

А.Б. Дюбуа

Рязанский институт открытого образования

Электрон–электронные взаимодействия в умеренно легированном гетеропереходе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Получены самосогласованное решение системы уравнений Шредингера и Пуассона, выражения зависимостей времени внутривозонного электрон–электронного взаимодействия τ_{ee}^{intra} от температуры T для умеренно легированного гетероперехода $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x = 0,3$).

Ключевые слова: внутривозонные электрон–электронные взаимодействия, зонная структура гетероперехода.

Электрон–электронные («e–e») взаимодействия играют определяющую роль в кинетических явлениях, среди которых следует отметить эффекты горячих электронов, квантовые поправки к проводимости и затухание (разрушение) квантования Ландау в объёмных и двумерных полупроводниковых соединениях с вырожденными электронами [1]. Для корректной теоретической интерпретации экспериментов необходимо нахождение явного вида зависимостей времени электрон–электронных взаимодействий от температуры $\tau_{ee}(T)$ в приближении хаотических фаз [2].

Суть метода состоит в следующем. Роль внешнего возмущения играет потенциал экранирования, в который входит диэлектрическая функция электронного газа. Далее, фурье-образ внешнего возмущения (обычно ограничиваются вторым членом разложения) подставляется в уравнение Больцмана, результатом решения которого является время «e–e» релаксации. Решение этого интегро-дифференциального уравнения представляет большие математические сложности. В первую очередь это связано с необходимостью точного учёта потенциального профиля квантовой ямы. Чаще всего (см. например, [3]) используется в качестве аппроксимации бесконечная прямоугольная квантовая яма, что делает все последующие преобразования неприменимыми для исследования более сложных квантовых структур.

Зонные диаграммы исследованных наноструктур были рассчитаны методом самосогласованного решения уравнений Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + E(z) \right] \psi_j(z) = E_j \psi_j(z) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\psi_j(0) = 0, \quad \psi_j(\infty) = 0 \quad (2)$$

и Пуассона

$$E(z) = -eV(z), \quad -\frac{d^2V}{dz^2} = \frac{4\pi\rho(z)}{\chi} \quad (3)$$

с граничными условиями

$$V(z = \infty) = 0, \quad eV(z = 0) = E_0, \quad (4)$$

где χ — диэлектрическая функция.

Самосогласованное решение системы (1)–(4) представляет определённые трудности из-за неопределённости распределения плотности заряда $\rho(z)$.

В ряде работ [4] уже были предприняты попытки расчёта зонных структур гетеропереходов, однако авторы ограничились численным методом и не получили аналитического решения. Кроме того, в решении системы (1)–(4) могут возникнуть разного рода расходимости, существенно влияющие на конечный результат.

Поскольку суммарный интеграл

$$Q = \int_0^\infty \rho(z) dz = 0, \quad (5)$$

то в первом приближении должны существовать две области положительного и отрицательного зарядов: $z < D$ и $z > D$ с условием $\rho(z = D) = 0$. Поскольку $\rho(z = 0) = eN_0^{3/2}$ (N_0 — уровень легирования), то простейшая аппроксимация такова:

$$\begin{cases} \rho(z) = eN_0^{3/2} \left(1 - \frac{z}{D}\right), & z < D, \\ \rho(z) = -A \exp(-(z - D)/a), & z > D. \end{cases} \quad (6)$$

Подставляя систему (6) в (5) и интегрируя, получим

$$A = \frac{eN_0^{3/2}D}{2a}.$$

Далее, подставив (6) в (3), после простых преобразований получим распределение потенциала:

$$V(z) = -\frac{2\pi}{\chi} \left[eN_0^{3/2} \left(z^2 - \frac{z^3}{3D} \right) \right] + \frac{4\pi eN_0^{3/2}}{\chi} \left(\frac{1}{3}D^2 + \frac{1}{2}Da \right), \quad z < D, \quad (7)$$

$$V(z) = \frac{2\pi eN_0^{3/2}D}{\chi} a \exp(-(z - D)/a), \quad z > D. \quad (8)$$

Моделирование потенциала имеет существенный недостаток: произвол в определении постоянных a и D . Кроме того, используя данный метод, не

удаётся решить уравнение Шредингера (1). В какой-то мере произвол можно снять с помощью граничного условия (4):

$$E(0) = -eV(z=0) = -\frac{4\pi e^2 N_0^{3/2} \left(\frac{1}{3}D^2 + \frac{1}{2}aD\right)}{\chi} \quad (9)$$

Откуда следует связь:

$$a = \frac{\chi E(0)}{2\pi e^2 N_0^{3/2} D} + \frac{2}{3}D.$$

Для решения уравнения (1) преобразуем его к виду

$$E_F \left(-\frac{1}{k_F^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{V(z)}{E_F} \right) \psi_j(z) = \varepsilon_j \psi_j(z),$$

где E_F — уровень Ферми, связанный с волновым вектором k_F соотношением

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}.$$

Для 2D-электронного газа справедливо $k_F = \sqrt{2\pi n_S}$, где n_S — концентрация 2D-электронов.

Систему уравнений (1)–(4) удобно решать в новых безразмерных переменных:

$$\frac{V(z)}{E_F} = \varphi(z), \quad \frac{\varepsilon_j}{E_F} = E_j, \quad \tilde{z} = zk_F,$$

$$\rho(z) = -en(\tilde{z})k_F^2, \quad \psi(z) = \tilde{\psi}(\tilde{z})k_F^{1/2}.$$

Исходная система в новых переменных запишется как

$$\left(-\frac{d^2}{d\tilde{z}^2} + \varphi(\tilde{z}) \right) \tilde{\psi}_j(\tilde{z}) = E_j \tilde{\psi}_j(\tilde{z}), \quad (10)$$

$$-\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{z}^2} = \frac{8\pi m^* e^2 k_F}{\chi \hbar^2} n(\tilde{z}), \quad (11)$$

с граничными условиями

$$\varphi(z = \infty) = 0,$$

$$\left(-\frac{d\varphi}{dz} \right)_{z=0} = \frac{8\pi m^* e^2 k_F}{\chi \hbar^2} \int_0^\infty n(\tilde{z}) d\tilde{z}, \quad (12)$$

$$\psi_j(0) = 0, \quad \psi_j(z = \infty) = 0.$$

В отсутствии внешних полей интеграл в (12) равен нулю.

Будем искать решение уравнения (11) в виде

$$\varphi(z) = c \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \beta^n \exp(-(n+1)\lambda z), \quad (13)$$

где β , λ — некоторые подлежащие определению константы, а c определяется из граничных условий как

$$c = \frac{V_0}{E_F \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \beta^n} = \frac{V_0}{E_F} (\beta + 1).$$

Из уравнения (11) получим

$$\begin{aligned} & \frac{8\pi m^* e^2 k_F}{\chi \hbar^2} n(\tilde{z}) = \\ & = \frac{V_0}{E_F} (\beta + 1) \lambda^2 \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \beta^n (n+1)^2 \times \\ & \quad \times \exp(-(n+1)\lambda z), \end{aligned}$$

а затем будем варьировать $E(z)$ в известных пределах и построим параметрическую зависимость функции $E(z)$ от λ (рис. 1). На этом же рис. 1 изображено решение системы (7)–(8). Подгоночными параметрами были выбраны λ и β . Анализ показал, что зависимость $\varphi(\beta)$ достаточно слабая.

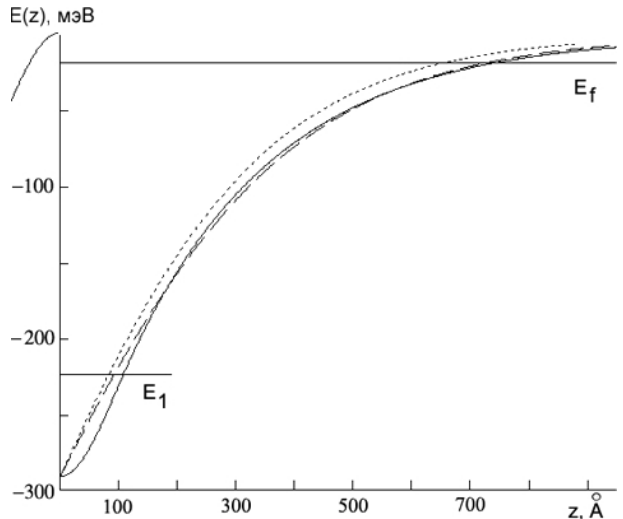


Рис. 1. Профиль потенциальной ямы: сплошная — решение системы (7)–(8); пунктирная — зависимость (13) при $\lambda = 0,5 \cdot 10^6$, $\beta = 0,7$; штриховая — зависимость (13) при $\lambda = 0,45 \cdot 10^6$, $\beta = 0,7$

Решение уравнения (10) представим как

$$\psi_k(z) = C(k) \sin[kz + \eta(k)], \quad (14)$$

где $C(k)$ будет определяться из условий нормировки:

$$C^2(k) \int_0^L \psi_k^2(z) dz = 1. \quad (15)$$

Представляя (14) в виде

$$\psi_k^+(z) = \exp(ikz + i\eta(k)) \sum_{j=0}^\infty b_j(k) \exp(-j\lambda z)$$

и подставляя в уравнение Шредингера (10), получим

$$\begin{aligned} & \left[-k^2 \sum_{j=0}^\infty b_j(k) - 2ik\lambda \sum_{j=0}^\infty b_j(k)j + \lambda^2 \sum_{j=0}^\infty b_j(k)j^2 + \right. \\ & \left. + \left[\frac{V_0}{E_F} (\beta + 1) \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \beta^n \exp(-(n+1)\lambda z) - E_j \right] \times \right. \\ & \quad \left. \times \sum_{j=0}^\infty b_j(k) \right] \exp(-j\lambda z) = 0, \end{aligned}$$

$$b_1(k) = -\frac{V_0(\beta+1)}{E_F\lambda(\lambda^2+4k^2)}(\lambda+2ik),$$

$$b_j(k) = -\frac{V_0(\beta+1)}{E_F\lambda(j^3\lambda^2+4k^2j)}[j\lambda+2ik] \times$$

$$\times \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n b_{j-(n+1)},$$

где $b_0 = 1$, которое определяется из условия нормировки (15).

Фазовый сдвиг определяется суммой

$$\sum_{j=0} b_j(k) = -\exp(-i\eta(k)).$$

На рис. 2 показана зависимость $E(z)$, квадрат модуля волновых функций электронов на энергетическом уровне основной E_1 подзоны размерного квантования. Для решения поставленной задачи реальный профиль $E(z)$ зоны проводимости гетероперехода аппроксимируем треугольной ямой, так как это представлено на рис. 2. Рассмотрим двумерный электронный газ, находящийся в треугольной потенциальной яме. Представляя в области $0 < z < d$ потенциальный профиль в сферической системе координат как

$$E_{ext}(r) = \frac{E_0 - E_1}{d}r - E_0$$

с граничными условиями

$$E_0 = E_{ext}(0), \quad E_1 = E_{ext}(d).$$

Фурье-образ кулоновской экранировки будет иметь вид

$$V_{ext}(q) = \frac{1}{S} \int \frac{d^2r}{(2\pi)^2} \exp(-iqr) E_{ext}(r),$$

где $S = L^2$, L — линейные размеры системы, а фурье-образ полной экранировки:

$$V_{tot}(q, \omega) = \frac{V_{ext}(q)}{\varepsilon(q, \omega)},$$

где диэлектрическая функция в приближении хаотических фаз (ПХФ) имеет вид

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \frac{2\pi e^2}{q} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{f_{k-q/2} - f_{k+q/2}}{\hbar^2 k q / m^* + \hbar\omega}.$$

В соответствии с теорией возмущений

$$\frac{1}{\tau_i^{ee}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{j,k,l} \sum_{k,p,q} |V_{tot}^{ijkl}(q, \omega)|^2 \delta(E_k(k+q) +$$

$$+ E_l(p-q) - E_i(k) - E_i(p)) \times$$

$$\times f_k f_p (1 - f_{k+q}) (1 - f_{p-q}), \quad (16)$$

где $V_{tot}^{ijkl}(q, \omega)$ — матричный элемент полного потенциала экранирования, а f — функция Ферми-Дирака. В случае одной заполненной подзоны имеем $i = j = k = l = 1$. Здесь отступим от

традиционного (численного) метода решения задачи, используя нормировку вероятности электрон-электронных переходов на δ -функцию. В результате в процессе интегрирования (16) встречаются лишь сингулярные члены. Это позволило проинтегрировать (16) в элементарных функциях и получить результат, удобный для анализа. Воспользовавшись в процессе вычисления тождественным преобразованием

$$\sum_k f_k (1 - f_{k+q}) \delta(\hbar\omega - E_{k+q} + E_k) =$$

$$= \frac{1}{\pi (\exp(-v\hbar\omega) + 1)} \Im [\chi_0(q, \omega)],$$

где

$$\chi_0(q, \omega) = 2 \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\hbar\omega - E_{k+q} + E_k + i\delta}, \quad v = \frac{1}{k_B T}.$$

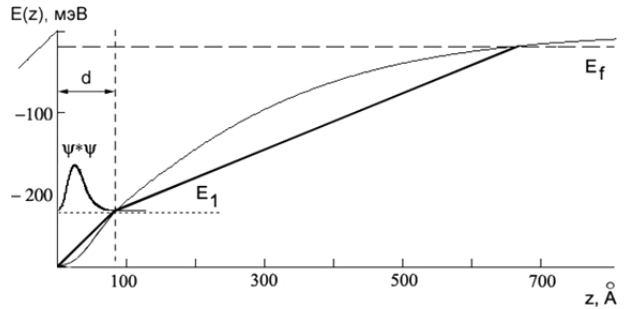


Рис. 2. Фрагмент $E(z)$ гетероперехода при $n_s = 6,3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Показана аппроксимация реального распределения потенциала треугольным профилем с изломом в точке пересечения с уровнем E_1

Приходим к окончательному выражению:

$$\left(\frac{1}{\tau_{ee}}\right)^{intra} = \frac{(E_0 - E_1)^2 \hbar v}{m^* E_F d^2 \pi^2} [\psi_1(v) + \psi_2(v) + \psi_3(v)] +$$

$$+ \frac{\sqrt{8m^* E_F}}{\pi^2 E_F^2 m^* d^2} (E_0 - E_1) \left[(E_0 - E_1) \frac{e^2 L^2 m^*}{\pi \hbar^2} - V_0 d \right] \times$$

$$\times [\psi_1(v) + \psi_2(v)] +$$

$$+ \frac{E_0}{\pi^3 \hbar v E_F^2 d} \left[E_0 d - (E_0 - E_1) \frac{e^2 L^2 m^*}{\pi \hbar^2} \right] \psi_3(v), \quad (17)$$

где

$$\psi_1(v) = \frac{v E_F}{5(2B - v E_F)^2} \left[\ln(B) - \frac{v E_F}{5(2B - v E_F)^2} \right],$$

$$\psi_2(v) = \frac{v E_F}{6(2B - v E_F)} \left[\ln(B) - \frac{v E_F}{6(2B - v E_F)} \right],$$

$$\psi_3(v) = \frac{(v E_F)^6}{5(2B - v E_F)^7} \ln\left(\frac{v E_F}{2B}\right) + \frac{(v E_F)^5}{(2B - v E_F)^6} -$$

$$- \frac{(v E_F)^4}{2(2B - v E_F)^5} + \frac{(v E_F)^3}{(2B - v E_F)^4} - \frac{(v E_F)^2}{2(2B - v E_F)^3}.$$

Проанализируем последнее выражение. По смыслу входящих в него величин можно указать, что

основными факторами, влияющими на интенсивность электрон-электронного взаимодействия, являются температура и параметры потенциальной ямы. Оценим вклад каждого из них. Преобразуем (17) к виду

$$\tau_{ee}^{intra} = \sigma_1(E_0, E_1, d) p_1(v) + \sigma_2(E_0, E_1, d) p_2(v) + p_3(v), \quad (18)$$

где функции σ_n зависят только от параметров ямы и являются безразмерными, а p_n — от температуры и имеют размерность времени. Вышеуказанные функции представлены на рис. 3 и 4, а зависимость времени релаксации от температуры на рис. 5.

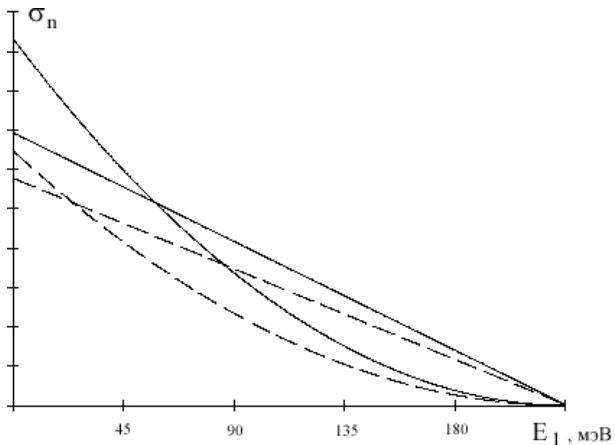


Рис. 3. Характер воздействия на σ_n суммы (9) параметров E_1 и d для реальных гетероструктур при $E_0 = 225$ мэВ. Сплошные кривые — σ_1, σ_2 при $d = 86$ Å, штриховые кривые — σ_1, σ_2 при $d = 100$ Å

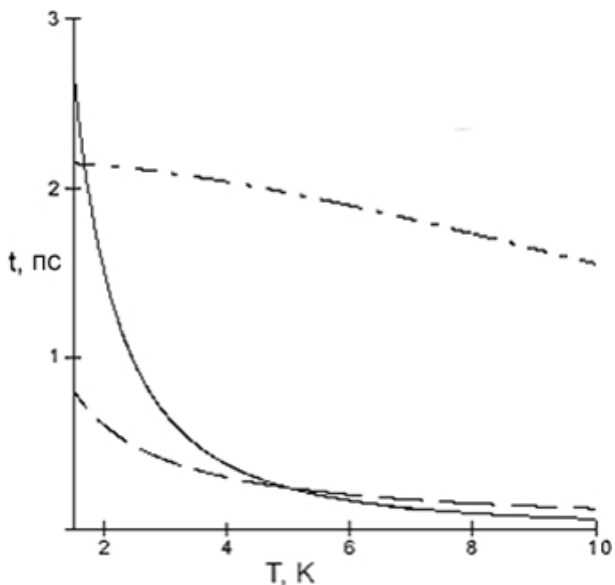


Рис. 4. Вариационный вклад в температурную зависимость компонентов p_n в (9) при $E_0 = 225$ мэВ, $E_1 = 165$ мэВ, $d = 86$ Å. p_1 — сплошная кривая, p_2 — штриховая, p_3 — штрихпунктирная

Сравним выражение (18) с экспериментальными данными [4] (рис. 5). Варьируя параметры ямы в известных пределах, возможно добиться удовлетворительного согласия с результатами работы [3]. Как видно из рис. 2, имеются три параметра, задающих треугольную яму. Зафиксируем

один из них (пусть это будет E_0) и будем варьировать два других (ширина ямы d и E_1). Из рис. 2 следует, что влияние первых двух слагаемых в (18) при значениях $E_1 > 135$ мэВ будет несущественным и ход температурной зависимости времени «e-e» взаимодействия полностью определяется третьим слагаемым — $p_3(v)$, повторяющим экспериментальные кривые.

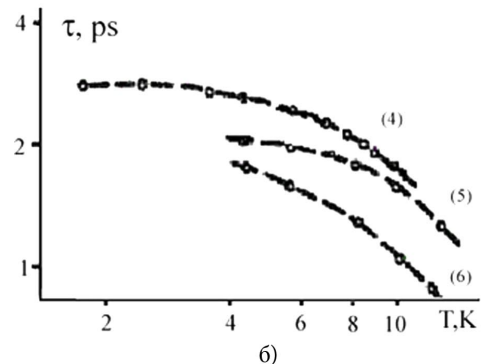
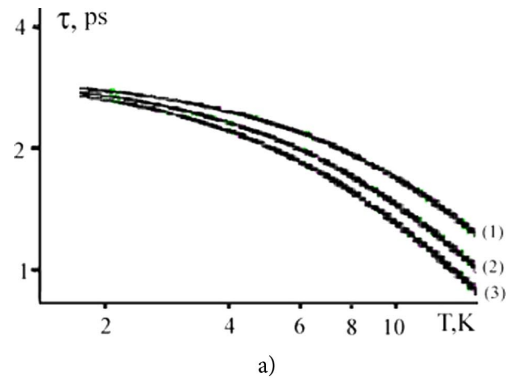


Рис. 5. Сопоставление теоретических (а) и экспериментальных (б) зависимостей для $n_s = 8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ — (1) и (4), $n_s = 6,9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ — (2) и (5), $n_s = 6,3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ — (3) и (6)

Таким образом, аппроксимируя реальный профиль гетероперехода треугольной ямой, когда под уровнем Ферми имеется лишь одна заполненная подзона размерного квантования, удаётся добиться хорошего согласия результатов расчёта τ_{ee} — времени внутривозонной релаксации с экспериментальной зависимостью. Подгоночными параметрами служила лишь характеристика потенциальной ямы наноструктуры.

Литература

1. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. — М.: Мир, 1985.
2. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. — М.: Мир, 1967.
3. Slutzky M., Entin-Wohlman O., Berk Y., Palevsky A. // Phys. Rev. B. — 1996. — V. 53, N. 7. — P. 4065–4072.
4. Kadushkin V.I., Dubois A.B. The Role of Electron-Electron Relaxation in Landau Quantization Damping // Phys. Low-Dim. Struct. — 2002. — V. 11/12. — P. 27–37.

Поступила в редакцию 16.12.2007.