

©1994 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО НЕСТАЦИОНАРНОГО ПЕРЕНОСА ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОКАХ

В.М.Осадчий

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия
(Получена 14 января 1994 г. Принята к печати 28 марта 1994 г.)

Метод Монте-Карло применяется для исследования в квантовых проволоках на основе GaAs временной эволюции дрейфовой скорости электронов после приложения электрического поля. Показано, что время достижения стационарного состояния в проволоках выше, чем в объемном GaAs. При низких температурах установление дрейфовой скорости носит характер затухающих колебаний в более широком диапазоне электрических полей, чем в объемном случае.

Процессы переноса электронов в квантовых проволоках отличаются от процессов переноса в объемных материалах из-за наличия сингулярностей в плотности состояний [1]. Перенос горячих электронов в квантовых проволоках в стационарном состоянии широко исследовался теоретически [2-7]. Процессы же установления стационарных характеристик, насколько нам известно, лишь частично затрагивались в работах [7-9]. В работе [7] приведена единственная кривая пространственного отклика дрейфовой скорости на поле 100 В/см при температуре 77 К и утверждается, что время достижения стационарного состояния в проволоке выше, чем в объемном материале. В работе [8] приведен график временного отклика дрейфовой скорости на включение поля 500 В/см при температуре 300 К в условиях, когда электроны инжектируются у дна зоны проводимости в узком энергетическом диапазоне. В работе [9] рассматривалась эволюция функции распределения при низких температурах. Таким образом, отсутствуют систематические исследования нестационарного переноса горячих электронов в квантовых проволоках в зависимости от температуры, электрического поля и сечения проволоки и сравнение результатов с полученными для объемных полупроводников.

В настоящей работе мы исследуем процессы установления стационарного состояния электронов в квантовых проволоках на основе GaAs при приложении электрического поля. Решается нестационарное уравнение Больцмана с использованием многочастичного метода

Монте-Карло [10]. Моделируется движение ансамбля из 10^4 электронов, в начальный момент времени имеющих максвелловское распределение по энергиям с температурой решетки. Рассматривается проволока квадратного сечения, так как, по-видимому, форма сечения во многих случаях малосущественна, а важна величина площади сечения [11]. Учитывается только один энергетический уровень, что достаточно для тонких проволок в довольно широком диапазоне электрических полей [7]. В расчеты включается рассеяние только на полярных оптических фононах согласно работе [1], поскольку это рассеяние доминирует в GaAs, особенно при низких температурах. В проволоках, по-видимому, существует квантование фононов, но этот вопрос еще исследуется и нет общепринятой модели для квантования [12-14], поэтому мы ограничиваемся учетом фононов как трехмерных, так же как и в работах по исследованию стационарного транспорта [2-7].

Скорость испускания оптических фононов сингулярна на пороге энергии $\hbar\omega_0$ из-за сингулярности плотности конечных состояний [1], поэтому в численных расчетах требуется какое-то ограничение ее величины [2]. Сингулярность убирается при учете столкновительного уширения энергетических состояний. В работе [15] были проведены самосогласованные расчеты собственной энергии полярона в квантовой проволоке. Показано, что скорость рассеяния, вычисленная таким образом, практически совпадает с полученной из правила Ферми [1], исключая область энергий от $\hbar\omega_0$ до $\hbar\omega_0 + \Gamma$, где она изменяется слабо. Величина Γ равна 2.5 мэВ при 300 К и 1.6 мэВ при 77 К [15] и не зависит от геометрии проволоки. Учитывая эти результаты, мы полагали скорость испускания фононов при энергиях электрона от $\hbar\omega_0$ до $\hbar\omega_0 + \Gamma$ равной ее величине при $\hbar\omega_0 + \Gamma$. Исследования показали, что приведенные далее результаты практически не изменяются при варьировании Γ от 2.5 до 0.5 мэВ.

В GaAs электроны при энергиях ниже $\hbar\omega_0$ (пассивная область) могут только поглощать фононы, а при более высоких энергиях (активная область) также испускать, поэтому времена рассеяния в этих областях сильно отличаются: $\tau_{\text{pass}} \gg \tau_{\text{act}}$, где τ_{pass} (τ_{act}) относятся к пассивной (активной) области. Характерным временем является также время пролета пассивной области

$$\tau_E = \hbar k_0 / eE \quad (1)$$

(k_0 — импульс электрона с энергией $\hbar\omega_0$, E — электрическое поле). Нестационарный перенос в объемном GaAs рассматривался ранее в [16]. В этой работе было показано, что при температуре 77 К установление дрейфовой скорости происходит путем затухающих колебаний в полях от 50 до 100 В/см, когда выполняется условие

$$\tau_{\text{act}} \ll \tau_E \ll \tau_{\text{pass}} \quad (2)$$

В квантовых проволоках времена рассеяния зависят от размеров [1]. Используя формулы работы [1], можно оценить, что τ_{pass} равны около 90, 40 и 25 пс в проволоках толщиной 20, 10 и 5 нм соответственно, $\tau_{\text{act}} < 0.1$ пс. (Мы не рассматриваем более тонких проволок, так как для

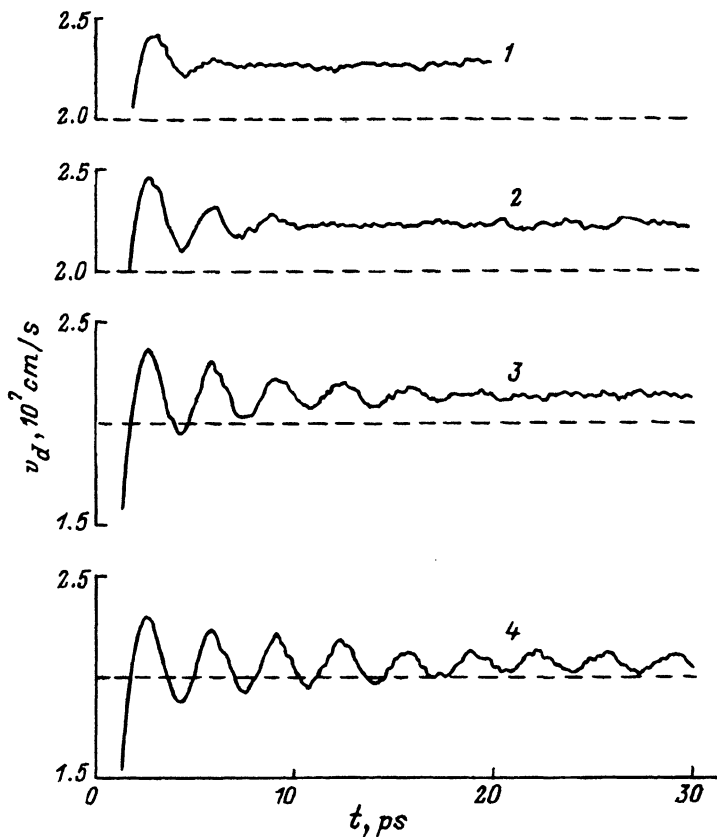


Рис. 1. Зависимость дрейфовой скорости v_d от времени t после включения электрического поля 500 В/см при температуре 77 К в объемном GaAs (1) и в квантовых проволоках толщиной 20 (2), 10 (3) и 5 нм (4).

них Γ -минимум зоны проводимости лежит выше L -минимума из-за размерного квантования). Левая часть условия (2) выполняется до очень сильных полей, когда начинаются переходы в вышележащие уровни, поэтому для нас существенна только правая часть.

На рис. 1 приведены временные отклики дрейфовой скорости на включение электрического поля 500 В/см при температуре 77 К для объемного полупроводника и квантовых проволок различной толщины. В этом поле $\tau_E = 3.3$ пс и условие (2) в проволоках выполняется, поэтому отклики имеют вид затухающих колебаний, образующихся вследствие чередования почти баллистического движения электронов в пассивной области и испускания фононов в активной области. В квантовой проволоке колебания имеют больший размах и дольше сохраняются вследствие отсутствия углового рассеяния импульса и более резкого включения испускания фононов [7,17]. В поле 500 В/см (рис. 1) в объемном материале происходит всего два колебания перед выходом на стационарное состояние, в проволоках их число значительно больше и возрастает с уменьшением толщины проволоки, при этом также возрастают амплитуда колебаний и время установления стади-

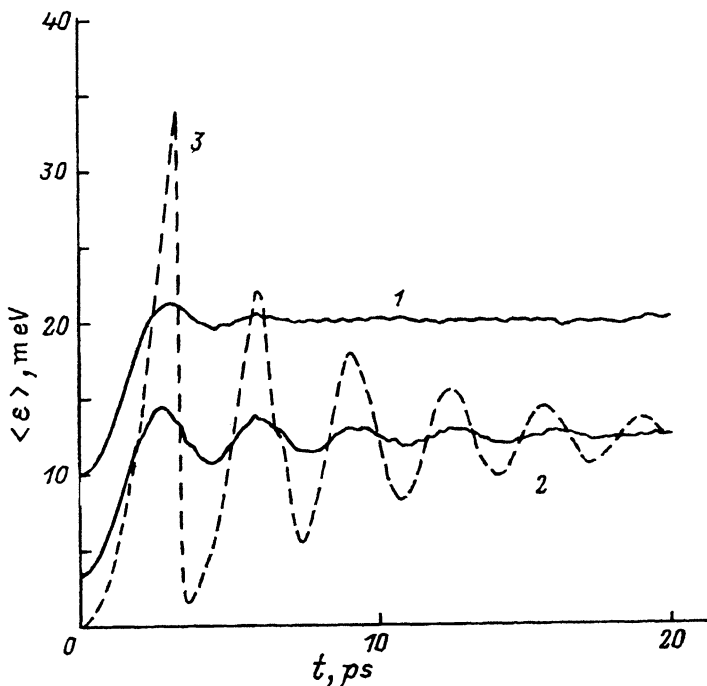


Рис. 2. Зависимость средней энергии электронов (ϵ) от времени t в электрическом поле 500 В/см в объемном GaAs (1) и квантовых проволоках толщиной 10 нм при начальном максвелловском (2) и δ -образном (3) распределениях. Температура решетки 77 К.

онарного состояния. Последнее объясняется тем, что с уменьшением толщины возрастает интенсивность рассеяния [1], электроны меньше проникают в активную область и, таким образом, затрудняется достижение стационарного состояния, так как при этом уже перемешивается начальное состояние. Время, за которое электроны достигают стационарного состояния, составляет около 10 пс в объемном GaAs. Это время возрастает до 25 пс в проволоке толщиной 10 нм, а в проволоке толщиной 5 нм оно больше 50 пс. Заметим, что здесь величина, к которой стремится дрейфовая скорость, выше в объеме, чем в проволоке. Однако, расчеты стационарных характеристик показали, что дрейфовая скорость в проволоках толщиной 20 нм выше объемной в диапазоне полей до 300 В/см, в проволоке толщиной 10 нм — до 150 В/см, а толщиной 5 нм — ниже объемной, начиная со слабых полей.

Зависимость средней энергии электронов $\langle \epsilon \rangle$ от времени носит также осциллирующий характер (рис. 2). Как видно из рисунка, в проволоках электроны греются меньше, чем в объеме, из-за более сильного рассеяния в активной области. Разогрев при этом слабо зависит от толщины проволоки, и мы не приводим зависимостей для других толщин. Энергии в нулевом поле в объеме и проволоке разные, так как имеется разное число степеней свободы, на каждую из которых приходится $k_B T_L / 2$, где k_B — постоянная Больцмана, T_L — температура решетки. Средняя энергия не достигает величины энергии оптического фонона (36 мэВ) при максвелловском распределении. Дополнительно-

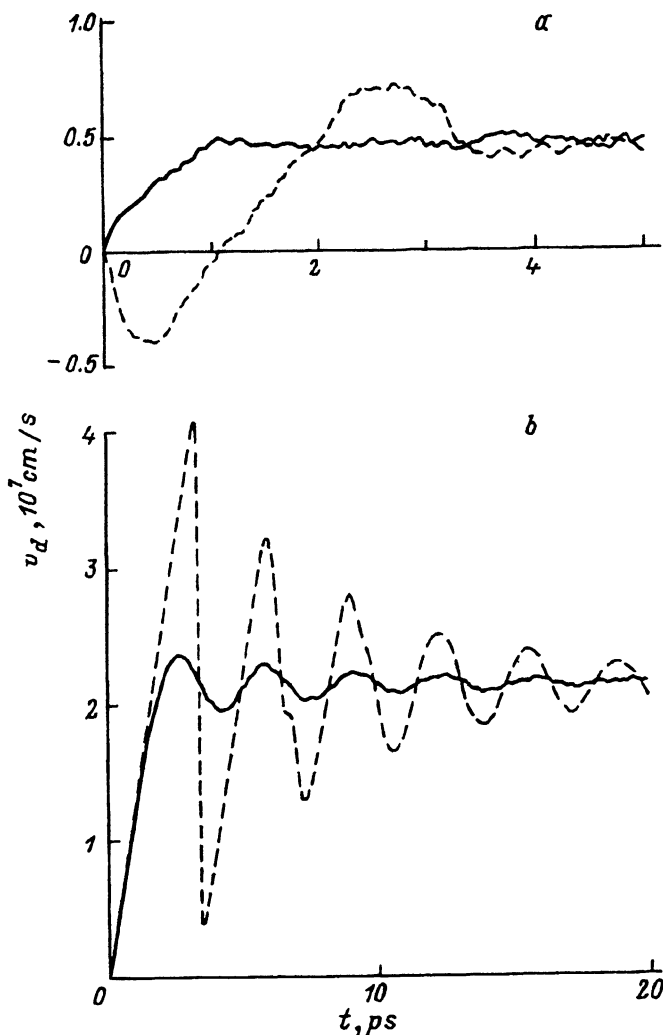


Рис. 3. Влияние начального электронного распределения на эволюцию дрейфовой скорости v_d в поле 500 В/см при температурах 300 К (а) и 77 К (б) в квантовой проволоке толщиной 10 нм. Начальное распределение: максвелловское — сплошные линии, δ -образное — штриховые.

ные расчеты показали, что достижение энергии фона происходит при начальном δ -образном распределении с нулевой энергией (рис. 2, пунктир). На рис. 3, б сравниваются отклики дрейфовой скорости для начальных максвелловского и δ -образного распределений. В последнем случае первый максимум скорости имеет место при 3.3 пс — времени пролета электроном пассивной области. При максвелловском распределении этот максимум достигается при 2.6 пс, что равно, как можно оценить, времени достижения энергии фона электроном с тепловым импульсом. При начальных нулевых условиях скорость практически линейно изменяется до первого максимума, при максвелловском

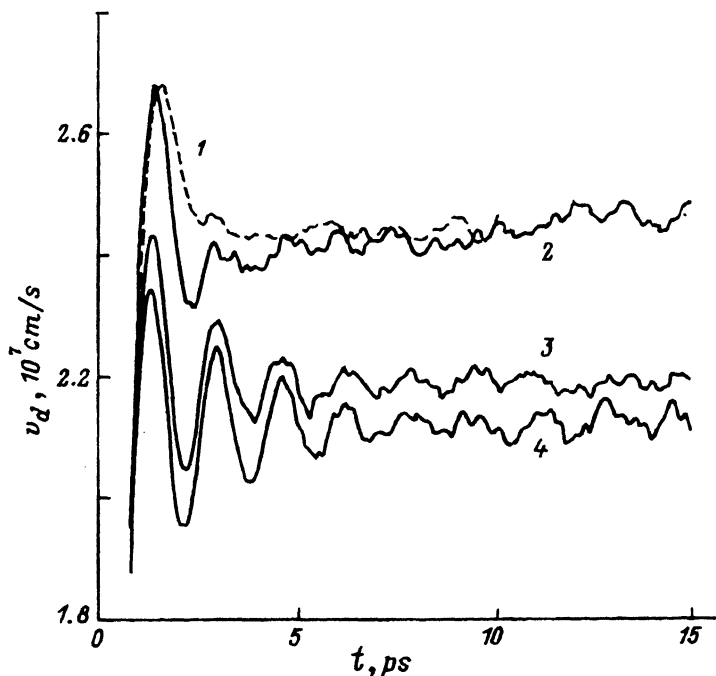


Рис. 4. Временная эволюция дрейфовой скорости v_d в поле 1000 В/см в объемном GaAs (1) и в квантовых проволоках толщиной 20 (2), 10 (3) и 5 нм (4) при температуре решетки 77 К.

распределении отличие от линейности начинается при 1.1 пс. Для δ -образного распределения падение скорости после максимума происходит быстро — примерно за 0.1 пс, так как электроны достигают энергии фонона одновременно, а испускание фононов включается резко; для максвелловского — падение скорости размазано из-за конечной ширины начального распределения (рис. 3, б).

Увеличение электрического поля ведет к сокращению времени достижения стационарного состояния. На рис. 4 приведены отклики дрейфовой скорости на включение поля 1000 В/см. В объеме скорость после первого рассеяния на фононах монотонно уменьшается к стационарной величине, в проволоках же отклик носит осциллирующий характер, так как условие (2) при этом сохраняется ($\tau_E = 1.65$ пс). Время достижения стационарного состояния в объеме составляет величину около 4 пс, а в проволоке толщиной 10 нм — около 12 пс. Отметим, что в проволоке толщиной 20 нм наблюдается убегание — скорость (и энергия) электронов неограниченно возрастает. В объемном GaAs поле убегания около 6000 В/см [18]; в работе [1] указывалось, что в проволоках убегание может происходить более легко, так как скорость рассеяния вскоре после сингулярности становится меньше объемной, подтверждение чего мы и получили. С уменьшением толщины порог убегания увеличивается: в проволоке толщиной 10 нм убегание начинается с 1500 В/см. Как показали дополнительные исследования, включение в расчеты второго уровня не останавливает убегания.

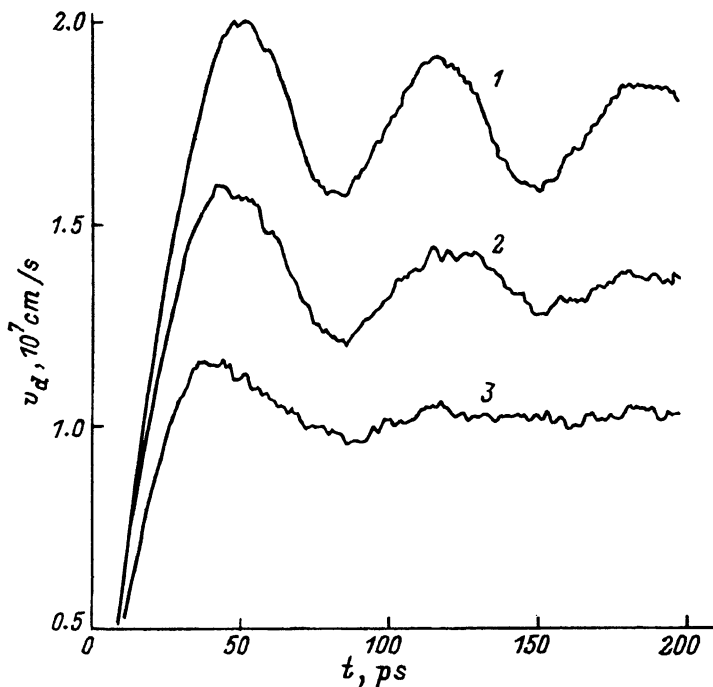


Рис. 5. Отклик дрейфовой скорости v_d на включение электрического поля 25 В/см при температуре 77 К в квантовых проволоках толщиной 20 (1), 10 (2) и 5 нм (3).

В слабых полях время пролета пассивной области возрастает и условие $\tau_{\text{pass}} > \tau_E$ может нарушиться. Так, в поле 25 В/см $\tau_E = 66$ пс и больше τ_{pass} для проволоки толщиной 10 нм (40 пс). На рис. 5 приведены временные зависимости дрейфовой скорости в поле 25 В/см. Как видим, с уменьшением толщины проволоки, в отличие от сильных полей, размах колебаний падает и время достижения стационарного состояния сокращается. В этом поле электрон во время пролета пассивной области может поглотить фонон, а так как вероятность поглощения от энергии зависит слабо, то поглощение и испускание фонона растянуты по времени, что и ведет к сглаживанию колебаний дрейфовой скорости. В проволоке толщиной 5 нм скорость эволюционирует уже практически без колебаний, выражен только всплеск скорости. Уменьшение амплитуды колебаний наблюдалось и в поле 50 В/см, но меньшее. В объемном GaAs осцилляций не было в полях ниже 50 В/см [16].

При понижении температуры условие (2) выполняется лучше, так как возрастает τ_{pass} . При температуре 4.2 К амплитуда колебаний дрейфовой скорости гораздо выше, чем при 77 К (рис. 6) для всех полей, и они сохраняются дольше. В слабых полях нет уменьшения размаха колебаний с уменьшением толщины, так как условие (2) продолжает выполняться. Увеличивается разница во временах достижения стационарного состояния в объеме и проволоках в сравнении с темпе-

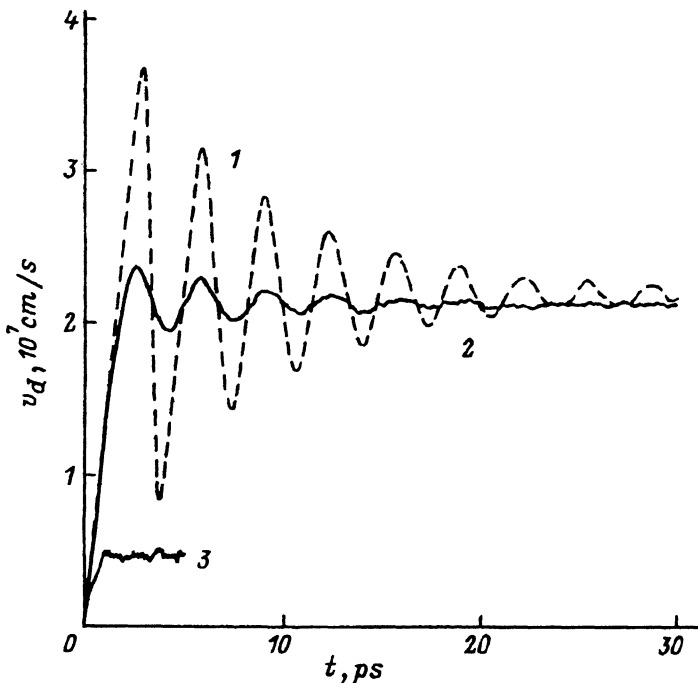


Рис. 6. Отклик дрейфовой скорости v_d в квантовой проволоке толщиной 10 нм в поле 500 В/см при температурах T_L , К: 4.2 (1), 77 (2), 300 (3).

ратурой 77 К. При повышении температуры эта разница уменьшается из-за включения процессов поглощения фононов: при 300 К отклики скорости в объеме и проволоках близки друг к другу, при этом скорость монотонно возрастает к стационарной величине (рис. 6). При начальном δ -образном распределении дрейфовая скорость при 300 К первоначально отрицательная (рис. 3, а), что рассматривалось в работе [8].

Таким образом, проведены расчеты методом Монте-Карло нестационарного переноса электронов в квантовых проволоках на основе GaAs. Показано, что время достижения стационарного состояния в проволоках выше, чем в объемном полупроводнике, и эта разница растет с понижением температуры. При низких температурах установление дрейфовой скорости имеет характер затухающих колебаний в более широком диапазоне полей, чем в объемном GaAs; амплитуда колебаний растет с уменьшением толщины до тех пор, пока время поглощения фонона не станет меньше времени пролета электроном пассивной области. Убегание электронов происходит в более слабых полях, чем в объемном GaAs.

Автор благодарит А.В. Ефанова за ценные критические замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований.

Список литературы

- [1] J.P. Leburton. J. Appl. Phys., **56**, 2850 (1984).
- [2] D. Chattopadhyay, A. Bhattacharyya. Phys. Rev. B, **37**, 7105 (1988).
- [3] S. Briggs, J.P. Leburton. Phys. Rev. B, **38**, 8163 (1988).
- [4] S. Briggs, J.P. Leburton. Phys. Rev. B, **39**, 8025 (1989).
- [5] S. Briggs, D. Jovanovic, J.P. Leburton. Appl. Phys. Lett., **54**, 2012 (1989).
- [6] J.P. Leburton. Phys. Rev. B, **45**, 11022 (1992).
- [7] J.P. Leburton, D. Jovanovic. Semicond. Sci. Techn., **7**, B202 (1992).
- [8] R. Mickevicius, V. Mitin, M.A. Stroschio, M. Dutta. J.Phys.: Condens. Matter., **5**, 2233(1993).
- [9] T. Yamada, J. Sone. Phys. Rev. B, **40**, 6265 (1989).
- [10] P.A. Lebowitz, P.J. Price. Sol. St. Commun., **9**, 1221 (1971).
- [11] A. Gold, A. Ghazali. Phys. Rev. B, **41**, 7626 (1990).
- [12] N.C. Constantinou, B.K. Ridley. Phys. Rev. B, **41**, 10627 (1990).
- [13] K.W. Kim, M.A. Stroschio, A. Bhatt, R. Mickevicius, V. Mitin, J. Appl. Phys., **70**, 319 (1991).
- [14] R. Enderlein. Phys. Rev. B, **47**, 2162 (1993).
- [15] S. Briggs, B.A. Mason, J.P. Leburton. Phys. Rev. B, **40**, 12001 (1989).
- [16] A. Matulionis, J. Pozela, A. Reklaitis. Phys. St. Sol. (a), **31**, 83 (1975).
- [17] V.M. Osadchy. In: *Nanostructures: Physics and Technology. International Symposium. Abstracts of Invited Lectures and Contributed Papers* (St. Petersburg, 1993).
- [18] E.M. Conwell. *High field transport in semiconductors* (N. Y., 1967).

Редактор Т.А. Полянская

Investigation of hot electron transient transport in quantum wires by the Monte Carlo method

V.M. Osadchy

Institute of Semiconductor Physics, Russian Academy of Science, 630090, Novosibirsk, Russia

The Monte Carlo method is applied for investigation of the evolution of a drift velocity in quantum wires after the onset of electric field. It is shown that the stationary state drift velocity in a wire is reached sooner than in bulk semiconductor. The time difference in reaching the stationary state in a wire and in a bulk increases with lowering temperature. At low temperature the drift velocity response has a form of damping oscillations, the amplitude of which increases with decreasing the phonon absorption probability increases substantially.
