ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ СТРУКТУРЕ ПРИ ИХ РАССЕЯНИИ НА АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

В.Р.РАСУЛОВ, Р.Я.РАСУЛОВ, Д.КАМБАРОВ, И.Н.КАРИМОВ

Ўлчамли квантлашган ярим ўтказгичли структаралардаги электронларнинг акустик сочилишида импульсларининг релаксация вақти ҳисобланган. Бунда электронларнинг изотроп параболик энергетик спектридан фойдаланилган. Ҳисоблашларда фононларнинг спектри ҳажми кристаллдаги каби қолади деб ҳисобланган. Икки ва уч ўлчамли электронлар импульслари релаксация вақтлари солиштирилган ва бу муносабат структуранинг параметрлари билан аниқланиши таҳлил этилган.

The relaxation time of electrons were calculated considering elastic scattering electrons on acoustic phonons in approach of the isotropic parabolic law of a carriers dispersion by the impulse in quantum well. It is supposed that the phonons spectrum in structure does not differ from the volume. Comparison times of relaxation of an impulse of two and three-dimensional electrons made and shown, that the account value of time of relaxation in a two-dimensional case were analyzed by structure parametres.

Теоретические и экспериментальные исследования полупроводниковых структур с учетом размерного квантования привлекли внимание к возможности их использования не только в наноэлектронике, но и в термоэлектричестве.

В [1] теоретически показано, что можно в 2-3 и более раз увеличить термоэлектрической добротности *Z* путем приготовления термоэлектрических полупроводниковых сверхрешеток с квантовыми ямами. Основной выигрыш в *Z* достигается за счет увеличения плотности состояний носителей тока вблизи краев зон в структурах с квантовыми ямами по сравнению с объемными.

В [1,2] предполагается, что размерное квантование не приводит к изменению подвижности носителей тока вдоль интерфейса структуры. Если это учитывается (см., например, [3]), тогда ограничивается приближением, где считают, что все электроны находятся вблизи дна нижней подзоны размерного квантования.

Ниже рассмотрим обобщенную модель полупроводниковой размерно квантованной структуры. Предполагаем, что в структуре имеются как симметричные, так и асимметричные по отношению к пространственной инверсии электронные состояния. Пусть гетероструктура выращена по оси z, где считаем, что потенциальные барьеры достаточно высоки, то волновая функция электрона может быть записана в виде

$$\left\langle n,\vec{k}_{\perp}\right| = \psi^{n}_{\vec{k}_{\perp}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}z\right)\cdot\exp\left(i\vec{k}_{\perp}\vec{r}\right) \quad (1)$$

где n – номер энергетического состояния размерного квантования, $\vec{k}_{\perp} = \left(k_x, k_y\right)$ – волновой вектор движения электрона в плоскости интерфейса, $\vec{r} = (x, y)$, a - толщина ямы, z – ось размерного квантования, S – нормировочная площадь (площадь интерфейса).

В сотоветствии с методом деформационного потенциала потенциальная энергия взаимодействия электронов с акустическими колебаниями [4, 5]

$$U(\vec{r}) = \zeta div(\vec{u}(\vec{r})) = \frac{iE_D}{\sqrt{NM_0}}\sum_{\vec{q}}\left(a_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\vec{r}} + a^{*}_{\vec{q}}e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right). \quad (2)$$

Здесь E_D – константа деформационного потенциала, $\vec{u}(\vec{r})$ – оператор смещения, N – число элементарных ячеек в объеме кристалла, M_0 – масса элементарной ячейки, $\vec{q}$ – волновой вектор фонона, $a_{\vec{q}}$ – нормальные координаты фононов.

Будем рассматривать переходы электронов из барьера в яму за счет взаимодействия с акустическими фононами. Влиянием гетероструктуры на спектр фононов и на механизм электрон-

фононного взаимодействия пренебрежем. Тогда вероятность перехода типа $\left|n,\vec{k}_\perp\right\rangle \to \left|n',\vec{k}'_\perp\right\rangle$ с участием акустического фонона определяется согласно золотому правилу Ферми

$$W^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|M^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}\right|^2 \delta\left(E_{n',\vec{k}'} - E_{n,\vec{k}_\perp}\right). \quad (3)$$

где $E_{n',\vec{k}'}$ $\left(E_{n,\vec{k}_\perp}\right)$- энергиия конечного (начального) состояния электронов, энергия акустического фонона. $M^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}$ - матричный элемент, $\delta\left(E_{n',\vec{k}'} - E_{n,\vec{k}_\perp}\right) - \delta$ - функция, описывающая закон сохранения энергии, соответствующий оптическим переходам. Тогда матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в (3) равен [4, 5]

$$M^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = i\frac{E_D}{\sqrt{NM_0}}\left\langle n',\vec{k}'_\perp\left|\sum_{\vec{q}} q\left(a_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\vec{r}} + a^*_{\vec{q}}e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right)\right|n,\vec{k}_\perp\right\rangle, \quad (4)$$

или

$$M^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = M_D Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm), \quad (5)$$

где выделен матричный элемент $M_D = \frac{E_D}{\sqrt{2NM_0 s^2}}\sqrt{k_B T}$, не зависящий от волнового вектора фонона и номеров размерно-квантованных состояний, k_B – постоянная Больцмана, T – температура образца, знак $"-"("+")$ соответсвует поглощению (испусканию) фонона, энергия которого считаем малой величиной по отношению $k_B T$, а функция $Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = \int_V d^3\vec{r}\left\langle n',\vec{k}'_\perp\left|U(\vec{r})\right|n,\vec{k}_\perp\right\rangle$ получена в результате интегрирования по переменной z, т.е.

$$Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)\cdot e^{\pm iq_z z}\cdot\sin\left(\frac{\pi n}{a}z\right)dz, \quad (6)$$

Волновая функция связанного состояния электрона в яме представляет собой произведение бегущей волны, описывающей свободное движение в плоскости интерфейсов, и зависящей от $\vec{r}$ симметричной функции размерного квантования:

$$\left\langle n,\vec{k}_\perp\right| = \psi^n_{\vec{k}_\perp}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi n}{a}z\right)\cdot\exp\left(i\vec{k}_\perp\vec{r}\right) \quad (7)$$

Тогда имеем

$$Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = \frac{2}{a}\int_0^a \cos\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)\cdot e^{\pm iq_z z}\cdot\cos\left(\frac{\pi n}{a}z\right)dz. \quad (8)$$

Поэтому, в дальнейшем требуется провести интегрирование типа

$$Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = \frac{2}{a}\int_0^a f_2\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)\cdot e^{\pm iq_z z}\cdot f_1\left(\frac{\pi n}{a}z\right)dz. \quad (9) \qquad (\text{}$$

Поэтому в таблице 1 приведены результаты интегрирования (9) для различных $f_1\left(\frac{\pi n}{a}z\right)$ и $f_2\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)$функций

	$f_1\left(\frac{\pi n}{a}z\right)$	$f_2\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)$	$Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)$
1	$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right)$	$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right)$	$\frac{\sin(\pi x)}{\pi x(1-x^2)}\exp(\pm i\pi x)$
2	$\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi}{a}z\right)$	$\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi}{a}z\right)$	$\frac{(1-2x^2)\sin(\pi x)}{\pi x(1-x^2)}\exp(\pm i\pi x)$
3	$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)$	$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}z\right)$	$\Xi_- - \Xi_+$
4	$\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)$	$\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi n}{a}z\right)$	$\Xi_- + \Xi_+$
5	$\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n'}{a}z\right)$	$\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi n}{a}z\right)$	$\Xi'_- + \Xi'_+$

где проведено следующие обозначения: $x=\frac{q_z a}{2\pi}$, $s=\pm$,

$$\Xi_s=\frac{\pm 2ix}{\pi\left[(n'+sn)^2-4x^2\right]}\left[\exp(\pm i\pi x)\times\cos\left(\pi(n'+sn)\right)-1\right],\ \Xi''_s=\pm\frac{(n'+sn)}{2x}\Xi_s$$

Тогда время релаксации импульса двумерных $(2D)$ электронов определяется с помощью обратного значения вероятности перехода как

$$\frac{1}{\tau^{(2D)}}=\sum_{n',n}\frac{1}{\tau^{(n'n)}_{2D}}=\sum_{n',n}\sum_{\vec{q}}\left|M_D\right|^2\frac{q_\aleph}{k_\aleph}\left\{\begin{matrix}\left|Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(+,q_z)\right|^2\delta\left(E^{(n')}_{\vec{k}_\perp+\vec{q}}-E^{(n')}_{\vec{k}_\perp}\right)+\\ +\left|Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(-q_z)\right|^2\delta\left(E^{(n')}_{\vec{k}_\perp+\vec{q}}-E^{(n')}_{\vec{k}_\perp}\right)\end{matrix}\right\},\ (10)$$

где выбрано направление, например направление вектора напряженности внешнего электрического поля, относительно которого проводится угловое интегрирование.

После ряда преобразований можно переписать (10) в другом виде

$$\frac{1}{\tau^{(n'n)}_{2D}}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|M_D\right|^2 g^{(2D)}\Phi^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(+,q_z),\ (11)$$

где $g^{(2D)}=m^*/(2\pi\hbar^2)$- двумерная плотность электронных состояний, m^* - эффективная масса электронов,

$$\Phi^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2\frac{dq_z}{2\pi}.\ (12)$$

Ради полноты задачи ниже приводим ряд полезных для промежуточных расчетов выражений:

а) случай $n'=n=1$ (волновая функция нечетная по z)

$$F_1=\left|Y^{(1,1)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2=\left(\frac{\sin(\pi x)}{\pi x(1-x^2)}\right)^2,\ (13)$$

б) случай $n'=n=1$ (волновая функция четная по z)

$$F_2=\left|Y^{(1,1)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2=\left(\frac{(1-2x^2)\sin(\pi x)}{\pi x(1-x^2)}\right)^2,\ (14)$$

в) случай $n'=n=2$ (волновая функция нечетная по z)

$$F_3 = \left|Y^{(2,2)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2 = \left(\frac{4\sin(\pi x)}{\pi x(4-x^2)}\right)^2, \quad (15)$$

г) случай $n' = n = 2$ (волновая функция четная по z)

$$F_4 = \left|Y^{(2,2)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2 = \left(\frac{2(2-x^2)\sin(\pi x)}{\pi x(x^2)}\right)^2, \quad (13)$$

Графики этих функций, в зависимости от x, приведены на рис.1.

Из графиков видно, что матричные элементы перехода электронов с участием акустических фононов осциллируются в пространстве q_z. А также имеем следующие интересные, на наш взгляд, результаты как при $n' = n = 1$, так и при $n' = n = 2$:

$$\Phi^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm) = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|Y^{(n',n)}_{\vec{k}'_\perp,\vec{k}_\perp}(\pm)\right|^2 \frac{dq_z}{2\pi} = \frac{3}{2\cdot a}. \quad (13)$$

где доказано, что при переходах между одноименными размерно-квантованными состояниями обратное время релаксация по импульсу $2D$ электронов тем больше, чем уже толщина ямы.

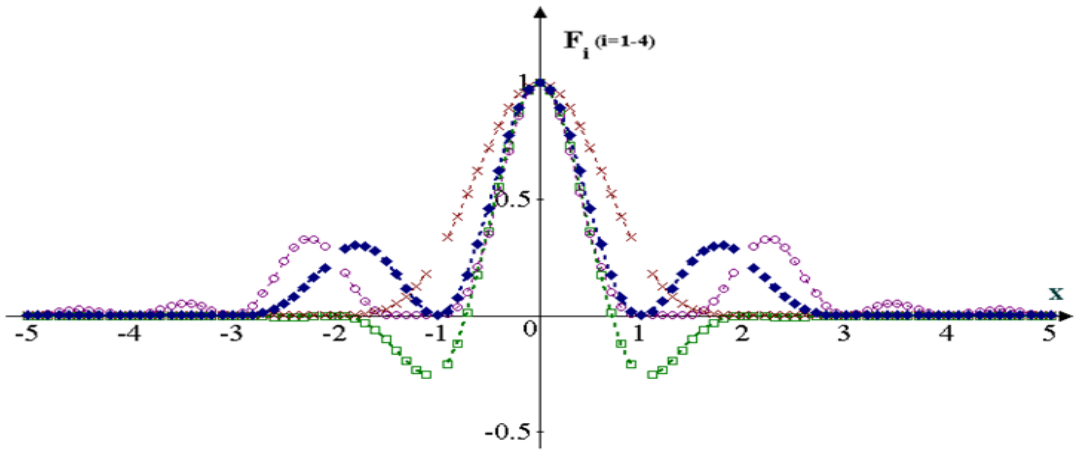

Рис.1. Графики $F_i\,(i = 1 \div 4)$ в зависимости от x, где $\times$ - $F_1(x; n' = n = 1)$, ■ - $F_2(x; n' = n = 1)$, □ - $F_3(x; n' = n = 1)$, ○ - $F_4(x; n' = n = 1)$

В первом случае, нами получены результаты [Пш Равич]. Тогда как и в [3], отношение времен релаксации импульса двух и трехмерных электронов

$$\frac{\tau^{(2,2)}_{2D}}{\tau_{3D}} = \frac{\tau^{(1,1)}_{2D}}{\tau_{3D}} = \frac{g^{(1,1)}_{2D}}{g_{3D}} = \frac{2ka}{3\pi}. \quad (12)$$

где g_{3D} – плотность электронных состояний в кристалле, k - волновой вектор[1] электронов, определяемый из закона сохранения энергии (из условия обращения в ноль аргумента δ-функции) и усредненный по телесному углу вектора $\vec{\aleph}$.

Из последнего имеем, что выбирая структуры можно контролировать время релаксации электронов по импульсу. Также отметим, что нами было не учтена зависимость g_{2D} и k от номера состояний размерного квантования, учет которого приводит дополнительному вкладу в $\tau^{(n',n)}_{2D}$

[1] В общем случае значение этого вектора должно зависит от номера начального и конечного состояний (например, размерного квантования).

Литература

1. L.D.Hicks, M.S.Dresselhaus. Phys.Rev. B.47. 1277. (1993).
2. L.D.Hicks, T.C.Herman, X.Sun, M.S.Dresselhaus. Phys.Rev. B.53 10493. (1993).
3. Д.А.Пшенай Северин, Ю.И.Равич. ФТП. 2002. Т. 36. С. 974-980.
4. Г.Л.Бир, Г.Е.Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.- М.: Наука,1973.
5. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников.- М.: Наука. 1978.

ЎзФА Фарғона илмий маркази,
Андижон давлат университети,
2012 йил 6 апрелда қабул қилинган