

КАСКАДНАЯ ТЕОРИЯ ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВЫЕ ЯМЫ

И. С. Алексеев^a, М. С. Куца^{a,b}, **В. И. Перель**^a, И. Н. Ясиевич^{a*}

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

^b Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
197376, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 27 сентября 2007 г.

Построена каскадная теория захвата электронов в мелкие квантовые ямы, когда процесс захвата определяется взаимодействием с акустическими фононами. В этих условиях существенным оказывается выброс попавших в яму электронов обратно в зону проводимости. Для количественного учета возможности выброса вводится функция прилипания электронов, оказавшихся в яме. Настоящий подход аналогичен каскадной теории Лэкса захвата электронов на мелкие примесные центры. Конкретные вычисления проведены для ям шириной 3 и 4 нм в гетероструктуре состава $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$. Развита теория позволила также описать термический выброс электронов из мелких квантовых ям.

PACS: 72.20.Jv, 73.21.Fg, 73.40.-c

1. ВВЕДЕНИЕ

Захват носителей в квантовые ямы и выброс носителей из квантовых ям играют важную роль в поперечном транспорте в гетероструктурах [1], в работе инжекционных лазеров [1, 2] и светодиодов [3], при исследовании параметров гетероструктур методами емкостной спектроскопии [4–6]. Первые достоверные измерения характерных времен захвата электронов в одиночную квантовую яму были выполнены в работе [7]. В дальнейшем захват и выброс в гетероструктурах теоретически и экспериментально исследовались в работах [8–13]. Основное внимание концентрировалось на осцилляциях скорости захвата как функции ширины ямы. Этот эффект впервые был предсказан в работах [8, 9], экспериментально обнаружен в [11] и обусловлен эффектами отражения от границы ямы. В качестве возмущения, определяющего переход носителей из барьера в яму, рассматривалось взаимодействие с оптическими фононами. В этом случае процесс захвата определяется одноквантовым переходом из барьера в яму, так как после испускания оптического фонона электрон погружается в яму на энергию, существенно большую kT .

С другой стороны, недавно экспериментально изучался захват носителей в мелкие квантовые ямы (с глубиной залегания единственного уровня, меньшей энергии оптического фонона), где процессы захвата и выброса контролируются взаимодействием носителей с акустическими фононами [14, 15].

В связи с этим в настоящей работе построена каскадная теория захвата электронов в мелкие квантовые ямы за счет взаимодействия с акустическими фононами. В таких условиях существенным оказывается учет возможности обратного выброса попавших в яму электронов. Для количественного описания данной ситуации по аналогии с теорией каскадного захвата на мелкие примесные центры [16–18] вводится функция прилипания. Развита модель позволяет также построить теорию выброса носителей из ямы. Конкретные расчеты проведены для гетероструктур с одиночной квантовой ямой состава $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$, которые экспериментально изучались в работах [14, 15].

2. ЗАХВАТ

В работе рассматривается гетероструктура, выращенная в направлении z с одиночной квантовой ямой ширины a и глубины U (рис. 1). Бу-

*E-mail: Irina.Yassievich@mail.ioffe.ru

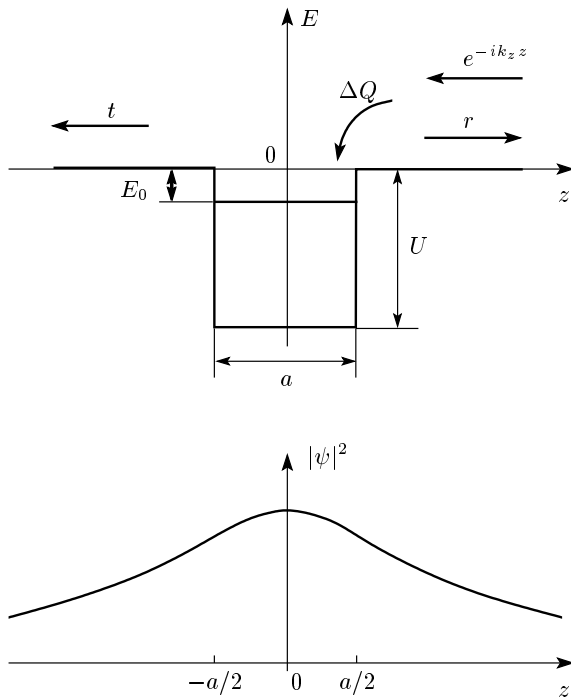


Рис. 1. Зонная диаграмма гетероструктуры с мелкой квантовой ямой: E_0 — единственный уровень размерного квантования, ψ — z -составляющая волновой функции связанного состояния электрона в яме. Плоская волна с волновым вектором $-k_z$ падает на яму справа, частично отражается от нее (r) и частично проходит (t), небольшая доля ΔQ потока налетающих на яму электронов захватывается в яму

дем предполагать, что глубина E_0 залегания единственного уровня размерного квантования меньше энергии $\hbar\omega_{opt}$ оптического фонона. Если также $E_0 + kT < \hbar\omega_{opt}$, то процесс захвата электрона в яму контролируется взаимодействием с акустическими фононами.

Конкретные расчеты в дальнейшем будут проводиться для исследованных в работах [14,15] гетероструктур состава $Al_{0.05}Ga_{0.95}As/GaAs/Al_{0.05}Ga_{0.95}As$ с ямами шириной 3 и 4 нм. Величины эффективных масс m^* для материала ямы и материала барьера составляют соответственно $0.0665m_0$ и $0.068m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), и при расчете уровня энергии и волновых функций их различием можно пренебречь. Разрыв зон U был принят равным 47 мэВ, величина E_0 для двух ям при этом составила 7.0 и 10.8 мэВ. Энергия $\hbar\omega_{opt}$ оптического фонона в GaAs равна 34 мэВ, т. е. для рассматриваемых

структур ограничение $E_0 + kT < \hbar\omega_{opt}$ выполняется практически до комнатных температур.

Волновая функция связанного состояния электрона в яме представляет собой произведение бегущей волны, описывающей свободное движение в плоскости интерфейсов, и зависящей от z симметричной функции размерного квантования:

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^w(\mathbf{r}) = F \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho})}{\sqrt{S}} \times \begin{cases} \frac{\cos(k_0 z)}{\cos(k_0 a/2)}, & |z| < \frac{a}{2}, \\ \exp\left[-\kappa\left(|z| - \frac{a}{2}\right)\right], & |z| \geq \frac{a}{2}, \end{cases} \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$, \mathbf{k}_{\parallel} — волновой вектор движения электрона в плоскости интерфейса, S — нормировочная площадь (площадь интерфейса), $k_0 = \sqrt{2m^*(U - E_0)}/\hbar$, $\kappa = \sqrt{2m^*E_0}/\hbar$ — характерная обратная длина затухания волновой функции в барьере, F — нормировочный коэффициент,

$$F = \frac{\cos(k_0 a/2)}{\sqrt{\frac{a}{2} + \frac{\sin(k_0 a)}{2k_0} + \frac{\cos^2(k_0 a/2)}{\kappa}}}$$

Состояния электрона в барьере могут быть описаны плоскими волнами, налетающими на яму из бесконечности справа и слева, частично проходящими сквозь нее и частично отражающимися от нее. Вероятность захвата определяется перекрытием волновых функций состояний в яме и в барьере. Перекрытие бывает максимальным при совпадении кинетической энергии электрона вдоль оси z с энергией резонансных состояний над ямой, что сопровождается полной прозрачностью ямы для электрона. Именно этим определяются привлекавшие большой интерес осцилляции скорости захвата как функции ширины квантовой ямы. В рассматриваемом случае мелких ям эти эффекты не имеют места. В Приложении А проводится подробный анализ энергетической зависимости коэффициента отражения от мелкой ямы. В частности, там показывается, что для рассматриваемых гетероструктур при температурах примерно до 40 К ямы практически непрозрачны для электронов.

Полученный результат позволяет перейти от рассмотрения свободных электронных состояний во всей гетероструктуре к рассмотрению свободных электронных состояний отдельно в левом и правом барьерах. В условиях, когда коэффициент отражения от границы ямы равен единице, волновую функ-

цию электрона в правом барьере можно записать в виде

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}^{b+}(\mathbf{r}) = 2\sqrt{\frac{m^*}{\hbar k_z}} \sin\left[k_z\left(z - \frac{a}{2}\right)\right] \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho})}{\sqrt{S}}. \quad (2)$$

Нормировочная константа выбрана здесь так, что волновая функция соответствует единичному потоку налетающих электронов.

Будем рассматривать переходы электронов из барьера в яму за счет взаимодействия с акустическими фононами. При этом во взаимодействии с электронами участвуют только продольные фононы. Влиянием гетероструктуры на спектр фононов и на механизм электрон-фононного взаимодействия пренебрежем (см. разд. 6). Спектр акустических фононов будем считать аксиально-симметричным. Вероятность перехода из состояния в барьере (2) в состояние в яме (1) с испусканием или поглощением акустического фонона с волновым вектором \mathbf{q} определяется согласно золотому правилу Ферми формулой

$$w_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\mathbf{q}, \pm} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle w, \mathbf{k}_{\parallel}^f | \hat{H}_{e-ph}^{\mathbf{q}, \pm} | b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i \rangle \right|^2 \times \delta(E^i - E^f \mp \hbar s q), \quad (3)$$

где

$$E^i = \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^i)^2 + \hbar^2 (k_z^i)^2}{2m^*}$$

— начальная энергия электрона в барьере (b),

$$E^f = -E_0 + \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^f)^2}{2m^*}$$

— конечная энергия электронов в яме (w). Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в выражении (3) равен

$$\begin{aligned} \langle w, \mathbf{k}_{\parallel}^f | \hat{H}_{e-ph}^{\mathbf{q}, \pm} | b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i \rangle &= \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar(N_{\mathbf{q}} + 1/2 \pm 1/2)}{2\rho s V}} \sqrt{q} E_D M_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\pm}(\mathbf{q}), \end{aligned}$$

где $N_{\mathbf{q}}$ — число фононов с волновым вектором \mathbf{q} , ρ — плотность кристалла, s — продольная скорость звука, V — нормировочный объем, E_D — деформационный потенциал, а матричный элемент $M_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\pm}(\mathbf{q})$ определяется выражением

$$M_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\pm}(\mathbf{q}) = \langle \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}^f}^w | e^{\mp i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}^i}^{b+} \rangle.$$

При выбранной нормировке волновых функций в барьере вероятность (3) определяет поток электронов в состояние (1) в яме из состояния (2) в барьере при единичном потоке налетающих электронов.

Возможность обратного вылета электрона из ямы учтем введением функции прилипания $P(E)$, которая определяет вероятность того, что, попав в яму в состояние с полной энергией E , электрон не будет выброшен обратно в барьер. Вычисление вводимой функции прилипания $P(E)$ проводится в разд. 3. Поток захватываемых в яму электронов из состояния $(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i)$ при единичном потоке налетающих электронов дается формулой

$$\Delta Q(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i) = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}^f} P\left(-E_0 + \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^f)^2}{2m^*}\right) \times \sum_{\pm, \mathbf{q}} w_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\mathbf{q}, \pm}. \quad (4)$$

Полная плотность потока Δq захватываемых в яму электронов получается суммированием $\Delta Q(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i)$ по всем значениям $(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i)$ с учетом выражения для плотности потока налетающего электрона, $\hbar k_z^i/m^*$, и функции распределения налетающих электронов по состояниям $f(k_{\parallel}^i, k_z^i)$:

$$\Delta q = \frac{2}{S} \int_0^{\infty} \frac{dk_z^i}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}^i; \mathbf{k}_{\parallel}^f, \pm, \mathbf{q}} \frac{\hbar k_z^i}{m^*} \times P\left(-E_0 + \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^f)^2}{2m^*}\right) w_{w, \mathbf{k}_{\parallel}^f; b, \mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i}^{\mathbf{q}, \pm} f(k_{\parallel}^i, k_z^i), \quad (5)$$

где множитель «2» учитывает захват из левого и правого барьеров.

В работах [11, 18] для описания захвата было предложено использовать так называемое локальное время захвата τ_{loc} , определяемое формулой

$$\Delta q = n \frac{a}{\tau_{loc}}, \quad (6)$$

где n — концентрация электронов в барьерах вблизи ямы. Из определения (6) следует, что время τ_{loc} легко находится, если известна величина Δq .

3. ФУНКЦИЯ ПРИЛИПАНИЯ

Микроскопически процесс захвата состоит из следующих этапов. В начальный момент времени электроны есть только в барьерах. Первый этап захвата представляет собой переходы электронов из барьера в яму. Оказавшись в яме с некоторой энергией продольного движения, электрон может или остаться в яме («прилипнуть»), провалившись в глубь ямы (в область меньших кинетических энергий), уход отсюда практически невозможен, или выйти обратно в

зону. Для количественного описания этой ситуации по аналогии с теорией Лэкса каскадного захвата на мелкие примесные центры [16] введем функцию прилипания $P(E)$, представляющую собой вероятность того, что электрон в яме с данной полной энергией $E = -E_0 + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$ не покинет яму. Существенно, что вероятность прилипания зависит только от полной энергии электрона, а не от каждой из компонент k_x и k_y продольного волнового вектора по отдельности. Причиной этого является аксиальная симметрия спектра электронов и фононов в плоскости квантовой ямы.

Функцию прилипания следует находить из интегрального уравнения

$$P(E) = \tau_s(E) \int_{-E_0}^{\infty} w_{in}(E', E) P(E') dE', \quad (7)$$

где $w_{in}(E', E) dE'$ — вероятность перехода из состояния в яме с энергией E в интервал состояний в яме с энергиями от E' до $E' + dE'$, $\tau_s(E)$ — полное время жизни электрона в состоянии с энергией E . Оно определяется переходами в состояния внутри ямы и переходами в состояния барьера:

$$\tau_s(E) = \frac{1}{w_{in}^d(E) + w_{out}^d(E)}. \quad (8)$$

Здесь $w_{in}^d(E)$ и $w_{out}^d(E)$ — вероятности ухода в единицу времени из состояния в яме с энергией E в состояния соответственно в яме и в барьере.

В качестве пояснения вывода интегрального уравнения (7) отметим следующее. Вероятность $P(E)$ прилипнуть в состоянии с данной энергией E расписывается как сумма вероятностей перейти в состояния в яме с другой энергией E' и прилипнуть к яме, будучи уже в них. При этом считается, что вышедший из ямы электрон обратно в нее не возвращается.

Будем предполагать, что $E_0 \gg kT$, так что обратный выброс из состояний с энергией вблизи уровня $E = -E_0$ практически невозможен. Это позволяет дополнить интегральное уравнение (7) граничным условием

$$P|_{E=-E_0} = 1. \quad (9)$$

Входящие в уравнение (7) вероятности $w_{in}(E^f, E^i)$, $w_{in}^d(E)$ и $w_{out}^d(E)$ получаются из вероятностей $w_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\mathbf{q}, \pm}$ перехода между двумя состояниями $|\mathbf{k}_{\parallel}^i\rangle$ и $|\mathbf{k}_{\parallel}^f\rangle$ в яме и из вероятностей $w_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\mathbf{q}, \pm}$ перехода из состояния $|\mathbf{k}_{\parallel}^i\rangle$ в яме в состояние $|\mathbf{k}_{\parallel}^f\rangle$

в барьере путем усреднения с микроканоническим распределением:

$$w_{in}(E^f, E^i) = \frac{1}{\varrho_2(E^i)} \times \sum_{\pm, \mathbf{q}; \mathbf{k}_{\parallel}^i, \mathbf{k}_{\parallel}^f} w_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\mathbf{q}, \pm} \delta(E^i - E_{\mathbf{k}_{\parallel}^i}) \delta(E^f - E_{\mathbf{k}_{\parallel}^f}), \quad (10)$$

$$w_{in}^d(E) = \frac{1}{\varrho_2(E)} \sum_{\pm, \mathbf{q}; \mathbf{k}_{\parallel}^i, \mathbf{k}_{\parallel}^f} w_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\mathbf{q}, \pm} \delta(E - E_{\mathbf{k}_{\parallel}^i}), \quad (11)$$

$$w_{out}^d(E) = \frac{1}{\varrho_2(E)} \sum_{\pm, \mathbf{q}; \mathbf{k}_{\parallel}^i, \mathbf{k}_{\parallel}^f} w_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\mathbf{q}, \pm} \delta(E - E_{\mathbf{k}_{\parallel}^i}). \quad (12)$$

Здесь $\varrho_2(E)$ — двумерная плотность состояний, $E_{\mathbf{k}_{\parallel}} = -E_0 + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$ — энергетический спектр электронов в яме.

В процессе определения w_{in} по формуле (10) необходимо вычислить формфактор рассеяния электрона в яме,

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{\pm}(q_z) = \langle \mathbf{k}_{\parallel}^f | \exp(\mp i q_z z) | \mathbf{k}_{\parallel}^i \rangle,$$

для которого имеем

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{+}(q_z) = M_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}^{-}(q_z) \equiv M(q_z) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}^f, \mathbf{k}_{\parallel}^i}, \quad (13)$$

$$M(q_z) = \frac{\mu(q_z) + 2 \cos^2\left(\frac{k_0 a}{2}\right) \nu(q_z)}{\frac{a}{2} + \frac{\sin(k_0 a)}{2k_0} + \frac{\cos^2(k_0 a/2)}{\kappa}},$$

где

$$\mu(q_z) = \frac{\sin(q_z a/2)}{q_z} + \frac{1}{2} \frac{\sin[(q_z/2 + k_0) a]}{q_z + 2k_0} + \frac{1}{2} \frac{\sin[(q_z/2 - k_0) a]}{q_z - 2k_0},$$

$$\nu(q_z) = \frac{2\kappa \cos(q_z a/2) - q_z \sin(q_z a/2)}{4\kappa^2 + q_z^2}.$$

Были определены области энергий E^i и E^f , при которых возможно рассеяние (рис. 2). Оказывается, что при кинетических энергиях $\varepsilon_{\parallel} = E + E_0$, лежащих в области I на рис. 2, рассеяние невозможно и $w_{in}(E^f, E^i) \equiv 0$. При энергиях в областях II и III рассеяние возможно, причем происходит испускание фононов с волновыми векторами q_z , сколь угодно

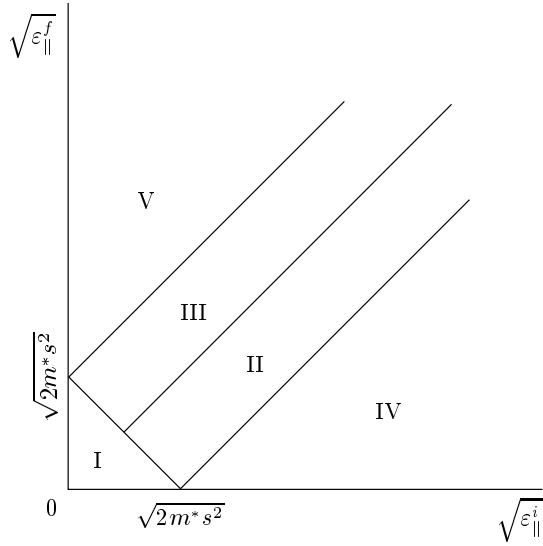


Рис. 2. Области в плоскости начальных ϵ_{\parallel}^i и конечных ϵ_{\parallel}^f кинетических энергий двумерных электронов в квантовой яме, в которых реализуются различные сценарии рассеяния

близкими к нулю. Эта область соответствует рассеянию на акустических фононах в объемном материале [18]. При энергиях в областях IV и V, в отличие от объемного материала, рассеяние для электрона в яме также возможно, но существует интервал на оси q_z в окрестности точки $q_z = 0$, с волновыми векторами из которого фононы излучаться не могут. Указанное отличие от объемного случая обусловлено отсутствием закона сохранения z -компоненты импульса при рассеянии двумерных электронов благодаря наличию гетерограницы. Максимально возможные значения волнового вектора фононов q_z^+ (для областей II–V) и минимально возможные значения волнового вектора фононов q_z^- (для областей IV и V) определяются формулами

$$q_z^{\pm}(E^f, E^i) = \sqrt{\left(\frac{E^i - E^f}{\hbar s}\right)^2 - \frac{2m^*}{\hbar^2} \left(\sqrt{E^i + E_0} \mp \sqrt{E^f + E_0}\right)^2}. \quad (14)$$

Используя выражение (13) для матричного элемента M и формулу (14), для вероятностей w_{in} перехода внутри ямы как функций начальной ϵ_{\parallel}^i и конечной ϵ_{\parallel}^f кинетических энергий электрона получаем

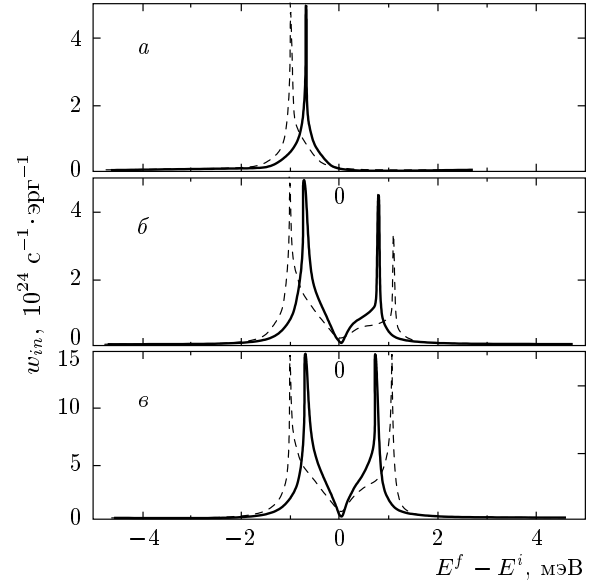


Рис. 3. Вероятность перехода между состояниями внутри ямы $w_{in}(E^f, E^i)$ как функция конечной энергии E^f при фиксированной начальной энергии E^i . Расчет выполнен для ямы шириной 3 нм для температур 1 К (а), 10 К (б) и 40 К (в). Сплошная линия соответствует $E^i = 0$, штриховая — $E^i = E_0$

$$w_{in}^{\pm}(\epsilon_{\parallel}^f, \epsilon_{\parallel}^i) = \frac{m^* E_D^2 |\epsilon_{\parallel}^i - \epsilon_{\parallel}^f| \left(N(|\epsilon_{\parallel}^i - \epsilon_{\parallel}^f|) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)}{\pi^2 \hbar^4 \rho s^3} \times \int_{\sqrt{\max(0, x_1)}}^{\sqrt{x_2}} d\xi \frac{M^2 \left(\xi |\epsilon_{\parallel}^i - \epsilon_{\parallel}^f| / \hbar s \right)}{\sqrt{(\xi^2 - x_1)(x_2 - \xi^2)}}, \quad (15)$$

где

$$x_1(\epsilon_{\parallel}^f, \epsilon_{\parallel}^i) = 1 - \frac{2m^* s^2}{\left(\sqrt{\epsilon_{\parallel}^i} - \sqrt{\epsilon_{\parallel}^f}\right)^2},$$

$$x_2(\epsilon_{\parallel}^f, \epsilon_{\parallel}^i) = 1 - \frac{2m^* s^2}{\left(\sqrt{\epsilon_{\parallel}^i} + \sqrt{\epsilon_{\parallel}^f}\right)^2},$$

$N(E)$ — бозевская функция, индекс «+» (испускание фононов) соответствует области $E^i > E^f$, индекс «-» (поглощение фононов) — области $E^i < E^f$. На рис. 3 приведены зависимости w_{in} от E^f при фиксированном значении E^i для различных температур. Видно, что при энергиях, удовлетворяющих условию $|\sqrt{\epsilon_{\parallel}^i} - \sqrt{\epsilon_{\parallel}^f}| = \sqrt{2m^* s}$, имеется сингулярность. Было показано, что эта сингулярность логарифмического типа. Ее физическая причина состо-

ит в резком росте числа состояний фононов, посредством которых может происходить рассеяние между состояниями вблизи энергий, удовлетворяющих приведенному выше условию. С повышением температуры начинают играть роль процессы излучения фононов. Соответственно, справа от нуля на графиках рис. 3 появляются пики.

Зная $w_{in}(E^f, E^i)$, легко найти вероятность (11) ухода в состояния ямы:

$$w_{in}^d(E) = \int_{-E_0}^{\infty} w_{in}(E', E) dE'. \quad (16)$$

Результат вычисления вероятности ухода из ямы в состояния в барьере по формуле (12) можно представить в виде двух членов, соответствующих переходам с испусканием и поглощением фонона:

$$w_{out}^d(E) = w^+(E) + w^-(E).$$

Поскольку E_0 меньше энергии предельных акустических фононов, выход из ямы за счет поглощения фононов в принципе возможен для электронов при всех энергиях E . Однако вероятности переходов с поглощением фононов с энергией $E > kT$ экспоненциально малы. С учетом этого замечания для вероятностей $w^{\pm}(E)$ при энергии $E \geq m^*s^2/2 \pm \sqrt{2m^*s^2E_0}$ с точностью до $\exp(-E_0/kT)$ получены выражения

$$w^{\pm}(E) = \frac{E_D^2 F^2 m^{*2}}{\pi^3 \hbar^3 \rho} \int_{\tilde{q}_1^{\pm}}^{\tilde{q}_2^{\pm}} d\tilde{q} \int_0^{\tilde{k}_m^{\pm}} d\tilde{k}_z^f \times \sqrt{\tilde{q}^2 - (\tilde{k}_{\parallel}^i - \tilde{k}_{\parallel}^f)^2} \times \int_{\sqrt{\max(0, \tilde{q}^2 - (\tilde{k}_{\parallel}^i + \tilde{k}_{\parallel}^f)^2)}} d\tilde{q}_z f^{\pm}(\tilde{q}, \tilde{q}_z, \tilde{k}_z^f; E), \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{q}_{1,2}^+ (E) &= \tilde{k}_{\parallel}^i - 1 \pm \sqrt{(\tilde{k}_{\parallel}^i - 1)^2 - \tilde{\kappa}^2}, \\ \tilde{q}_{1,2}^- (E) &= \tilde{k}_{\parallel}^i + 1 \pm \sqrt{(\tilde{k}_{\parallel}^i + 1)^2 - \tilde{\kappa}^2}, \\ \tilde{k}_m^{\pm}(\tilde{q}; E) &= \sqrt{-\tilde{q}^2 - \tilde{\kappa}^2 + 2\tilde{q}(\tilde{k}_{\parallel}^i \mp 1)}, \\ \tilde{k}_{\parallel}^{f\pm}(\tilde{k}_z^f, \tilde{q}; E) &= \sqrt{2} \sqrt{\frac{E}{m^*s^2} - \frac{(\tilde{k}_z^f)^2}{2} \mp \tilde{q}}, \\ \tilde{\kappa} &= \sqrt{\frac{2E_0}{m^*s^2}}, \quad \tilde{k}_{\parallel}^i(E) = \sqrt{\frac{2(E + E_0)}{m^*s^2}}, \end{aligned}$$

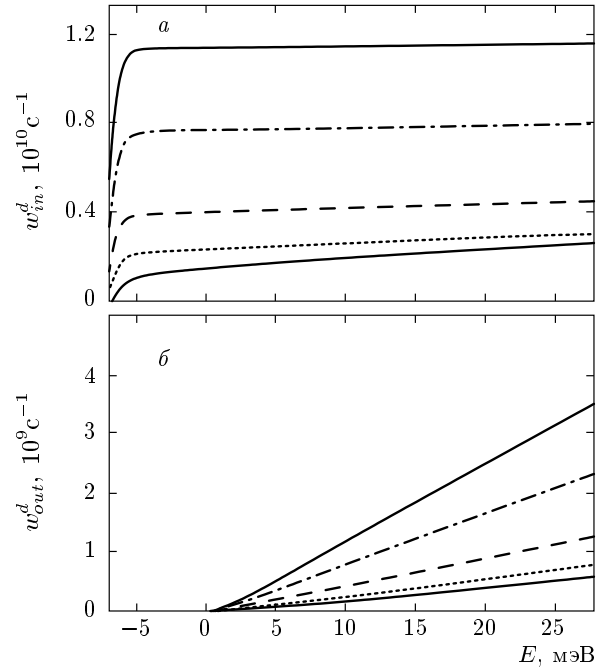


Рис. 4. Вероятности w_{in}^d и w_{out}^d ухода в единицу времени из состояния в яме с энергией E в состоянии в яме (а) и в барьере (б) как функции энергии электрона E . Расчет выполнен для ямы шириной 3 нм для температур 0,25, 5, 10, 20, 30 К (большим температурам соответствуют расположенные выше кривые)

а явный вид функций $f^{\pm}(\tilde{q}, \tilde{q}_z, \tilde{k}_z^f; E)$ приведен в Приложении Б. На участках $-E_0 \leq E < m^*s^2/2 \pm \sqrt{2m^*s^2E_0}$ в рамках сделанного приближения следует считать $w^{\pm}(E) \equiv 0$. На рис. 4 приведены зависимости вероятностей w_{in}^d и w_{out}^d от энергии E при различных температурах. Необходимо отметить, во-первых, что $w_{in}^d(E)$ стремится к насыщению при больших энергиях, а $w_{out}^d(E)$ возрастает с ростом энергии, а во-вторых, что на всем рассматриваемом интервале энергий абсолютные величины $w_{out}^d(E)$ значительно меньше абсолютных величин $w_{in}^d(E)$, что дает возможность не учитывать множественные переходы из ямы в барьер и обратно (подробнее см. разд. 6).

Решение уравнения (7) проводится в Приложении В. На рис. 5 приведены полученные функции прилипания P при различных температурах для рассматриваемых ям шириной 3 и 4 нм в гетероструктурах состава $Al_{0.05}Ga_{0.95}As/GaAs/Al_{0.05}Ga_{0.95}As$. Видно, что при низких температурах функция прилипания $P(E)$ в области отрицательных энергий практиче-

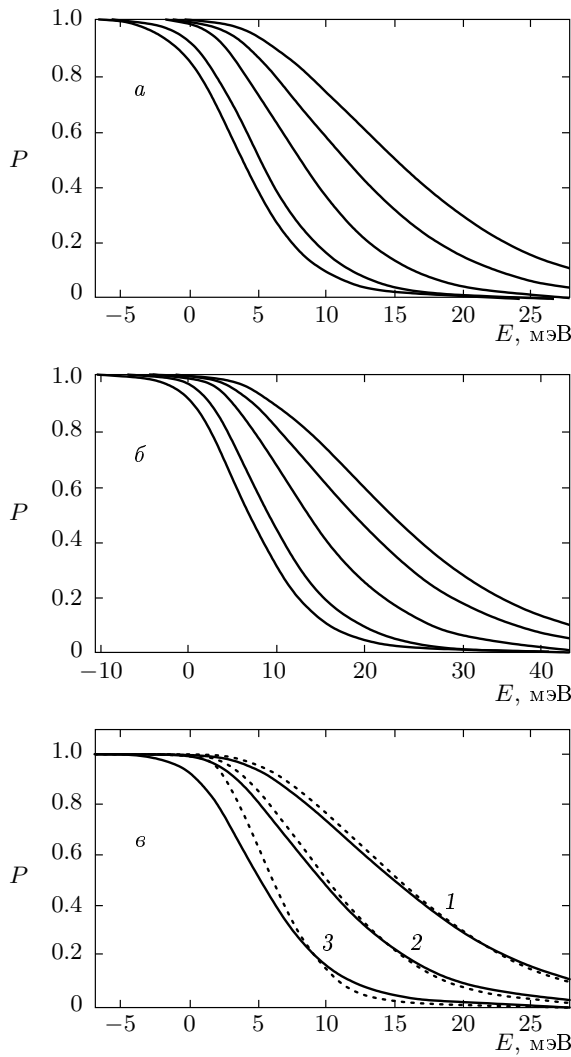


Рис. 5. Функция прилипания $P(E)$, полученная на основе решения интегрального уравнения (7) по схеме, изложенной в Приложении В для ям шириной 3 нм (а) и 4 нм (б) для температур 0.25, 5, 10, 20, 30 К (большим температурам соответствуют расположенные ниже кривые), а также для ямы шириной 3 нм (в) для температур 1 К (1), 7 К (2), 14 К (3) на основе решения приближенного дифференциального уравнения (18) (пунктирные линии) и по точной схеме, изложенной в Приложении В (сплошные линии)

ски равна единице. При повышении температуры величина P уменьшается в каждой точке E , и она становится отличной от единицы как для положительных, так и для отрицательных энергий.

В случае низких температур уравнение (7) оказывается возможным решить аналитически. При $kT \lesssim \sqrt{2m^*s^2E_0}$ ядро $w_{in}(\varepsilon_{||}^f, \varepsilon_{||}^i)$ при

$\varepsilon_{||}^i, \varepsilon_{||}^f \gg m^*s^2, \hbar s/a$ оказывается существенно отличным от нуля только вблизи диагонали $\varepsilon_{||}^i = \varepsilon_{||}^f$ (см. рис. 3). Благодаря этому интегрирование в правой части уравнения (7) снимается, и мы получаем дифференциальное уравнение для функции прилипания:

$$\overline{\Delta E}(E)P' - \frac{w_{out}^d(E)}{w_{in}^d(E)}P = 0, \quad (18)$$

где $\overline{\Delta E}(E)$ — характерная величина скачка энергии электрона, определяемая через $w_{in}(E^f, E^i)$ и $\tau_s(E)$. При низких температурах преобладают процессы излучения фононов, так что эта величина отрицательна. Результат решения уравнения (18) с граничным условием (9) записывается в виде

$$P(E) = \exp\left(\int_{-E_0}^E \frac{w_{out}^d(E')}{\overline{\Delta E}(E')w_{in}^d(E')} dE'\right), \quad (19)$$

откуда следует, что при отрицательных энергиях, когда $w_{out}^d(E) \approx 0$, функция прилипания $P(E)$ практически равна единице, а с ростом энергии в силу того, что $\overline{\Delta E}(E) < 0$, она начинает монотонно убывать. На рис. 5в приведены графики функции прилипания, рассчитанные по формуле (19) и по точной схеме, изложенной в Приложении В. Видно, что при низких температурах аналитический ответ (19) практически совпадает с точным решением интегрального уравнения (7), расхождение становится значительным при $T > 10$ К.

4. ВЫБРОС ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ ЯМЫ

Для мелких ям и низких температур ($E_0, kT < \hbar\omega_{opt}$) выброс носителей из ямы, так же, как и их захват, преимущественно контролируется взаимодействием с акустическими фононами. При этом не будем учитывать процессы многократного перехода из барьера в яму, т.е. попавший из ямы в барьер электрон будем считать безвозвратно выброшенным из ямы (см. разд. 6).

Следуя работам [6, 19, 20], будем характеризовать выброс электронов из ямы при помощи скорости e тепловой эмиссии в соответствии с формулой

$$q_{em} = n_w e, \quad (20)$$

где q_{em} — плотность потока выбрасываемых носителей, n_w — двумерная концентрация электронов в яме. Вероятность $w_{out}^d(E)$ ухода электрона в единицу времени из состояния в яме с энергией E в состоянии в барьере представляет собой величину потока выбрасываемых из ямы электронов в расчете на

один электрон. Поэтому скорость e эмиссии связана с $w_{out}^d(E)$ соотношением

$$e = \frac{1}{n_w S} \int_{-E_0}^{\infty} f(E) \varrho_2(E) w_{out}^d(E) dE, \quad (21)$$

где $f(E)$ — функция распределения по состояниям для электронов в яме.

Кроме того, для описания выброса введем полную вероятность W^d ухода электрона из ямы. По определению эта величина представляет собой среднюю вероятность того, что электрон в яме через время порядка времени перехода электрона из ямы в барьер окажется в барьере. Знание функции прилипания $P(E)$ позволяет вычислять W^d :

$$W^d = \frac{1}{n_w S} \int_{-E_0}^{\infty} f(E) \varrho_2(E) [1 - P(E)] dE. \quad (22)$$

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ЗАХВАТА И ВЫБРОСА ЭЛЕКТРОНОВ

Результат расчета потока захватываемых электронов по формуле (4) может быть записан в виде

$$\Delta Q(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i) = \frac{2m^* E_D^2 F^2 k_z^i}{\pi \varrho_s \hbar E_0} \times [F^+(p; \tilde{\varepsilon}_{\parallel}, \tilde{\varepsilon}_z) + F^-(p; \tilde{\varepsilon}_{\parallel}, \tilde{\varepsilon}_z)], \quad (23)$$

где

$$p = \frac{m^* s^2}{E_0}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\parallel} = \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^i)^2}{2m^* E_0}, \quad \tilde{\varepsilon}_z = \frac{\hbar^2 (k_z^i)^2}{2m^* E_0},$$

а явный вид безразмерных функций F^{\pm} приведен в Приложении Б.

Отдельно остановимся на случае низких температур. Можно показать, что характерная величина теряемой электроном энергии при первом скачке в яму по порядку величины равна $\sqrt{2m^* s^2 E_0}$. Это составляет 4.0 К для ямы шириной 3 нм и 5.0 К для ямы шириной 4 нм. В случае, когда эта энергия превысит $2kT$, электрон при первом скачке попадет в яму на глубину, большую kT , и обратный выброс электрона в зону проводимости станет практически невозможен. Электрон будет захвачен в яму сразу на первом шаге каскадного процесса, т. е. процесс захвата будет однофононным. Математически это выражается равенством единице функции прилипания

$P(E)$ при отрицательных энергиях E (см. формулу (19) и рис. 5).

Кроме того, при температурах $kT < \sqrt{2m^* s^2 E_0}$ процессы поглощения фононов играют незначительную роль по сравнению с процессами излучения фононов. Величина пограничной температуры определяется из условия малости бозевской функции по сравнению с единицей для характерных волновых векторов испущенных фононов. В рамках полученного ответа (23) доминирование процессов испускания фононов и невозможность обратного выброса выражаются следующим образом: функция F^+ для всех заселенных электронами состояний близка к 1/2, а F^- — к нулю (см. Приложение Б).

На основе описанных упрощений оказывается возможным получить ответ в замкнутом виде:

$$\Delta Q(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i) \equiv \Delta Q(k_z^i) = \frac{m^* F^2 E_D^2 k_z^i}{\pi \varrho_s \hbar E_0}. \quad (24)$$

Если характерное время жизни носителей в барьере достаточно велико, то может реализовываться ситуация, при которой электроны в барьере термализованы и обладают максвелловским распределением с температурой T , равной температуре решетки:

$$f(k_{\parallel}, k_z) = n \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m^* kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^2 + k_z^2)}{2m^* kT} \right).$$

Для этой ситуации в соответствии с формулами (5) и (6) было проведено вычисление локального времени захвата τ_{loc} . В случае низких температур подстановка (24) в (5) и (6) приводит к следующему ответу:

$$\tau_{loc} = \frac{\pi \hbar^2 \varrho_s a E_0}{kT E_D^2 m^* F^2}. \quad (25)$$

Для остального интервала температур локальное время захвата должно вычисляться по общим формулам (23) и (5) с учетом функции прилипания $P(E)$ и зависимости вероятности первого перехода из барьера в яму от начального состояния $(\mathbf{k}_{\parallel}^i, k_z^i)$.

На рис. 6 представлен результат расчета локального времени захвата как функции температуры для всего диапазона применимости построенной каскадной модели. Для области низких температур для сравнения также приведена зависимость (25). Наблюдаемые спад и насыщение обусловлены двумя противодействующими факторами: увеличением вероятности первичного перехода электрона из барьера в яму с ростом температуры и увеличением вероятности выброса электрона из ямы с ростом температуры. При низких температурах, как уже было сказано, выброс становится невозможен и зави-

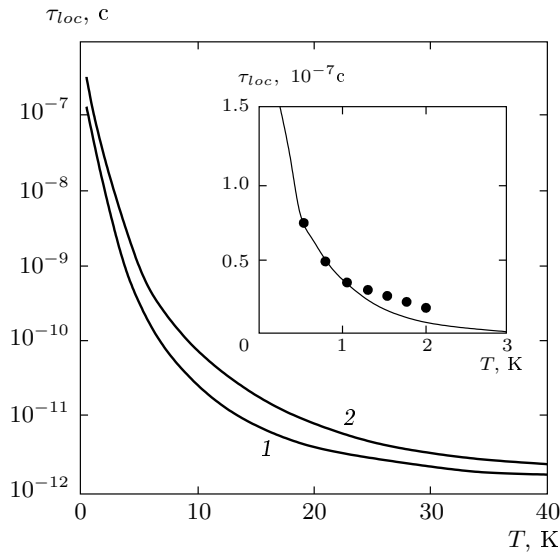


Рис. 6. Локальное время захвата τ_{loc} как функция температуры T . Показаны результаты расчета для ям шириной 3 нм (1) и 4 нм (2). На вставке показан расчет $\tau_{loc}(T)$ для области низких температур для ямы шириной 3 нм в рамках каскадной модели (сплошная линия) и модели одноквантового захвата по формуле (25) (точки)

симость локального времени захвата от температуры определяется исключительно статистикой электронов в барьере. Видно, что увеличение ширины ямы приводит к уменьшению интенсивности процессов захвата. Действительно, с ростом ширины a ямы увеличивается глубина залегания уровня E_0 . При этом происходит рост локализации волновой функции связанного состояния электрона в яме. Это, в свою очередь, приводит к уменьшению перекрытия волновых функций (1) и (2) электрона в яме и в барьере и, следовательно, вероятностей переходов.

Также был проведен численный расчет характеристик выброса электронов из ямы на основе полученных выражений (21) и (22). Распределение электронов по энергиям также считалось бoльцмановским:

$$f(E) = n_w \frac{2\pi\hbar^2}{m^*kT} \exp\left(-\frac{E + E_0}{kT}\right).$$

На рис. 7 и 8 приведены результаты расчета температурных зависимостей скорости e тепловой эмиссии и полной вероятности W^d ухода электрона из ямы. Для сравнения также построены соответствующие аррениусовские кривые $A \exp(-E_a/kT)$ и $B \exp(-E_a/kT)$ с энергией активации E_a , равной глубине залегания уровня $E_a = E_0$, и предэкспонен-

циальными множителями A и B , выбираемыми из условий

$$A \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) = e(T), \quad B \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) = W^d(T)$$

при $T = 40$ К.

На вставках к рис. 7 и 8 построены также температурные зависимости предэкспоненциальных множителей A_e и B_{W^d} , определяемых в соответствии с формулами

$$A_e(T) = e(T) \exp(E_0/kT), \quad (26)$$

$$B_{W^d}(T) = W^d(T) \exp(E_0/kT). \quad (27)$$

Видно, что зависимость $A_e(T)$ является монотонно растущей, а зависимость $B_{W^d}(T)$ имеет тенденцию к насыщению. Последнее свидетельствует о чисто активационном характере выброса электронов из ямы при высоких температурах. Из рис. 7 и 8 также видно, что увеличение ширины ямы приводит к уменьшению интенсивности процессов выброса. Аналогично снижению интенсивности захвата этот эффект объясняется уменьшением перекрытия волновых функций (1) и (2) с ростом E_0 .

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Обсудим применимость использованного способа описания фононов и электрон-фононного взаимодействия. Известно, что в гетероструктурах нарушение трансляционной симметрии приводит к изменению характера фононных мод, а также механизма взаимодействия электронов с фононами [21–25]. Однако в случае слабого отличия материала ямы от материала барьеров этими эффектами можно пренебречь. При этом в качестве константы электрон-фононного взаимодействия берется ее среднее значение в материалах ямы и барьера. Покажем, что этот подход является справедливым для рассматриваемых гетероструктур AlGaAs/GaAs.

В монографиях [23, 24] рассмотрены изменения спектра и мод акустических фононов в гетероструктурах. Показано, что нарушение трансляционной симметрии приводит к появлению мод нового типа (так называемых интерфейсных мод), а также к модификации спектра и смешиванию продольных и поперечных объемных акустических мод кристалла. Эти эффекты характеризуются безразмерными параметрами

$$\nu_1^s = \frac{kT a^2}{\hbar L} \sqrt{\left| \frac{1}{s_1^2} - \frac{1}{s_2^2} \right|},$$

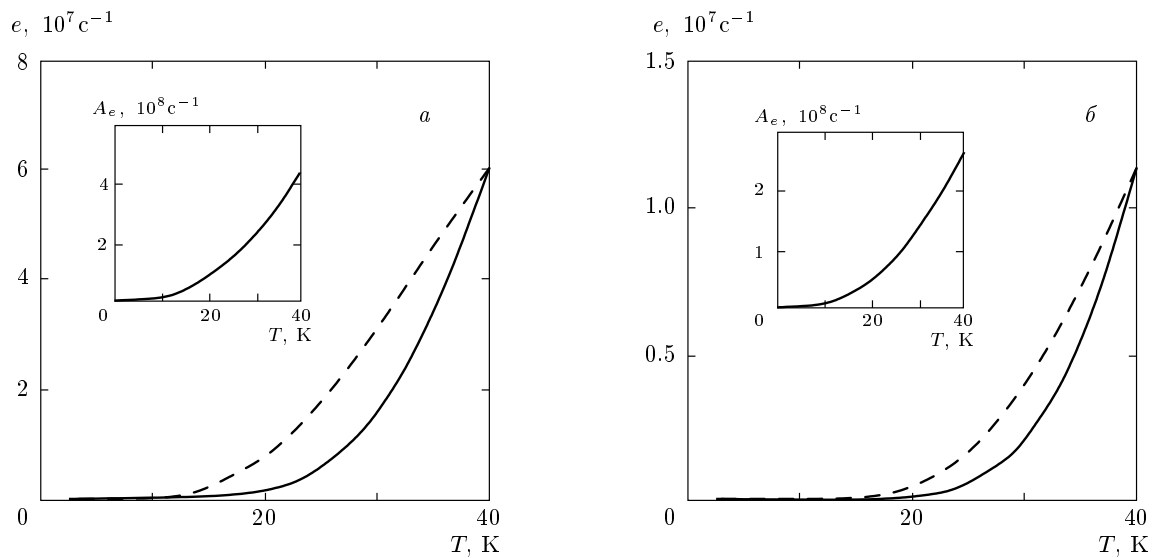


Рис. 7. Скорость e тепловой эмиссии (сплошные кривые) как функция температуры T для ям шириной 3 нм (а) и 4 нм (б). Штриховые кривые — аррениусовские зависимости $A \exp(-E_0/kT)$ с постоянным значением A , выбранным в соответствии с условием $A \exp(-E_0/kT) = e(T)$ при $T = 40$ К. На вставках — зависимости $A_e(T)$ согласно формуле (26)

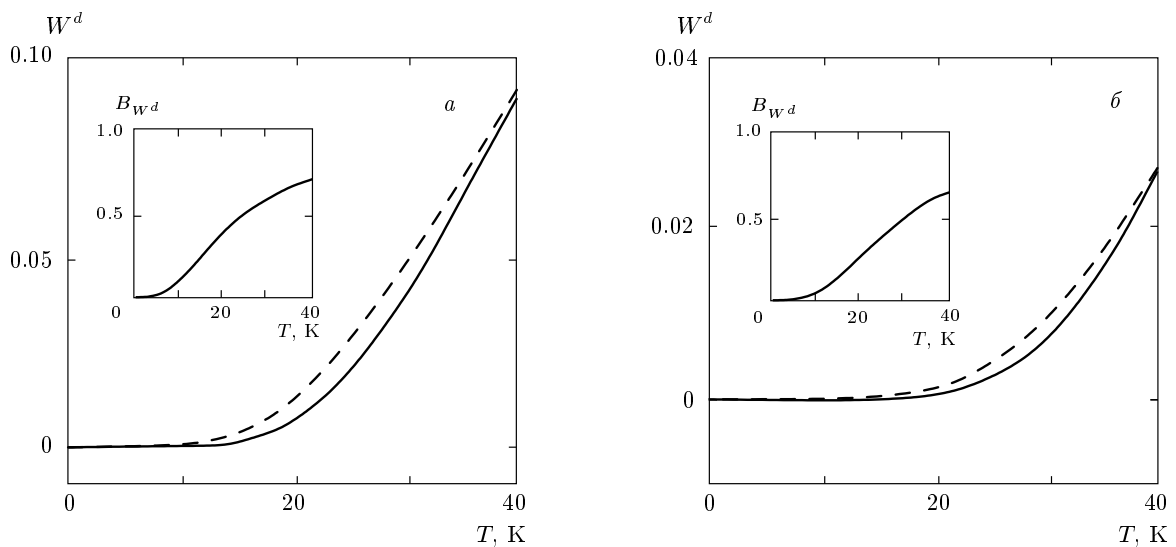


Рис. 8. Полная вероятность W^d ухода электрона из ямы (сплошные кривые) как функция температуры T для ям шириной 3 нм (а) и 4 нм (б). Штриховые кривые — аррениусовские зависимости $B \exp(-E_0/kT)$ с постоянным значением B , выбранным в соответствии с условием $B \exp(-E_0/kT) = W^d(T)$ при $T = 40$ К. На вставках — зависимости $B_{W^d}(T)$ согласно формуле (27)

$$\nu_2^s = \frac{|\varrho_1 s_1 - \varrho_2 s_2|}{\sqrt{\varrho_1 s_1 \varrho_2 s_2}},$$

где L — длина гетероструктуры, s_1 и s_2 — продольные скорости звука соответственно в яме и в барьере, а ϱ_1 и ϱ_2 — плотности материалов ямы и барьера. При $\nu_1^s \ll 1$ и $\nu_2^s \ll 1$ малы, во-первых, плотность состояний интерфейсных фононов по сравне-

нию с плотностью состояний трехмерных фононов, а во-вторых, изменения спектра и смешивание продольных и поперечных мод для трехмерных фононов в гетероструктуре. Величина ν_1^s для структуры с одиночной квантовой ямой мала в меру отношения ширины a ямы к ширине L всей гетероструктуры. Для ν_2^s , используя линейную интерполяцию при

вычислении параметров соединения $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$, получаем величину 0.008.

Одним из механизмов, определяющих модификацию взаимодействия электронов с акустическими фононами в гетероструктурах, является влияние смещений ионов на эффективную массу электрона [25]. Для описания относительной величины вклада взаимодействия по этому механизму введем величину

$$\nu^{int} = H'_{e-ph} / H_{e-ph},$$

где H'_{e-ph} , и H_{e-ph} — характерные величины матричных элементов гамильтонианов электрон-фононного взаимодействия по описанному в работе [25] механизму и по механизму деформационного потенциала. Для случая длинноволновых фононов можно показать, что

$$\nu^{int} \sim \hbar^2 \chi \kappa^2 / m^* |E_D|,$$

где χ — константа взаимодействия [25] в материале ямы, E_D — среднее значение деформационного потенциала для всей гетероструктуры. В рассматриваемом случае $\nu^{int} = 0.03$ и $\nu^{int} = 0.05$ соответственно для ям шириной 3 и 4 нм.

Обсудим определение функции прилипания. Трудность состоит в том, что, вообще говоря, всегда существует ненулевая вероятность электрона покинуть яму за достаточно большой промежуток времени. Поэтому при определении функции прилипания более строго говорить не о вероятности электрона остаться в яме, а о вероятности электрона через бесконечно большое время оказаться в яме. Такое расширенное определение включает в себя возможность процессов многократного перехода электрона из ямы в барьер и обратно.

Однако заметим следующее. Между состояниями в яме (1) и состояниями в барьере (2) возможны четыре типа переходов: яма–яма, барьер–барьер, барьер–яма и яма–барьер. Характерные времена для этих типов переходов при 10 К для ямы шириной 3 нм равны $\tau_{w-w} \approx 2 \cdot 10^{-10}$ с, $\tau_{b-b} \approx 10^{-11}$ с и $\tau_{w-b} \approx \tau_{b-w} \approx 10^{-9}$ – 10^{-8} с (в зависимости от начальной энергии электрона). Таким образом, на один переход между ямой и барьером приходится много переходов внутри ямы и внутри барьера. Иными словами, переход между барьером и ямой является «узким местом» в общей картине кинетики электронов в гетероструктуре. Благодаря этому при расчете функции прилипания в изложенном выше смысле можно не учитывать многократные переходы из ямы в барьер и обратно. При этом изложенная в разд. 3 схема расчета функции прилипания и, в

частности, уравнение (7) оказываются справедливыми лишь приближенно в меру отношений τ_{w-w} / τ_{w-b} и τ_{b-b} / τ_{w-b} .

В заключение этого раздела еще раз приведем условия применимости развитой теории:

- 1) захват происходит посредством взаимодействия только с акустическими фононами;
- 2) коэффициент отражения электронов от ямы близок к единице;
- 3) в яме существует область состояний, уход из которых практически невозможен.

Каждое из этих условий в конечном итоге приводит к ограничениям сверху рассматриваемого диапазона температур:

$$kT < \hbar\omega_{opt} - E_0, \quad kT \ll \frac{m^* a^2 U^2}{2\hbar^2}, \quad kT \ll E_0.$$

Для рассматриваемых ям наиболее жестким из этих ограничений является второе. В Приложении А показывается, что в качестве граничного значения температуры, ниже которой отражение электронов от квантовой ямы может считаться полным, разумно выбрать величину $T \approx 40$ К.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически исследованы захват электронов в квантовые ямы и выброс электронов из квантовых ям, контролируемые взаимодействием с акустическими фононами. В рамках построенной каскадной теории захвата электронов в квантовые ямы вычислены локальное время захвата, скорость тепловой эмиссии из ямы и полная вероятность ухода электрона из ямы как функции температуры. Для случая низких температур, когда процесс захвата является одноквантовым, получен аналитический ответ для локального времени захвата. Расчеты проведены для квантовых ям шириной 3 и 4 нм в гетероструктуре состава $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$, экспериментально исследованных в работах [14, 15].

Авторы выражают глубокую благодарность Н. Н. Сибельдину за предложение темы данной работы. Исследование выполнено при поддержке РФФИ (гранты №№ 07-02-00315-а, 06-02-90082-ННФ-а), Программы Отделения физических наук РАН, гранта Президиума РАН и гранта Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (НШ-5026.2006.2). Один из авторов (П. С. А.) благодарит также фонд «Династия» и фонд Ж. И. Алфёрова.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Коэффициент отражения от мелкой ямы

Рассмотрим отражение электронов от квантовой ямы. Коэффициент отражения электрона от квантовой ямы глубиной U и шириной a (см. рис. 1) определяется формулой

$$R(\varepsilon_z) = \frac{\sin^2(k_w a)}{p \sin^2(k_w a) + q \cos^2(k_w a)}, \quad (28)$$

где

$$p = \left(\frac{k_b^2 + k_w^2}{k_b^2 - k_w^2} \right)^2, \quad q = \left(\frac{2k_b k_w}{k_b^2 - k_w^2} \right)^2,$$

$$k_b = \frac{\sqrt{2m^* \varepsilon_z}}{\hbar}, \quad k_w = \frac{\sqrt{2m^*(\varepsilon_z + U)}}{\hbar},$$

ε_z — кинетическая энергия движения электрона вдоль оси z . В случае мелкой ямы выражение (28) может быть разложено по параметру $\delta = a^2 m^* U / \hbar^2$. Первое и второе приближения для коэффициента отражения по параметрам δ и $\epsilon = \varepsilon_z / U$ при $\varepsilon_z \ll U$ имеют вид

$$R^{(1)}(\epsilon) = \frac{1}{1 + 2\epsilon/\delta}, \quad (29)$$

$$R^{(2)}(\epsilon) = \frac{1}{1 + 2\epsilon/\delta + 2\epsilon/(1 + \epsilon)}. \quad (30)$$

На основе этих выражений можно оценить характерную энергию ε_{cr} электрона, ниже которой отражение близко к единице: $\varepsilon_{cr}^{(1)} = \delta U / 2$ для формулы (29) и

$$\varepsilon_{cr}^{(2)} = \left(-\frac{1}{2} - \frac{\delta}{4} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{3}{4}\delta + \frac{\delta^2}{16}} \right) U$$

для формулы (30).

Для рассматриваемых ям шириной 3 и 4 нм параметр δ соответственно равен 0.36 и 0.65, так что «мелкость» ям выражена слабо. Энергии $\varepsilon_{cr}^{(1)}$ и $\varepsilon_{cr}^{(2)}$ в единицах температуры равны 100 К и 75 К для ямы шириной 3 нм и 177 К и 115 К для ямы шириной 4 нм. На рис. 9 приведен результат расчета зависимостей $R(\varepsilon_z)$, $R^{(1)}(\varepsilon_z)$ и $R^{(2)}(\varepsilon_z)$ для этих ям. Из рисунка следует, что приближенное выражение $R^{(2)}(\varepsilon_z)$ хорошо описывает зависимость $R(\varepsilon_z)$. Также видно, что при $T < 40$ К для рассматриваемых ям максимально возможное отличие коэффициента отражения от единицы составляет примерно 30%.

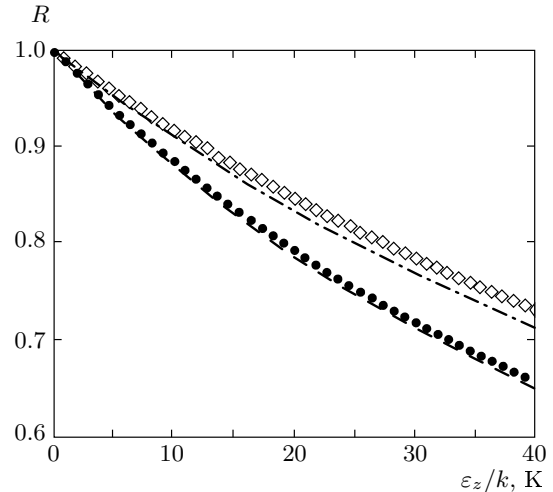


Рис. 9. Коэффициент отражения R электрона от границы ямы как функция кинетической энергии $\varepsilon_z = \hbar^2 k_z^2 / 2m^*$ движения электрона в барьере вдоль оси z . Точки и квадраты соответствуют точной зависимости (28) для ям шириной 3 и 4 нм, штрихпунктирная и штриховая линии — расчету коэффициента отражения для ямы шириной 3 нм по асимптотическим формулам (29) и (30)

При этих условиях амплитуда $r(\varepsilon_z)$ отраженной волны близка к -1 , так что волновые функции электрона в барьере могут быть взяты в виде (2). Отметим также, что энергия E_1 первого резонансного состояния для ям шириной 3 нм и 4 нм составляет соответственно 584 мэВ и 308 мэВ. Таким образом, эффекты, связанные с резонансным прохождением электронов над ямой, для рассматриваемых структур полностью отсутствуют.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Функции f^\pm и F^\pm

Приведем точное выражение для функций f^\pm , участвующих в определении вероятности выброса из состояния в яме по формуле (17):

$$f^\pm(\tilde{q}, \tilde{q}_z, \tilde{k}_z^f; E) = \frac{A \left[N(m^* s^2 \tilde{q}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]}{\sqrt{4B \left(\frac{E}{m^* s^2} - C^\pm \right) - \left(\frac{E_0}{m^* s^2} - B + C^\pm \right)^2}},$$

где

$$A = \frac{\tilde{q}^2 \left(\tilde{k}_z^f\right)^2}{4\tilde{\kappa}^2 \tilde{q}_z^2 + \left[\tilde{\kappa}^2 + \left(\tilde{k}_z^f\right)^2 - \tilde{q}_z^2\right]^2},$$

$$B = \frac{1}{2} (\tilde{q}^2 - \tilde{q}_z^2), \quad C^\pm = \frac{1}{2} \left(\tilde{k}_z^f\right)^2 \pm \tilde{q},$$

а $\tilde{\kappa} = \kappa \hbar / m^* s$.

Функции F^\pm , определяющие поток захватываемых в яму электронов в выражении (23), имеют вид

$$F^+(p; \tilde{\varepsilon}_\parallel, \tilde{\varepsilon}_z) = \frac{p}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_0^{x^+(\varphi)} dx \Phi^+(\varphi, x),$$

$$F^-(p; \tilde{\varepsilon}_\parallel, \tilde{\varepsilon}_z) = \frac{p}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_{x^-(\varphi)}^{\infty} dx \Phi^-(\varphi, x),$$
(31)

где

$$\Phi^\pm(\varphi, x) = \frac{(\tilde{q}_0^\pm)^2}{\sqrt{(\tilde{q}_0^\pm)^2 - 2px}} \times$$

$$\times \frac{\left[N(|E_0 \tilde{q}_0^\pm|) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] P[E_0(\tilde{\varepsilon}_\parallel + \tilde{\varepsilon}_z) - \tilde{q}_0^\pm]}{16p^2 \tilde{\varepsilon}_z + \left[(\tilde{q}_0^\pm)^2 + 2p - 2px - 2p\tilde{\varepsilon}_z \right]^2},$$

$$\tilde{q}_0^\pm(\varphi, x) = 1 + \tilde{\varepsilon}_z - x \pm 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\parallel x \cos \varphi},$$

$$x^\pm(\varphi) = \left[\sqrt{\frac{p}{2}} - \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\parallel} \cos \varphi \mp \sqrt{\left(\sqrt{\frac{p}{2}} - \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\parallel} \cos \varphi \right)^2 + 1 + \tilde{\varepsilon}_z} \right]^2.$$

В случае низких температур начальные энергии электронов в барьере малы по сравнению с глубиной залегания уровня E_0 , при этом безразмерные величины $\tilde{\varepsilon}_\parallel$ и $\tilde{\varepsilon}_z$ близки к нулю. Поэтому для определения потока захватываемых электронов можно ограничиться вычислением значений функций (31) в нуле. Величина $F^-(p; 0, 0)$ равна нулю, для $F^+(p; 0, 0) \equiv F(p)$ имеем

$$F(p) =$$

$$= p \int_0^{1+p-\sqrt{2p+p^2}} \frac{dx}{\sqrt{(1-x)^2 - 2px} [1-x+2p]^2}. \quad (32)$$

Для исследуемых структур $p = 1.2 \cdot 10^{-3}$ (узкая яма) и $p = 0.8 \cdot 10^{-3}$ (широкая яма), так что для определения $F(p)$ можно ограничиться вычислением предела при $p \rightarrow 0$. Из выражения (32) нетрудно получить, что

$$\lim_{p \rightarrow 0} F(p) = \frac{1}{2}.$$

Численный расчет показывает, что $F(p) = 0.479$ для гетероструктуры с ямой шириной 3 нм и $F(p) = 0.483$ для гетероструктуры с ямой шириной 4 нм.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Интегральное уравнение для функции прилипания

Исследуем постановку и решение задачи о поиске функции прилипания $P(E)$ на основе сформулированного интегрального уравнения (7) и граничного условия (9).

Уравнение (7) представляет собой критерий того, что единица является собственным числом, а $P(E)$ — собственной функцией интегрального оператора с ядром $K(E, E') = \tau_s(E) w_{in}(E', E)$. Граничное условие (9) представляет собой условие нормировки собственной функции $P(E)$. В этой связи встает вопрос о корректности сформулированной задачи: является ли единица собственным числом интегрального оператора с ядром $K(E, E')$, и если является, то соответствует ли собственному числу $\lambda = 1$ единственная собственная функция $P(E)$.

Отметим, что в области низких энергий $E \ll -kT$ величина w_{out}^d стремится к нулю, откуда следует, что

$$\int_{-E_0}^{\infty} K(E, E') dE' \rightarrow 1, \quad E \ll -kT \quad (33)$$

(см. формулы (8) и (16)). Предельное соотношение (33) означает, что при низких энергиях ядро $K(E, E')$ приближенно является марковским. Физически это соответствует следующему. В области низких энергий переходы электронов происходят почти исключительно между состояниями внутри ямы с вероятностями, зависящими от начального и конечного состояний. Такой сценарий, по определению, является марковским процессом, описываемым марковским ядром $K(E, E')$. Как известно, у марковского ядра единица является собственным числом, которому соответствует единственная собственная

функция $P_1(E) \equiv 1$. Следовательно, если искомая единственная собственная функция $P(E)$ оператора с ядром $K(E, E')$ существует, то $P(E)$ будет тождественной единицей при низких энергиях $E \ll -kT$ с точностью до величин порядка $w_{out}^d(E)/w_{in}^d(E)$.

Не останавливаясь на математических подробностях доказательства, изложим основные результаты. Была построена последовательность алгебраических уравнений, сходящихся к интегральному уравнению (7), каждое из которых получалось рассмотрением уравнения (7) на конечной сетке на оси энергий E . Для каждого уравнения из этой последовательности было показано следующее. Во-первых, все собственные числа каждого алгебраического уравнения меньше единицы. Во-вторых, максимальному собственному числу каждого уравнения соответствует единственный собственный вектор. Также было выяснено, что при предельном переходе к непрерывному случаю последовательность максимальных собственных чисел сходится к единице. На основе этих утверждений удалось доказать, что единица есть собственное число интегрального оператора с ядром $K(E, E')$ и ему соответствует единственная собственная функция $P(E)$.

Таким образом, наряду с доказательством корректности поставленной задачи поиска функции прилипания также может быть сформулирована численная схема ее решения. Первый шаг этой схемы состоит в выборе интервала энергий E , на котором будет строиться функция прилипания. На втором шаге строится сетка значений E на выбранном интервале и на этой сетке вычисляются значения функций w_{in} , w_{in}^d и w_{out}^d по формулам (15), (16) и (17). При этом ядро уравнения (7) превращается в матрицу. На последнем шаге для построенной матрицы ищется максимальное собственное число λ_m и соответствующий ему собственный вектор v . Критерием адекватности численной схемы служит близость λ_m к единице. Собственный вектор v нормируется условием $v_1 = 1$ (индекс «1» вектора v соответствует значению энергии $E = -E_0$). Компоненты полученного таким образом вектора v представляют собой значения функции прилипания на узлах сетки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Radhakrishnan Nagarajan, Toru Fukushima, Scott W. Corzine et al., Appl. Phys. Lett. **59**, 1835 (1991).
2. С. В. Иванов, К. Д. Моисеев, В. А. Кайгородов и др., ФТП **37**, 762 (2003).
3. S. Khatsevich, D. H. Rich, S. Keller et al., Phys. Rev. B **75**, 35324 (2007).
4. N. Debbar, Dipankar Biswas, and Pallab Bhattacharya, Phys. Rev. B **40**, 1058 (1989).
5. X. Letartre, D. Stievenard, and E. Barbier, Appl. Phys. Lett. **58**, 1047 (1991).
6. K. Schmalz, I. N. Yassievich, H. Rucker et al., Phys. Rev. B **50**, 14287 (1994).
7. E. O. Gobel, H. Jung, J. Kuhl et al., Phys. Rev. Lett. **51**, 1588 (1983).
8. J. A. Brum, G. Bastard, Phys. Rev. B **33**, 1420 (1985).
9. С. В. Козырев, А. Я. Шик, ФТП **19**, 1667 (1985).
10. Yoshimasa Murayama, Phys. Rev. B **34**, 2500 (1985).
11. P. W. M. Blom, C. Smit, J. E. M. Haverkort et al., Phys. Rev. B **47**, 2072 (1993).
12. A. Fujiwara, Y. Takahashi, S. Fukatsu et al., Phys. Rev. B **51**, 2291 (1995).
13. B. Deveaud, J. Shah, T. C. Damen et al., Appl. Phys. Lett. **52**, 1886 (1998).
14. N. N. Sibeldin, M. L. Skorikov, and V. A. Tsvetkov, Nanotechnology **12**, 591 (2001).
15. Н. Н. Сибельдин, М. Л. Скориков, В. А. Цветков, Письма в ЖЭТФ **76**, 732 (2002).
16. M. Lax, Phys. Rev. **119**, 1502 (1960).
17. В. Н. Абакумов, И. Н. Ясиевич, ЖЭТФ **71**, 657 (1976).
18. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, Изд-во «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова РАН», Санкт-Петербург (1997), сс. 77–94, 291–307, 326–334.
19. I. N. Yassievich, K. Schmalz, and M. Beer, Semicond. Sci. Technol. **9**, 1763 (1994).
20. С. А. Соловьев, И. Н. Ясиевич, В. М. Чистяков, ФТП **29**, 1264 (1995).
21. B. K. Ridley, Phys. Rev. B **50**, 1717 (1994).
22. V. N. Stavrou, C. R. Bennett, O. M. M. Al-Dossary et al., Phys. Rev. B **63**, 205304 (2001).
23. V. V. Mitin, V. A. Kochelap, M. A. Stroschio, *Quantum Heterostructures*, University Press, Cambridge (1999), pp. 185–234.
24. П. Ю. М. Кардона, *Основы физики полупроводников*, Физматлит, Москва (2002), с. 431–445.
25. V. I. Pipa, N. Z. Vagidov, V. V. Mitin et al., Phys. Rev. B **64**, 235322 (2001).