

Интенсивность межподзонного рассеяния электронов на полярных оптических фонах в полупроводниковом квантовом проводе с учетом уширения энергетических уровней

© Д.В. Поздняков, В.М. Борздов

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

E-mail: borzdov@bsu.by

(Поступила в Редакцию 2 апреля 2003 г.)

Предложен подход к учету влияния уширения энергетических уровней в полупроводниковом квантовом проводе на интенсивность межподзонного рассеяния электронов при их взаимодействии с полярными оптическими фонами. В качестве механизмов, ответственных за уширение, рассматривались тепловые колебания атомов и шероховатости поверхностей, ограничивающих квантовую систему. Показано, что в этом случае зависимость интенсивности межподзонного рассеяния электронов от их кинетической энергии не содержит особых точек.

Известно, что современные технологические методы микро- и нанoeлектроники позволяют создавать наноразмерные полупроводниковые приборные структуры, принципы работы которых основаны на квантовых эффектах. Благодаря этому становится возможной разработка принципиально новых высокоскоростных и энергоэкономичных приборов [1,2]. В этой связи большое внимание уделяется теоретическим и экспериментальным исследованиям квантовых проводов или проволок. При этом важнейшим направлением исследования данного рода структур с точки зрения приборных приложений является изучение особенностей электронного переноса в них и его численное моделирование. Одним из наиболее перспективных методов в этом отношении является метод Монте-Карло [3]. Корректное применение последнего возможно лишь тогда, когда известны строгие выражения для интенсивностей рассеяния носителей заряда для основных механизмов.

В рассматриваемом нами в настоящей работе квантовом проводе на основе полярного полупроводника важнейшим механизмом рассеяния электронов является их рассеяние на полярных оптических фонах, особенности которого в значительной степени определяются характерным видом плотности состояний для одномерной системы [4]. Вследствие этого, в частности, зависимость интенсивности рассеяния носителей зарядов от их энергии содержит особые точки [5,6]. Из-за обращения интенсивности фоновонного рассеяния в данных точках в бесконечность при объяснении характера и величины проводимости квантового провода возникают различного рода противоречия. Так, например, в работе [4] показано, что квантовый провод при определенных условиях в принципе может обладать нулевой проводимостью, однако этого не наблюдается на практике. В этой работе данное противоречие объясняется тем, что в расчетах использовались параметры идеализированной квантовой структуры, в которой плотность состояний определяется в предположении дискретного спектра энергии с бес-

конечно узкими энергетическими уровнями, в то время как в реальных квантовых проволоках эти уровни имеют конечную ширину.

Целью данной работы является расчет плотности состояний в квантовом проводе с уширенными энергетическими уровнями, а также установление влияния этого уширения на интенсивность межподзонного рассеяния электронов на полярных оптических фонах. При этом предполагалось, что основные причины уширения — тепловые колебания атомов кристаллической решетки и шероховатости поверхностей полупроводниковой квантовой структуры, образующих двумерную квантовую яму [5].

1. Плотность состояний

Согласно [4], плотность состояний для квантового провода в случае бесконечно узких энергетических уровней описывается формулой

$$n(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\sqrt{m_d}}{\hbar ab} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \frac{U(E - E_{\mu\nu})}{\sqrt{E - E_{\mu\nu}}}, \quad (1)$$

где m_d — эффективная масса плотности состояний электронов в квантовом проводе, E — среднее значение полной энергии электрона, $E_{\mu\nu}$ — энергия соответствующего квантового состояния ($\{\mu, \nu\} = 1, 2, 3, \dots$), a и b — высота и ширина квантового провода в направлениях Y и Z соответственно, U — ступенчатая функция.

Рассмотрим диагональный тензор эффективных масс электрона. В одномерном случае имеем

$$m_d = m_x, \quad (2)$$

$$E = E_{\mu\nu} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x}, \quad (3)$$

$$E_{\mu\nu} = E_\mu + E_\nu = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \left(\frac{\mu^2}{m_y a^2} + \frac{\nu^2}{m_z b^2} \right), \quad (4)$$

где m_x , m_y и m_z — эффективные массы электрона в направлениях X , Y и Z соответственно, k_x — компонента волнового вектора электрона в направлении X .

В соответствии с работами [1,7,8] будем рассматривать лоренцевское уширение энергетических уровней, описываемое модифицированной лоренцевской функцией плотности вероятности $f(\varepsilon, E)$, которая учитывает перекрытие уровней. Эта функция в данном случае имеет вид

$$f(\varepsilon, E) = \frac{g(\eta)}{\pi} \frac{\eta E}{(E - \varepsilon)^2 + (\eta E)^2}, \quad (5)$$

$$\eta = \frac{\Delta E}{E}, \quad (6)$$

где ε — полная энергия электрона, ΔE — среднее отклонение величины ε от значения E (полуширина лоренцевского контура), η — коэффициент уширения, $g(\eta)$ — некоторая функция, учитывающая перекрытие энергетических уровней. Тогда с учетом уширения, согласно теореме о среднем значении функции на некотором интервале, плотность состояний для квантового провода примет вид

$$N(E) = \int_0^\infty n(\varepsilon) f(\varepsilon, E) d\varepsilon. \quad (7)$$

Определим далее вид функции $g(\eta)$. Учитывая тот факт, что при $\Delta E \rightarrow +\infty$ плотность состояний для квантового провода должна равномерно сходиться к трехмерной плотности состояний $G(E)$, можно записать следующее уравнение:

$$G(E) = \int_0^\infty G(\varepsilon) f(\varepsilon, E) d\varepsilon. \quad (8)$$

Решая это уравнение относительно $g(\eta)$ при подстановке функции $G(E)$ в явном виде [9], приходим к следующему результату:

$$g(\eta) = \sqrt{2} \frac{\sqrt{\sqrt{1 + \eta^2} - 1}}{\eta}. \quad (9)$$

Вычислим теперь значение коэффициента уширения η в направлении Z , сопоставляя ему малые отклонения ширины квантового провода, обусловленные тепловыми колебаниями атомов кристаллической решетки. В этом случае имеет место соотношение

$$\eta = \eta_\nu = \frac{\Delta E_\nu}{E_\nu} = 1 - \frac{b^2}{(b + \Delta b)^2} \approx \frac{2\Delta b}{b}, \quad (10)$$

которе определяет уширение энергетического уровня E_ν в квантовой системе за счет пространственного отклонения Δb , обусловленного флуктуациями ширины

квантового провода во времени. На основании вышеизложенного суммарный коэффициент уширения для квантового провода при наличии двух пространственных отклонений Δa и Δb по аналогии с (10) запишется в виде

$$\eta = \eta_{\mu\nu} = \frac{\Delta E_\mu + \Delta E_\nu}{E_{\mu\nu}} \approx \frac{2\Delta a}{a} \frac{E_\mu}{E_{\mu\nu}} + \frac{2\Delta b}{b} \frac{E_\nu}{E_{\mu\nu}}. \quad (11)$$

Рассмотрим далее величину этих пространственных отклонений. Очевидно, что она будет определяться взаимными отклонениями атомарных плоскостей под действием фононных колебаний атомов в кристаллической решетке [10]. Следовательно, пространственным отклонениям, изменяющимся во времени, будет соответствовать среднеквадратичное отклонение расстояния между атомами, и тогда выполняется равенство

$$\Delta a = \Delta b = \sigma, \quad (12)$$

где σ — среднеквадратичное отклонение расстояния между атомами относительно положения равновесия для одной степени свободы.

Согласно [10,11], можно записать следующие выражения:

$$\sigma = \sqrt{\frac{E_0}{M_1 \omega^2}} + \sqrt{\frac{E_0}{M_2 \omega^2}}, \quad (13)$$

$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \right)^{-1}, \quad (14)$$

где E_0 — средняя колебательная энергия атома для одной степени свободы, M_1 и M_2 — атомные массы соответствующих сортов частиц в кристаллической решетке с базисом (в примитивной решетке $M_1 = M_2$), ω — циклическая частота оптического фонона, T — температура кристаллической решетки. Комбинируя (13) и (14), получим

$$\sigma = \left(\frac{\hbar}{M \omega} \right)^{1/2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \right)^{1/2} \times \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \right)^{-1/2}, \quad (15)$$

$$M = \frac{2M_1 M_2}{(\sqrt{M_1} + \sqrt{M_2})^2}. \quad (16)$$

Учтем далее уширение энергетических уровней из-за наличия шероховатостей поверхностей. В частности, следуя работе [5], несложно получить выражение, аналогичное формуле (11). Однако отметим, что в [5] предполагалось, что характеристическая длина шероховатостей значительно больше длины электронной волны, в то время как в интересующей нас области вблизи энергетических уровней это предположение не является справедливым. Кроме того, гораздо больший практический интерес представляют шероховатости с характеристической длиной порядка межатомного расстояния, в особенности для короткого квантового провода. Именно для этого случая мы и проведем расчет уширения.

Положим, что высота шероховатостей распределена по нормальному закону [12]. Далее учтем, что, согласно, например, [11], среднее время жизни частицы τ_v на энергетическом уровне E_v связано с полушириной этого уровня соотношением

$$\Delta E_v = \frac{\hbar}{2\tau_v}. \quad (17)$$

Используя равенства (10) и (17), несложно вычислить детерминированный сдвиг фазы электронной волны за это время относительно невозмущенного состояния, что соответствует случаю отсутствия шероховатостей поверхностей. Он равен $1/2\text{rad}$. Если же длина электронной волны значительно больше характеристической длины шероховатостей, то необходимо перейти от детерминированного сдвига фаз к случайному с нормальным распределением. При этом за среднее время жизни частицы на энергетическом уровне среднее квадратичное отклонение фазы электронной волны, определяемое шероховатостями поверхностей, составит $\pi/2\text{rad}$.

Следовательно, рассматривая фазовые сдвиги для электронных волн, мы можем вычислить уширение энергетических уровней, обусловленное шероховатостями поверхностей. Рассуждая таким образом, приходим к следующему результату:

$$\eta_v = \frac{1}{v\pi} \left(\frac{b}{2v\delta_z} \right)^{-2}, \quad (18)$$

где δ_z — среднее квадратичное отклонение шероховатой поверхности от плоскости, перпендикулярной оси Z . Кроме того, учет эквивалентности электронных состояний при сдвиге фазы на $\pm v\pi\text{rad}$ позволяет уточнить выражение (18), которое в этом случае модифицируется следующим образом:

$$\eta_v = \frac{1}{v\pi} \left(\left(\frac{b}{2v\delta_z} \right)^2 + 3 \exp \left(-\frac{2}{5} \left(\frac{b}{2v\delta_z} \right)^2 \right) \right)^{-1}. \quad (19)$$

Суммарный коэффициент уширения, согласно (10)–(12) и (19), будет равен

$$\begin{aligned} \eta_{\mu\nu} = & \left[\frac{2\sigma}{a} + \frac{1}{\mu\pi} \left(\left(\frac{a}{2\mu\delta_y} \right)^2 + 3 \exp \left(-\frac{2}{5} \left(\frac{a}{2\mu\delta_y} \right)^2 \right) \right)^{-1} \right] \frac{E_\mu}{E_{\mu\nu}} \\ & + \left[\frac{2\sigma}{b} + \frac{1}{v\pi} \left(\left(\frac{b}{2v\delta_z} \right)^2 + 3 \exp \left(-\frac{2}{5} \left(\frac{b}{2v\delta_z} \right)^2 \right) \right)^{-1} \right] \frac{E_v}{E_{\mu\nu}}, \quad (20) \end{aligned}$$

где δ_y — среднее квадратичное отклонение шероховатостей поверхности от плоскости, перпендикулярной

оси Y . После упрощения выражения (7) с учетом формулы (20) получим

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\sqrt{m_d}}{\hbar ab} \sum_{\mu} \sum_{\nu} F_{\mu\nu}(E), \quad (21)$$

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}(E) = & \frac{E}{\sqrt{(E_{\mu\nu} - E)^2 + (\eta_{\mu\nu} E)^2}} \\ & \times \frac{\sqrt{\sqrt{1 + \eta_{\mu\nu}^2} - 1}}{\sqrt{(E_{\mu\nu} - E) + \sqrt{(E_{\mu\nu} - E)^2 + (\eta_{\mu\nu} E)^2}}}. \quad (22) \end{aligned}$$

Равенства (21) и (22) описывают поведение плотности состояний в квантовом проводе при наличии уширения энергетических уровней, обусловленного возмущением квантовой системы тепловыми колебаниями кристаллической решетки и шероховатостями поверхностей, ограничивающих эту систему.

2. Интенсивность рассеяния

Запишем выражения для расчета интенсивности межподзонного рассеяния электронов на полярных оптических фононах в квантовом проводе на основе полярного полупроводника, воспользовавшись результатами работы [5]. При этом заменим соответствующим образом входящую во взятые из данной работы формулы плотность конечных состояний без учета уширения энергетических уровней на плотность конечных состояний с учетом уширения. Кроме того, учтем закон сохранения полного импульса электрона, а не только его продольной компоненты, как это сделано в [5], таким образом, чтобы при рассмотрении интенсивности рассеяния имел место предельный переход от квантового провода к объемному полупроводнику при стремлении величин a и b к бесконечности. В этом случае выражение для интенсивности межподзонного рассеяния электронов в квантовом состоянии с энергией $E_{\mu\nu}$ при испускании/поглощении фонона (индекс e/a соответственно) будет иметь вид

$$\begin{aligned} W^{\{e/a\}}(E_x) = & \alpha^{\{e/a\}} \sum_{\mu'} \sum_{\nu'} I(q_+^{\{e/a\}}) F_{\mu'\nu'} \\ & \times (E_x + E_{\mu\nu} \mp \hbar\omega) U(E_x + E_{\mu\nu} - E_{\mu'\nu'} \mp \hbar\omega) \\ & + \alpha^{\{e/a\}} \sum_{\mu'} \sum_{\nu'} I(q_-^{\{e/a\}}) F_{\mu'\nu'} \\ & \times (E_x + E_{\mu\nu} \mp \hbar\omega) U(E_x + E_{\mu\nu} - E_{\mu'\nu'} \mp \hbar\omega), \quad (23) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \alpha^{\{e/a\}} = & \left(\frac{2}{\pi} \right)^4 \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \\ & \times \left(N_{\text{ph}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{e^2 \omega \sqrt{2m_d}}{\hbar ab}, \quad (24) \end{aligned}$$

$$I(q_{\pm}) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{P_{ij}^2}{q_{\pm}^2 + \left(\frac{i\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{j\pi}{b}\right)^2}, \quad (25)$$

$$q_{+}^{\{e/a\}} = k_x + \frac{\sqrt{2m_d(E_x + E_{\mu\nu} - E_{\mu'\nu'} \mp \hbar\omega)}}{\hbar}, \quad (26)$$

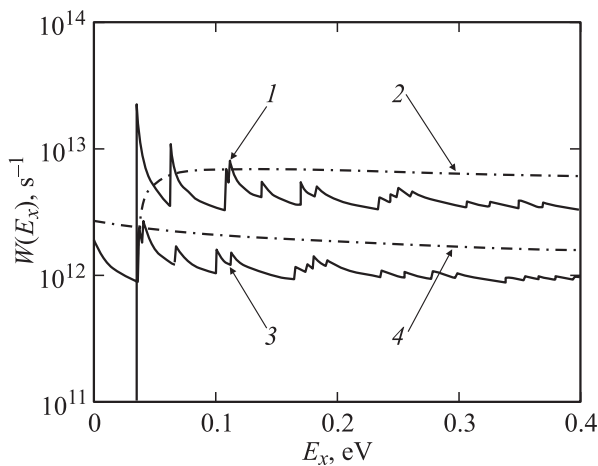
$$q_{-}^{\{e/a\}} = k_x - \frac{\sqrt{2m_d(E_x + E_{\mu\nu} - E_{\mu'\nu'} \mp \hbar\omega)}}{\hbar}, \quad (27)$$

$$P_{ij} = \int_0^{\pi} \sin(\mu y) \sin(\mu' y) \sin(iy) dy \times \int_0^{\pi} \sin(\nu z) \sin(\nu' z) \sin(jz) dz, \quad (28)$$

E_x — кинетическая энергия электрона, ε_{∞} и ε_s — оптическая и статическая диэлектрические проницаемости полярного полупроводника соответственно, N_{ph} — число фононов, e — заряд электрона.

3. Обсуждение результатов

Сравнение полученных выше результатов с результатами работы [5] показало, что учет закона сохранения поперечных компонент импульса электрона при рассеянии снижает вероятность рассеяния частицы в 4 раза. Это обусловлено тем, что одна из поперечных компонент волны де Бройля электрона может взаимодействовать только с сонаправленной компонентой соответствующей поперечной фононной моды, так как в противном случае не будет выполняться закон сохранения импульса. Подобный эффект снижения вероятности рассеяния электронов на резонансных уровнях в одномерной квантовой яме уже обсуждался в работе [13].



Зависимость интенсивности межподзонного рассеяния электронов W от их кинетической энергии E_x при испускании (1, 2) и поглощении (3, 4) полярного оптического фонона в квантовом проводе (1, 3) и объемном полупроводнике (2, 4). $T = 300$ К, $\mu = \nu = 1$, $a = 15$ nm, $b = 25$ nm, $\delta_y = 0.53$ nm, $\delta_z = 0.88$ nm.

На рисунке в качестве примера приведены зависимости интенсивности $W(E_x)$ межподзонного рассеяния электронов, находящихся в основном квантовом состоянии, на полярных оптических фононах в квантовом проводе из арсенида галлия, рассчитанные по формуле (23) при температуре $T = 300$ К и тех же параметрах квантовой системы, что и в работе [5]. Для сравнения на этом же рисунке представлены зависимости интенсивности $W(E_x)$ межподзонного рассеяния электронов на полярных оптических фононах в объемном арсениде галлия (квантовый провод с поперечным сечением $10^{-3} \times 10^{-3}$ м). Отметим, что результаты расчетов предельного перехода, соответствующего объемному полупроводнику, полностью совпадают с результатами расчетов, приведенными в [14].

Таким образом, в данной работе предложен подход к расчету интенсивности межподзонного рассеяния электронов на полярных оптических фононах в полупроводниковом квантовом проводе с энергетическими уровнями конечной ширины. При этом показано, что зависимость интенсивности рассеяния от кинетической энергии носителей заряда не содержит особых точек. Кроме того, в предельном случае при стремлении поперечных размеров квантового провода к бесконечности она сходится к зависимости, характерной для объемного полупроводника [14], в то время как такой же расчет с использованием результатов наиболее известной работы [5] приводит к четырехкратно завышенной интенсивности рассеяния.

Список литературы

- [1] А.С. Тагер. Электронная техника. Электроника СВЧ **9**, 21 (1987).
- [2] L. Worschech, S. Reitzenstein, A. Forchel. Appl. Phys. Lett. **77**, 22, 3662 (2000).
- [3] V.M. Borzdov, F.F. Komarov, A.V. Homich, O.G. Zhevnyak. Phys. Low-Dim. Struct. **10**, 63 (1997).
- [4] D. Calecki. J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 4315 (1986).
- [5] R. Mickevicius, V.V. Mitin, K.W. Kim, M.A. Stroscio, G.J. Iafrate. J. Phys.: Cond. Matter. **4**, 4959 (1992).
- [6] V.M. Borzdov, V.O. Galenchik, F.F. Komarov, D.V. Pozdnyakov, O.G. Zhevnyak. Phys. Low-Dim. Struct. **11/12**, 21 (2002).
- [7] P. Roblin, W.-R. Liou. Phys. Rev. B **47**, 4, 2146 (1993).
- [8] N. Zou, Q. Chen, M. Willander. J. Appl. Phys. **75**, 3, 1829 (1994).
- [9] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. Наука, М. (1990).
- [10] П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. Физика твердого тела. Высш. шк., М. (2000).
- [11] А.С. Давыдов. Квантовая механика. Наука, М. (1973).
- [12] E.X. Ping, H.X. Jiang. Phys. Rev. B **40**, 17, 11 792 (1989).
- [13] В.М. Борздов, Д.В. Поздняков. Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. **1**, 26 (2002).
- [14] В.М. Иващенко, В.В. Митин. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. Наук. думка, Киев (1990).