Зависимость акустического рассеяния квазидвумерных электронов от параметров сверхрешетки типа GaAs/Al_xGa_{1-x}As

© С.И. Борисенко[¶]

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова, 634050 Томск, Россия

(Получена 8 января 2002 г. Принята к печати 21 марта 2002 г.)

Проведен численный анализ времени релаксации квазидвумерных электронов сверхрешетки GaAs/Al_xGa_{1-x}As при рассеянии на акустических фононах в зависимости от ширины квантовой ямы, толщины и высоты потенциального барьера. Вероятность рассеяния электронов нижней минизоны рассчитывалась с приближенной огибающей волновой функцией, не учитывающей дисперсию периодической части функции Блоха по волновому вектору. Проведен сравнительный анализ рассчитанных значений времени релаксации со значением, полученным по известной приближенной формуле.

1. Введение

Как известно [1–3], многие специфические и электрические свойства сверхрешеток (СР) с квазидвумерным электронным газом проявляются в области низких температур, при которых основным механизмом рассеяния на колебаниях решетки является рассеяния на акустических (АК) фононах. Обычно для расчета подвижности, определяемой этим рассеянием, используется известная формула для времени релаксации [3–5]

$$\tau = \frac{2}{3} \frac{a\hbar^3 c_L}{m^* D_c^2 k_0 T},\tag{1}$$

где a — ширина прямоугольной квантовой ямы (КЯ) сверхрешетки, c_L — модуль упругости продольных акустических колебаний, D_c — константа деформационного потенциала у дна зоны проводимости, m^* — эффективная масса электронов. Константы c_L , D_c , m^* имеют те же значения, что и в полупроводнике, из которого состоит КЯ. Время релаксации, определяемое этой формулой, зависит только от ширины КЯ, так как она получена с учетом огибающей волновой функции для носителей заряда, соответствующей бесконечно глубокой квантовой яме. В связи с этим возникает вопрос о применимости этой формулы к анализу подвижности в СР с достаточно узкими барьерами, высота которых сравнима с энергией электронов нижней (основной) минизоны.

В данной работе предложен метод расчета времени релаксации квазидвумерных электронов на деформационном потенциале акустических фононов с огибающей волновой функцией, учитывающей конечную высоту и ширину потенциальных барьеров сверхрешетки. Проведен численный анализ зависимости времени релаксации от конструктивных параметров СР GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

2. Методика расчета

В приближении сильной связи вероятность упругого рассеяния квазидвумерных электронов нижней минизоны СР на акустических фононах из состояния с волновым вектором \mathbf{k} в состояние с \mathbf{k}' можно представить в виде

$$w(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n=-N_z/2}^{N_z/2} |U_n(k'_z,k_z)|^2 \delta\big(\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k})\big), \quad (2)$$

где N_z — число периодов СР,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} + \frac{\Delta}{2} \left[1 - \cos(k_z d) \right]$$
(3)

— энергия электронов нижней минизоны в приближении сильной связи, *d* — период СР,

$$U_n(k'_z, k_z) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} e^{i2\pi nz/d} C u^*_{k'_z} u_{k_z} dz, \qquad (4)$$

 $C = D_c \sqrt{k_0 T/c_L}$ — параметр взаимодействия электронов с фононами, имеющий в приближении объемного фононного спектра различное значение для квантовой ямы и барьера, $u_{k_z}(z)$ — периодическая по периоду СР часть огибающей функции Блоха.

Для расчета выражения (4) обычно используют приближение сильной связи, в котором функция $u_{k_z}(z)$ представляется в виде суммы Блоха по нижнему локализованному состоянию бесконечно глубокой КЯ [4,5];

$$u_{k_z}(z) = \sum_n e^{-ik_z(z-dn)}\varphi(z-dn), \qquad (5)$$

где $\varphi(z) = \sqrt{d/a} \cos(\pi z/a)$ — нормированная на период СР функция, отличная от нуля в области КЯ при $-a/2 \leq z \leq a/2$. С учетом функции (5) интеграл в (4) принимает аналитическое выражение

$$U_n(k'_z, k_z) = U(q_n) = CS(q_n)$$

= $C \frac{\pi^2 \sin(aq_n/2)}{(aq_n/2)[\pi^2 - (aq_n/2)^2]},$ (6)

где $q_n = k'_z - k_z + 2\pi n/d$.

[¶] E-mail: sib@elefot.tsu.ru

Рассчитаем продольное и поперечное относительно оси СР время релаксации по известной формуле:

$$\tau_i^{-1}(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}'} w(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \left(1 - \frac{\upsilon_i(\mathbf{k}')}{\upsilon_i(\mathbf{k})} \right), \tag{7}$$

где индекс *i* означает \perp или \parallel , $v_i(\mathbf{k}) = \nabla_i \varepsilon(\mathbf{k})/\hbar$ компонента скорости электрона вдоль оси і. Учитывая формулы (2), (3), (6) и используя квазидвумерное приближение $(\Delta \ll k_0 T, \varepsilon \approx E = \hbar^2 k_\perp^2/2m^*)$, получаем

$$\tau_{\perp}^{-1}(E) = C_{\rm AC} \int_{0}^{\infty} |S(x)|^{2} dx,$$

$$^{1}(E) = C_{\rm AC} \int_{0}^{\infty} |S(x)|^{2} [1 - \cos\left(2\frac{d}{a}x\right)] dx, \quad (8)$$

где интегрирование идет по безразмерной переменной x = aq/2,

$$C_{\rm AC} = \frac{2m^*C_a^2}{\pi\hbar^3 a},$$

С_а = С при значениях параметров, соответствующих КЯ. Интегралы в формулах (8) с учетом (6) имеют аналитическое выражение, что приводит к известной формуле (1):

$$\tau_{\perp}^{-1} = \tau_{\parallel}^{-1} = \tau_0^{-1} = \frac{3}{4} \pi C_{\rm AC}.$$
 (9)

Согласно формуле (9), время релаксации квазидвумерных электронов СР на акустических фононах является изотропным, зависит только от параметров объемного полупроводника КЯ и ее ширины.

В реальных СР время релаксации должно зависеть от высоты и ширины потенциальных барьеров, так как их значения конечны, а не бесконечны, как предполагалось при выводе формулы (9). Чтобы найти эту зависимость и оценить применимость формулы (9) к реальным СР типа GaAs/Al_xGa_{1-x}As, в качестве функции $u_{k_z}(z)$ предлагается использовать периодическую часть огибающей функции Блоха СР при $k_z = 0$, рассчитанную в модели Кронига-Пенни:

$$u_{k_z}(z) \approx u_0(z)$$

$$= \begin{cases} B\operatorname{ch}\left[\chi\left(\frac{d}{2}+z\right)\right], & -\frac{d}{2} \le z \le -\frac{a}{2}, \\ A\cos(kz), & |z| \le \frac{a}{2}, \\ B\operatorname{ch}\left[\chi\left(\frac{d}{2}-z\right)\right], & \frac{a}{2} \le z \le \frac{d}{2}, \end{cases}$$
(10)

где $k = \sqrt{2m_a E_0}/\hbar$, $\chi = \sqrt{2m_b (V - E_0)}/\hbar$, V и b высота и ширина потенциальных барьеров (ПБ), *m*_a и m_b — эффективные массы электронов в КЯ и ПБ; E₀ — энергия, соответствующая дну нижней минизоны СР, значение которой является решением секулярного уравнения

$$\operatorname{sh}\left(\frac{b}{2}\chi\right)\cos\left(\frac{a}{2}k\right) - \frac{km_a}{\chi m_a}\operatorname{ch}\left(\frac{b}{2}\chi\right)\sin\left(\frac{a}{2}k\right) = 0; (11)$$

А и В — нормировочные константы, равные

$$B = A \cos\left(\frac{a}{2}k\right) / \operatorname{ch}\left(\frac{b}{2}\chi\right),$$
$$\frac{1}{A^2} = \frac{1}{2d} \left\{ a + \frac{1}{k} \sin ak + \left(\frac{B}{A}\right)^2 \left[b + \frac{1}{\chi} \operatorname{sh}(b\chi) \right] \right\}.$$
(12)

С учетом (10) формулу (7) для продольного и поперечного времени релаксации можно представить в виде

$$\tau_{\perp} = \tau_{\parallel} = \tau = \alpha \tau_0, \tag{13}$$

(1)

где $\alpha(a, b, x)$ есть функция ширины КЯ, толщины и высоты (параметр сплава x) ПБ:

$$a^{-1} = \frac{2a}{3d} \sum_{n=-\infty}^{\infty} S_n^2,$$
$$S_n = \frac{1}{C_a} U_n(k'_z, k_z) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} e^{i2\pi nz/d} \frac{C_{\rm AC}}{C_a} u_0^2(z) dz. \quad (14)$$

С учетом четности функции $u_0(z)$ и независимости величины САС в пределах КЯ и ПБ от координаты формулу для S_n можно представить в виде

$$S_n = \frac{2}{d}A^2 \left\{ S_{an} + \left(\frac{B}{A}\right)^2 \frac{C_b}{C_a} S_{bn} \right\},$$
(15)

где

$$S_{an} = \int_{0}^{d/2} \cos^2 kz \cos\left(\frac{2\pi n}{d}z\right) dz,$$
$$S_{bn} = \int_{a/2}^{d/2} \operatorname{ch}^2\left[\chi\left(\frac{d}{2}-z\right)\right] \cos\left(\frac{2\pi n}{d}z\right) dz \qquad (16)$$

 интегралы, имеющие аналитическое выражение, *C_b* — константа *C* при значениях параметров, соответствующих потенциальному барьеру.

Численный анализ 3.

Численный анализ времени релаксации по формуле (13) был проведен для СР GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Расчет проводился при следующих значениях параметров [6]: для GaAs

 $m^* = 0.066m_0$, $D_c = 17.5 \,\text{sB}$, $c_L = 14.4 \cdot 10^{10} \,\text{H/m}^2$;

для сплава $Al_xGa_{1-x}As$

$$\begin{split} m^* &= [0.066 + x(0.0174 + 0.145x)]m_0, \quad D_c = 17.5\, \mathrm{sB}, \\ c_{11} &= (12.21 + 0.14x)10^{10}\,\mathrm{H/m^2}, \\ c_{12} &= (5.66 + 0.32x)10^{10}\,\mathrm{H/m^2}, \\ c_{44} &= (5.99 - 0.05x)10^{10}\,\mathrm{H/m^2}; \end{split}$$

для высоты потенциального барьера

$$V = 0.6x(1.18 + 0.4x) \, \mathrm{sB}.$$

 au_{\parallel}^{-}



Рис. 1. Зависимости квадрата модуля огибающей волновой функции $|\psi|^2$ от координаты z для сверхрешетки при a = b = 5 нм и x = 0.36. *I*-3 соответствуют функциям: $I - |u_0(z)|^2$, $2 - |u_{\pi/d}(z)|^2$, $3 - |\varphi(z)|^2$.



Рис. 2. Зависимости функции τ/τ_0 от ширины квантовой ямы сверхрешетки *а* при x = 0.36. Ширина потенциального барьера *b*, нм: 1 - 3, 2 - 5, 3 - 6, 4 - 7, 5 - 10.

Применимость для рассматриваемой СР приближения (10), пренебрегающего дисперсией периодической части огибающей функции Блоха по k_z , продемонстрирована на рис. 1. На этом рисунке приведены зависимости квадрата модуля функции $u_0(z)$, рассчитанной по формулам (10)–(12), и функции $u_{k_z}(z)$, рассчитанной в модели Кронига–Пенни при максимальном значении $k_z = \pi/d$ [7]. Обе функции рассчитаны для симметричной СР при a = b = 5 нм и x = 0.36. Из рисунка следует, что различие между указанными функциями действительно невелико, по сравнению с различием

между функцией $u_0(z)$ и функцией $\varphi(z)$ для бесконечно глубокой КЯ.

На рис. 2 представлены зависимости параметра $\alpha = \tau/\tau_0$ от ширины КЯ при различных значениях толщины потенциального барьера *b* для СР с x = 0.36. Из графиков, приведенных на этом рисунке, следует, что при постоянном значении *b* существует заметная дисперсия параметра α от ширины КЯ, которая имеет в общем случае немонотонный характер. При значениях b < 5 нм время релаксации существенно превышает τ_0 . На рис. 3 представлены зависимости параметра α от толщины потенциального барьера *b* при различных значениях ширины КЯ для СР с x = 0.36. Из рисунка следует, что с ростом *b* при постоянной величие *a*



Рис. 3. Зависимости функции τ/τ_0 от толщины потенциального барьера сверхрешетки *b* при x = 0.36. Ширина квантовой ямы *a*, нм: 1 - 3, 2 - 5, 3 - 10.



Рис. 4. Зависимости функции τ/τ_0 от периода симметричной сверхрешетки d при значениях параметра сплава x: I = 0.15, 2 = 0.25, 3 = 0.35.

время релаксации монотонно убывает. Зависимости параметра α от периода сверхрешетки d для симметричной СР (a = b) при различных значениях параметра сплава представлены на рис. 4. Согласно этому рисунку, с увеличением параметра сплава, т.е. прежде всего с ростом высоты потенциального барьера, при постоянных значениях толщины ПБ и ширины КЯ время релаксации монотонно убывает.

4. Заключение

Проведенный численный анализ показывает, что время релаксации квазидвумерных электронов сверхрешетки GaAs/Al_xGa_{1-x}As на акустических фононах при уменьшении толщины и высоты потенциального барьера увеличивается. Учет этой зависимости может существенно изменить расчетное значение подвижности носителей заряда, полученное с помощью приближенной формулы (1).

Список литературы

- A.A. Dremin, V.B. Timofeev, D. Birkedal, J.M. Hvam. Phys. St. Sol. A, 164, 557 (1997).
- [2] T.P. Pearsall, A. DiVergilio, G. Pierre, M. Duncan, P. Hartmut, K. Erich, W. Jager, S. Dirk. Appl. Phys. Lett., 72, 76 (1998).
- [3] Ю.В. Иванов, М.В. Ведерников, Ю.И. Равич. Письма ЖЭТФ, 69, 290 (1999).
- [4] L. Fridman. Phys. Rev. B, 32, 955 (1985).
- [5] B.K. Ridley. J. Phys. C, 15, 5899 (1982).
- [6] Landolt-Börnstein. Numerical Date and Functional Relationships in Science and Technology, ed. by O. Madelung (Berlin, Springer Verlag, 1987) New Series III, v. 22 a.
- [7] С.И. Борисенко, Г.Ф. Караваев. ФТП, 32, 607 (1998).

Редактор Т.А. Полянская

Acoustic scattering dependence of quasi-2D electrons on parameters of a superlattice of GaAs/Al_xGa_{1-x}As type

S.I. Borisenko

Siberian Physical and Technical Institute, 634050 Tomsk, Russia

Abstract Numerical analysis has been made of a acoustic phonon scattering relaxation time of quasi-2*D* electrons of a GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattice as a function on the quantum well width as well as on the thickness and height of the potential barrier. The scattering probability of electrons of the lower minizone has been calculated with an approximate envelope wave function, which does not take into account dispersion of a periodic part of the Bloch function due to wave vector. Comparative analysis of the relaxation time calculated and that obtained with the help of well-known approximate formula is carried out.