующий коэффициенту C_3 . Этот коэффициент может быть на несколько порядков меньше, чем оже-коэффициенты для беспорогового и квазипорогового процессов (C_1, C_2) в мелких квантовых ямах ($(V_c, V_v) < E_g$).

Следует также отметить, что в случае квантовых ям существенные изменения претерпевает также процесс оже-рекомбинации с участием фононов. Аналогично бесфононному процессу оже-рекомбинации имеются три различных механизма фононного процесса (C_{ph}^3, C_{ph}^2 и C_{ph}^1), соответствующие пороговому, квазипороговому и беспороговому матричным элементам электрон-электронного взаимодействия. Первый процесс вполне аналогичен трехмерному. Однако в случае узких квантовых ям этот процесс заметно слабее беспорогового и порогового процессов оже-рекомбинации. В литературе именно этот процесс с участием фононов считается основным процессом оже-рекомбинации в квантовых ямах [35,36]. Процессы оже-рекомбинации при участии фононов с квазипороговым и беспороговым матричными элементами электрон-электронного взаимодействия могут являться резонансными процессами. При низких температурах они могут конкурировать с бесфононными процессами оже-рекомбинации. Однако из-за отсутствия сильной зависимости последних от температуры такая конкуренция возможна при гораздо более низких температурах, чем в трехмерном случае (см. рис. 8). С ростом ширины квантовой ямы резонансное рассеяние на фонах ослабевает и мы переходим к обычным трехмерным условиям.

3.6. Заключение

В заключение остановимся на некоторых интересных работах, вышедших в последнее время и посвященных анализу оже-рекомбинации в узкощелевых материалах.

В статье [37] разработана модель для расчета скорости оже-рекомбинации в узкоzonных квантовых ямах на основе гетероструктур HgTe/CdHgTe. Показано, что для корректного расчета скорости оже-рекомбинации в таких структурах необходимо учитывать процессы ударной ионизации и влияние свободных носителей заряда на электрон-электронное взаимодействие. Показано, что процессы релаксации могут как увеличивать, так и уменьшать скорость оже-рекомбинации в зависимости от концентрации носителей. Приведены зависимости скорости оже-рекомбинации для квантовых ям с запрещенной зоной 35 и 50 мэВ при четырех температурах 8, 100, 200 и 300 К.

Авторы работы [38] исследовали влияние шероховатости поверхности раздела на оже-рекомбинацию в квантовых ямах. Они показали, что при увеличении отношения шероховатости поверхности к толщине квантовой ямы оже-рекомбинация значительно усиливается. В частности, при рассмотрении реалистичной шероховатости поверхности раздела для квантовой ямы InGaN

увеличение скорости оже-рекомбинации по сравнению с квантовой ямой с идеальным интерфейсом может составлять приблизительно 4 порядка величины.

В работе [39] исследуется время жизни неравновесных носителей заряда в квантовых ямах на основе GaInN/GaN. Показано, что при высоких плотностях носителей заряда время жизни безызлучательной рекомбинации слабо зависит от температуры и пропорционально обратной величине плотности, что подразумевает экспонентный, беспороговый оже-процесс.

Авторы работы [40] исследовали внутреннюю квантовую эффективность квантовых ям на основе (In,Ga)N/GaN. Было предложено несколько механизмов, объясняющих снижение квантовой эффективности, включая оже-рекомбинацию, как внутреннюю, так и вызванную дефектами. Была использована атомистическая модель электронной структуры в рамках приближения сильной связи для расчета скорости излучательной и оже-рекомбинаций.

В работе [41], на основе систематического изучения зависимости пороговой плотности тока от температуры и гидростатического давления в сочетании с теоретическим анализом коэффициента усиления и пороговой плотности носителей авторы определили зависимость коэффициентов оже-рекомбинации от длины волны в лазерах на квантовых ямах InGaAsSb/GaSb, излучающих в диапазоне длин волн 1.7–3.2 мкм. Был проведен анализ соотношения скоростей оже-рекомбинации для двух процессов CHCC и CHSH.

В работе [42] предложен подробный теоретический анализ безызлучательной оже-рекомбинации в узкоzonных квантовых ямах из ртути, кадмия и теллурида (квантовые ямы CdHgTe). Рассмотрена микроскопическая модель для расчета скоростей оже-рекомбинации в квантовых ямах с различной долей Cd в зависимости от неравновесной плотности носителей с учетом сложной зонной структуры. Однако авторы не учитывали влияние пространственной неоднородности квантовой структуры на механизм ОР.

В работе [43] изучается влияние процессов оже-рекомбинации на температурное гашение фотолюминесценции в квантовых ямах HgTe/CdHgTe. Предполагается, что резонансный беспороговый оже-процесс определяет пороговые значения вынужденного излучения в широком температурном интервале.

Из анализа перечисленных публикаций следует, что авторы при исследовании процессов оже-рекомбинации не учитывают влияние пространственной неоднородности квантовых гетероструктур на механизмы оже-рекомбинации. Однако, как известно, оже-рекомбинация представляет собой процесс кулоновского взаимодействия между частицами. Как отмечено выше, воздействие гетерограницы на кулоновское взаимодействие между частицами носит фундаментальный характер: гетерограница видоизменяет законы сохранения энергии и импульса, что в результате приводит к формированию новых каналов оже-рекомбинации. Как показано в

настоящем обзоре, для всех типов квантовых гетероструктур (квантовые ямы, квантовые нити и квантовые точки) пространственная неоднородность влияет как на механизмы оже-рекомбинации, так и на зависимость скорости оже-рекомбинации от температуры и от параметров квантовой гетероструктуры, а также на величину скорости.

Конфликт интересов

Авторы обзора заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (ПИЯФ им. Б.П. Константинова, СПб., 1997).
- [2] P.T. Landsberg. *Recombination in Semiconductors* (Cambridge University Press, 1991).
- [3] P.V. Auger. C. R. Acad Sci.: Paris, **180**, 65 (1925).
- [4] З.Н. Соколова. *Теория межзонной оже-рекомбинации в прямозонных полупроводниках*: автореф. дис. канд. физ.-мат. наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Л., 1982).
- [5] A. Polkovnikov, G. Zegrya. Phys. Rev. B, **64** (7), 073205 (2001).
- [6] Г.Г. Зегря, В.И. Перель. *Основы физики полупроводников* (Физматлит, М., 2009).
- [7] A.R. Beattie, P.T. Landsberg. Proc. Roy. Soc., **A249** (1256), 16 (1959).
- [8] М.П. Михайлова, А.А. Рогачев, И.Н. Яссиевич. ФТП, **10**, 1460 (1976).
- [9] М.П. Михайлова, А.А. Рогачев, И.Н. Яссиевич. ФТП, **11**, 1882 (1977).
- [10] Б.Л. Гельмонт. ЖЭТФ, **75** (8), 536 (1978).
- [11] R.I. Taylor, R.A. Abram. Semicond. Sci. Technol., **3** (9), 859 (1988).
- [12] P. Roussignol, M. Kull, D. Ricard, F. de Rougemont, R. Frey, C. Flytzanis. Appl. Phys. Lett., **51** (23), 1882 (1987).
- [13] Г.Г. Зегря, В.А. Харченко. ЖЭТФ, **101** (1), 327 (1992).
- [14] R.I. Taylor, R.A. Abram, M.G. Burt, C. Smith. Semicond. Sci. Technol., **5** (1), 90 (1990).
- [15] M.I. Dyakonov, V.Yu. Kachorovskii. Phys. Rev. B, **49** (24), 17130 (1994).
- [16] G.G. Zegrya, A.D. Andreev, N.A. Gun'ko, E.V. Frolovskina. Proc. SPIE, 2399, 307 (1995).
- [17] I.V. Kudryashov, G.G. Zegrya, V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov. В сб.: *Compound Semiconductors (ISCS-23) 23th Int. Phys. Conf.* (St. Peterburg, Russia, September 23–27 1996), **155**, Chap. 10, p. 795.
- [18] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1**, 249 (1957).
- [19] P.C. Sercel, K.J. Vahala. Phys. Rev. B, **42**, 3690 (1990).
- [20] Р.А. Сурис. ФТП, **20** (11), 2008 (1986).
- [21] M.G. Burt. J. Phys.: Condens. Matter., **4**, 6651 (1992).
- [22] B.A. Foreman. Phys. Rev. B, **49**, 1757 (1994).
- [23] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. (Наука, М., 1972).
- [24] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нелинейистическая теория* (Наука, М., 1989).
- [25] H.L. Wang, M.J. Freeman, D.G. Steel, R. Craig, D.R. Scifres. Optics Lett., **18** (24), 2141 (1995).
- [26] A. Haug. J. Phys. C: Solid State Phys., **16**, 4159 (1983).
- [27] G.P. Agrawal, N.X. Dutta. *Long-Wavelength Semiconductor Lasers* (Van Nostrand Reinhold Company, N.Y., 1993).
- [28] A. Haug. Appl. Phys. A, **51**, 354 (1990).
- [29] A. Haug. J. Phys. Chem. Solids., **49** (6), 599 (1988).
- [30] A.S. Polkovnikov, G.G. Zegrya. Phys. Rev. B, **58** (7), 4039 (1998).
- [31] B.K. Ridley. J. Phys. C: Solid State Phys., **15** (28), 5899 (1982).
- [32] G.G. Zegrya. In: *Antimonide-Related Strained-Layer Heterostructures*, (Gordon and Breach, Amsterdam, 1997) v. 3.
- [33] S. Ideshita, A. Furukawa, Y. Mochizuki, M. Mizuta. Appl. Phys. Lett., **60** (20), 2549 (1992).
- [34] M. Sweeny, J. Xu. Appl. Phys. Lett., **54**, 546 (1989).
- [35] E.P. O'Reilly, M. Silver. Appl. Phys. Lett., **63** (24), 3318 (1993).
- [36] E.P. O'Reilly, A.R. Adams. IEEE J. Quant. Electron., **30** (2), 366 (1994).
- [37] V.Ya. Aleshkin, A.A. Dubinov, V.V. Rumyantsev. J. Appl. Phys., **138**, 135702 (2025).
- [38] Chee-Keong Tan, Wei Sun, Jonathan J. Wierer jr., Nelson Tansu. AIP Advances, **7**, 035212 (2017).
- [39] T. Langer, Al. Chernikov, D. Kalincev, M. Gerhard, H. Bremers, U. Rossow, M. Koch, A. Hangleiter. Appl. Phys. Lett., **103**, 202106 (2013).
- [40] R.M. Barrett, J.M. McMahon, R. Ahumada-Lazo, J.A. Alanis, P. Parkinson, S. Schulz, M.J. Kappers, R.A. Oliver, D. Binks. ACS Photonics, **10**, 2632 (2023).
- [41] T.D. Eales, I.P. Marko1, A.R. Adams, J.R. Meyer, I. Vurgaftman, S.J. Sweeney. J. Phys. D: Appl. Phys., **54**, 055105 (2021).
- [42] V.Ya. Aleshkin, V.V. Rumyantsev, K.E. Kudryavtsev, A.A. Dubinov, V.V. Utochkin, M.A. Fadeev, G. Alymov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, F. Teppe, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. J. Appl. Phys., **129**, 133106 (2021).
- [43] K.E. Kudryavtsev, A.A. Yantser, M.A. Fadeev, V.V. Rumyantsev, A.A. Dubinov, V.Ya. Aleshkin, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. Appl. Phys. Lett., **123**, 18 (2013).

Редактор А.Н. Смирнов

Auger-recombination mechanisms in semiconductor nanoheterostructures.

Part 1. Quantum wells

G.G. Zegrya, N.L. Bazhenov

Institute Ioffe,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract This review is devoted to the mechanisms of Auger recombination in semiconductor nanoheterostructures. A distinctive feature of nanoheterostructures is strong spatial heterogeneity caused by existence of heterogeneous boundaries. Heterogeneities have a fundamental effect on the energy value and behavior of charge carrier wave functions in quantum-dimensional heterostructures, and, as shown in this review, the heterogeneity significantly affects the macroscopic properties of semiconductor nanostructures. The presence of a heterogeneous boundary affects the electron-electron (hole-hole) interaction in quantum structures, and this effect is fundamental. The heterogeneity removes the restrictions imposed on interelectronic collision processes by the laws energy and momentum of conservation, which leads to the appearance of thresholdless Auger recombination channels, which depend weakly on temperature. The main mechanisms of Auger recombination of nonequilibrium charge carriers in semiconductor heterostructures with quantum wells (Part 1), quantum filaments, and quantum dots (Part 2) are considered. It is shown that there are three fundamentally different Auger recombination mechanisms: thresholdless, quasi-threshold, and threshold processes. The speed of the thresholdless process has weak temperature dependence. The threshold energy of the quasi-threshold process significantly depends on the width of the quantum well and is close to zero for narrow quantum wells. It is shown that thresholdless and quasi-threshold Auger processes prevail in narrow quantum wells, while threshold and quasi-threshold Auger processes prevail in wide quantum wells. The critical width of the quantum well is found at which the quasi-threshold Auger recombination channel transforms into a three-dimensional threshold Auger process. The influence of phonons on Auger recombination processes in quantum wells is also analyzed. It is shown that for narrow quantum wells, the Auger process involving phonons becomes resonant, which leads to an increase in the Auger recombination coefficient taking into account phonons. The effect of relaxation processes on Auger recombination mechanisms in homogeneous semiconductors is considered separately. It is shown that taking into account relaxation processes leads to disappearance of the energy threshold for Auger recombination processes.