

Влияние примесей на постоянную составляющую тока в квантовой нити в условиях совместного воздействия постоянного и переменного электрических полей

© Д.В. Завьялов[¶], С.В. Крючков

Волгоградский государственный педагогический университет,
400131 Волгоград, Россия

(Получена 17 октября 2007 г. Принята к печати 15 января 2008 г.)

Рассчитан ток, протекающий вдоль цилиндрической квантовой нити со сверхрешкой при одновременном приложении постоянного и переменного электрических полей. Предполагается, что нить содержит примесные центры, ионизация которых приводит к генерации неравновесных носителей в зоне проводимости. Обнаружено, что зависимость постоянной составляющей тока от частоты электрического поля имеет ступенчатый характер. Показано, что расстояние между ступенями определяется шириной мини-зоны проводимости и параметрами поперечного квантового ограничения и не зависит от глубины залегания примеси.

PACS: 73.21.Nb, 73.21.Cd, 73.63.Nm

Прогресс микро- и нанoeлектроники обусловлен, кроме всего прочего, созданием новых твердотельных структур с наперед заданными электронными спектрами. К таким структурам можно отнести, в частности, объекты с пониженной размерностью (квантовые нити, точки, кольца, сверхрешетки и т.д.). Особенно перспективными такие материалы представляются в связи с их оптическими и кинетическими свойствами. Именно поэтому исследованию таких свойств посвящено множество работ последнего времени (см. [1–4] и цитируемую там литературу). Известно также, что оптические и электрические свойства полупроводников в значительной мере определяются наличием в них примесных центров [5,6]. Особенно актуальной такая ситуация представляется в сильных электрических полях, которые могут приводить к ионизации примесей и тем самым динамически изменять концентрацию носителей в зоне проводимости. Например, в [7] исследовано внутримини-зонное поглощение нелинейной электромагнитной волны в полупроводниковой сверхрешетке (СР) с учетом того факта, что одновременно происходит примесное поглощение. Поглощение приводит к повышению концентрации носителей тока в мини-зоне проводимости, что, в свою очередь, влечет изменение формы самой электромагнитной волны.

Важной особенностью полупроводников со СР является возможность рождения в процессе ионизации примесей неравновесных носителей у потолка мини-зоны, т.е. там, где отрицательна эффективная масса. Современные технологии позволяют изготовить квантовые нити со спектром в направлении квазисвободного движения носителей, присущим СР. Представляется, что электрические и оптические свойства такой нити со сверхструктурой могут быть весьма специфичны.

Цель работы заключается в расчете электрического тока, текущего вдоль цилиндрической квантовой нити со сверхрешкой при одновременном приложении по-

стоянного и переменного электрических полей. Считается, что нить содержит примесные центры, ионизация которых приводит к генерации в зоне проводимости неравновесных носителей заряда.

Для определенности квантовая нить выбирается в модели жестких стенок. Энергетический спектр электронов такой нити в одномини-зонном приближении имеет вид

$$\varepsilon(p) = \frac{\hbar^2 j_{m,n}^2}{2m^* \rho_0^2} + \Delta \{1 - \cos(pd/\hbar)\}, \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса электрона в плоскости ZOY в материале нити, Δ — полуширина мини-зоны проводимости, d — период СР. При этом считается, что СР периодична вдоль оси OZ, p — компонента квазиимпульса электрона вдоль оси OZ, $j_{m,n}$ — n -й корень функции Бесселя первого рода m -го порядка, ρ_0 — радиус нити.

Будем считать, что характерное расстояние, на котором происходит заметное изменение поля волны, значительно больше длины свободного пробега электронов. Последнее условие позволяет считать поле волны однородным и в кинетическом уравнении Больцмана для электрона в поле волны пренебречь пространственной производной функции распределения. В силу того что электрические свойства подобной СР в значительно большей степени определяются особенностями энергетического спектра носителей тока, нежели конкретным видом интеграла столкновений, мы будем использовать кинетическое уравнение Больцмана с интегралом столкновений Батнагара–Крука–Гросса (БКГ) [8]. Такой выбор обусловлен еще и тем, что интеграл столкновений в виде БКГ корректно учитывает сохранение числа носителей тока в мини-зоне проводимости, оставаясь при этом довольно простым по своей форме. Отметим, что он не может быть получен из общего интеграла Больцмана путем каких-либо приближений и поэтому является модельным. Таким образом имеем кинетиче-

[¶] E-mail: sed@fizmat.vspu.ru

ское уравнение

$$\frac{\partial f(p, t)}{\partial t} + eE \frac{\partial f(p, t)}{\partial p} = \left(\frac{\partial f(p, t)}{\partial t} \right)_{cm} - R(p) + G(p). \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части (6) в соответствии с моделью БГК имеет вид

$$\left(\frac{\partial f(p, t)}{\partial t} \right)_{cm} = -v \left(f(p, t) - \frac{n}{n_0} f_0(p) \right), \quad (3)$$

где $f(p, t)$ — неравновесная функция распределения, учитывающая влияние электрического поля E на состояния и разогрев носителей в мини-зоне, $E = E_0 \cos(\omega t) + E_{dc}$, E_{dc} — напряженность постоянного электрического поля, n — линейная концентрация электронов в мини-зоне проводимости, n_0 — равновесная (в структуре каких-либо внешних воздействий) линейная концентрация, v — частота столкновений электронов с нерегулярностями решетки, $f_0(p)$ — равновесная функция распределения. Выберем $f_0(p)$ в больцмановском виде

$$f_0(p) = C \exp(-\varepsilon(p)/\Theta), \quad (4)$$

где $\varepsilon(p)$ задается (1), Θ — температура, выраженная в энергетических единицах.

Второе слагаемое в правой части (2) определяет уменьшение числа электронов в мини-зоне проводимости благодаря их рекомбинации и имеет вид

$$R(p) = \nu_r (f(p, t) - f_0(p)), \quad (5)$$

где ν_r — частота рекомбинации электронов. Входящая в (2) функция $G(p)$ — член генерации носителей тока — имеет смысл количества носителей, образующихся на единице длины вещества в единицу времени в результате ионизации, и находится по формуле

$$G(p) = (N + n_0 - n) \sum_f W_{if}. \quad (6)$$

Здесь W_{if} — вероятность перехода электрона в единицу времени с примесного уровня i на уровень f , соответствующий свободному движению в мини-зоне проводимости, N — линейная концентрация примесей. Будем полагать постоянное электрическое поле слабым, так что туннельным просачиванием электрона с примесного уровня в мини-зону проводимости под его действием пренебрежем. Вероятность W_{if} будет обусловлена только переходами под влиянием переменного поля и записывается так:

$$W_{if} = \frac{2\pi e^2 E_0^2}{\hbar m_0^2 \omega^2} |M_{if}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega), \quad (7)$$

где ε_f — энергия электрона в мини-зоне проводимости и задается формулой (1), $\varepsilon_i \equiv V$ — энергия примесного уровня, ω , E_0 — частота и амплитуда электромагнитной

волны соответственно, m_0 — масса свободного электрона, M_{if} — матричный элемент перехода примесь—мини-зона проводимости — задается соотношением

$$M_{if} = -i\hbar \int \psi_f^* \frac{\partial}{\partial z} \psi_i d^3r, \quad (8)$$

где ψ_f — волновая функция электрона в мини-зоне проводимости, ψ_i — волновая функция электрона, локализованного на примеси.

Будем полагать глубину залегания примесного уровня V большой по сравнению с изменением потенциала СР на длине d . Тогда волновая функция электрона, локализованного на примеси, будет иметь тот же вид, что и в однородном кристалле. Выберем волновую функцию в виде, соответствующем водородоподобной примеси

$$\psi_i = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \exp(-\alpha r) \exp(-iVt), \quad (9)$$

где α — обратный радиус локализации примесного центра, причем предполагается, что V и ширина мини-зоны проводимости 2Δ — величины одного порядка. Волновую функцию электрона в мини-зоне проводимости запишем в виде [9]

$$\psi_f = \frac{1}{\rho_0 \sqrt{L_z}} \frac{J_m(j_{m,n} \rho \rho_0^{-1})}{J_{m+1}(j_{m,n})} \exp(im\varphi) \exp\left(i \frac{pz}{\hbar}\right). \quad (10)$$

Здесь L_z — нормировочная длина нити вдоль оси OZ , ρ — радиальная координата, $J_n(x)$ — функция Бесселя первого рода порядка n .

Таким образом, подставляя (9) и (10) в (8) и переходя к цилиндрическим координатам, получаем следующее выражение для M_{if} :

$$M_{if} = \frac{i\hbar}{J_{m+1}(j_{m,n}) \kappa_0 \sqrt{L_z}} \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) \times \int_0^{\kappa_0} \int_{-\frac{\alpha L_z}{2}}^{\frac{\alpha L_z}{2}} \kappa \xi d\kappa d\xi \frac{J_m(j_{m,n} \kappa \kappa_0^{-1}) \exp(i\beta \xi) \exp(-\sqrt{\xi^2 + \kappa^2})}{\sqrt{\xi^2 + \kappa^2}}, \quad (11)$$

где $\kappa_0 = \alpha \rho_0$, $\beta = p(\hbar\alpha)^{-1}$.

Выполнив интегрирование в (11), получим

$$M_{if} = \frac{4\hbar}{J_1(j_{0,n}) \kappa_0 \sqrt{L_z}} \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} (\beta - 8\beta j_{0,n}^2 \kappa_0^{-2}). \quad (12)$$

Таким образом, выражение для W приобретает вид

$$W = \frac{128e^2 E_0^2 \hbar}{\pi d^3 \kappa_0^2 m_0^2 \omega^2 \alpha \Delta} \sum_n (1 - 8j_{0,n}^2 \kappa_0^{-2}) \frac{\chi_0^2}{J_1^2(j_{0,n}) \sin(2\chi_0)}. \quad (13)$$

Здесь

$$\chi = \arcsin \sqrt{\left(\frac{\hbar\omega}{2\Delta} - \frac{\hbar^2 j_{0,n}^2}{4m^* \rho_0^2 \Delta} - \frac{|V|}{2\Delta} \right)} \times \theta \left(\frac{\hbar\omega}{2\Delta} - \frac{\hbar^2 j_{0,n}^2}{4m^* \rho_0^2 \Delta} - \frac{|V|}{2\Delta} \right),$$

$\theta(x)$ — функция Хевисайда.

Решая уравнение (2) методом характеристик, находим функцию распределения, учитывающую разогрев электронного газа и ионизацию примесей. Далее, обычным образом получим следующее выражение для постоянной составляющей электрического тока, текущего вдоль оси OZ:

$$I = \frac{n}{n_0} F(a, \Omega), \quad (14)$$

где

$$F(a, \Omega) = I_0 \sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s^2(a) \times \frac{\nu \Omega (\Omega^2 + \nu^2 - s^2 \omega^2)}{[(\Omega + s\omega)^2 + \nu^2][(\Omega - s\omega)^2 + \nu^2]}, \quad (14a)$$

$a = eE_0 d (\hbar\omega)^{-1}$, $\Omega = eE_c d \hbar^{-1}$, $I_0 = \hbar \omega_p^2 (4\pi e d)^{-1}$, $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n_0 \Delta d^2 \hbar^{-2} I_1(\Delta/\Theta)/I_0(\Delta/\Theta)$, $I_n(x)$ — модифицированная функция Бесселя первого рода порядка n . Отношение n/n_0 вычисляется по формуле

$$\frac{n}{n_0} = 1 + \frac{N}{n_0} \left(\frac{W}{W + \nu_r} \right), \quad (15)$$

которая следует из суммирования обеих частей уравнения Больцмана (2) по квазиимпульсу.

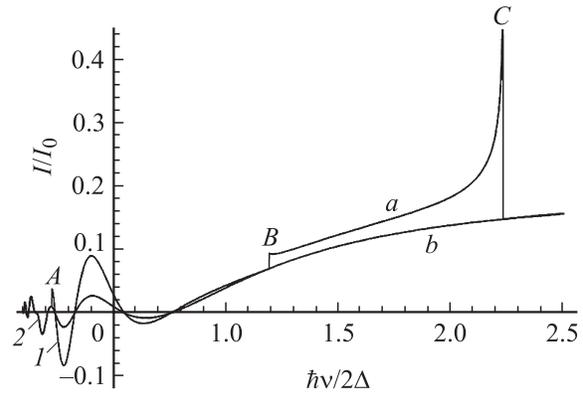
Заметим, что выражение (15) с точностью до множителя n/n_0 совпадает с результатами, полученными ранее в [10]. Однако именно наличие множителя n/n_0 , зависящего сложным образом от амплитуды и частоты поля электромагнитной волны, и обуславливает модификацию постоянной составляющей тока за счет процессов ионизации.

В отсутствие переменного электрического поля ($a = 0$) в формуле (14a) необходимо положить $J_s^2(0) = \delta_{s,0}$, $n = n_0$. Таким образом, имеем для тока следующее выражение [8]:

$$I = I_0 \frac{\nu \Omega}{\Omega^2 + \nu^2}. \quad (16)$$

По формуле (14) построены графики зависимости тока нити в безразмерных единицах от отношения $\hbar\omega/(2\Delta)$. На рисунке график a соответствует концентрации примесей $N = 3n_0$, график b — квантовой нити без примесей.

Из рисунка видно, что, во-первых, в областях абсолютной отрицательной проводимости (там, где I/I_0 меньше нуля) значение тока больше по модулю, чем в ситуации



Зависимость постоянной составляющей тока от частоты электромагнитной волны (в безразмерных единицах). Графики построены при $m = 0.1m_0$, $\Delta, V = 0.01$ эВ, $\nu = 10^{12}$ с $^{-1}$, $d = 10^{-6}$ см, $E_c = 10$ ед. СГС, $E_0 = 100$ ед. СГС, $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-6}$ см (m_0 — масса свободного электрона).

без примесей. Это связано с ростом эффективной концентрации носителей тока за счет ионизации примесей. Во-вторых, видно, что зависимость постоянной составляющей тока от частоты электромагнитного поля имеет немонотонный (ступенчатый) характер. На рисунке ступени в точке A соответствует переход с примесного уровня на первый (нижайший) уровень размерного квантования. Точка B соответствует включению процессов перехода с примеси на второй уровень размерного квантования, а точка C — выключению переходов с примеси на первый уровень размерного квантования. При этом анализ показывает, что расстояние между ступенями имеет фиксированное значение и не зависит от глубины залегания примеси, а зависит только от ширины мини-зоны проводимости (расстояние между A и C) и параметров поперечного ограничения (расстояние между A и B). Последнее обстоятельство дает возможность экспериментального определения ширины мини-зоны проводимости и параметров поперечного квантового ограничения (confinement). Кроме того, сами пороги четко выражены, что обусловлено особенностями ван Хова.

Отметим, что, строго говоря, при $\omega \approx 2\Delta$ квазиклассический подход (основанный на использовании кинетического уравнения Больцмана) перестает работать. Таким образом, количественные выводы о величине тока в этой области частот не точны. Для правильной количественной оценки I необходимо использовать квантовое кинетическое уравнение. При этом, как показывают предварительные оценки, в выражении (14) существенные изменения затрагивают функцию $F(a, \Omega)$. Однако выводы о пороговых эффектах в точках B и C на рисунке останутся и в этом случае, так как они определяются видом множителя n/n_0 в формуле (14), который рассчитан квантово-механически и имеет простую физическую интерпретацию. Наконец, отметим, что при выбранных параметрах структуры $I_0 \approx 10^{-9}$ А.

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации МК-3316.2007.2 и Государственным грантом АВО № 1.1 от 17.07.07.

Список литературы

- [1] А.А. Григорькин, С.М. Дунаевский. ФТТ, **22**, 557 (2007).
- [2] Л.И. Магарилл, М.В. Энгин. Письма ЖЭТФ, **74**, 249 (2003).
- [3] И.А. Дмитриев, Р.А. Сурис. ФТП, **36**, 1449 (2002).
- [4] Н.Г. Галкин, В.А. Маргулис, А.В. Шорохов. ФТТ, **43**, 511 (2001).
- [5] В.А. Маргулис, Н.Ф. Павлова, А.В. Шорохов. ФТТ, **48**, 880 (2006).
- [6] В.Д. Кревчик, А.Б. Грунин. ФТТ, **45**, 1272 (2003).
- [7] Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, Н.Е. Мещерякова. Опт. и спектр., **98**, 23 (2005).
- [8] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, П.П. Тетервов. *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками* (М., Наука, 1989).
- [9] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. *Физика квантовых низкоразмерных структур* (М., Логос, 2000).
- [10] В.В. Павлович, Э.М. Эпштейн. ФТТ, **13**, 1483 (1976).

Редактор Л.В. Беляков

Impurity influence on the steady component of the current in the quantum wire under the action of dc and ac fields

D.V. Zavyalov, S.V. Kryuchkov

Volgograd State Pedagogical University,
400131 Volgograd, Russia

Abstract A current flow in the cylindrical quantum wire with a superlattice under the action of dc and ac fields has been calculated. The wire was considered to have impurity centers, those can generate non-equilibrium carriers into the conduction band. The steady component of the current was found to be a step-like function of the ac field frequency. It was shown that step heights are determined by a conduction mini-band width and by transverse quantum confinement parameters and don't depend on impurity level depth.