

ПЕРЕНОС НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА ПРИ ВНУТРИЗОННОМ ПОГЛОЩЕНИИ

Carrier transport in semiconductor structures at the intraband absorption of photons is modeled by the Monte Carlo method. The diffusion constants resulting from the free-carrier absorption are calculated. The region of acceptability of the diffusion and the ballistic approach for computation of current density is estimated.

Перенос носителей заряда в оптоэлектронных гетероструктурах является нелинейным электронно-оптическим процессом, который в значительной степени определяет динамические характеристики приборов. С участием фотонов, например, может осуществляться туннелирование электронов [1], выравнивание уровня возбуждения различных частей структуры с множеством квантовых ям за счет межзонных переходов [2]. В данной работе исследовано влияние внутрizonного поглощения на перенос носителей.

При внутрizonном поглощении излучения носители приобретают энергию, значительно превышающую тепловую, и за время релаксации на дно зоны они могут баллистически переместиться на значительное расстояние от места поглощения фотона. Кроме того, столкновения высокоэнергетических частиц могут привести к перемещению и других носителей заряда.

Эффективность указанного механизма наиболее просто определить методом Монте-Карло, сущность которого в данном случае заключается в расчете большого количества случайных траекторий движения частицы после поглощения фотона и получения начального импульса после соударения. Для реализации метода необходимо найти вероятности рассеяния частиц на электронах и дырках и фононах кристаллической решетки.

Межчастичное рассеяние

Матичный элемент кулоновского взаимодействия между носителями имеет вид [3]

$$V_{cc} = \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{\Delta k^2 + q_{scr}^2},$$

где e - заряд электрона, ϵ_0 - электрическая постоянная, ϵ - диэлектрическая проницаемость полупроводникового материала, Δk - модуль переданного импульса, q_{scr} - обратная длина экранирования.

Частоту рассеяния находим из следующего соотношения:

$$\omega_{cc} = \frac{2\pi}{\hbar} \iint V_{cc}^2 \delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) \frac{2d^3k_2}{(2\pi)^3} \frac{d^3k_3}{(2\pi)^3},$$

где \hbar - постоянная Дирака, \mathbf{k}_i - волновой вектор и E_i - энергия i -й частицы. Индекс 1 обозначает характеристики исходной высокоэнергетической частицы, индекс 2 - характеристики низкоэнергетической частицы, с которой сталкивается частица 1, индексы 3 и 4 относятся к характеристикам частиц 1 и 2 после соударения соответственно. Учитывая, что $E_2 \ll E_1$, в расчетах будем полагать $E_2 = 0$. При интегрировании дельта-функции удобно выполнить преобразование $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}_1 m_1 / (m_1 + m_2)$, при котором входящая в нее квадратичная форма проекций волновых векторов приводится к каноническому виду. Тогда выражение для частоты рассеяния можно преобразовать к виду

$$\omega_{cc} = \left(\frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \frac{n_2 m_1 m_2^2 k_1}{2\pi \hbar^3 (m_1 + m_2)^2 q_{scr}^2} \frac{1}{4m_2^2 k_1^2 / (m_1 + m_2)^2 + q_{scr}^2},$$

а волновые векторы частиц после столкновения находятся из соотношений

$$\mathbf{k}'_3 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{k}_1, \quad \mathbf{k}_3 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}'_3, \quad \mathbf{k}_4 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_3.$$

Соответствующая функция распределения $\cos \theta_{13'}$ имеет вид

$$F_{cc}(\cos \theta_{13'}) = \frac{x(2+x)}{2(1-\cos \theta_{13'} + x)} - \frac{x}{2}, \quad x = \frac{(m_1 + m_2)^2 q_{scr}^2}{2m_2^2 k_1^2}.$$

Здесь всюду m_1 и m_2 - эффективные массы сталкивающихся частиц, n_2 - концентрация носителей заряда.

Рассеяние носителей на оптических фононах

Матичный элемент взаимодействия носителей заряда с оптическими фононами имеет вид [3]

$$V_{ph}^2 = \frac{e^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{\hbar\omega_{LO}}{q^2} \left(N_{ph} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right).$$

Здесь ω_{LO} - частота оптических фононов, ϵ_∞ - высокочастотная диэлектрическая проницаемость, N_{ph} - числа заполнения фононов и q - модуль их волнового вектора. Частоту рассеяния находим из следующего соотношения:

$$\omega_{e-ph} = \frac{2\pi}{\hbar} \int V_{ph}^2 \cdot \delta(E_1 - E_2 \mp \hbar\omega_{LO}) \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3}$$

при $\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$. Преобразуем выражение для частоты рассеяния:

$$\omega_{e-ph} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{m\omega_{LO}}{\hbar^2 k_1} \ln \left| \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} \right|.$$

Волновой вектор частицы (с эффективной массой m) после столкновения находим из соотношения

$$\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \mp \hbar\omega_{LO}.$$

Соответствующая функция распределения косинуса угла рассеяния имеет вид

$$F_{e-ph}(\cos\theta_{12}) = \ln \left(\frac{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2}{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 \cos\theta_{12}} \right) / \left(2 \ln \left| \frac{k_1 + k_2}{k_1 - k_2} \right| \right).$$

Рассеяние оптических фононов на носителях

При релаксации энергии носителей после внутризонного поглощения фотона происходит испускание нескольких ($N = \omega/\omega_{LO}$) неравновесных фононов, которые могут снова поглотиться носителями заряда и привести к их дополнительному перемещению. Частоту рассеяния находим из соотношения

$$\omega_{ph-e} = \frac{2\pi}{\hbar} \int V_{ph}^2 \exp\left(\frac{F - E_1}{kT}\right) \delta(E_1 - E_2 + \hbar\omega_{LO}) \frac{2d^3k_1}{(2\pi)^3},$$

где $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$, F - квазиуровень Ферми. После преобразования выражение для частоты рассеяния принимает вид

$$\omega_{ph-e} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{\omega_{LO} m^2 kT}{\hbar^4 q^3} \exp\left(-\frac{\hbar^2 k_{1m}^2}{2mkT}\right) \exp\left(\frac{F}{kT}\right),$$

где $k_{1m} = (m\omega_{LO}/\hbar q) - (q/2)$, а волновые векторы частиц до и после столкновения можно найти из соотношений

$$k_1 = \frac{k_{1m}}{\cos\theta}, \quad k_2^2 = k_1^2 + q^2 + 2k_1 q \cos\theta.$$

Соответствующую функцию распределения косинуса угла рассеяния запишем

$$F_{ph-e}(|\cos\theta|) = \exp\left(\frac{\hbar^2 k_{1m}^2}{2mkT} \left(1 - \frac{1}{\cos^2\theta}\right)\right),$$

причем для $k_{1m} > 0$ имеет место рассеяние только при $\cos\theta > 0$, а для $k_{1m} < 0$ - при $\cos\theta < 0$.

А так как время жизни оптических фононов τ_{LO} конечно, то с носителями успевае взаимодействовать только их часть

$$\rho(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau_{LO}}\right),$$

где t — время между испусканием оптического фонона и его последующим рассеянием на носителях заряда. Время жизни оптических фононов до распада, например, в GaAs составляет 6-7 пс [4].

Моделирование переноса носителей методом Монте-Карло

Расчеты траектории движения частицы после поглощения фотона с энергией $\hbar\omega$ проводятся следующим образом. На основании энергии фотона и зонной структуры полупроводника вычисляется начальное значение волнового вектора электрона или дырки. Далее определяется случайная длина свободного пробега $L = \hbar v k_i / m$ с учетом суммарной частоты рассеяния и случайно выбирается механизм рассеяния: на электронах зоны проводимости, тяжелых или легких дырках валентной зоны, с испусканием или поглощением оптического фонона. После этого случайно выбирается угол рассеяния и импульс частиц после взаимодействия. Затем расчеты повторяются для нового положения и импульса частицы. Расчеты заканчиваются при рассеянии с поглощением фонона, если начальная энергия частицы меньше энергии оптического фонона. Также учитываются траектории всех носителей заряда, которые приобрели дополнительную энергию после соударения с исходной частицей, и перенос носителей $\hbar\hbar(k_2 - k_1)/m$, обусловленный поглощением неравновесных фононов.

Результаты расчетов представлены на рисунке. Так, поглощение фотона в зоне проводимости приводит к переносу 5-6 электронов на расстояние 0,1 мкм, а поглощение фотона в валентной зоне смещает 3-4 электрона на это же расстояние. Указанные значения включают перенос первичных носителей заряда после внутризонного поглощения фотона и вторичных, получивших импульс после столкновения с первичными носителями заряда или неравновесными оптическими фононами. Из-за большей эффективной массы дырок в валентной зоне на расстояние свыше 0,1 мкм смещаются только первичные носители заряда, но уже на расстоянии 0,01 мкм смещаются 7-8 вторичных носителей.

Зависимость энергии носителей от волнового вектора не является квадратичной в диапазоне его изменений, сравнимом с волновым вектором обратной решетки. Поэтому для вторичных (низкоэнергетических) частиц в расчетах использовались обычные эффективные массы $m_c = 0,067 m_e$, $m_v = 0,50 m_e$, т. е. дающие хорошее приближение для энергий вблизи края зоны, а для первичных (высокоэнергетических) частиц эффективны массы $m_c = 0,12 m_e$, $m_v = 0,48 m_e$, дающие хорошее приближение для энергий, близких к энергии поглощаемых фотонов.

Коэффициент диффузии

При медленном пространственном изменении концентрации носителей результирующая плотность тока через плоскость $z = 0$ создается разностью количества

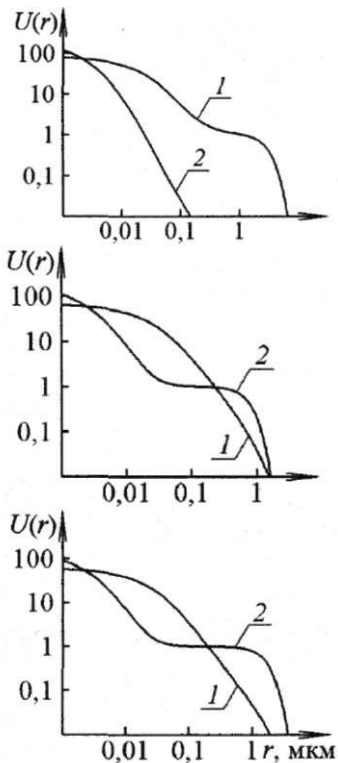


Рис. 1. Число частиц, смещенных на расстояние, превышающее r , при внутризонном поглощении в GaAs одного фотона с энергией $\hbar\omega = 1,2$ эВ с участием электрона зоны проводимости (а), тяжелой дырки валентной зоны (б) и дырки из спин-орбитально отщепленной зоны (в) при концентрации электронов и дырок, равной $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; $T = 300 \text{ К}$. Кривые 1 соответствуют смещению электронов, 2 — дырок

перемещенных в противоположных направлениях частиц, которая связана со скоростью внутризонного поглощения:

$$j_{fca} = e \int_0^{\infty} U(z) (R_{fca}(-z) - R_{fca}(z)) dz,$$

где R_{fca} - скорость поглощения фотонов свободными носителями заряда; $U(z)$ - число частиц, смещенных вдоль декартовой координаты на расстояние, превышающее z . После преобразования получаем следующее выражение для плотности тока:

$$j_{fca} = -e D_{fca} \frac{dn}{dz}, \quad (1)$$

где n - концентрация носителей заряда, а коэффициент диффузии при внутризонном поглощении равен

$$D_{fca} = \frac{1}{6} v_g \sigma_{fca} S \langle r^2 \rangle.$$

Здесь $\sigma_{fca} = \alpha_{fca} / n$ - сечение поглощения фотонов свободными носителями, α_{fca} - коэффициент поглощения; v_g - групповая скорость света в кристалле; S - плотность фотонов; $\langle r^2 \rangle$ - средний квадрат смещения всех частиц при внутризонном поглощении одного фотона.

При наличии же пространственной неоднородности плотности фотонов возникает дополнительный ток

$$j_{fca} = -e \frac{1}{6} v_g \alpha_{fca} \frac{dS}{dz} \langle r^2 \rangle,$$

описывающий перенос носителей заряда из области с большей плотностью фотонов даже при отсутствии диффузионного тока.

Баллистический ток

Диффузионное приближение неприменимо при анализе переноса носителей заряда через участки, размеры которых меньше средней длины свободного пробега. В этом случае плотность тока может быть рассчитана как разность потоков между однородно возбужденными участками полупроводника. При внутризонном поглощении плотность тока через плоскость $z = 0$ из полубесконечного объема записывается как

$$j_{fca} = e \int_0^{\infty} U(z) R_{fca}(-z) dz.$$

После преобразования этого выражения путем интегрирования по частям находим

$$j_{fca} = \frac{1}{4} e v_g \alpha_{fca} S \langle r \rangle, \quad (2)$$

где $\langle r \rangle$ - среднее смещение всех частиц при внутризонном поглощении одного фотона.

Приравняв выражения (1) и (2), можно оценить критический размер $L_{cr} = 2 \langle r^2 \rangle / 3 \langle r \rangle$, разделяющий области применимости диффузионной и баллистической моделей переноса.

Результаты расчета

Результаты расчетов представлены в таблице. Коэффициенты внутризонного поглощения с участием электронов и дырок оценивались по данным работ [5,6]. Главный вклад в перенос носителей дает внутризонное поглощение фотонов в валентной зоне. Коэффициент диффузии дырок, обусловленный внутризонным поглощением фотонов с участием дырок, при комнатной температуре может составлять несколько процентов от обычного коэффициента диффузии $D_p \approx 5 \text{ см}^2/\text{с}$. В гетероструктурах с неоднородным возбуждением, где перенос носителей между различными частями структуры искусственно затруднен потенциальными барьерами, движение высокоэнергетических носителей при внутризонном поглощении фотонов может быть основным механизмом переноса заряда. Роль рассмотренного механизма может возрастать также в структурах с

высокой концентрацией электронно-дырочной плазмы, диффузия носителей в которой уменьшена из-за многочастичных эффектов [7].

Средние расстояния смещений, средние квадраты расстояний смещения и коэффициенты диффузии при внутризонном поглощении электронов и дырок

$\alpha_{\text{fca}}, \text{см}^{-1}$	Зона поглощения	Зона переноса	$\langle r \rangle, \text{мкм}$	$\langle r^2 \rangle, \text{мкм}^2$	$D_{\text{fca}}, \text{см}^2/\text{с}$	$L_{\text{ст}}, \text{мкм}$
0,54	c	c	2,9	10,0	0,14	2,3
		c'	2,7	0,68	0,0092	0,17
		v'	0,53	0,0054	$7,3 \cdot 10^{-3}$	0,0069
0,85	v	v	0,73	0,64	0,013	0,58
		c'	2,3	0,37	0,0078	0,11
		v'	0,48	0,0054	$1,1 \cdot 10^{-4}$	0,0076
5,0	s	s	1,6	3,0	0,38	1,3
		c'	2,0	0,37	0,046	0,12
		v'	0,40	0,0038	$4,8 \cdot 10^{-4}$	0,0065

Примечание. Концентрация электронов и дырок равна $5 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$, плотность фотонов $S = 10^{15} \text{см}^{-3}$. Символами c, v, s обозначены зоны проводимости, валентная и спин-орбитально отщепленная соответственно. Штрихи соответствуют переносу вторичных частиц.

Для описания переноса первичных носителей, возбужденных при внутризонном поглощении фотонов, в оптоэлектронных структурах с типичными размерами, меньшими 1 мкм, необходимо использовать баллистическое приближение. Диффузионная модель может быть применена к переносу вторичных электронов на расстояния до -0,1 мкм и вторичных дырок - до -0,01 мкм, причем на указанных расстояниях токи вторичных носителей становятся сравнимыми с токами первичных носителей.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ.

1. Platero G., Aguado R. //Physics Reports. 2004. Vol. 395. № 1-2. P. 1.
2. Tessler N., Eisenstein G. //IEEE J. Quantum Electron. 1993. Vol. 29. № 6. P. 1586.
3. Маделунг О. Теория твердого тела. М., 1980.
4. Sudhanshu S. Jha, Vengurlekar k. //I Hyperfine Interact. 1987. Vol. 38. № 1-4. P. 585.
5. Blackmore J. S. //J. Appl. Phys. 1982. Vol. 53. № 10. P. R123.
6. Songprakob W., Zallen R., Liu W.K., Bacher K.L. // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. № 7. P. 4501.
7. Young Jeff F., van Driel H.M. //Phys. Rev. B. 1982. Vol. 26. № 4. P. 2147.

Поступила в редакцию 14.05.07.

Александр Николаевич Дрозд - аспирант кафедры квантовой радиофизики и оптоэлектроники. Научный руководитель - А.А. Афоненко.

Александр Анатольевич Афоненко - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой радиофизики и оптоэлектроники.