

Кинетика двумерных электронов с учетом рассеяния на резонансном состоянии

© М.С. Кипа^{*,+}, П.С. Алексеев^{*,†}, И.Н. Ясиевич^{*}

^{*} Физико-технический институт им. А.Ф. Иофе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

[†] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“, 195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 9 июля 2009 г. Принята к печати 18 августа 2009 г.)

Изучена кинетика электронов в двух подзонах квантовой ямы при наличии сильного ускоряющего электрического поля вдоль интерфейсов, рассеяния на оптических и акустических фононах, а также рассеяния на резонансном квазистационарном состоянии, связанном с наличием мелких доноров. Резонансное рассеяние учитывается в рамках известной модели Брейта–Вигнера. Функция распределения строится при помощи метода „случайных блужданий“ Монте-Карло. Рассеяние на резонансном состоянии приводит к накоплению электронов вблизи резонансного состояния и в целом к существенной модификации функции распределения стриммингового режима. Получена зависимость относительной заселенности рассматриваемых подзон от температуры решетки.

1. Введение

При легировании квантовых гетероструктур в непрерывном спектре двумерных носителей могут возникать квазистационарные резонансные состояния [1]. Наличие таких состояний кардинально влияет на функцию распределения электронов. В работе [2] было изучено влияние рассеяния на резонансном состоянии на кинетику двумерных электронов в квантовой яме в условиях, когда приложено сильное электрическое поле в плоскости ямы и действует неупругое рассеяние на оптических фононах (стримминговый режим). Рассмотрение проводилось в рамках простейшей модели: изучались электроны только одной подзоны размерного квантования, резонансное рассеяние учитывалось по s -модели Брейта–Вигнера. Ширина резонансного состояния считалась равной нулю при фиксированном полном сечении рассеяния. Такой подход позволил построить аналитическое решение уравнения Больцмана и вычислить заселенность резонансных состояний.

Изучение кинетики двумерных электронов в квантовых ямах с донорной примесью представляет интерес в связи с исследованиями, направленными на создание терагерцовых лазеров на основе легированных квантово-размерных гетероструктур [1]. Недавно в работах [3] изучался спектр электролюминесценции в терагерцовой области из многоямных AlGaAs/GaAs-структур, легированных в области ямы кремнием. Были обнаружены линии, соответствующие переходам между резонансными и локализованными состояниями мелких доноров. Вопрос о виде функции распределения является определяющим для анализа спектра электролюминесценции и ее поляризационных зависимостей.

Настоящая статья посвящена развитию теории [2]. Будут представлены результаты моделирования методом

Монте-Карло функции распределения двумерных электронов в присутствии рассеяния на резонансном состоянии для реалистической гетероструктуры n -типа. В отличие от работы [2], учитывались рассеяние на акустических фононах и наличие нескольких уровней размерного квантования. Показано, что в присутствии резонансного рассеяния существенно меняется вид функции распределения носителей: стримминговый режим разрушается и происходит накопление носителей в состояниях, лежащих по энергии ниже резонансного состояния. Изучено влияние температуры решетки и электрического поля на распределение электронов по состояниям подзон квантовой ямы. Конкретные вычисления выполнены для случая легированной кремнием AlGaAs/GaAs-гетероструктуры, изучавшейся в работах [3].

2. Постановка задачи

Будем рассматривать двумерные электроны в гетероструктуре с параболическим спектром, живущие в первых двух подзонах квантовой ямы E_1 и E_2 . Соответственно спектр электронов определяется формулой

$$E_{\mathbf{k},n} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор в плоскости ямы, n — номер подзоны, m — эффективная масса. Пусть z — направление роста гетероструктуры. Тогда волновые функции имеют вид

$$\psi_{\mathbf{k},n}(\varrho, z) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\varrho}}{\sqrt{S}} u_n(z), \quad (2)$$

где $\varrho = (x, y)$, S — нормировочная площадь. В центре ямы легирована мелкими донорами. В объемном материале донор создает потенциал кулоновского центра. При помещении его в центр ямы уровень $2p$ расщепляется на два уровня: $2p_{x,y}$ и $2p_z$ [1]. Ширина и глубина

[†] E-mail: pavel.alekseev@mail.ioffe.ru

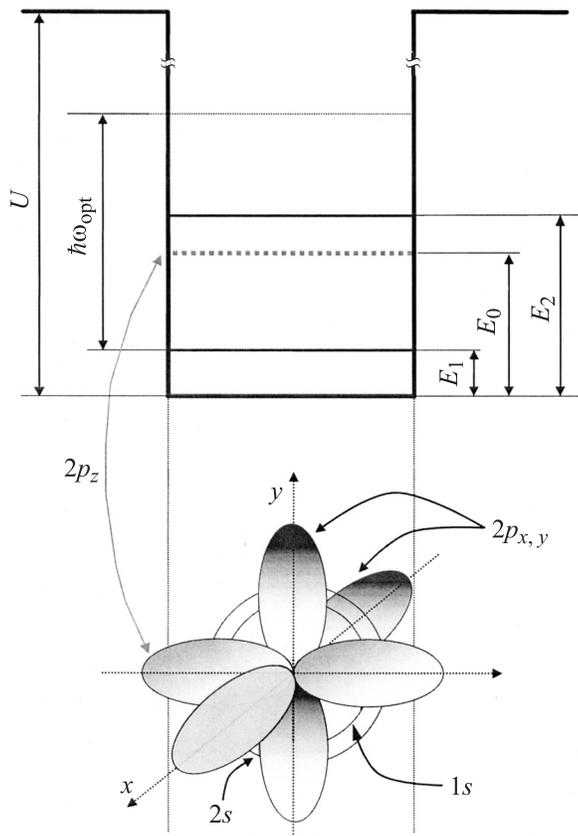


Рис. 1. Исследуемая квантовая яма с двумя подзонами размерного квантования E_1 и E_2 и с резонансным уровнем $2p_z$. Схематически пояснено происхождение резонансного уровня $2p_z$ из орбитали водородоподобного мелкого донорного центра за счет сжатия z -орбитали интерфейсами квантовой ямы.

ямы предполагаются такими, что уровень донора $2p_z$ попадает в область непрерывного спектра подзоны E_1 (см. рис. 1). Состояние $2p_z$ образовано преимущественно волновой функцией $\psi_{k,2}$ и уровень $E_{2p_z} \equiv E_0$ лежит вблизи уровня E_2 , поэтому разогретые электрическим полем электроны подзоны E_1 будут рассеиваться на резонансном состоянии, образованном уровнем $2p_z$, и одновременно за счет взаимодействия с акустическими фононами частично переходить в подзону E_2 . Таким образом, рассмотрение электронов в двух подзонах является разумной минимальной моделью реалистической системы, в которой может происходить резонансное рассеяние.

В работах [3] изучалась легированная кремнием квантовая яма состава $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$; ширина квантовой ямы составляла $a = 30$ нм, глубина — $U = 330$ мэВ. Используя для массы электрона в яме и в барьере значения $m_w = 0.0665m_0$ и $m_b = 0.092m_0$ соответственно, для уровней электрона в яме было получено: $E_1 = 5.0$, $E_2 = 20.3$ и $E_3 \cong 50$ мэВ (энергия отсчитывается от дна некантованной зоны проводимости в яме). Энергия продольного оптического фотона

в GaAs составляет $\hbar\omega_{\text{opt}} = 37.7$ мэВ. Сильное неупругое рассеяние на оптических фононах электронов с энергиями больше, чем $\hbar\omega_{\text{opt}} + E_1$ при не очень сильных электрических полях приводит к тому, что электроны действительно преимущественно живут в первых двух подзонах E_1 и E_2 — вероятность попадания в подзону E_3 в рассматриваемых полях пренебрежимо мала. Расчет волновых функций (2) для рассматриваемой ямы дает, что для первого и второго уровня плотность электрона почти полностью сосредоточена внутри ямы:

$\int_{|z| \geq a/2} u_n^2(z) dz \lesssim 0.07$. Поэтому в формуле (1) можно считать $m = m_w$, и при вычислении вероятностей рассеяния будем пренебрегать туннельными хвостами функций в барьере, для волновых функций в яме ($|z| \leq a/2$) используя выражения:

$$u_1(z) = \frac{\cos(k_0^1 z)}{\sqrt{\frac{a}{2} + \frac{\sin(k_0^1 a)}{2k_0^1}}}, \quad u_2(z) = \frac{\sin(k_0^2 z)}{\sqrt{\frac{a}{2} - \frac{\sin(k_0^2 a)}{2k_0^2}}},$$

где $k_0^n = \sqrt{2mE_n}/\hbar$.

Резонансное состояние характеризуется положением E_0 и полушириной Γ . Эти параметры сильно зависят от свойств ямы и геометрического места легирования [1]. Так, если донор находится точно в центре ямы, то, хотя энергия состояния $2p_z$ лежит в непрерывном спектре подзоны E_1 , но волновая функция состояния $2p_z$ не смешивается с $\psi_{k,1}$ в силу симметрии, т.е. состояние остается локализованным и $\Gamma = 0$. Смешивание появляется при сдвиге донора из центра ямы. Так как в реальности у доноров есть некоторое распределение относительно центра ямы, то разумно считать E_0 и Γ подгоночными параметрами.

Направим электрическое поле вдоль оси x : $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$. Примем предположение о возможности квазиклассического описания кинетики электронов в рассматриваемой системе при помощи функции распределения по состояниям двух подзон и по состояниям доноров (т.е. будем пренебрегать недиагональными элементами матрицы плотности электрона). Справедливость этого предположения связана с тем, что безызлучательное (тем более также и излучательное) уширение уровней E_1 , E_2 и E_0 много меньше всех расстояний между этими уровнями. Из дальнейших расчетов вероятностей переходов будет видно, что это предположение выполняется с хорошей точностью.

Как известно, при наличии сильного электрического поля функция распределения электронов в k -пространстве имеет вид узкого лезвия, вытянутого в направлении электрического поля [4]. Верхней границей заселенных состояний по кинетической энергии является энергия оптического фотона $\hbar\omega_{\text{opt}}$; при достижении электроном состояний с кинетической энергией выше нее происходит интенсивное рассеяние электрона в область вблизи $\mathbf{k} \approx 0$. Разумно считать, что эта картина (стримминговый режим рассеяния) будет постепенно разрушаться

с увеличением интенсивности резонансного рассеяния. Также на эту картину может оказывать существенное влияние взаимодействие электронов с акустическими фононами, приводящее к внутриволновому рассеянию и уходу электронов в подзону E_2 . Будет считаться, что произошел пробой примеси и число электронов на примесях мало по сравнению с числом электронов в подзонах, поэтому кинетику электронов в первой и второй подзонах можно описывать при помощи двух функций распределения $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$ независимо от заселенности электронами донорных состояний (применимость аналогичного подхода для дырок в двух подзонах деформированного германия обсуждалась в работе [5]).

Итак, резюмируем постановку задачи. Состояния, между которыми будут изучаться переходы, — это состояния (2) первой и второй подзон размерного квантования. При моделировании кинетики мы будем учитывать ускорение электронов электрическим полем, рассеяние на оптических фононах, рассеяние на резонансном состоянии $2p_z$ и рассеяние на акустических фононах. Функции распределения $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$ должны находиться из уравнения Больцмана с ускоряющим членом $(eF/\hbar)\partial f_n/\partial k_x$ и интегралом столкновений, описывающим рассеяние по всем вышеговоренным механизмам. При этом мы будем считать, что концентрация примеси в яме, а следовательно, и электронов в подзонах E_1 и E_2 настолько мала, что можно пренебречь электрон-электронным рассеянием и не учитывать заполненность состояний при рассеянии: $f_n \ll 1$. Решение уравнения Больцмана такого вида методами математической физики (при помощи сеток или, тем более, аналитически) представляется затруднительным. Мы применим метод Монте-Карло, состоящий в записи истории случайного блуждания частицы в k -пространстве с учетом ускорения электрическим полем и рассеяния. В следующем разд. 3 мы рассчитаем необходимые вероятности рассеяния, в разд. 4 кратко опишем применявшийся метод моделирования Монте-Карло.

3. Вероятности рассеяния

Для вычисления полной вероятности рассеяния $w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}$ из состояния (\mathbf{k}^i, n^i) в состояние (\mathbf{k}^f, n^f) нужно провести суммирование по всем механизмам рассеяния:

$$w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i} = \sum_{\pm} w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt}; \pm} + \sum_{\pm} w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{ac}; \pm} + w_{\mathbf{k}^f; \mathbf{k}^i}^{\text{res}} \delta_{1, n^f} \delta_{1, n^i}, \quad (3)$$

$$w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt}; \pm} = \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt}; \mathbf{q}, \pm}, \quad w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{ac}; \pm} = \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{ac}; \mathbf{q}, \pm}.$$

Здесь $\delta_{n', n''}$ — дельта-символ Кронекера, \mathbf{q} — трехмерный волновой вектор фонона, знаки „ \pm “ обозначают рассеяние с испусканием или с поглощением фонона.

Как видно из рис. 1, резонансное состояние $2p_z$ обладает центральной симметрией в плоскости квантовой ямы. Поэтому применим простейшую модель резонансного s -рассеяния Брейта–Вигнера [2,6], пренебрегая резонансами амплитуды рассеяния при $l \neq 0$ и нерезонансной частью амплитуды рассеяния. Переходы за счет резонансного рассеяния возможны только для электронов первой подзоны (преимущественно с энергиями в радиусе Γ вблизи E_0). Как и всегда для примесного центра, рассеяние является упругим; соответствующая вероятность перехода дается формулой [2]

$$w_{\mathbf{k}^f; \mathbf{k}^i}^{\text{res}} = \frac{2\pi \hbar^3 n_w}{m^2 S} \frac{\Gamma^2}{(E^i - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \delta(E^i - E^f), \quad (4)$$

где $E^{i,f}(\mathbf{k}^{i,f}) = E_{n^{i,f}} + \hbar^2(\mathbf{k}^{i,f})^2/2m$, n_w — двумерная концентрация примеси в яме. Расчеты были проведены со следующими параметрами резонансного состояния: $n_w = 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $E_0 = E_1 + 11.2 \text{ мэВ}$, $\Gamma = 0.2 \text{ мэВ}$ (таковы характерные значения для гетероструктур типа изучавшейся в [3], см. [7,1]).

Ограничимся рассмотрением взаимодействия электронов в квантовой яме с объемными фононами во всей структуре (поэтому в формуле (3) волновой вектор фонона трехмерный; пример анализа допустимости такого упрощенного подхода рассмотрен в работе [8]). При вычислении вероятностей рассеяния на фононах нужно учитывать только взаимодействие с продольными фононами, потому что в полупроводниках с решеткой цинковой обманки взаимодействие электронов с поперечными фононами (как с оптическими, так и с акустическими) запрещено по симметрийным соображениям [9]. Примем простейшую изотропную модель фононного спектра:

$$\epsilon_q^{\text{ac}} = \hbar s q, \quad \epsilon_q^{\text{opt}} = \hbar \omega_{\text{opt}},$$

где s — скорость звука. Общая формула для однофононной вероятности рассеяния с участием продольного фонона с волновым вектором \mathbf{q} имеет вид [9–11]

$$w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\mu; \mathbf{q}, \pm} = \frac{2\pi}{\hbar} |c_q^\mu|^2 \left(N_{\epsilon_q^\mu} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times |\langle \mathbf{k}^f, n^f | e^{\mp i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}^i, n^i \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}^i, n^i} - E_{\mathbf{k}^f, n^f} \mp \epsilon_q^\mu), \quad (5)$$

где $\mu = \text{opt}, \text{ac}$ обозначает тип фононов, $|c_q^\mu|^2$ — форм-фактор соответствующего механизма рассеяния, N_ϵ — бозевская функция с температурой решетки T . В случае квадратичного закона дисперсии (1) для матричного оператора экспоненты мы получим

$$\langle \mathbf{k}^f, n^f | e^{\mp i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}^i, n^i \rangle = \langle n^f | e^{\mp i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | n^i \rangle \delta_{\mathbf{k}^f \pm \mathbf{q}, \mathbf{k}^i},$$

где \mathbf{q}_{\parallel} — компонента вектора \mathbf{q} в плоскости квантовой ямы. С акустическими фононами взаимодействие идет преимущественно по механизму деформационного по-

тенциала [9,10], в этом случае форм-фактор имеет вид

$$|c_q^{\text{ac}}|^2 = \frac{\hbar E_D^2 q}{2Q_S V},$$

где E_D — деформационный потенциал зоны проводимости, Q — плотность кристалла, V — нормировочный объем. С оптическими фононами взаимодействие электронов идет только по фрелиховскому (поляризационному) механизму [9,10]. Его форм-фактор равен

$$|c_q^{\text{opt}}|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{\text{opt}}}{V q^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right),$$

где $\varepsilon_{0,\infty}$ — диэлектрические проницаемости кристалла при $\omega = 0$ и при $\omega = \infty$ соответственно.

При азотных температурах и ниже (в частности, эксперимент [3] проводился при температурах $T < 20$ K) $\hbar \omega_{\text{opt}} \gg kT$ и $N_{\hbar \omega_{\text{opt}}} \ll 1$, поэтому можно учитывать только излучение оптических фононов. Результат вычисления вероятности рассеяния с излучением оптических фононов дается формулой

$$w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt};+} = \frac{2\pi e^2 \omega_{\text{opt}}}{S} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \delta(E^i - E^f - \hbar \omega_{\text{opt}}) \times \frac{J_{n^f, n^i}(|\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^f|)}{|\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^f|},$$

где обозначено:

$$J_{n^f, n^i}(\Delta k) = \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-a/2}^{a/2} dz' dz'' u_{n^f}(z') u_{n^i}(z') u_{n^f}(z'') u_{n^i}(z'') \times e^{-\Delta k |z' - z''|}.$$

Реализуется следующая ситуация. При разогреве электронов первой и второй подзон до энергий $E > \hbar \omega_{\text{opt}} + E_1$ они будут быстро излучать оптический фотон и попадать на дно первой подзоны, т.е. частично сохранится сценарий стриммингово режима. Поэтому нужно вычислить только вероятности $\omega_{\mathbf{k}^f, 1; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt};+}$, и соответственно только интегралы J_{11} и J_{12} . Эти интегралы были рассчитаны аналитически, результат расчета не приводится в связи с его громоздкостью.

При рассеянии электрона из состояний вблизи $E^i = \hbar \omega_{\text{opt}} + E_1$ с излучением оптического фонона вероятность перехода от \mathbf{k}^i зависит слабо, поэтому существенно знать только полную вероятность ухода:

$$\sum_{\mathbf{k}^f} w_{\mathbf{k}^f, 1; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{opt}} \equiv \frac{1}{\tau^{\text{opt}}(\mathbf{k}^i, n^i)} \approx R_{n^i} \theta(E^i - \hbar \omega_{\text{opt}}), \quad (6)$$

$$R_{n^i} = \frac{m e^2 \omega_{\text{opt}}}{2 \hbar^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) J_{1, n^i}(\Delta k = k_{\text{opt}}).$$

Здесь $k_{\text{opt}} = \sqrt{2m \hbar \omega_{\text{opt}}}/\hbar$, $\theta(E)$ обозначает ступенчатую функцию. Численное значение скорости переходов из первой подзоны в первую: $R_1 = 2.2 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$, для переходов из второй подзоны в первую: $R_2 = 1.52 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$. Так как рассеяние на акустических фононах гораздо менее интенсивно, чем рассеяние на оптических фо-

нонах, эти величины ограничивают сверху уширение уровней E_1 , E_2 и E_0 величиной $\hbar R_n \approx 1$ мэВ.

Рассеяние на акустических фононах описывает температурное размытие функции распределения. Кроме того, благодаря акустическим фононам возможны переходы электронов из одной подзоны в другую (как с понижением энергии при испускании фонона, так и с повышением энергии при поглощении фонона). Расчет вероятности рассеяния с акустическими фононами приводит к результату:

$$w_{\mathbf{k}^f, n^f; \mathbf{k}^i, n^i}^{\text{ac};\pm} = \frac{E_D^2 [N_{|E^i - E^f|} + (1 \pm 1)/2] (E^i - E^f)^2}{\hbar^2 Q_S^3 S \tilde{q}_z(\mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i)} \times |I_{n^f, n^i}(\mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i)|^2, \quad (7)$$

где введены обозначения:

$$I_{n^f, n^i}(\mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i) = \int_{-a/2}^{a/2} u_{n^f}(z) u_{n^i}(z) e^{i \tilde{q}_z(\mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i) z} dz,$$

$$\tilde{q}_z(\mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i) = \sqrt{[(E^i - E^f)/\hbar S]^2 - (\mathbf{k}^i - \mathbf{k}^f)^2}.$$

Здесь уже существенны переходы между каждой парой подзон как с испусканием, так и с поглощением фонона. Как и интегралы J_{n^f, n^i} , интегралы I_{n^f, n^i} были рассчитаны аналитически, но результат также не приводится в связи с громоздкостью.

При достаточно больших энергиях электронов $E - E_1 \gg \sqrt{m S^2 E_1}$ рассеяние внутри подзоны на акустических фононах является квазиупругим [11,8]. Усредненная по углам вероятность перехода

$$w_n^{\text{ac}}(E^f, E^i) = \frac{1}{\rho_2(E^f)} \times \sum_{\pm, \mathbf{k}^f, \mathbf{k}^i} w_{\mathbf{k}^f, n; \mathbf{k}^i, n}^{\text{ac};\pm} \delta(E^f - E_{n, \mathbf{k}^f}) \delta(E^i - E_{n, \mathbf{k}^i})$$

где $\rho_2(E^f)$ — двумерная плотность состояний спадает до нуля при $\Delta k \equiv |\mathbf{k}^f - \mathbf{k}^i| \gtrsim \pi/a$, как $1/\Delta k$ (это следует из рассмотрения разд. 3 работы [8]). Заметим, что в результирующей вероятности (7) величина \tilde{q}_z в знаменателе и в интеграле I_{n^f, n^i} при $n^i = n^f$ и $k^i + k^f \leq 2ms/\hbar$ становится нулем или мнимой величиной. Рассеяние между такими начальными и конечными состояниями невозможно [8]. Сингулярность вероятности (7) при $k^i + k^f \rightarrow 2ms/\hbar$ коренного типа, т.е. интегрируемая. Более того, вклад от сингулярной области в полную вероятность ухода $1/\tau_i^{\text{ac}} \equiv \sum_{f, fi} w_{fi}^{\text{ac}}$ из данного состояния $i = (\mathbf{k}^i, n^i)$ существует только для электронов с волновым вектором $k^i \lesssim 2ms/\hbar$, которых пренебрежимо мало ($2ms/\hbar = 7 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$). Поэтому при численных расчетах величины $1/\tau_i^{\text{ac}}$ можно пренебрегать некорректным вычислением вероятности ухода $1/\tau_i^{\text{ac}}$ из этих состояний (за счет недостаточной мелкости фиксированной равномерной сетки для численного интегрирования $w_{\mathbf{k}^f, n; \mathbf{k}^i, n}^{\text{ac};\pm}$ по области $\mathbf{k}^f: k^i + k^f \rightarrow 2ms/\hbar$).

Укажем значения параметров материала гетероструктуры, использованные при расчете вероятностей рассеяния на фононах: $\rho = 5.316 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$, $s \equiv s_L = 4.77 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$, $\varepsilon_\infty = 10.9$, $\varepsilon_0 = 12.8$, $E_D = -7.17 \text{ эВ}$.

4. Моделирование функции распределения методом Монте-Карло

При численном моделировании функций распределения $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$ мы следовали в основном рекомендациям известной статьи [12].

Подготовительный этап к моделированию состоял в следующем. В каждой подзоне E_1 и E_2 выбиралась область k -пространства в виде квадрата с центром в начале отсчета $\mathbf{k} = 0$ и с размером k_{max} (расстояние от центра до края), приблизительно в 2 раза большим, чем k_{opt} . Затем эта область покрывалась сеткой, чаще всего 1000×1000 ячеек. Для каждой ячейки сетки каждой подзоны (начальное состояние с индексом i) вычислялась вероятность перехода в каждую другую ячейку каждой подзоны (конечное состояние с индексом f) за счет рассеяния (формулы (3), (4), (6) и (7)). Вычислялась и запоминалась полная вероятность ухода $1/\tau_i^\mu \equiv w_i^\mu = \sum_f w_{fi}^\mu$ из каждой клетки по каждому механизму μ : акустические фононы, оптические фононы, резонансное рассеяние. Находилась максимальное значение w_{max} полной вероятности ухода $w_i = \sum_\mu w_i^\mu$ из данной ячейки i по всем ячейкам i сетки.

Алгоритм моделирования процесса случайного блуждания частицы в k -пространстве состоит из последовательности итераций, на каждой из которых происходит ускорение электрона электрическим полем в течение промежутка времени Δt_k и поиск начального состояния для следующей итерации. Движение в электрическом поле происходит по классическому закону:

$$\dot{\mathbf{k}} = \frac{e}{m\hbar} \mathbf{F}.$$

Время Δt_k определяется выражением α/w_{max} , где α — случайная величина, равномерно распределенная на промежутке $(0, 1]$. Начальное состояние для следующей итерации определяется вероятностным розыгрышем следующих альтернатив: частица не рассеивается и остается в текущей точке k -пространства, частица рассеивается по одному из механизмов и переходит в другую точку k -пространства.

На первом шаге частицу помещают в начало координат, после чего начинается итерационный процесс. На протяжении итерации происходит регистрация тех ячеек сетки, через которые прошла траектория частицы в k -пространстве. После достаточно большого числа итераций эти записи положения частицы дают информацию о ненормированной функции распределения электронов по состояниям подзон E_1 и E_2 . (При необходимости нормировка функций распределения производится при

помощи условия: $\int f_1(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} + \int f_2(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} = n_w$). Характерное число итераций в проведенных моделированиях — 10^9 . По времени этот процесс занимал от нескольких часов до нескольких суток (в зависимости от величин температуры и электрического поля).

5. Обсуждение результатов

Для тестирования программы и для сравнения с дальнейшими расчетами сначала было проведено моделирование стриммингового режима рассеяния электронов в первой подзоне: учитывалось только ускорение электронов электрическим полем и их рассеяние на оптических фононах. Результаты моделирования приведены на рис. 2. Получена известная стримминговая функция распределения в виде лезвия примерно постоянной высоты и ширины, простирающегося от точки $\mathbf{k} = 0$ до точки $(k_x = k_{\text{opt}}, k_y = 0)$. Видно, что увеличение электрического поля приводит к некоторому уменьшению высоты (и в силу условия нормировки к уширению) лезвия стриммингового режима.

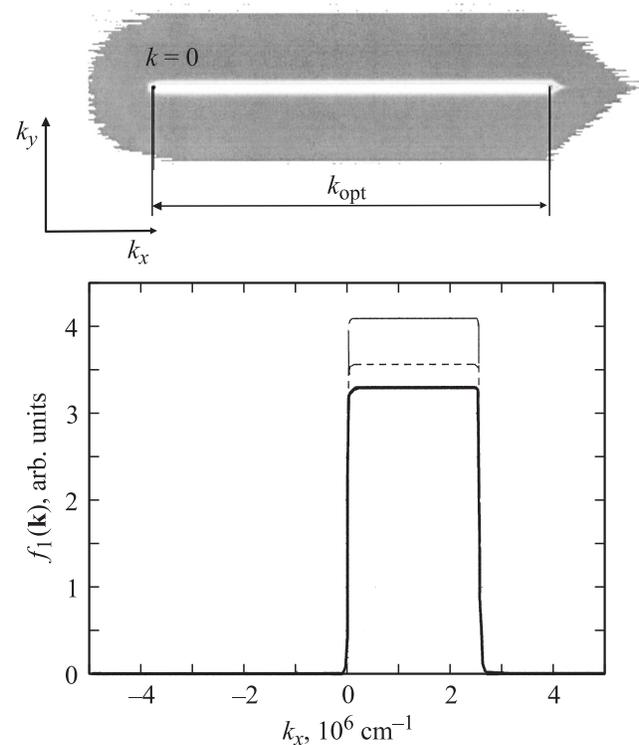


Рис. 2. Функция распределения $f_1(\mathbf{k})$ электронов подзоны E_1 , рассчитанная с учетом только ускорения электронов электрическим полем и рассеяния с излучением оптического фонона. Верхняя панель — вид сверху функции распределения в k -пространстве при $F = 49 \text{ В/см}$. Более светлый цвет соответствует большей величине функции распределения в соответствующей точке k -пространства. Нижняя панель — функция распределения $f_1(k_x, k_y)$ при $k_y = 0$ для электрических полей 34, 43 и 49 В/см (тонкая сплошная, пунктирная и толстая сплошная линии соответственно).

Затем было проведено моделирование кинетики электронов первой подзоны с учетом ускорения электрическим полем, рассеяния с испусканием оптического фонона, а также с учетом упругого резонансного рассеяния на квазистационарном состоянии $2p_z$. На рис. 3, *a* и 4 приведен результат расчета функции распределения с учетом также и рассеяния на акустических фононах при низкой температуре $T = 4.2$ К, практически совпадающий с результатом настоящего этапа расчета без учета акустических фононов. Видно, что резонансное рассеяние существенно модифицирует стримминговый режим. Появляется вероятность пребывания электронов во всех состояниях с энергией меньше резонансного уровня. Это легко объясняется тем, что при резонансном рассеянии электрон упруго переходит с квазистационарных состояний на лезвии на другие состояния на резонансном уровне с той же энергией. Из каждого

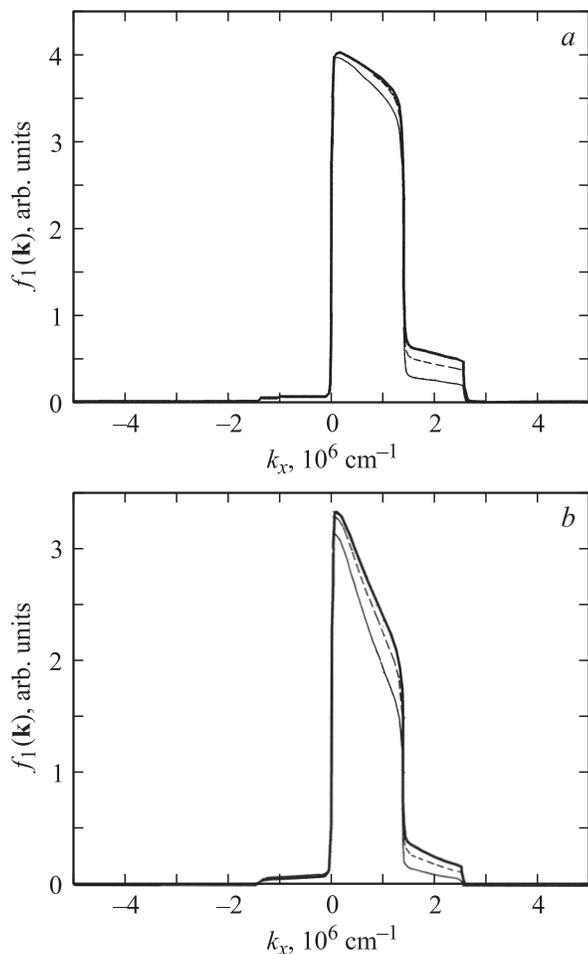


Рис. 3. Функция распределения $f_1(\mathbf{k})$ электронов подзоны E_1 при $k_y = 0$, рассчитанная с учетом всех рассматриваемых в статье способов перехода между состояниями (ускорение электрическим полем, излучение оптического фонона, рассеяние на резонансном состоянии, а также рассеяние с излучением и поглощением акустических фононов). Расчет при температуре решетки, К: *a* — 4.2, *b* — 20. Электрические поля равны 34, 43 и 49 В/см (тонкая сплошная, пунктирная и толстая сплошная линии соответственно).

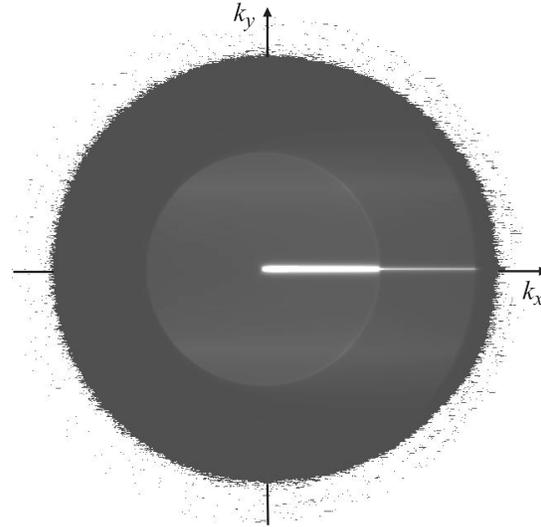


Рис. 4. Вид сверху функции распределения $f_1(\mathbf{k})$ электронов подзоны E_1 , рассчитанной с учетом всех рассматриваемых в статье способов перехода между состояниями для $F = 49$ В/см и $T = 4.2$ К. Более светлый цвет соответствует большей величине функции распределения в соответствующей точке k -пространства. Внутренний кружок ограничен энергией резонансного состояния, внешний кружок — энергией оптического фонона.

такого состояния существует вероятность ускориться электрическим полем, что и приводит к заполнению кружка радиуса $k_{\text{res}} = \sqrt{2m(E_0 - E_1)}/\hbar$, очерчиваемого резонансным состоянием. Рис. 3, *a* и 4 показывают, что стримминговое лезвие разбивается на две части — ниже энергии квазистационарного состояния (лезвие на этом участке более толстое и более высокое) и выше энергии квазистационарного состояния (лезвие более тонкое и низкое). Из рис. 4 видно также, что электрическое поле несколько протягивает электроны из резонансных состояний в состояния вне кружка резонансного состояния.

Наконец, было проведено полное моделирование кинетики электронов в первой и второй подзоне с учетом также рассеяния на акустических фононах. Акустические фононы должны приводить, во-первых, к переходам между подзонами, а во-вторых, к смазыванию острых особенностей функции распределения, полученной на предыдущем шаге моделирования. На рис. 3 приведены срезы при $k_y = 0$ функции распределения $f_1(k_x, k_y)$ в первой подзоне при различных температурах и электрических полях. Видно, что с повышением температуры стримминговое лезвие становится более низким и острым, а с увеличением электрического поля растет высота лезвия (в отличие от случая чисто стриммингового режима). Это связано с тем, что с ростом температуры более эффективное рассеяние на акустических фононах становится способным быстро уводить электроны с лезвия, а рост электрического поля, наоборот, задерживает электроны на лезвии. Полутоновый график двумерной функции распределения $f_1(k_x, k_y)$ (для $T = 4.2$ К и $F = 34$ В/см), представленный на рис. 4, с увеличени-

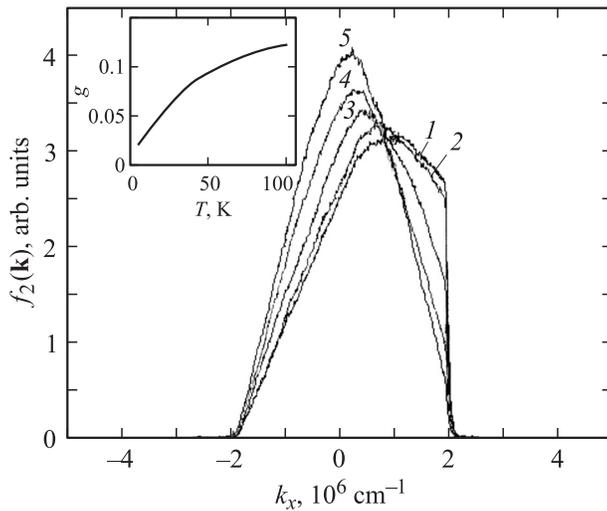


Рис. 5. Функция распределения $f_2(\mathbf{k})$ электронов подзоны E_2 при $k_y = 0$, рассчитанная с учетом всех рассматриваемых в статье способов перехода между состояниями. Температура решетки, К: 1 — 4,2, 2 — 10, 3 — 25, 4 — 55, 5 — 100; электрическое поле равно 43 В/см. На вставке — зависимость относительной заселенности g подзон E_2 и E_1 от температуры решетки T при $F = 43$ В/см.

ем температуры модифицируется следующим образом. Во-первых, почти исчезает стримминговое лезвие на отрезке $k_{\text{res}} < k_x < k_{\text{opt}}$, $k_y = 0$. Во-вторых, возникает большая протяжка электронов за окружность резонансного состояния.

На рис. 5 приведена функция распределения электронов $f_2(k_x, k_y)$ при $k_y = 0$ во второй подзоне размерного квантования, рассчитанная для различных температур решетки (в зависимости от величины электрического поля вид рис. 5 меняется слабо). Видно, что при низких температурах функция распределения резко падает на энергиях $E = E_1 + \hbar\omega_{\text{opt}}$, соответствующих возникновению возможности излучения электроном оптического фонона и перехода в первую подзону. Рост интенсивности рассеяния на акустических фононах нивелирует эту ступеньку, и функция распределения приобретает симметричный относительно точки $\mathbf{k} = 0$ вид. Важно отметить, что суммарная заселенность подзоны E_2 оказывается гораздо меньше суммарной заселенности подзоны E_1 . На вставке рис. 5 представлена зависимость отношения $g = \int f_2(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} / \int f_1(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}$ заселенностей подзон E_2 и E_1 от температуры решетки T . Было установлено, что эта зависимость очень близка к активационной зависимости $g(T) = Ae^{-E_a/k_B T}$, где активационная энергия E_a порядка расстояния между уровнями ($E_2 - E_1$). Этого и следовало ожидать согласно формуле (7).

6. Заключение

Было проведено монте-карловское моделирование кинетики электронов в двух подзонах квантовой ямы при наличии сильного электрического поля вдоль слоя ямы.

Учитывалось рассеяние на оптических и акустических фононах, а также на резонансном квазистационарном состоянии, возникшем за счет попадания состояния $2p_z$ мелкого донора в континуум первой подзоны. Исследованы возникающие особенности функции распределения в зависимости от величины электрического поля и температуры. В дальнейшем на основе полученной функции распределения планируется провести расчет интенсивностей оптических переходов из состояний первой и второй подзон, а также из резонансного состояния в локализованные состояния донора. Это, как ожидается, позволит теоретически описать наблюдавшийся в работах [3] спектр электролюминесценции.

Мы горячо благодарим Л.Е. Воробьева, М.М. Глазова и М.С. Кагана за многочисленные обсуждения в процессе работы над статьей.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ, гранта президента Российской Федерации поддержки ведущих научных школ НШ-1972.2008.2, грантов президиума РАН, а также грантов фонда „Династия“.

Список литературы

- [1] В.Я. Алешкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич. ФТП, **42**, 899 (2008).
- [2] А.А. Прокофьев, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич. ФТП, **35**, 586 (2001).
- [3] A.O. Zakhar'in, A.V. Andrianov, V.A. Shalygin, D.A. Firsov, L.E. Vorobjev, A.N. Sofronov, V.Yu. Panevin, A.E. Zhukov, V.S. Mikhlin, A.P. Vasil'ev, N.N. Zinov'ev. *Abstracts of 2008 Annual Meeting of European Optical Society (EOS-2008), Terahertz — Science and Technology* (Paris, France, Sept. 29–Oct. 2, 2008) v. 2, p. 79; A.B. Андрианов, A.O. Захар'ин, В.А. Шалыгин, Д.А. Фирсов, Л.Е. Воробьев, A.H. Софронов, В.Ю. Паневин, A.E. Жуков, В.С. Михрин, A.П. Васильев, Н.Н. Зиновьев. *Тез. докл. Межд. сем. по опто- и наноэлектронике* (СПб., 27 октября 2008) с. 28.
- [4] А.А. Андронов. ФТП, **21**, 1153 (1987).
- [5] М.А. Odnoblyudov, A.A. Prokofiev, I.N. Yassievich, K.A. Chao. *Phys. Rev. B*, **70**, 115 209 (2004).
- [6] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (Нерелятивистская теория)* (М., Физматлит, 2002) с. 666, 731.
- [7] M. Helm, F.M. Peeters, F. DeRosa, E. Colas, H.P. Harbison, L.T. Florez. *Phys. Rev. B*, **43**, 13 983 (1991).
- [8] П.С. Алексеев, М.С. Кипа, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ, **133**, 921 (2008).
- [9] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972) с. 426.
- [10] В.М. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984) с. 40.
- [11] В. Карпус. ФТП, **20**, 12 (1986).
- [12] C. Jacobini, L. Reggiani. *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 645 (1983).

Редактор Л.В. Беляков

Two-Dimensional Electrons Kinetics Controlled by Scattering on a Resonant State

M.S. Keepa^{,+}, P.S. Alekseev^{*}, I.N. Yassievich^{*}*

^{*} Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

⁺ Saint Petersburg Electrotechnical University „LETI“,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract A kinetics of electrons in two quantum well subbands has been studied in a presence of a strong electric field along interfaces, scattering on optic and acoustic phonons as well as on a resonant quasi-stationary state risen from shallow donors in the well. Resonant scattering is treated in terms of the well-known Breit–Wigner model. A distribution function is built using the Monte-Carlo method. Scattering on the resonant state leads to accumulating of electrons in states near the resonant state and, in general, to considerable modification of the streaming regime distribution function. A dependence of the relative occupation of the subbands under consideration on the lattice temperature has been obtained.