

ПРИДНЕСТРОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. Т.Г. ШЕВЧЕНКО

На правах рукописи

УДК **xxx.xxx**

Карапетян Сергей Артурович

**ВЛИЯНИЕ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ НА ШЕРОХОВАТОЙ
ПОВЕРХНОСТИ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В
РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННЫХ СИСТЕМАХ**

Специальность 01.04.02 —
«теоретическая физика»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д-р физ.-мат. наук, проф.
Синявский Элерланж Петрович

Тирасполь — 2017

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Рассеяния носителей на шероховатой поверхности	7
1.1 Обзор литературы	7
1.2 Теория рассеяния носителей на шероховатой поверхности в размерно-ограниченных системах	9
Глава 2. Влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на оптические свойства размерно-ограниченных систем	16
2.1 Межзонное и межподзонное поглощение света в квантовых системах с пониженной размерностью с учетом рассеяния на шероховатой поверхности	16
2.2 Влияние лазерного излучения на оптические свойства квантовых пленок	20
2.3 Оптические свойства квантовых проволок в присутствии резонансного лазерного излучения	29
Глава 3. Влияние шероховатой поверхности на кинетические эффекты в низкоразмерных системах	38
3.1 Подвижность носителей в размерно-квантованных системах с учетом рассеяния на поверхности и фононах	38
3.2 Электропроводность в размерно-квантовых системах с учётом рассеяния носителей на шероховатой поверхности в магнитном поле	50
Глава 4. Явления переноса в нанопроволоках в поперечном электрическом поле с учетом рассеяния на шероховатой поверхности	55
4.1 Исследования подвижности носителей в квантовых ямах в постоянном поперечном электрическом поле	55
4.2 Влияние поперечного электрического поля на подвижность в нанопроволоках	59

4.3	Особенности подвижности в нанопроволоках в поперечных электрическом и магнитном полях	65
4.4	Термоэдс в нанопроволоках Bi в поперечном постоянном электрическом поле	70
Заключение		77

Введение

Исследования кинетических явлений (процессы переноса, оптические свойства) в квантовых системах с пониженной размерностью в настоящее время продолжают привлекать внимание как теоретиков так и экспериментаторов. Это связано с тем, что энергетический спектр электронов и дырок в таких системах из-за размерного квантования принципиальным образом отличается от объемного материала. Одним из наиболее перспективных в использовании и интенсивно изучаемых является эффект размерного квантования. Квантование движения частиц имеет место, когда характерный размер системы близок по величине к длине волны де Бройля носителей. Уменьшение размеров системы в одном, либо двух, трех направлениях приводит к тому, что движение частицы становится соответственно квазидумерным, квазиодномерным или квазинульмерным. В настоящее время существует большое число видов низкоразмерных систем: квантовые ямы (КЯ), сверхрешетки (СР), квантовые проволоки (КП), квантовые доты (точки) и их системы. Именно появление размерно-квантованных зон проводимости (как и валентных зон) создает новые каналы поглощения и люминесценции, определяемые, например, с переходом заряженной частицы между размерно-квантованными зонами проводимости (межподзональные переходы). При этом, что является очень важным, из-за локализации носителей сила осциллятора при таких переходах велика, что приводит к большим, порядка 10^3 cm^{-1} , значениям коэффициента поглощения слабой электромагнитной волны в далекой инфракрасной области спектра. Если в объемных полупроводниковых материалах электронные явления переноса определяются в основном рассеянием носителей на колебаниях кристаллической решетки, при низких температурах рассеянием на легированной примеси, то в размерно-ограниченных системах (квантовые ямы, гетероструктуры, квантовые проволоки и т.д.) возникает новый тип рассеяния – рассеяние носителей на шероховатой поверхности. Любое незначительное изменение размеров квантовой системы (например ширины КЯ, радиуса КП) приводит, естественно, к изменению энергии размерного квантования. Именно это изменение можно рассматривать как результат взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью. Наиболее удачным для описания таких процессов рассеяния носителей является модель, когда размеры наноструктуры при движении заряженных частиц

вдоль поверхности меняются случайным образом. В дальней при описании кинетических явлений в размерно-ограниченных системах используется такая модель. Именно этот механизм рассеяния может писать большие значения подвижности в области низких температур наблюдаемые в экспериментальных исследованиях [\[добавить ссылки на эксперименты\]](#). При этом, естественно, чем меньше ширина размерно-квантованной системы, тем процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности становятся наиболее активными. Поэтому механизм рассеяния носителей на шероховатой поверхности можно экспериментально выделить от других механизмов рассеяния по резкой зависимости от размеров наноструктуры и по влиянию поперечного электрического поля на процессы рассеяния. Эти процессы влияют на кинетические явления по разному в зависимости от ориентации напряженности внешнего однородного магнитного поля по отношению к оси пространственного квантования. Рассматриваемые процессы рассеяния важны в области низких температур T , потому что с ростом T вначале важную роль начинают играть процессы рассеяния носителей на длинноволновых (акустических) колебаниях кристаллической решетки, а потом включаются процессы, связанные с взаимодействием заряженных частиц с оптическими фононами.

В настоящее время для описания кинетических явлений в размерно-ограниченных системах используется модель, в которой потенциал квантовой системы аппроксимируется параболой. Системы с квадратичным потенциалом интересны тем, что проявление эффектов размерного квантования в них происходит в достаточно больших размерно-ограниченных системах. Например для типичных параметров параболической квантовой ямы $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ шаг пространственного квантования для электронов равен $14.6/a$ eV (a -ширина КЯ в Å), т.е. при $a = 10^3 \text{ Å}$, $\hbar = 14.6 \text{ meV}$. Следовательно, уже при температуре $T 100 \text{ K}$, должно заметно проявляться влияние размерно-квантованных уровней на свойства таких систем. Квадратичная зависимость потенциала также удобна для теоретических расчетов и позволяет получить многие характеристики полупроводниковых систем в аналитическом виде, что делает более удобным проводить детальный анализ рассматриваемых физических явлений.

В первой главе данной диссертационной работы представлен обзор экспериментов и теоретических работ, посвященных исследованию влияния процессов рассеяния носителей на шероховатой поверхности на оптические свойства и явления переноса в размерно-ограниченных системах. В ней же кратко изложена тео-

рия рассеяния носителей на шероховатой поверхности в размерно-ограниченных системах. Обсуждаются приближения, которые используются ниже в оригинальных главах диссертации.

Вторая глава диссертации посвящена расчету коэффициента поглощения света различной поляризации, позволяющий исследовать частотную зависимость поглощения света в широкой области частот и последовательно описать как межподзонное так и внутризонное поглощение с учетом взаимодействия электрона с шероховатой поверхностью. В этой же главе исследуется влияние резонансного инфракрасного лазерного излучения на межзонное поглощение света в системах с пониженной размерностью (квантовые ямы, нанопроволоки), когда частота лазерного излучения равна или частоте размерного квантования или гибридной частоте.

В третьей главе проведено исследование влияния рассеяния носителей на шероховатой поверхности на процессы переноса в квантовых ямах и квантовых проволоках. Теоретические результаты сравниваются с экспериментальными данными в КЯ GaAs-AlAs, нанопроволоках Bi.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию явлений переноса (подвижность, термоэдс) в электрическом поле, направленном перпендикулярно оси размерно-ограниченной системы. В частности, показано, что подвижность с ростом напряженности поперечного электрического поля уменьшается, а в случае вырожденного электронного газа подвижность описывается осцилляционной кривой.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: перечисление основных конференций, симпозиумов и т. п.

Личный вклад. Автор принимал активное участие ...

При использовании пакета `biblatex` для автоматического подсчёта количества публикаций автора по теме диссертации, необходимо их здесь перечислить с использованием команды `\nocite`.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 84 страницы, включая 10 рисунков и 0 таблиц. Список литературы содержит 67 наименований.

Глава 1. Рассеяния носителей на шероховатой поверхности

1.1 Обзор литературы

Фактически впервые на важную роль взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью на процессы переноса обратили внимание Н. Sakaki и др. [1] при исследовании подвижности в КЯ GaAs/AlAs малой толщины (40 \AA , 60 \AA). При этом подвижность оказалась очень чувствительной величиной от ширины а квантовой ямы. При низких температурах ($T = 4.2 \text{ K}$) подвижность при $a < 60 \text{ \AA}$ с ростом толщины увеличивалась как a^6 . Для описания экспериментальных данных по величине и температурной зависимости подвижности в кремниевых инверсионных слоях (Si-SiO₂) в области низких температур ($T \leq 80 \text{ K}$) параметры флуктуирующей поверхности принимают значения $\Delta 6 \text{ \AA}$, $\Lambda 13 \text{ \AA}$ [2; 3]. Как показали теоретические и экспериментальные исследования в КЯ GaAs/AlAs [4] влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на подвижность, полуширину линии при межподзонных оптических переходах существенно вплоть до комнатных температур (толщина $a 80 \text{ \AA}$). В [5] при исследовании оптических свойств сверхрешеток с активной областью GaAs/AlGaAs показано, что в отсутствии магнитного поля рассеяние носителей на шероховатой поверхности всегда доминирует в области низких температур над другими механизмами рассеяния (рассеяние на длинноволновых акустических фононах, на примесях). В работе [6] рассматривалось влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на подвижность вырожденного электронного газа в квантовых проволоках цилиндрической формы с бесконечным потенциалом на границе $r = R_0$. Влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на форму фотолюминесценции было обращено внимание в [7]. Влияние электрического поля E , направленном перпендикулярно поверхности прямоугольной квантовой ямы, на рассеяние носителей на шероховатой поверхности (в случае гауссовской флуктуации поверхности) исследовалось в [8]. Показано, что вероятность рассеяния в единицу времени увеличивается с ростом E (при $E > 3 \cdot 10^5 \text{ V/sm}$ это увеличение для КЯ с шириной 60 \AA более чем в три раза).

Теоретические расчеты времени релаксации (транспортного времени) с учетом рассеяния носителей на шероховатой поверхности (surface roughness scattering) для описания температурной зависимости подвижности в инверсионных слоях кремния проводились в [2].

В работе [9] обсуждалось влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на подвижность в квантовых проволоках, когда электроны находятся в нижней подзоне. В [10] исследовалось поведение подвижности в области низких температур в Al-GaAs/GaAs V-подобной квантовой проволоки, когда учитывалось рассеяние на шероховатой поверхности. Эти же авторы обратили внимание на влияние этого механизма на внутри и межподзонные переходы ($\Delta 10\text{\AA}$, $\Lambda 30\text{\AA}$) для вырожденного электронного газа. В исследованиях [11] проводились расчеты транспортного времени релаксации в гетероструктурах для прямоугольной квантовой ямы конечной высоты барьера на границе $A_xGe_{1-x}N/GeN$ с малой плотностью носителей с учетом рассеяния и на шероховатой поверхности. В работе [12] теоретически исследовалось в частности, влияние рассеяния электронов на шероховатой поверхности в транзисторной структуре на основе квантовой проволоки GaAs в матрице AlAs. Влияние рассеяния электронов на шероховатой поверхности на явления переноса в полупроводниковых графитовых нанопленках изучалось в [13]. В этой работе, в частности, обсуждается вопрос локализации носителей на шероховатой поверхности при $\Delta \ll \Lambda \ll a$. В [14] обсуждалась роль рассеяния носителей на поверхности на низкотемпературные явления переноса в Ni нанопроволоках (диаметр проволоки изменяется от 55 до 13 nm). С ростом диаметра квантовой проволоки при низких температурах влияние поверхности на удельное сопротивление, как показывают экспериментальные исследования, уменьшается. Влияние шероховатой поверхности с различной шириной шероховатости (Λ менялось от 13\AA до 108\AA) на теплопроводность в нанопроволоках кремния экспериментально исследовалось в [15]. Было показано, что с увеличением неровностей поверхности исследуемой наноструктуры теплопроводность уменьшается.

1.2 Теория рассеяния носителей на шероховатой поверхности в размерно-ограниченных системах

Из-за неровности поверхности случайным образом меняется ширина a размерно-ограниченной системы, что приводит к флуктуации энергии размерного квантования E_n при движении носителя параллельно поверхности исследуемой квантовой системы. Следовательно, энергия взаимодействия электрона (дырки) с шероховатой поверхностью в случае двухмерного электронного газа может быть записана в следующем виде [1]

$$W(x,y) = \frac{\partial E_n}{\partial a} \Delta(x,y) \equiv V_n \Delta(x,y) \quad (1.1)$$

Например, для прямоугольной квантовой ямы (КЯ) с бесконечными стенками для потенциала:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} = E_0 n^2 \Rightarrow V_n = -\frac{2}{E_0} n^2 \quad (1.2)$$

Для случая квантовой ямы с параболическим потенциалом для электрона с эффективной массой m_e :

$$E_n = 2\hbar \left[\frac{2\Delta E_c}{m_e} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{a} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega_e \left(n + \frac{1}{2} \right), V_n = -\frac{1}{a} \hbar\omega_e \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.3)$$

ΔE_c — высота параболического потенциала на границе наноструктуры, $\hbar\omega_e$ — энергия размерного квантования.

Часто в расчетах кинетических коэффициентов используется случай гауссовой флуктуации поверхности, когда автокорреляционная функция для различных точек поверхности определяется соотношением:

$$\{\Delta(x,y)\Delta(x',y')\}_V = \Delta^2 \exp \left[-\frac{1}{\Lambda^2} ((x-x')^2 + (y-y')^2) \right] \equiv F(|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|), \quad (1.4)$$

здесь: Δ, Λ — высота и ширина гауссовой флуктуации соответственно, $\{\dots\}_V$ описывает усреднение по реализации случайного процесса $\Delta(x,y)$, $|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'| = (x-x')^2 + (y-y')^2$. Естественно, что можно рассматривать случай δ -образной

флуктуации [16], когда

$$\{\Delta(x,y)\Delta(x',y')\} = \gamma\delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}') = \gamma_0\delta(x - x')(y - y') = \tilde{F}(|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|) \quad (1.5)$$

γ_0 — определяет квадрат амплитуды флуктуации.

Если исследовать случай одномерного электронного газа (примером могут служить квантовые проволоки, квантовые нанотрубки), то для гауссовой флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности по аналогии (1.4) может быть записана следующим образом:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \Delta_0^2 \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{\Lambda_0^2}\right] = F_0(x - x') \quad (1.6)$$

Для случая δ -образной флуктуации поверхности естественно положить:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \gamma\delta(x - x') = \tilde{F}_0(x - x') \quad (1.7)$$

Время релаксации носителей на шероховатой поверхности, определяется квантово-механической вероятностью рассеяния в единицу времени, в нижайшем порядке теории возмущений определяется соотношением:

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\beta} V_{\alpha} V_{\beta} W_{\alpha\beta} \delta(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta}) \quad (1.8)$$

$$W_{\alpha\beta} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}_1 \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}_1) V_{\alpha} V_{\beta} F \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\beta}(\mathbf{r})$$

$\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1)$ — волновая функция носителей в состоянии α в размерно-квантованной системе. F определяется соотношением (1.4–1.7).

Вставить выражение для $W_{\alpha\beta}$, аналогично тому как ниже вставили для проволок

Для квазидвумерных систем (квантовые ямы с различным профилем потенциала, гетероструктуры) в случае гауссовой флуктуации поверхности (1.4) не трудно получить:

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{\pi m_e}{\hbar^3} (\Delta \Lambda V_n)^2 \exp\left[-\frac{1}{2}(\Lambda k_{\perp})^2\right] I_0\left[\frac{1}{2}(\Lambda k_{\perp})^2\right] \quad (1.9)$$

$I_0(z)$ – модифицированная функция Бесселя нулевого значка, $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ – волновой вектор электрона в плоскости двумерной системы.

При низких температурах, когда $\Lambda k_{\perp} \ll 1$ из (1.9) следует:

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{\pi m_e}{\hbar^3} (\Delta \Lambda V_n)^2 \quad (1.10)$$

Аналогично можно записать для случая δ -образной флуктуации поверхности

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{m_e \gamma}{\hbar^3} V_n^2 \quad (1.11)$$

Согласно (1.10), (1.11) рассеяние электронов происходит в одной зоне, и время релаксации зависит только от номера размерно-квантованной зоны n . При этом с ростом n τ_a , если учитывать (1.2), (1.3) уменьшается.

В случае прямоугольной квантовой ямы:

$$\frac{1}{\tau_a} \sim \frac{1}{a^2} E_0^2 n^4 \quad (1.12)$$

А для параболической квантовой ямы:

$$\frac{1}{\tau_a} \sim \frac{1}{a^2} (\hbar \omega_e)^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (1.13)$$

Следовательно, для двумерного электронного газа время релаксации при рассеянии на шероховатой поверхности (1.10), (1.11) справедливо для произвольного вида потенциала $V(\boldsymbol{\rho})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\rho}^2} + V(\boldsymbol{\rho}) \right] \Psi_n(\boldsymbol{\rho}) = E_n \Psi_n(\boldsymbol{\rho}).$$

Для одномерных квантовых систем (например нанопроволоки, нанотрубки) когда носители свободно движутся вдоль оси OX исследуемой наноструктуры и волновая функция определяется как

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = C e^{ik_x x} \varphi(y, z),$$

то согласно (1.8) для гауссовой флуктуации поверхности

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\Delta_0^2}{L_x} \sqrt{\pi} \Lambda_0 \exp \left[-\frac{(k_x - k'_x) \Lambda_0^2}{4} \right] \delta_{nn'}, \quad (1.14)$$

для δ -образной флуктуации поверхности

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\gamma_0}{L_x} \delta_{nn'}. \quad (1.15)$$

Наличие символов Кронекера указывает, что процессы рассеяния носителей происходят в одной зоне. Следовательно согласно (1.8) время релаксации определяется соотношением

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L_x}{2\pi} |V_a|^2 \int W_{\alpha\beta} \delta(k_x - k'_x) dk'_x.$$

[Нет суммы по β (подразумевается что там дельта символ, но зачем тогда писать β) и 2π и в числителе и знаменателе.]

Для квадратичного закона дисперсии

$$\varepsilon(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e}$$

не трудно получить для гауссовой флуктуации

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{m_e}{\hbar^3} \frac{|V_a|^2}{|k_x|} \frac{\Delta_0^2 \Lambda_0}{2} \sqrt{\pi} (1 + \exp [-\Lambda_0^2 k_x^2]) \quad (1.16)$$

для δ -образной флуктуации поверхности

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{m_e}{\hbar^3} \frac{|V_a|^2}{|k_x|} \gamma_0 \quad (1.17)$$

Следовательно время релаксации зависит от номера размерно-квантованной зоны и имеет особенности при $k_x = 0$, т.е. на дне зоны проводимости. Последнее обстоятельство является непосредственным следствием одномерности движения носителей заряда. Для параболических квантовых проволок радиуса R энергетический спектр зонных электронов, когда магнитное поле \mathbf{B} направленно перпендикулярно оси нанопроволоки, а электрическое поле \mathbf{E} параллельно \mathbf{B} , определя-

ется аналогично [17] и имеет вид:

$$E_{k_x, n, m} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \hbar\Omega_e \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_e \left(m + \frac{1}{2}\right) - \Delta_c \quad (1.18)$$

Здесь обозначено

$$m^* = m_e \left(\frac{\Omega_e}{\omega_e}\right)^2, \quad \Omega_e^2 = \omega_{ec}^2 + \omega_c^2, \quad \omega_{ec} = \frac{eH}{m_e c}, \quad \omega_e = \frac{1}{R} \left[\frac{2\Delta E_c}{m_e}\right]^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta_c = \frac{(eER)^2}{4\Delta E_c}$$

Следовательно, согласно (1.1):

$$V_\alpha = -\frac{1}{R} \left[\left(\frac{\omega_e \omega_{ec}}{\Omega_e}\right)^2 \frac{\hbar^2 k_x^2}{m_e} + \hbar\omega_e \left(\frac{\omega_e}{\Omega_e}\right) \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_e \left(m + \frac{1}{2}\right) + 2\Delta_c \right] \quad (1.19)$$

В дальнейшем исследуются кинетические явления при низких температурах, когда процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности являются наиболее активными. Но при низких температурах в процессах переноса принимают участие электроны с малыми значениями волнового вектора, поэтому зависимость V_α от волнового вектора можно пренебречь, если $\hbar\omega_e \gg k_0 T$. Последнее неравенство хорошо выполняется в области низких температур, когда размерно-квантованные уровни проявляются наиболее ярко. В рассматриваемых приближения время релаксации с учетом (1.17), (1.19) для случая δ -образной флуктуации¹ принимает вид:

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{m_e^* \gamma_0}{\hbar^3 R^2} \left[\left(\frac{\omega_e}{\Omega_e}\right) \left(n + \frac{1}{2}\right) + \left(m + \frac{1}{2}\right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega_e} \right]^2 \frac{(\hbar\omega_e)^2}{|k_x|} \quad (1.20)$$

Из (1.20) непосредственно следует, что с уменьшением размеров наноструктуры время релаксации существенно уменьшается ($\tau_\alpha \sim R^4$). Последнее обстоятельство позволяет экспериментально выделять рассматриваемый механизм рассеяния [1] от других конкурирующих механизмов рассеяния при исследовании явлений переноса.

С ростом напряженности магнитного поля время релаксации уменьшается, что связано с увеличением локализации зонных носителей. Поперечное электрическое поле прижимает электроны к поверхности исследуемой наноструктуры,

¹Заметим, что для случая гауссовой флуктуации поверхности при $\Lambda_0 k_x < 1$ нужно γ_0 заменить на $\Delta_0^2 \Lambda_0 \sqrt{\pi}$

поэтому вероятность рассеяния носителей на шероховатой поверхности увеличивается. Именно по этой причине время релаксации уменьшается, что, естественно, должно влиять на кинетические коэффициенты (электропроводность, термоэдс). Если $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}$ (оба вектора расположены в плоскости перпендикулярной оси квантовой проволоки), то

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2m_e\Omega_e^2\gamma_0}{\hbar R^2 |k_x|} \left[\left(\frac{\omega_e}{\Omega_e} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(m + \frac{1}{2} \right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar\Omega_e} \left(\frac{\omega_e}{\Omega_e} \right)^3 \right]^2 \quad (1.21)$$

Следовательно заметная зависимость τ_α от напряженности поперечного электрического поля проявляется при более больших значениях E чем в случае $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$. Заметим, что только процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности (как для одномерного, так и для квазидвумерного электронного газа) зависят от напряженности постоянного поперечного электрического поля. Согласно классической теории явлений переноса в конденсированных средах, использующей решение кинетического уравнения Больцмана, кинетические коэффициенты определяются транспортным временем релаксации, которое имеет вид [18]:

$$\frac{1}{\tau_\alpha^{tr}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\beta W_{\alpha\beta} (1 - \cos \theta) \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \quad (1.22)$$

θ — угол между волновыми векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' , характеризующие движение электронов до и после процессов рассеяния. Для случая рассеяния носителей на гауссовой флуктуации

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^{tr}} &= \frac{\Delta_0^2 \Lambda_0}{\hbar^3} |V_n|^2 \frac{m_e}{2} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos \theta) e^{-\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2} (1 - \cos \theta)} = \\ &= \frac{\pi m_e}{\hbar^3} (\Delta_0 \Lambda_0 V_n)^2 e^{-\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2}} \left[I_0 \left(\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2} \right) - I_1 \left(\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.23)$$

Заметим, что при $k_\perp^2 \Lambda_0^2 \ll 1$ (1.23) совпадает с временем релаксации (1.9).

Обратим внимание, что времена релаксации для размерно-ограниченных систем (квантовые ямы, нанопроволоки), определяемые рассеянием носителей на шероховатой поверхности, для δ -образной флуктуации в точности совпадают с транспортным временем релаксации. С ростом температуры и с увеличением размеров наноструктуры (ширины квантовой ямы, радиуса нанопроволоки) на кине-

тические явления в исследуемых квантовых системах начинают влиять процессы рассеяния носителей на колебаниях кристаллической решетки. В случае упругого рассеяния носителей на длинноволновых колебаниях, когда $\hbar\omega_q \ll 1$ ($\hbar\omega_q$ — энергия акустических фононов с волновым вектором \mathbf{q}) время релаксации определяется соотношением [19]:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^{ph}} = \frac{2\pi E_1^2 k_0 T}{\pi \rho v^2} \sum_{\beta} \int d\mathbf{r} |\Psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 |\Psi_{\beta}(\mathbf{r})|^2 \delta(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta}) \quad (1.24)$$

E_1 — константа деформационного потенциала для электронов, v — скорость звука в размерно-ограниченной системе плотность ρ .

Для параболической квантовой проволоки в поперечном магнитном поле время релаксации при рассеянии носителей в нижней размерно-квантованной зоне проводимости определяется соотношением:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^{ph}} = \frac{E_1^2 m_e^2 \omega_e k_0 T}{\pi \rho v^2 \hbar^4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{|k_x|} \quad (1.25)$$

Согласно (1.25) и (1.20), как показывают расчеты [20; 21], влиянием рассеяния носителей заряда на длинноволновых акустических колебаниях можно пренебречь, если

$$T \left[\frac{R \cdot 10^{-2}}{\gamma_0^{\frac{1}{3}}} \right] \ll 1 \quad (1.26)$$

При записи (1.26) учитывались параметры типичные для квантовых проволок $E_1 = 10\text{eV}$, $v = 1.5 \cdot 10^5\text{cm/s}$, $m_e = 0.06m_0$, $\rho = 5.4\text{g/cm}^3$. Следовательно при $T = 4^\circ\text{K}$ $\gamma_0^{\frac{1}{3}} \cong 12\text{\AA}$ можно пренебрегать взаимодействием электронов с колебаниями кристаллической решетки, если $R \ll 10^3\text{\AA}$.

Глава 2. Влияние рассеяния носителей на шероховатой поверхности на оптические свойства размерно-ограниченных систем

2.1 Межзонное и межподзонное поглощение света в квантовых системах с пониженной размерностью с учетом рассеяния на шероховатой поверхности

В наноструктурах зона проводимости (как и валентная зона) квантуется, поэтому возникают новые каналы поглощения (излучения) слабой электромагнитной волны в далекой инфракрасной области спектра, связанные с переходом электрона между размерно-квантованными состояниями зоны проводимости (рис.1). В работе [22] впервые наблюдалось такое поглощение света в квантовых ямах GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.7}As с толщинами 65 Å и 82 Å (переход I на рис. 1).

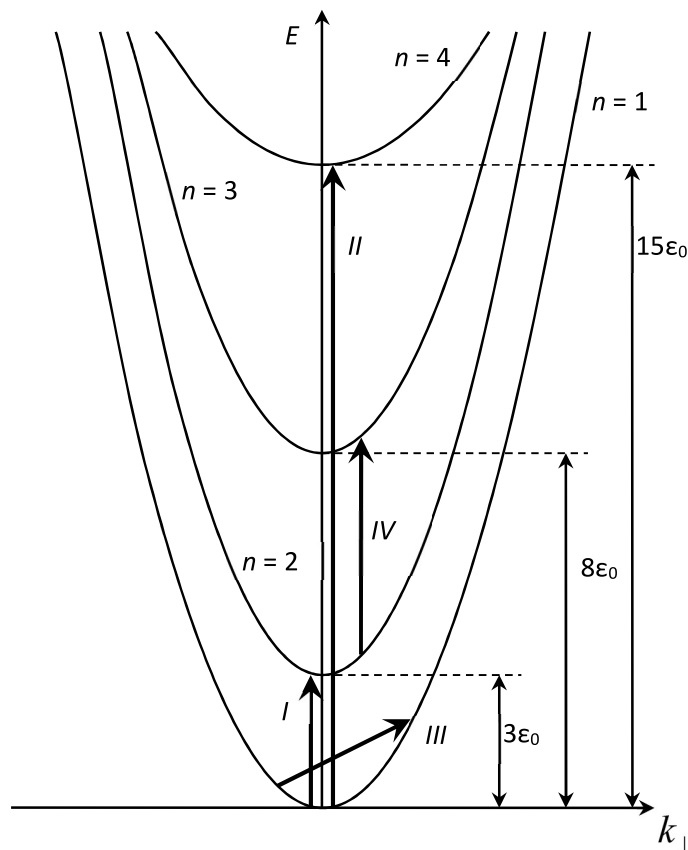


Рис. 1 Энергетическая диаграмма для размерно-квантованной зоны проводимости. Стрелками указаны возможные оптические переходы.

Как показали экспериментальные исследования частотная зависимость коэффициента поглощения света хорошо описывается лоренцевской кривой, и по-

луширина линии поглощения при комнатных температурах 10 meV , что может быть связано с взаимодействием электрона с фононами. В работах [23; 24] исследовалось поглощение света свободными носителями в широких ($d > 10^4\text{ \AA}$) квазидвумерных полупроводниковых структурах в нижайшем порядке теории возмущений по взаимодействию электронов с длинноволновыми акустическими колебаниями. В частности показано, что коэффициент поглощения света с ростом ширины квантовой системы уменьшается и с ростом температуры увеличивается. Однако в узких нелегированных размерно-ограниченных системах при низких температурах возможным и наиболее важным является рассеяние носителей на шероховатой поверхности. Этот механизм рассеяния определяет величину и температурную зависимость подвижности в квантовых ямах [1], в кремниевых инверсионных слоях [2]. В которых электронный газ остается вырожденным вплоть до $T < 100\text{ K}$. Влияние шероховатой поверхности на процессы фотолуминесценции в узких ($d \geq 50\text{ \AA}$) одиночных квантовых ямах GaAs/AlGaAs проводилось в [7] при $T = 4\text{ K}$. Теоретические исследования поглощения света свободными носителями с учетом взаимодействия электрона с шероховатой поверхностью проводились в [25]. Рассматривался как случай ТМ-поляризации поглощения (электромагнитная волна распространяется вдоль оси пространственного квантования) и случай поглощения ТЕ-поляризации (электромагнитная волна распространяется нормально к поверхности квантовой системы). В обоих случаях коэффициент поглощения света рассчитывался в нижайшем порядке по взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью. Численные расчеты для коэффициента поглощения света справедливы естественно для частот электромагнитной волны вдали от максимума поглощения (для ТМ-поляризованной волны) и при малых взаимодействиях электрона с поверхностью исследуемой квантовой системы. В диссертационной работе проводится расчет коэффициента поглощения слабой электромагнитной волны различной поляризации, позволяющий исследовать частотную зависимость поглощения света в широкой области частот и последовательно описать внутризонное поглощение и при неслабых взаимодействиях электрона с шероховатой поверхностью. В работах [26; 27] экспериментально, а в [28] теоретически исследовалось межзонное поглощение света в ступенчатых квантовых ямах InGaAs/AlGaAs. При высоких уровнях возбуждения заполняются как основная подзона, так и возбужденные состояния, что позволило наблюдать поглощение инфракрасного излучения, связанного с переходами электрона между

возбужденными состояниями (переход VI на рис. 1). При этом коэффициент поглощения достигает больших значений ($\sim 10^3 \text{cm}^{-1}$) при высоких температурах $T \sim 300^\circ \text{K}$. Однако в узких нелегированных размерно-ограниченных системах при низких температурах возможным и наиболее важным является рассеяние носителей на шероховатой поверхности. Этот механизм рассеяния, например, определяет величину и температурную зависимость подвижности в квантовых ямах [1] и в кремниевых инверсионных слоях [2]. Влияние поверхности на оптические характеристики в квантовых ямах GaAs/AlGaAs экспериментально исследовалось в [7; 29]. В частности было показано, что учет шероховатой поверхности приводит к уширению спектров фотолюминесценции.

Далее проводится исследование коэффициента поглощения света $K(\Omega)$ различной поляризации как для внутризонных переходов (переход II на рис. 1), так и для межзонных переходов (переходы I, II) с учетом взаимодействия электронов с шероховатой поверхностью. При этом коэффициент поглощения электромагнитной волны вычисляется без использования теории возмущений по взаимодействию носителей с шероховатой поверхностью, как это делалось в [25], что позволяет исследовать частотную зависимость $K(\Omega)$ в широкой области частот и сформулировать условия применимости теории возмущений. Время релаксации при рассеянии носителей на шероховатой поверхности не зависит от волнового вектора электрона и заметным образом уменьшается с ростом n и n_1 (см формулу в первой главе ???). Для не вырожденного электронного газа, если использовать соотношения (??? главы 1) и (??? главы 1), то коэффициент поглощения света, связанный с переходом электрона из нижней зоны проводимости ($n = 1$) в ближайшую размерно-квантованную зону проводимости ($n_1 = 1$) (переход I на рис.1), записывается следующим образом ($\beta_0 \hbar \Omega \gg 1$):

$$K(\Omega) = K_M \frac{1}{1 + \left(\frac{\tau_0}{17\hbar} \Delta_0\right)^2}; \quad (2.1)$$

$$K_M = \frac{2^{12} e^2 a^5 n_e}{\hbar c n_0 \pi^5 \gamma_0 3^3 \cdot 17}; \Delta_0 = \hbar \Omega - 3\varepsilon_0.$$

$n_e = N/L_x L_y$ – поверхностная плотность электронов. При записи (2.1) учитывалось, что в размерно-квантованной зоне, в которую происходит оптический переход носителя, электронов нет, поэтому $n_\beta \ll 1$. Последнее приближение вполне справедливо, если $3\varepsilon_0 \gg kT$, т.е. почти все электроны находятся на ни-

жайшей размерно-квантованной зоне проводимости ($n = 1$), и, следовательно, $\sum n_{k_{\perp}} \cong N$ (N – число электронов в исследуемой квантовой системе). Из (11) следует, что частотная зависимость коэффициента поглощения света описывается лоренцевой кривой с полушириной $\delta = 17 \cdot 2\hbar/\tau_0$. Величина коэффициента поглощения электромагнитной волны при рассматриваемом механизме рассеяния существенным образом определяется толщиной квантовой ямы ($K_M \sim a^5$) и не зависит от температуры. $K(\Omega)$ в максимуме при $n_e = 4 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$, $n_0 = 3.2$, принимает значение $K_M^{(\delta)} = 0,25 \cdot a_0^5/\gamma_0$ ($a_0, \gamma_0^{\frac{1}{4}}$ – измеряются в ангстремах), т.е. при \AA , \AA (именно такие значения хорошо описывают значения подвижности экспериментально наблюдаемые в КЯ GaAs/AlGaAs [22]), $K_M = 2 \cdot 10^4 \text{см}^{-1}$. Большие значения коэффициента поглощения света позволяют надеяться на практическое использование таких размерно-квантованных систем в качестве детекторов ИК-излучения в области низких температур. Полуширина линии поглощения для рассматриваемого прямого оптического перехода при рассматриваемых выше параметрах $\delta = 6.5 \cdot 10^6 (\gamma_0/a_0^6) \text{meV}$. Следовательно, при $a_0 = 60\text{\AA}$, $\gamma_0^{\frac{1}{4}} = 15\text{\AA}$, $\delta = 7\text{meV}$, что безусловно, находится в области экспериментального измерения.

Для ТЕ-поляризованного излучения, возможно поглощение света только в одной размерно-квантованной зоне проводимости (переход III на рис.1). В случае низких температур выражение для поглощения света можно записать (см. главу I выражение (???)):

$$K(\Omega) = \frac{4\pi e^2 n_e}{m c n_0 a \hbar \beta \Omega^2} \frac{\Gamma_0}{1 + \Gamma_0^2} \quad (2.2)$$

Как показывают численные расчеты соотношение (2.2) при больших δ_0 мало отличается от точного (??? главы 1). Например, при $\delta_0 > 5$ отличие менее 10% в широком интервале изменения Γ_0 . Заметим, что в нижайшем приближении по взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью ($\Gamma_0 \ll 1$), что соответствует обычной теории возмущений, тогда из (14) не трудно получить:

$$K(\Omega) = \frac{2^4 e^2 n_e \gamma_0 m}{\pi c n_0 a \hbar^3 \beta} \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar \Omega} \right)^3 \quad (2.3)$$

В рассматриваемом случае $K(\Omega) \sim \Omega^{-3}$ и при низких температурах ($T = 50^\circ K$) для $\gamma_0^{\frac{1}{4}} = 15\text{\AA}$, $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{см}^{-2}$, $a = 50\text{\AA}$, $K_0(\Omega) \cong 10 \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar \Omega} \right)^3 \text{см}^{-1}$.

При $\Gamma_0 \gg 1$, что соответствует сильному взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью, коэффициент внутризонного поглощения электромаг-

нитной волны определяется соотношением:

$$K(\Omega) = \frac{2^4 e^2 n_e a}{\pi^3 c n_0 \hbar} \frac{1}{\delta_0} \left(\frac{a^4}{\gamma_0} \right) \quad (2.4)$$

В рассматриваемом приближении сильной связи $a^4/\gamma_0 = 1$, $K(\Omega) \sim \Omega^{-1}$ и для $\delta_0 = 10$, $a = 50 \text{ \AA}$, $K(\Omega) \cong 120 \text{ cm}^{-1}$. Следовательно, в области низких частот для узких квантовых ям с большой флуктуацией поверхности теория возмущений при исследовании внутризонного поглощения света может оказаться несправедливой.

2.2 Влияние лазерного излучения на оптические свойства квантовых пленок

Исследования резонансных явлений в физике твердого тела являются довольно привлекательными, так как в этом случае лазерное излучение приводит к заметному влиянию на кинетические явления даже при небольших интенсивностях электромагнитной волны. Примером может служить влияние инфракрасного (ИК) лазерного излучения частоты ω на коэффициент межзонного магнетопоглощения слабого света, когда ω равна циклотронной частоте ω_c (магнитоинфракрасный резонанс - МИКР). В этом случае резонансное ИК-излучение оказывается причиной нестационарности электронных состояний и может полностью определять форму пиков магнетопоглощения слабой электромагнитной волны при небольших интенсивностях лазерного излучения. Наиболее ярко резонансные эффекты в кинетических коэффициентах проявляются в размерно-квантованных системах (параболические квантовые ямы), когда частота ИК лазерного излучения равна частоте размерного квантования (размерно-инфракрасный резонанс - РИР). В частности, экспериментальное обнаружение влияния РИР на межзонное поглощение слабого света позволит не только обосновать используемые модели, но и говорить о совершенстве этих размерно-квантованных систем. В настоящей работе исследуется влияние постоянного электрического поля на межзонное поглощение слабой электромагнитной волны в режиме МИКР и РИР. Именно в постоянном электрическом поле, во-первых, наиболее отчетливо проявляются эффекты влияния на коэффициент поглощения света резонансного лазерного излучения и,

во-вторых, возникают дополнительные особенности в высокочастотной области спектра поглощаемой электромагнитной волны.

Если магнитное поле $\mathbf{H}||OZ$, электрическое поле направлено вдоль \mathbf{H} , то гамильтониан для электрона в калибровке Ландау $A(-Hy, 0, 0)$ в поле лазерного излучения примет вид:

$$\hat{H}_c = \frac{1}{2m_c} \hat{P}^2 + \frac{e}{m_c c} (\hat{P}\xi) \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} (\hat{b} + \hat{b}^+) + \frac{e^2}{2m_c c^2} \left(\frac{4\pi c^2}{V} \right) (\hat{b} + \hat{b}^+)^2 + \hbar\omega \hat{b}^+ \hat{b} + eEz \equiv \hat{H}_c^0 + eEz \quad (2.5)$$

где $\hat{P} = \hat{p} + \frac{e}{c} \hat{A}$; \hat{b}^+ (\hat{b}) – операторы рождения (уничтожения) для интенсивного лазерного излучения частоты ω , поляризации ξ ; V — объем основной области кристалла; m_c — эффективная масса электрона.

Коэффициент межзонного поглощения слабой электромагнитной волны частоты Ω и поляризации ξ_0 согласно формуле Кубо [30] можно привести к виду [31]:

$$K(\Omega) = \frac{4\pi e^2}{V n_0 c \hbar \Omega} \left| \frac{p_{cv} \xi_0}{m_0} \right|^2 \times \sum_{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left(i\Omega t - \frac{ie^2 E^2 t^3}{6\hbar\mu} + \frac{ieEk_z t^2}{2\mu} \right) \times \left\{ \langle \beta^c | \exp \left(\frac{it}{\hbar} \hat{H}_v^0 \right) \exp \left(-\frac{it}{\hbar} \hat{H}_c^0 \right) | \beta^c \rangle \right\}_f \quad (2.6)$$

где $|\beta^c\rangle$ — волновые функции для электронов в зоне проводимости в отсутствии электрического поля; β — набор квантовых чисел, описывающих состояние заряженной частицы; p_{cv} — матричный элемент оператора импульса на блоховских функциях, \hat{H}_i^0 — гамильтониан для электронов в магнитном поле в i -ой зоне ($i = c, v$); $\{\}_f$ — описывает усреднение по системе свободного фотонного поля [32; 33].

Далее исследуем случай, когда электрическое поле E_0 линейно-поляризованного лазерного излучения перпендикулярно H , т.е. лазерное излучение распространяется вдоль H . Именно в такой поляризации интенсивная электромагнитная волна смешивает ближайшие уровни Ландау. Дальнейшие рас-

четы, для простоты, проведем в резонансном приближении $\omega_c = eH/(m_c c) = \omega$ (магнитоинфракрасный резонанс МИКР) и поэтому не учитываем взаимодействие дырок с лазерным излучением ($\omega_v = eH/(m_v c) \neq \omega$, $m_v \gg m_c$). В рассматриваемом приближении третьим слагаемым в (2.5), описывающим двухфотонные процессы, пренебрегаем. В результате, проводя расчет методом использованным в [34; 35], нетрудно получить:

$$K(\Omega) = \frac{2e^2}{n_0 c \hbar R^2} \left| \frac{p_{cv} \xi_0}{m_0} \right|^2 \sqrt{\frac{2\mu}{\pi \hbar \omega}} \frac{1}{\gamma^{\frac{1}{4}}} \times \\ \times \sum_n \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \cos \left(a\tau^3 - \Delta_n \tau + \frac{\pi}{4} \right) \exp \left(-\frac{\tau^2}{2} \right) L_n(\tau^2) \quad (2.7)$$

где

$$\Delta_n = \frac{\hbar \Omega - E_g - \hbar \omega^* (n + \frac{1}{2})}{\hbar \omega \sqrt{\gamma}}; \quad a = \frac{e^2 E^2}{24 \mu \omega^3 \hbar \gamma^{\frac{3}{2}}}; \quad \gamma = \frac{e^2 E_0^2}{8 \mu \hbar \omega^3};$$

$\mu^{-1} = m_c^{-1} + m_v^{-1}$; $\omega^* = \omega_c + \omega_v$; $L_n(z)$ — полиномы Лагерра; E_g — ширина запрещенной зоны; n — номер уровня Ландау.

Как непосредственно следует из (2.7), в поле резонансного ИК лазерного излучения ($\omega_c = \omega$) возникает затухание гауссовского типа $\exp(-\tau^2/2)$, т.е. лазерное излучение приводит к нестационарности электронных состояний. При записи (2.7) пренебрегалось влиянием электрон-фононного взаимодействия на форму линии магнетопоглощения. Как показали детальные исследования [36] это вполне оправдано для реальных полупроводниковых материалов даже при небольших интенсивностях резонансного ИК лазерного излучения.

На рис. 1 представлены частотные зависимости линии магнетопоглощения для $n = 0$, т.е. для оптических переходов между нижайшими уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости при различных значениях постоянного электрического поля. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $a = 0$, $a = 0.4$, $a = 0.8$.

Следовательно, с ростом напряженности электрического поля величина первого пика магнетопоглощения уменьшается, полуширина увеличивается и в высокочастотной области возникают осцилляции коэффициента поглощения света. При переходе электрона на первый уровень Ландау (в формуле (3) $n = 1$)

частотная зависимость второго пика магнетопоглощения описывается двумя пиками, причем величина длинноволнового пика меньше величины пика в высокочастотной области спектра (рис. 2, кривая 1 получена при $a = 0$). С ростом напряженности однородного электрического поля величина коротковолнового пика уменьшается и в высокочастотной области возникают характерные осцилляции коэффициента поглощения света (кривые 2, 3 на рис. 2 получены при $a = 0.4$, $a = 0.8$ соответственно).

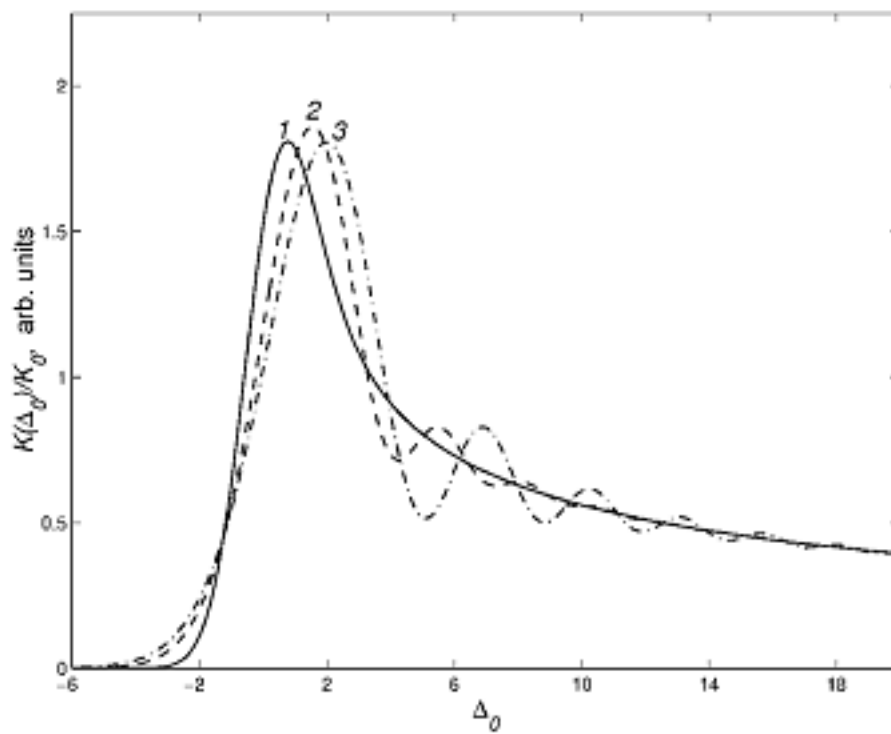


Рис. 1 Частотная зависимость первого пика магнетопоглощения в режиме магнитоинфракрасного резонанса. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $a = 0$; $a = 0.4$; $a = 0.8$.

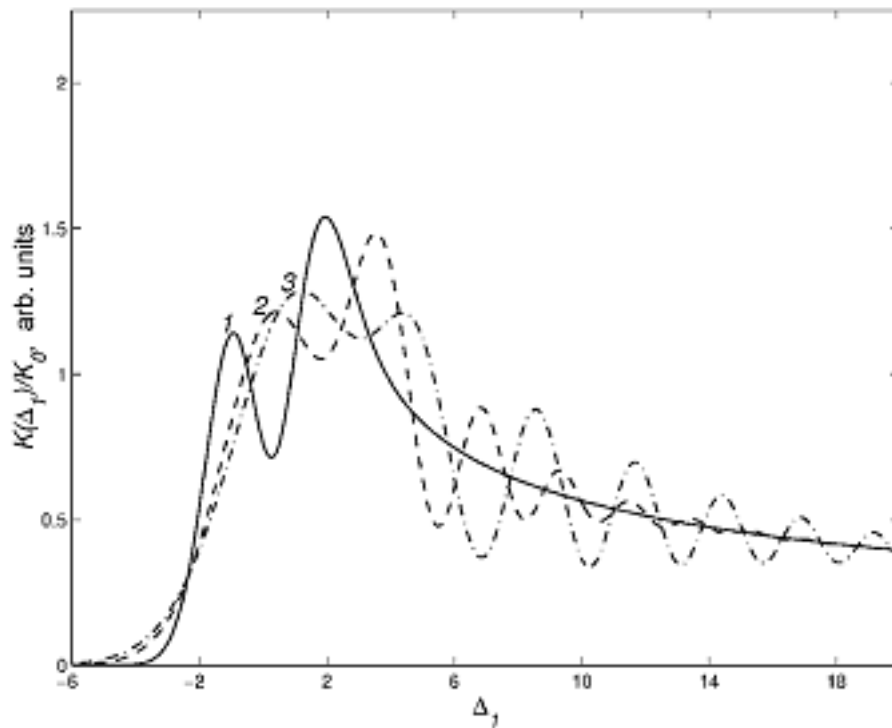


Рис. 2 Частотная зависимость второго пика магнето-поглощения в режиме магнитоинфракрасного резонанса. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $a = 0$; $a = 0.4$; $a = 0.8$.

Рассмотрим межзонное поглощение слабой электромагнитной волны в параболических квантовых ямах, в которых благодаря размерному квантованию возникают эквидистантные зоны проводимости и валентные зоны. Если электриче-

ское поле линейно-поляризованного излучения направлено вдоль оси пространственного квантования, то инфракрасное лазерное излучение смешивает ближайшие эквидистантные зоны. Вычислим коэффициент межзонного поглощения слабого света, когда частота лазерного излучения ω равна частоте размерного квантования ω_c в зоне проводимости (размерно-инфракрасный резонанс – РИР), а напряженность E постоянного электрического поля направлена параллельно поверхности параболической квантовой ямы (ПКЯ). Коэффициент поглощения $K(\Omega)$ вычисляется так же, как это было сделано выше и с учетом тех же приближений принимает следующий вид:

$$K(\Omega) = K_0 \sum_n V_n^2 \times \left\{ \frac{\pi}{2} + \int_0^\infty dt \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) L_n(x^2) \frac{\sin[x(\Delta_n - \delta x^2)]}{x} \right\} \quad (2.8)$$

где

$$\Delta_n = \frac{\hbar\Omega - E_g - \hbar\omega^* (n + \frac{1}{2})}{\hbar\sqrt{\gamma}}; \quad \omega^* = \omega_c + \omega_v;$$

$\hbar\omega_v$ — энергия размерного квантования в валентной зоне. В отсутствии постоянного электрического поля ($E = 0$) (2.8) переходит в выражение для межзонного поглощения света в режиме РИР, полученного в [35]. V_n — матричный элемент волновых функций электрона в зоне проводимости и в валентной зоне для ПКЯ [35]. В частном случае

$$V_0 = (\lambda_c \lambda_v)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2}{\lambda_c + \lambda_v}}; \quad V_1 = 2\sqrt{2} \frac{(\lambda_c \lambda_v)^{\frac{3}{4}}}{(\lambda_c + \lambda_v)^{\frac{3}{2}}}; \quad \lambda_i = \frac{m_i \omega^i}{\hbar} (i = c, v).$$

Для типичных параметров ПКЯ GaAs-AlGaAs $\lambda_c/\lambda_v = 0.47$ ($m_c = 0.06m_0$, $m_v = 0.4m_0$). На рис. 3 приведена частотная зависимость коэффициента межзонного поглощения света (в относительных единицах) при переходе электрона из нулевого (первого $n = 1$) размерно-квантованного состояния валентной зоны на нулевое $n = 0$ (первое $n = 1$) размерно-квантованное состояние зоны проводимости. Кривая 1 описывает частотную зависимость коэффициента поглощения в отсутствии постоянного электрического поля [35]. Кривая 2 получена при $a = 0.4$, кривая 3 при $a = 0.8$. Как непосредственно следует из рис. 3. постоян-

ное продольное электрическое поле существенным образом влияет на межзонный коэффициент поглощения света. При этом в электрическом поле возможно заметное поглощение в длинноволновой области спектра, а в высокочастотной области поглощение света определяется характерной осцилляционной зависимостью от частоты. С ростом напряженности постоянного электрического поля осцилляции становятся наиболее отчетливыми.

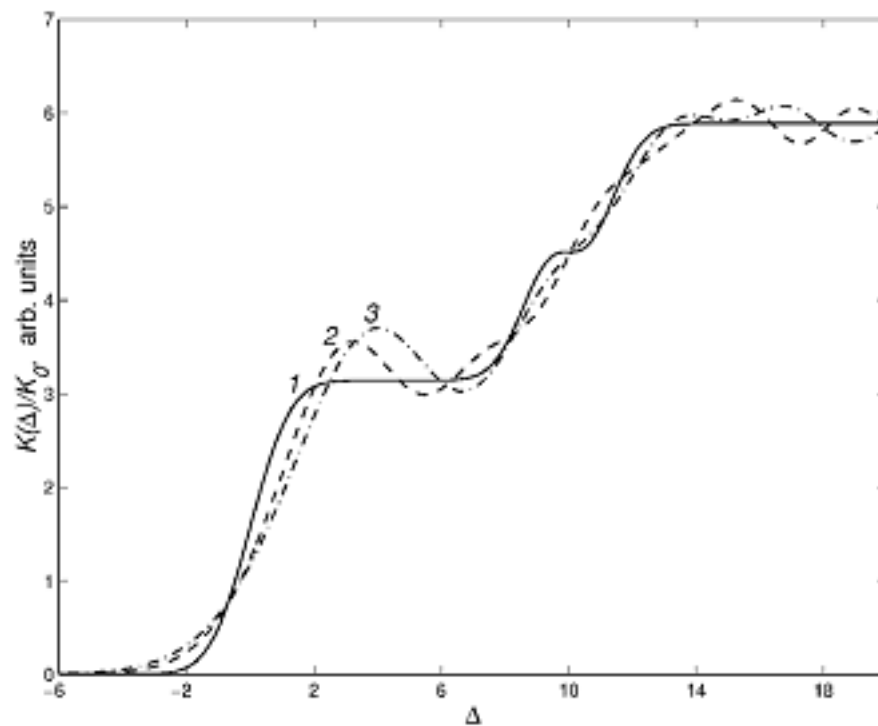


Рис. 3. Частотная зависимость межзонного поглощения света в режиме размерноинфракрасного резонанса. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $a = 0$; $a = 0.4$; $a = 0.8$.

2.3 Оптические свойства квантовых проволок в присутствии резонансного лазерного излучения

Рассмотрим квантовую проволоку в однородном магнитном поле \mathbf{B} , направленном перпендикулярно оси исследуемой наноструктуры. Энергетический спектр электрона в параболической нанопроволоке известен [37]:

$$E_\alpha = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \hbar\Omega_e \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_e \left(m + \frac{1}{2}\right)$$

$$m_e^* = m_e \left(\frac{\Omega_e}{\omega_e}\right)^2, \quad \Omega_e = [\omega_e^2 + \omega^2]^{1/2}, \quad \omega = \frac{eB}{m_e c}$$

$\hbar\omega_e$ – энергия размерного квантования электрона массы m_e в зоне проводимости, ω – циклотронная частота. Аналогично можно записать для электрона в валентной зоне.

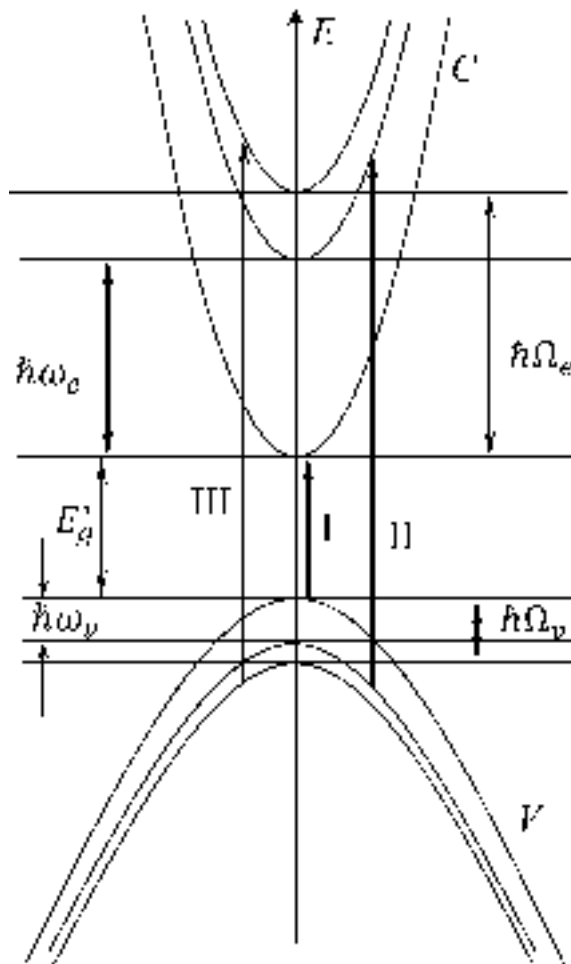


Рис. 1. Схема энергетических зон полупроводниковой квантовой проволоки в поперечном магнитном поле и оптические переходы.

Будем исследовать оптические свойства полупроводниковых квантовых проволок (КП), схема энергетических зон которых изображена на рис. 1. E_g^* – ширина запрещенной зоны КП в магнитном поле, ω_v, Ω_v – соответственно частота размерного квантования и гибридная частота носителей в валентной зоне.

Далее вычислим коэффициент межзонного поглощения слабой электромагнитной волны в поле лазерного излучения, частота которого ω_L равна ω_e (размерно-инфракрасный резонанс) или Ω_e (магнитно-инфракрасный резонанс). Так как для типичных полупроводниковых наноструктур эффективная масса электронов в зоне проводимости значительно меньше массы дырок ($m_e \ll m_v$), то взаимодействием интенсивного ИК излучения с электронами в валентной зоне в дальнейшем пренебрегаем ($\omega_e \gg \omega_v$).

Гамильтониан в представлении вторичного квантования для электронов в зоне проводимости в состоянии α в поле одномодового лазерного излучения по-

ляризацией ξ записывается в следующем виде:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \hbar \omega_L b^{\dagger} b + \left[\frac{2\pi \hbar e^2}{V \omega_L} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\alpha \alpha_1} \left| \frac{\mathbf{P}_{\alpha \alpha_1} \xi}{m_e} \right|^2 a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha_1} (b^{\dagger} + b) \quad (2.9)$$

Здесь a_{α}^{\dagger} (a_{α}), b^{\dagger} (b) – операторы рождения (уничтожения) электронов в состоянии α и фотонов.

Расчет матричных элементов оператора импульса $\mathbf{P}_{\alpha \alpha_1}$ на волновых функциях квантовой параболической проволоки в продольном магнитном поле [37] не представляет труда. В результате:

$$\begin{aligned} |\mathbf{P}_{\alpha \beta}^X|^2 &= \frac{\delta^2}{(1 + \delta^2)^{1/2}} |P_{\alpha \beta}^Y|^2, \delta = \left(\frac{\omega}{\omega_e} \right), \\ |\mathbf{P}_{\alpha \beta}^Y|^2 &= \frac{\hbar \omega_e (1 + \delta^2)^{1/2} m_e}{2} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{m, m_1} \{ n \delta_{n, n_1+1} + (n + 1) \delta_{n, n_1-1} \}, \\ |\mathbf{P}_{\alpha \beta}^Z|^2 &= \frac{\hbar \omega_e m_e}{2} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{n, n_1} \{ m \delta_{m, m_1+1} + (m + 1) \delta_{m, m_1-1} \}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Из выражения (2.10) следует, что линейно X-поляризованная волна лазерного излучения (электромагнитная волна распространяется перпендикулярно оси нанопроволоки) в отсутствие магнитного поля ($\delta = 0$) не взаимодействует с зонными носителями. Согласно (2.10) линейно Y-поляризованная волна (лазерное излучение распространяется вдоль оси квантовой проволоки и) смешивает гибридные состояния ($\hbar \omega_L = \hbar \Omega_e$), а Z-поляризованная волна (напряженность электрического поля лазерного излучения $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$) смешивает только размерно-квантованные состояния ($\hbar \omega_L = \hbar \omega_e$).

Расчет коэффициента межзонного поглощения слабой электромагнитной волны частоты Ω в поле резонансного лазерного излучения для квантовых проволок производился с использованием формулы Кубо [30] и методики, развитой в [34]. В результате в резонансном случае $\omega_L = \Omega_e$ для стабильно генерирующего

ИК лазерного излучения Y-поляризации получаем:

$$K(\Omega) = K_0 \sum_{nm} |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-at^2} e^{-\frac{\gamma_0 |t|}{|k_x|}} L_n(2at^2) \times \\ \times \exp \left\{ \frac{it}{\hbar} \left[\hbar\Omega - E_g^* - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu^*} - m(\hbar\omega_e + \hbar\omega_v) - n(\hbar\Omega_e + \hbar\Omega_v) \right] \right\} \quad (2.11)$$

$$K_0 = \frac{\hbar\Omega e^2}{4\mu^* E_g^* n_0 c s}, a = \frac{e^2 E^2}{8m_e \hbar\Omega_e}, \frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_v^*}, m_v^* = m_v \left(\frac{\Omega_v}{\omega_v} \right)^2$$

$\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle$ – матричный элемент сглаженных волновых функций электрона в зоне проводимости и в валентной зоне, $L_n(z)$ – полиномы Лаггера, E – напряженность электрического поля лазерного излучения, s – сечение квантовой проволоки.

При записи (2.11) учитывалось взаимодействие носителей с шероховатой поверхностью или с длинноволновыми акустическими фононами в приближении времени релаксации [38]. $\gamma_0/|k_x|$ – описывает вероятность рассеяния электронов в единицу времени или на шероховатой поверхности [39] или упругое рассеяние на акустических фононах [19].

Запишем коэффициент поглощения света, связанный с переходом электрона из нижайшей валентной зоны ($m = n = 0$) в нижайшую размерно-квантованную зону проводимости ($n = m = 0$). (Оптический переход I на рис.1) Интегрирование по t в (2.11) проводится точно, в результате, после замены

$$\frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu^*} = \hbar\omega_f x^2, \left(\omega_f^3 = \frac{\hbar\gamma_0^2}{2\mu^*} \right)$$

соотношение (2.11) записывается в виде ($L_0(z) = 1$):

$$K(\Omega) = K_0 \sum_{nm} |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 2 \left[\frac{2\pi\mu^*\omega_f}{\hbar a} \right]^{\frac{1}{2}} Re \int_0^{\infty} dx e^{f^2(x)} [1 - \Phi(f(x))] \quad (2.12)$$

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\tau^2} d\tau,$$

$$f(x) = \left(\frac{\omega_f^2}{4a} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{x} \left[1 - ix \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_f} - x^2 \right) \right], \Delta = \hbar\Omega - E_g^*$$

В отсутствии лазерного излучения $a = 0$ из (2.12) при $\omega_f^2/4a \gg 1$ можно получить выражение для коэффициента межзонного поглощения света в нанопроволоках в однородном магнитном поле [40]. Если же $\omega_f^2/4a \ll 1$, то форма линии межзонного поглощения света (высота, полуширина) полностью определяется интенсивностью лазерного излучения, и коэффициент поглощения света согласно (2.12) записывается следующим образом

$$K(\Omega) = K_0 |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 2 \left[\frac{2\pi\mu^*}{\hbar^2 a} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta^2}{4a\hbar^2}} \int_0^\infty dx e^{-\frac{x^4}{4a\hbar^2} + \frac{\Delta x^2}{2a\hbar^2}} \quad (2.13)$$

После интегрирования по x выражение (2.13) примет вид:

$$K(\Omega) = K_0 |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 \left[\frac{\pi\mu^* |\Delta|}{\hbar^2 a} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{cases} e^{-z} K_{1/4}(z), & \Delta \leq 0 \\ \frac{\pi}{\sqrt{2}} e^{-z} \{I_{1/4}(z) + I_{-1/4}(z)\}, & \Delta > 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

$K_v(z)$ – функция Макдональда, $I_v(z)$ – модифицированная функция Бесселя, $z = \Delta^2/8a\hbar^2$

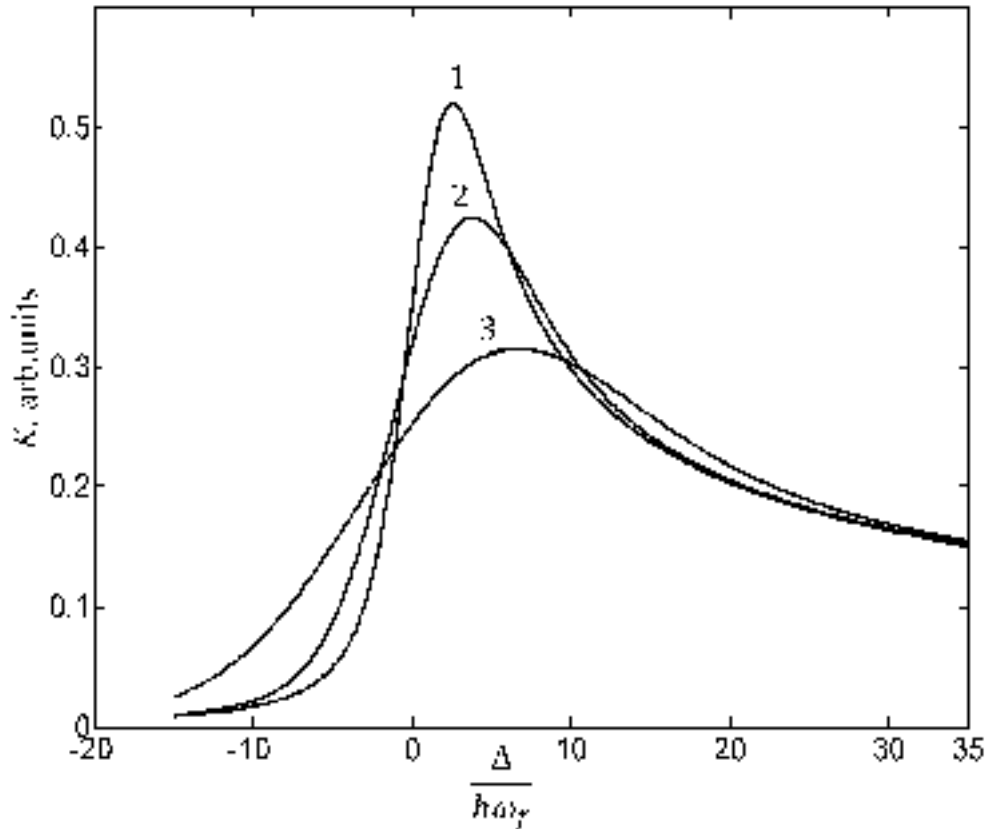


Рис. 2. Зависимость первого пика межзонного поглощения света (в относительных единицах) от $\Delta/\hbar\omega_f$. Кривые 1, 2, 3 вычислены $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ соответственно.

На рис. 2 представлена частотная зависимость коэффициента поглощения света (в относительных единицах) при различных значениях интенсивности лазерного излучения. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно при $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ ($\xi = \omega_f^2/4a$). Как следует из рис. 2 с ростом интенсивности ИК излучения (ξ уменьшается при фиксированном значении ω_f) форма линии поглощения изменяется: величина максимума поглощения уменьшается, а полуширина увеличивается. Заметим, что уже при $\xi \leq 1$ коэффициент межзонного поглощения света полностью определяется интенсивностью ИК лазерного излучения.

Рассмотрим межзонное поглощение света в области второго пика магнетопоглощения (оптический переход II на рис.1) при $\omega_L = \Omega_e$ (магнитоинфракрасный резонанс). В этом случае коэффициент поглощения света согласно (3) при $m = 0, n = 1$ ($L_1(2at^2) = 1 - 2at^2$) принимает следующий вид:

$$K(\Omega) = K_0 |\langle \tilde{\alpha}_c | \tilde{\alpha}_v \rangle|^2 4 \left[\frac{2\mu^* \omega_f}{\hbar a} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \operatorname{Re} \int_0^\infty dx f(x) \left\{ -\sqrt{\pi} f(x) e^{f^2(x)} [1 - \Phi(f(x))] + 1 \right\} \quad (2.15)$$

При $\xi = \omega_f^2/4a \gg 1$ (лазерное излучение отсутствует) из (2.15) следует выражение для коэффициента поглощения слабой электромагнитной волны, полученное в [40]. При $\xi < 1$ (форма линии поглощения определяется интенсивностью резонансного ИК излучения) получено:

$$K(\Omega) = K_0 |\langle \tilde{\alpha}_c | \tilde{\alpha}_v \rangle|^2 \pi z \left[\frac{2^* \pi}{\hbar} \left(\frac{8z}{a} \right)^{1/2} \right]^{1/2} e^{-z} \times \\ \times \left\{ -[I_{3/4}(z) + \operatorname{sign} \Delta I_{-3/4}(z)] + \left(1 + \frac{1}{4z} \right) [(I_{-1/4}(z) + \operatorname{sign} \Delta I_{1/4}(z))] \right\} \quad (2.16)$$

$$\operatorname{sign} \Delta = \begin{cases} 1, & \Delta > 0 \\ -1, & \Delta < 0 \end{cases}$$

$\langle \tilde{\alpha}_c | \tilde{\alpha}_v \rangle$ – матричный элемент сглаженных волновых функций носителей в возбужденном состоянии валентной зоны ($m = 0, n = 1$) и в возбужденном состоянии размерно-квантованной зоны проводимости.

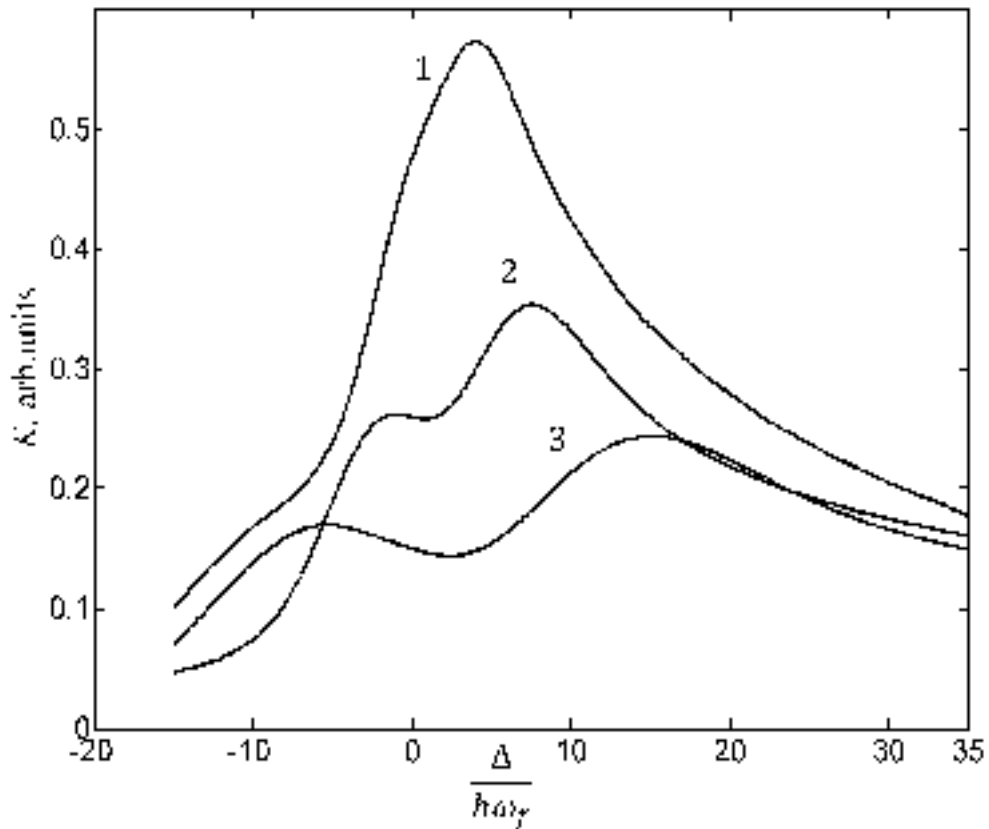


Рис. 3. Зависимость второго пика магнетопоглощения (в относительных единицах) от $\Delta/\hbar\omega_f$ при различных значениях интенсивности резонансного ($\omega_L = \Omega_e$) лазерного излучения. Кривые 1, 2, 3 вычислены $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ соответственно.

На рис.3 приведена частотная зависимость второго пика магнетопоглощения при различных значениях ξ . Кривые 1, 2, 3 вычислены при $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ соответственно. Как следует из рис.3 с ростом напряженности E электрического поля пик магнетопоглощения (1) деформируется и при $\xi \ll 1$ расщепляется на два пика. При этом расстояние между ними и их полуширина увеличивается. Расщепление второго пика поглощения связано с тем, что при $\omega_L = \Omega_e$ возбужденное гибридное состояние ($n = 1$) двукратно вырождено, и при взаимодействии с ИК лазерным излучением оно расщепляется. Эта ситуация близка к двойному оптическому резонансу (ДОР) на межзонных переходах в объемных материалах [41].

Заметим, что n -пик магнетопоглощения расщепляется на n пиков. Если рассматривать случай z -поляризованной электромагнитной волны лазерного излучения, когда $\omega_L = \omega_e$ (размерно-инфракрасный резонанс), то частотная зависимость коэффициента межзонного поглощения света (оптический переход III на рис.1)

качественно не отличается от частотной зависимости, приведенной на рис.2 и на рис.3.

Пусть при некотором значении напряженности электрического поля E_c интенсивной электромагнитной волны вклад лазерного излучения в полуширину магнетоосцилляций примерно такой же как вклад, определяемый рассеянием носителей на шероховатой поверхности ($\xi = 1$). Естественно при $E_c < E$ форма линии межзонного поглощения слабой электромагнитной волны полностью определяется внешней лазерной подсветкой. Для типичных параметров полупроводниковой нанопроволоки $m_e = 0.06m_0$, $m_v = 0.4m_0$, $\sqrt[3]{\gamma_0} = 20 \text{ \AA}$ (такое значение $\sqrt[3]{\gamma_0}$ хорошо описывает большие значения подвижности $\mu \propto 10^4 \frac{\text{cm}^2}{\text{V}\cdot\text{s}}$, характерные для квантовых проволок) при $R_0 = 10^3 \text{ \AA}$, $E_c = 7 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$ для лазера H_2O ($\hbar\omega_L = 0.044 \text{ eV}$). Следовательно, резонансное лазерное излучение заметно влияет на частотную зависимость межзонного поглощения света при небольших, вполне экспериментально доступных значениях интенсивности ИК- лазерного излучения.

Глава 3. Влияние шероховатой поверхности на кинетические эффекты в низкоразмерных системах

3.1 Подвижность носителей в размерно-квантованных системах с учетом рассеяния на поверхности и фононах

Квантовые системы с пониженной размерностью (квантовые ямы (КЯ), сверхрешетки, квантовые проволоки (КП)) благодаря их уникальным свойствам, связанным с возникновением размерного квантования, продолжают привлекать внимание теоретиков и экспериментаторов. При этом кинетические явления в размерно-квантованных системах принципиальным образом отличаются от объемных материалов. Так, например, в объемных материалах сопротивление растет с увеличением температуры T , а в КП малого диаметра d ($d \sim 70 \text{ \AA}$) убывает, оставаясь практически постоянным в области низких T [42—46]. Для КЯ GaAs/AlAs температурная зависимость подвижности $\mu(T)$ может носить не монотонный характер: в области низких температур ($T > 10 \text{ K}$) $\mu(T)$ увеличивается с ростом T , а при $T > 100 \text{ K}$ начинает уменьшаться [1; 42]. Следовательно, размеры квантовых систем принципиальным образом могут влиять на величину и температурную зависимость электропроводности.

В данной диссертационной работе делается попытка объяснить особенности температурной зависимости электропроводности, экспериментально наблюдаемые в нелегированных наноструктурах, учитывая процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности и на фононах. Именно из сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными по температурной зависимости электропроводности можно провести оценки параметров флуктуирующей поверхности. Учет двух механизмов рассеяния позволил сформулировать условия на ширину размерно-ограниченной системы и температуру, когда рассеяние электронов на фононах преобладает над поверхностным рассеянием.

Расчет электропроводности проводится согласно формуле Кубо [30] для статической электропроводности, которая в представлении вторичного квантова-

ния имеет вид¹:

$$\sigma_{ij} = \frac{\beta_0 e^2}{2Vm^2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha_1, \beta_1} \hat{p}_{\alpha\beta}^{(i)} \hat{p}_{\alpha_1\beta_1}^{(j)} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle a_{\alpha}^{+}(t) a_{\beta}(t) a_{\alpha_1}^{+} a_{\beta_1} \rangle \quad (3.1)$$

$\hat{p}_{\alpha\beta}^{(i)}$ – матричный элемент оператора импульса на сглаженных волновых функциях зонного электрона, $\beta_0 = 1/k_0T$, α – квантовые числа, описывающие состояние заряженной частицы с эффективной массой m , V – объем основной области системы,

$$a_{\alpha}^{+}(t) = \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) a_{\alpha}^{+} \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right),$$

$\langle \dots \rangle$ – описывает усреднение по системе равновесных электронов и по реализации случайного процесса

Гамильтониан для электрона, взаимодействующего с шероховатой поверхностью размерно-ограниченной системы в представлении вторичного квантования записывается в виде:

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+} a_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | \hat{V} | \beta \rangle a_{\alpha}^{+} a_{\beta}, \quad (3.2)$$

\hat{V} – оператор взаимодействия носителя с энергией ε_{α} с поверхностью системы, $|\alpha\rangle$ – волновая функция зонного электрона.

Если учесть временную зависимость операторов рождения уничтожения (...) в (3.1), то после усреднения с матрицей плотности удовлетворяющей уравнению нейтральности с гамильтонианом \hat{H}_0 не трудно получить:

$$\sigma_{ij} = \frac{\beta_0 e^2}{2Vm_e^2} \sum_{\alpha\alpha_1\beta\beta_1} \hat{P}_{\alpha\alpha_1}^{(i)} \hat{P}_{\beta\beta_1}^{(j)} n_{\beta_1} (1 - n_{\beta}) \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \left\langle \beta_1 \left| e^{\frac{it}{\hbar}(H_0+V)} \right| \alpha \right\rangle \left\langle \alpha_1 \left| e^{\frac{it}{\hbar}(H_0+V)} \right| \beta \right\rangle \right\}_V \quad (3.3)$$

$\{\dots\}_V$ — описывает усреднение по реализации случайного процесса $\Delta(x, y)$, n_{β} — равновесная функция распределения Ферми-Дирака для электронов с энергией E_{α} .

¹Полученное выражение для электропроводности справедливо для любых квантовых систем в произвольном магнитном поле. Единственное ограничение – это малость электрического поля, т.е. область применимости закона Ома.

В дальнейшем проведем усреднение для матричных элементов в (3.3) независимо. Такое приближение соответствует приближению «времени релаксации» [х.] и конечные результаты для кинетических коэффициентов будут вероятно отличаться от тех, которые получаются при использовании решения классического уравнения Больцмана. Далее этот вопрос будет детально обсуждаться ниже.

Рассмотрим функцию

$$y_{\beta_1\alpha} = e^{-\frac{it}{\hbar}E_{\beta_1}} \left\{ \left\langle \beta_1 \left| e^{\frac{it}{\hbar}(H_0+V)} \right| \alpha \right\rangle \right\}_V = \\ = \left\{ \left\langle \beta_1 \left| T \exp_{[-]} \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty V(\tau) d\tau \right] \right| \alpha \right\rangle \right\}_V \quad (3.4)$$

Здесь обозначено

$$T \exp_{[-]} \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty V(\tau) d\tau \right] = e^{-\frac{it}{\hbar}H_0} e^{\frac{it}{\hbar}(H_0+V)}, \quad V(\tau) = e^{-\frac{i\tau}{\hbar}H_0} V e^{\frac{i\tau}{\hbar}(H_0)}$$

Усреднение по реализации случайного процесса в (3.4) проведем с использованием кумулянтного усреднения [???]. В результате до второй кумулянты (3.4) принимает следующий вид:

$$y_{\beta_1\alpha}(t) = \left\langle \beta_1 \left| \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \{ V(\tau_1) V(\tau) \}_V \right\} \right| \alpha \right\rangle \quad (3.5)$$

Не трудно показать, что

$$\dot{y}_{\beta_1\alpha}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{\gamma} \langle \beta_1 | \{ V(\tau_1) V(t) \}_V | \gamma \rangle y_{\gamma\alpha}(t) \quad (3.6)$$

Дальнейшие расчеты проводятся в диагональном приближении, так как процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности являются упругими и происходят в основном в одной размерно-квантованной зоне проводимости. Решение дифференциального уравнения (3.6) в диагональном приближении $\gamma = \beta_1$ с начальным условием $y_{\beta_1\alpha}(0) = \delta_{\beta_1\alpha}$ записывается следующим образом:

$$y_{\beta_1\alpha}(t) = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \langle \beta_1 | \{ V(\tau) V(\tau_1) \}_V | \beta_1 \rangle \right\} \delta_{\beta_1\alpha} \quad (3.7)$$

Не трудно показать (см. §2 гл. 1), что

$$\langle \beta_1 | \{ V(\tau) V(\tau_1) \}_V | \beta_1 \rangle = \sum_{\gamma} W_{\beta_1 \gamma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\tau_1 - \tau) (\varepsilon_{\beta_1} - \varepsilon_{\gamma}) \right] \quad (3.8)$$

Если подставить (3.7) в (3.6) и провести интегрирование по τ, τ_1 , в результате получаем

$$y_{\beta_1 \alpha}(t) = \exp \{ g_{\alpha}(t) \} \delta_{\beta_1 \alpha} \quad (3.9)$$

$$g_{\alpha}(t) = -2 \sum_{\gamma} W_{\alpha \gamma} \frac{\sin^2 \frac{t}{\hbar} (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})}{(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})^2} + \\ + i \sum_{\gamma} \frac{W_{\alpha \gamma}}{(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})} \left\{ \frac{t}{\hbar} - \frac{1}{(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})} \sin \frac{t}{\hbar} (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma}) \right\}$$

Первое слагаемое в $g_{\alpha}(t)$ связано с квантово-механической вероятностью перехода носителя под влиянием возмущения V [???]; второе слагаемое, в частности, определяет изменение энергии электрона под влиянием возмущения V .

Если (3.9) и $y_{\alpha_1 \beta}(-t)$ подставить в (3.3), то электропроводность можно записать в виде

$$\sigma_{ij} = \frac{\beta_0 e^2}{2V m_e^2} \sum_{\alpha \beta} \hat{P}_{\alpha \beta}^{(i)} \hat{P}_{\beta \alpha}^{(j)} n_{\alpha} (1 - n_{\beta}) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{it}{\hbar} (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta})} \exp [g_{\alpha}(t) + g_{\beta}(-t)] \quad (3.10)$$

Если рассматривать упругое рассеяние в одной зоне и учесть, что в дальнейшем рассматриваем кинетические процессы с $\hat{P}_{\alpha \beta} \sim \delta_{\alpha \beta}$, то (3.10) можно представить в виде ($i = j$):

$$\sigma_{ij} = \frac{\beta_0 e^2}{2V m_e^2} \sum_{\alpha} \left| \hat{P}_{\alpha \alpha}^i \right|^2 n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left[- \sum_{\gamma} W_{\alpha \gamma} \frac{4 \sin^2 \frac{t}{\hbar} (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})}{(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})^2} \right] \quad (3.11)$$

При $t \rightarrow \infty$, когда можно ввести понятие о независимой от времени вероятности перехода [???], то

$$\sum_{\gamma} W_{\alpha\gamma} \frac{4 \sin^2 \frac{t}{\hbar} (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})}{(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})^2} \Rightarrow |t| \frac{1}{\tau_{\alpha}}; \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \sum_{\gamma} W_{\alpha\gamma} \delta(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma}) \quad (3.13)$$

$1/\tau_{\alpha}$ – квантово-механическая вероятность рассеяния носителей на шероховатой поверхности.

С учетом (3.12) электропроводность определяется соотношением

$$\sigma_{ij} = \frac{\beta_0 e^2}{V m_e^2} \sum_{\alpha} \left| \hat{P}_{\alpha\alpha}^i \right|^2 n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}) \tau_{\alpha} \quad (3.14)$$

Заметим, что соотношение для электропроводности (3.14) получено из самых общих соотношений квантовой статистики без привлечения решения классического уравнения Больцмана, которое, как известно имеет ограниченную область применения. В классическое выражение для тензора электропроводности входит не время релаксации τ_{α} , а транспортное время релаксации, которое естественным образом возникает при решении кинетического уравнения Больцмана [47]. При этом время релаксации и транспортное время в случае упругого рассеяния носителей на длинноволновых акустических колебаниях, на примесях, при рассеянии на шероховатой поверхности в случае δ -образной флуктуации поверхности не отличаются. (В случае гауссовой флуктуации поверхности см. замечание в §2 гл.1) Последнее обстоятельство является не случайным, т.к. выражение для электропроводности (3.14) получено при условии упругих процессов рассеяния носителей и при возможности введения независимой от времени вероятности процесса рассеяния. Но именно из тех же соображений вводится интеграл столкновений при выводе классического уравнения Больцмана.

Для прямоугольной КЯ с бесконечным потенциалом для случая гауссовой флуктуации поверхности

$$W_{\gamma\beta} = \frac{\pi}{L_x L_y} (\Delta\Lambda)^2 V_{\gamma} V_{\beta} \exp \left[-\frac{\Lambda^2}{4} |k_{\perp} - k'_{\perp}|^2 \right], \quad (3.15)$$

и время релаксации при рассеянии носителей в одной зоне определяется соотношением:

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{\pi m (\Delta \Lambda V_1)^2}{\hbar^3} \exp\left(-\frac{\Lambda^2}{2} k_\perp^2\right) I_0\left(\frac{\Lambda^2}{2} k_\perp^2\right), \quad (10) \quad (3.16)$$

$I_0(z)$ – модифицированная функция Бесселя нулевого индекса, $V_1 = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{m L^3}$.

Рассмотрим, случай, когда электроны находятся на нижайшем размерно-квантованном уровне ($n = 1$) прямоугольной КЯ. Это выполнимо, если $3\hbar^2 \pi^2 / (2mL^2) \gg k_0 T$. В результате (3.14) после суммирования по k_\perp принимает вид:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3}{m^2 \pi^2 (\Delta \Lambda^2 V_1)^2 L} \delta \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp(\delta \tau - \beta \tilde{\xi})}{\exp(-\tau) I_0(\tau) \cdot [\exp(\delta \tau - \beta \tilde{\xi}) + 1]^2}, \quad (3.17)$$

$$\delta = \frac{\beta_0 \hbar^2}{m_e \Lambda^2},$$

$\tilde{\xi} = \xi - \varepsilon_1$ – химический потенциал, отсчитанный от дна нижайшей зоны:

$$\beta_0 \tilde{\xi} = \ln \left[\exp\left(\frac{\beta_0 \pi \hbar^2 n_s}{m}\right) - 1 \right]. \quad (3.18)$$

n_s — поверхностная плотность электронного газа.

Для невырожденного электронного газа

$$(\beta_0 \pi \hbar^2 n_s / m_e \ll 1), \exp(\beta_0 \tilde{\xi}) = \beta_0 \pi \hbar^2 n_s / m_e,$$

и согласно (3.17) нетрудно вычислить подвижность:

$$\mu^{(nd)} = \mu_0 \delta^2 \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp[-(\delta - 1) \tau]}{I_0(\tau)}, \quad (3.19)$$

$$\mu_0 = \frac{e}{\hbar \pi^5} \left(\frac{L^3}{\Delta \Lambda} \right)^2.$$

Следовательно, подвижность существенным образом зависит от толщины размерно-квантованной системы ($\mu_0 \sim L^6$). На рис. 1а (кривая 1) приведена температурная зависимость $\mu^{(nd)} / \mu_0$ с учетом зависимости химического потенциа-

ла от температуры (3.18). Как непосредственно следует из рис. 1а при низких T ($\delta \gg 1$) подвижность практически не зависит от температуры и при высоких температурах ($\delta < 1$) с ростом T увеличивается (кривая 1). Такое поведение подвижности от L и T экспериментально наблюдалось в GaAs/AlAs [1]. При низких температурах $\mu^{(nd)} = \mu_0$, т.е. определяется только размером КЯ и параметрами флуктуирующей поверхности Δ , Λ . При изменении толщины КЯ от 70\AA до 100\AA подвижность изменяется от $\mu_0 = 2.6 \cdot 10^3 \text{cm}^2/Vs$ до $\mu_0 = 2 \cdot 10^4 \text{cm}^2/Vs$, что согласуется с экспериментальными данными в КЯ GaAs/AlAs [1].

Для вырожденного электронного газа при низких T электропроводность принимает вид:

$$\sigma_{xx}^{(d)} = \frac{e^2 \hbar \tilde{\xi}}{\pi^2 L m (\Delta \Lambda V_1)^2} \frac{\exp\left(\frac{m \Lambda^2}{\hbar^2} \tilde{\xi}\right)}{I_0\left(\frac{m \Lambda^2}{\hbar^2} \tilde{\xi}\right)}, \quad (14) \quad (3.20)$$

Если $\beta_0 \pi \hbar^2 n_s / m \gg 1$, то $\tilde{\xi} = \pi \hbar^2 n_s / m$ и подвижность определяется соотношением:

$$\mu^{(d)} = \mu_0 \frac{\exp(a)}{I_0(a)}, \quad (3.21)$$

$$a = \pi \Lambda^2 n_s$$

При $a \ll 1$

$$\mu^{(d)} = \mu_0. \quad (3.22)$$

При $a \gg 1$

$$\mu^{(d)} = \mu_0 \pi \sqrt{2 \Lambda^2 n_s} \quad (3.23)$$

Как следует из (3.22) в исследуемой модели КЯ подвижность в области низких температур не зависит от T (кривая 2 на рис. а). Такое поведение $\mu^{(d)}$ от T экспериментально наблюдалось в кремниевых инверсионных слоях, в которых электронный газ остается вырожденным вплоть до $T < 100K$ ($\tilde{\xi} = 12.5 \text{meV}$, $n_s = 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$) [2]. Для $\Delta = 6\text{\AA}$, $\Lambda = 13\text{\AA}$, при $L = 70\text{\AA}$, $n_s = 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ($a \ll 1$) $\mu^d = 1.5 \cdot 10^4 \text{cm}^2/Vs$, что близко к экспериментальным данным [2].

Аналогичные расчеты подвижности можно провести для прямоугольной квантовой ямы при δ -образной флуктуации поверхности. Учитывая предельный переход от гауссовой флуктуации поверхности к δ -образной, когда $\Lambda \rightarrow 0$, $(\Delta\Lambda)^2 \rightarrow \pi\gamma$ (см. замечание в параграфе 2 гл. 1) не трудно получить выражение для электропроводности. Согласно (3.17) электропроводность в этом случае может быть записана в виде:

$$\sigma_{xx}^{\delta} = \frac{e^2 \hbar}{\pi^3 \beta_0 m_e L V_1^2 \gamma} \int_0^{\infty} \frac{x dx e^{x-\beta\tilde{\xi}}}{\left(e^{x-\beta\tilde{\xi}} + 1\right)^2} \quad (3.24)$$

Для случая невырожденного газа из (3.24) нетрудно получить выражения для подвижности

$$\mu^{\delta(nd)} = \frac{eL^6}{\hbar\pi^6\gamma} \quad (3.25)$$

Для вырожденного электронного газа при низких температурах:

$$\mu^{\delta(d)} = \frac{eL^6}{\hbar\pi^6\gamma} \quad (3.26)$$

Как непосредственно следует из (3.24), (3.25), (3.26) подвижность существенным образом зависит от размеров квантовой системы и не зависит от температуры.

Для КП потенциал взаимодействия носителей с поверхностью по аналогии с (3) имеет вид:

$$V(x) = \frac{\partial E_n}{\partial R_0} \Delta(x) \equiv \tilde{V}_n \cdot \Delta(x),$$

и в случае гауссовской флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности записывается в виде:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\}_V = \Delta^2 \exp \left[-\frac{1}{\Lambda^2} (x-x')^2 \right] \equiv F(x-x'). \quad (3.27)$$

С учетом волновых функций для квантовой проволоки [48] $W_{\gamma\alpha}$ легко вычисляется и τ_{α}^{-1} согласно (3.13) принимает следующий вид:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \frac{(\Delta\tilde{V}_0)^2 m \Lambda \sqrt{\pi}}{\hbar^3 |k_x|} \left\{ 1 + \exp \left[-(k_x \Lambda)^2 \right] \right\}. \quad (3.28)$$

Подставляя (3.28) в (3.14) и интегрируя по квазиимпульсу электрона $\hbar k_x$:

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2 \hbar^3 \delta}{m^2 \pi^2 \sqrt{\pi} R_0^2 (\Delta \Lambda \tilde{V}_1)^2 \Lambda} \cdot \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp(\delta\tau - \beta_0 \tilde{\xi})}{(\exp(-\tau) + 1) \cdot [\exp(\delta\tau - \beta_0 \tilde{\xi}) + 1]^2}, \quad (3.29)$$

$$\delta = \frac{\beta_0 \hbar^2}{2m\Lambda^2},$$

$\beta_0 \tilde{\xi}$ определяется из уравнения:

$$\int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \beta_0 \tilde{\xi}) + 1} = \frac{n_l \pi \hbar \sqrt{\beta_0}}{\sqrt{8m}},$$

$n_l = N/L_x$ – линейная плотность электронов.

На рис. б представлена температурная зависимость электропроводности (в относительных единицах) в КП с учетом зависимости химического потенциала от концентрации носителей и температуры. Для невырожденного электронного газа (кривая 1 на рис. б) электропроводность имеет корневую зависимость от температуры ($\sigma_{xx}^{(nd)} \sim \sqrt{T}$).

Для вырожденного электронного газа искомая электропроводность (рассматривается нижайшая электронная зона) записывается в следующем виде:

$$\sigma_{xx}^{(d)} = \frac{4e^2 \hbar \tilde{\xi}}{\pi^2 \sqrt{\pi} R_0^2 m (\Delta \tilde{V}_1)^2 \Lambda} \cdot \frac{1}{1 + \exp(-q)}, q = \frac{2m\Lambda^2}{\hbar^2} \tilde{\xi}. \quad (3.30)$$

Как непосредственно следует из (3.30) для вырожденных КП электропроводность, а следовательно и подвижность, при низких температурах не зависит от T (кривая 3 на рис. с). Такое поведение электропроводности от температуры экспериментально наблюдалось в КП Bi [42; 44—46; 49—51].

Из рис. а-б следует, что электропроводность при рассеянии носителей на шероховатой поверхности размерно-квантованной системы в области низких температур слабо (для невырожденных квантовых систем) или вообще не зависит (для вырожденного электронного газа) от T . При этом с ростом T σ_{xx} , а следовательно и подвижность, начинает увеличиваться. Однако как показывают экспериментальные исследования [45; 49; 50] при высоких температурах подвижность уменьшается. Следовательно «включается» другой механизм рассеяния носите-

лей, например, на колебаниях решетки. Поэтому для последовательного сравнения теории с экспериментом рассмотрим температурную зависимость электропроводности с учетом двух механизмов рассеяния (на неровностях поверхности и на фононах). Это обстоятельство позволяет исследовать поведение подвижности в широкой области температур ($T \leq 200\text{K}$).

В приближении времени релаксации, если использовать соотношение (3.11) и результаты работы [38] выражение для электропроводности записывается следующим образом

$$\sigma_{xx} = \frac{\beta_0 e^2}{V m^2} \sum_{\alpha} \left| \hat{p}_{\alpha\alpha}^{(x)} \right|^2 \frac{\tau_{\alpha} \tau_{\alpha}^f}{\tau_{\alpha} + \tau_{\alpha}^f} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \quad (3.31)$$

τ_{α} – время релаксации, определяемое рассеянием электронов на шероховатой поверхности, τ_{α}^f – время релаксации, связанное с рассеянием электрона на фононах [38].

Для прямоугольной КЯ при рассеянии электронов в нижней зоне проводимости:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^f} = \frac{3E_1^2 m}{\beta_0 \hbar^3 \rho \nu^2 L}, \quad (3.32)$$

здесь E_1 – константа деформационного потенциала, ν – скорость звука в кристалле с плотностью ρ .

Для КП с бесконечным потенциалом для нижней зоны проводимости:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^f} = \gamma_f \frac{1}{|k_x|}, \gamma_f = \frac{4E_1^2 m}{\beta_0 \hbar^3 \rho \nu^2 \pi R_0^2}, \quad (3.33)$$

выражение для электропроводности прямоугольной КЯ записывается в виде:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi^2 m^2 (\Delta \Lambda^2 V_1)^2 L} \delta^2 \gamma \cdot \int_0^{\infty} d\tau \frac{\tau \cdot \exp(\delta \tau - \beta \tilde{\xi})}{[\delta \gamma \cdot \exp(-\tau) I_0(\tau) + 1] \cdot [\exp(\delta \tau - \beta \tilde{\xi}) + 1]^2}, \quad (3.34)$$

$$\delta = \frac{\hbar^2 \beta_0}{m \Lambda^2}, \gamma = \frac{\pi m \rho \nu^2 L}{3 \hbar^2 E_1^2} (\Delta \Lambda^2 V_1)^2.$$

Для невырожденного электронного газа подвижность определяется соотношением:

$$\mu^{(nd)} = \mu_0 \cdot \delta^3 \gamma \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp(-\tau \delta)}{\delta \gamma \cdot \exp(-\tau) I_0(\tau) + 1}. \quad (3.35)$$

Если $\delta \gamma \ll 1$, то из (3.35) получается выражение для подвижности, связанное с рассеянием носителей на длинноволновых колебаниях:

$$\mu_{xx}^{(fnd)} = \frac{e \hbar^3 \rho \nu^2 L^2}{3 m^2 E_1^2} \beta_0. \quad (3.36)$$

Для типичных параметров КЯ GaAs/AlAs ($\rho = 5.4 \text{ g/cm}^3$, $v = 5 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, $E_1 = 7 \text{ eV}$, $m = 0.06 m_0$) при $\Delta = 3 \text{ \AA}$, $\Lambda = 70 \text{ \AA}$, $L = 100 \text{ \AA}$ $\gamma \delta \cong 520/T$ и, следовательно, при $T > 100 \text{ K}$ рассеяние носителей на фононах начинает заметно влиять на температурную зависимость подвижности.

Для случая вырожденного электронного газа:

$$\sigma_{xx}^{(d)} = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi^2 m^2 (\Delta \Lambda^2 V_1)^2 L} \cdot \frac{\delta \gamma \cdot \delta_0}{\delta \gamma \cdot I_0(\delta_0) \exp(-\delta_0) + 1}, \quad (3.37)$$

n_s – поверхностная плотность электронов, $\delta_0 = \pi \Lambda^2 n_s$.

При $\delta \gamma \gg 1$ из (3.37) получается выражение для подвижности (3.21). Если $\delta \gamma \ll 1$, то из (3.37) следует соотношение для подвижности в прямоугольной квантовой яме, когда учитывается взаимодействие носителей с длинноволновыми фононами:

$$\mu_{xx}^{(fd)} = \frac{e \hbar^3 \rho \nu^2 L \beta_0}{3 m^2 E_1^2}. \quad (3.38)$$

Аналогичным образом можно вычислить электропроводность для квантовых проволок с бесконечным потенциалом, используя соотношения (3.29), (3.33):

$$\sigma_{xx} = \frac{2 e^2 \hbar^3 \delta^2 q}{m^2 \pi^2 \sqrt{\pi} R_0^2 (\Delta \Lambda V_1)^2 \Lambda} \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp(\delta \tau - \beta_0 \tilde{\xi})}{[\delta q \cdot (\exp(-\tau) + 1) + 1] \cdot [\exp(\delta \tau - \beta_0 \tilde{\xi}) + 1]^2}, \quad (3.39)$$

$$\delta = \frac{\beta_0 \hbar^2}{2 m \Lambda^2}, q = \frac{m \rho \nu^2 \sqrt{\pi} \pi R_0^2}{2 \hbar^2 E_1^2} (\Delta \Lambda V_1)^2 \Lambda.$$

Для невырожденного электронного газа квантовой проволоки (3.39) принимает вид:

$$\sigma_{xx}^{(nd)} = \frac{2e^2 \hbar^3 n_e}{\pi m^2 (\Delta \Lambda V_1)^2} q \delta^{\frac{5}{2}} \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp(-\delta \tau)}{[\delta q \cdot (\exp(-\tau) + 1) + 1]}. \quad (3.40)$$

При $\delta q \ll 1$ из (3.40) непосредственно следует выражение для электропроводности, связанное с рассеянием электронов на длинноволновых (акустических) фононах:

$$\sigma_{xx}^{(nd)} = \frac{e^2 \hbar^2 n_e R_0^2 \rho \nu^2}{m E_1^2} \sqrt{\frac{\beta_0 \pi}{2m}} \quad (3.41)$$

Для вырожденного электронного газа:

$$\sigma_{xx}^{(d)} = \frac{2e^2 \hbar^3}{\pi^2 R_0^2 m^2 \sqrt{\pi} (\Delta \Lambda V_1)^2 \Lambda} \cdot \frac{\delta q \delta_1}{\delta q \cdot (1 + \exp(-\delta_1)) + 1}, \quad (3.42)$$

$$\delta_1 = \frac{2m\Lambda^2}{\hbar^2} \tilde{\xi}.$$

Если $\delta q \ll 1$, то электропроводность имеет вид:

$$\sigma_{xx}^{(fnd)} = \frac{e^2 \hbar \rho \nu^2 \beta_0}{\pi m E_1^2} \tilde{\xi}. \quad (3.43)$$

На рис. с приведена температурная зависимость подвижности (в относительных единицах) для различных концентраций носителей в прямоугольной КЯ. Для невырожденного электронного газа (кривая 1) подвижность немонотонным образом зависит от T , что экспериментально наблюдалось в КЯ GaAs/AlAs [1]. Заметим, что с ростом ширины КЯ уменьшается влияние рассеяния носителей на шероховатости поверхности, поэтому максимум подвижности смещается в область низких температур. Кривые 2, 3 описывают температурную зависимость подвижности для вырожденного электронного газа. При низких T подвижность практически не зависит от температуры и с ее ростом уменьшается. Именно такое поведение подвижности от температуры экспериментально наблюдалось в инверсионных слоях Si для вырожденного электронного газа [2].

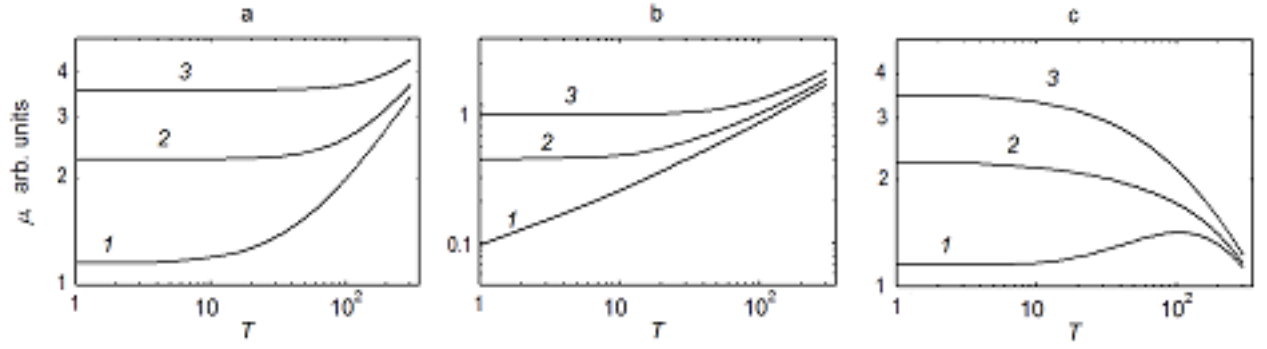


Рис. Температурная зависимость подвижности (в относительных единицах): а – при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности в КЯ при $\Lambda = 70\text{\AA}$, $\Delta = 3\text{\AA}$, $L_0 = 100\text{\AA}$, кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $n_s = 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 7 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 1.5 \cdot 10^{12}\text{cm}^{-2}$; б – при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности в КП при $\Lambda = 20\text{\AA}$, $\Delta = 2\text{\AA}$, $R_0 = 100\text{\AA}$, кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $n_l = 10^5\text{cm}^{-1}$, $n_l = 5 \cdot 10^5\text{cm}^{-1}$, $n_s = 10^6\text{cm}^{-1}$; в – при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности и на фононах в КЯ при $\Lambda = 70\text{\AA}$, $\Delta = 3\text{\AA}$, $L_0 = 100\text{\AA}$, кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $n_s = 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 7 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 1.5 \cdot 10^{12}\text{cm}^{-2}$

3.2 Электропроводность в размерно-квантовых системах с учётом рассеяния носителей на шероховатой поверхности в магнитном поле

Рассмотрим особенности электропроводности, возникающие в размерно-квантованных системах в присутствии однородного магнитного поля напряжённостью H . Для параболических КЯ в продольном магнитном поле ($H \parallel OX$) электропроводность для основного состояния описывается соотношением:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3 n}{m^2 \gamma V_0^2} \left[\frac{\omega}{\Omega} \right], \quad (3.44)$$

$$\Omega^2 = \omega^2 + \omega_c^2,$$

$$\hbar\omega = \frac{1}{L} \left(\frac{8\Delta E_c}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$$

– шаг пространственного квантования, ω_c – циклотронная частота, n – концентрация носителей.

$$V_0 = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\omega}{\Omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial L}. \quad (3.45)$$

С учётом (3.44), (3.45) подвижность для электронного газа с произвольным вырождением принимает вид:

$$\mu_{xx} = \frac{4e\hbar}{m^2\gamma} \left(\frac{\partial \omega}{\partial L} \right)^{-2} \left[1 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.46)$$

Заметим, что подвижность в размерно-ограниченных системах при учёте рассеяния носителей на длинноволновых колебаниях с ростом магнитного поля уменьшается [52]. Это связано с ростом локализации зонных электронов. Как непосредственно следует из (3.46) μ_{xx} с ростом магнитного поля увеличивается. Такое поведение зависимости подвижности от продольного магнитного поля может быть понято из следующих соображений. В параболической КЯ радиус локализации электрона $\lambda_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$ с ростом напряженности магнитного поля уменьшается, число носителей тока, рассеивающихся на шероховатой поверхности размерно-ограниченной системы, становится меньше, что и приводит к росту подвижности.

В поперечном магнитном поле в плоскости КЯ ($\mathbf{H} \parallel OY$) матричные элементы обобщённого импульса, входящие в общее выражение для электропроводности (3.14) определяются следующим образом:

$$P_{\alpha\beta}^{(x)} = \hbar k_x \left(\frac{\omega}{\Omega} \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{m\omega_c}{\sqrt{2}\lambda} \delta_{k_x k'_x} \delta_{k_y k'_y} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n, n_1+1} + \sqrt{n+1} \delta_{n, n_1+1} \right\}. \quad (3.47)$$

Следовательно, матричный элемент обобщенного импульса имеет как диагональные элементы (первое слагаемое в (3.47)) так и недиагональные элементы по квантовому числу размерно-магнитного квантования (второе слагаемое). Заметим, что диагональный матричный элемент возникает только в размерно-ограниченных системах (при $\omega \rightarrow 0$ это слагаемое в (3.47) отсутствует).

В дальнейшем будем рассматривать электропроводность с учётом диагонального слагаемого в матричном элементе обобщенного импульса. Подвижность в поперечном магнитном поле при низких температурах для основного состояния имеет вид:

$$\mu_x = \frac{4e\hbar}{m^2\gamma} \left(\frac{\partial \omega}{\partial L} \right)^{-2} \left[1 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (3.48)$$

Следовательно, с ростом магнитного поля подвижность уменьшается и при $(\frac{\omega_c}{\omega})^2 \gg 1$ $\mu_x \sim \frac{1}{H}$. Такое поведение подвижности от H связано с тем, что в скрещенных магнитном и электрическом полях носители с дрейфовой скоростью перемещаются вдоль оси пространственного квантования по трохоиде, поэтому активно участвуют в процессах рассеяния на шероховатостях поверхности размерно-квантовой системы.

Рассмотрим электропроводность в квантовых проволоках в однородном магнитном поле. В продольном магнитном поле время релаксации, определяемое (3.13), вычисляется обычным образом. В результате

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{\gamma_0}{\hbar^3} 2m V_\alpha^2 \frac{1}{|k_x|}. \quad (3.49)$$

Электропроводность (3.14) в рассматриваемой модели параболической КП принимает вид:

$$\sigma_{xx} = \frac{4\hbar e^2}{2\beta\pi sm\gamma_0} \sum_{n\nu} \frac{1}{V_{n\nu}^2} \ln [1 + \exp \{\beta\xi_{n\nu}\}] \quad (3.50)$$

$$V_\alpha = \frac{4}{[4 + \delta^2]^{\frac{1}{2}}} \left[n + \frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} \right] \frac{\partial(\hbar\omega)}{\partial R_0}.$$

При этом $\xi_{n\nu}$ определяется из уравнения для химического потенциала параболической КП:

$$\sum_{n\nu} \int_0^\infty \frac{dx}{1 + e^{x^2 - \beta\xi_{n\nu}}} = \frac{\pi n_e}{2} \left(\frac{\hbar^2 \beta}{2m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.51)$$

Для невырожденного электронного газа из (3.51) следует:

$$\sum_{n\nu} e^{\beta\xi_{n\nu}} = n_e \left[\frac{\pi \hbar^2 \beta}{2m} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

И, следовательно, для основного размерно-квантового состояния ($n = \nu = 0$) подвижность записывается в виде:

$$\mu_x^{(nd)} = \frac{eR_0^4 \left[4 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right]}{4\gamma_0 (\Delta E_c) \sqrt{2m\beta\pi}}. \quad (3.52)$$

В случае вырожденного электронного газа из (3.51) не трудно получить

$$\sum_{n\nu} \sqrt{\xi_{n\nu}} = \pi n_e \left[\frac{\hbar^2}{2m} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

и для основного электронного состояния ($n = \nu = 0$) подвижность определяется соотношением:

$$\mu_x^{(d)} = \frac{e\pi \left[4 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right] n_e \hbar R_0^4}{8m\gamma_0 (\Delta E_c)}. \quad (3.53)$$

Следовательно, в продольном магнитном поле, подвижность, увеличивается ($\mu_x \sim H^2$) и существенным образом зависит от радиуса квантовой проволоки ($\mu_x \sim R_0^4$). Если для невырожденного электронного газа подвижность (21) увеличивается с ростом температуры, то для вырожденной размерно-квантовой проволоки подвижность при низких температурах не зависит от T . На рис. 1 представлена зависимость сопротивления (в относительных единицах) от напряженности магнитного поля с учетом рассеяния носителей на шероховатой поверхности (пунктирная линия). Сплошной линией представлена зависимость относительного сопротивления от магнитного поля для нанопроволок висмута с учетом рассеяния на поверхности и на акустических фононах именно, такая зависимость сопротивления от магнитного поля экспериментально наблюдалась в работе [53].

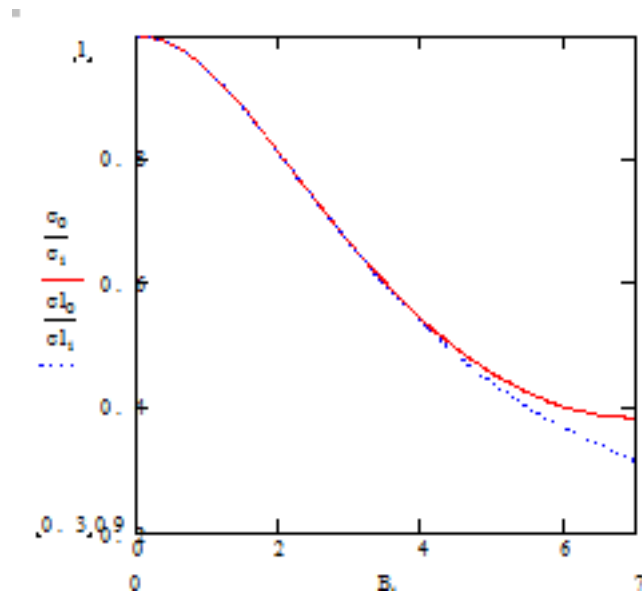


Рис 1. Зависимость относительного сопротивления от магнитного поля для проволоки висмута ($d = 80$ nm, $T = 4.2$ K). Пунктирной линией показана зависимость $R(H)/R(0)$ при учете рассеяния носителей на поверхности, сплошной линией при учете рассеяния носителей на поверхности и на акустических фононах.

Глава 4. Явления переноса в нанопроволоках в поперечном электрическом поле с учетом рассеяния на шероховатой поверхности

4.1 Исследования подвижности носителей в квантовых ямах в постоянном поперечном электрическом поле

В параболических квантовых ямах (ПКЯ), когда постоянное электрическое поле E направлено вдоль оси пространственного квантования, потенциальная энергия электрона определяется соотношением:

$$U(z) = \frac{m\omega^2}{2}z^2 + eEz.$$

Следовательно, с ростом напряженности электрического поля минимум $U(z)$ смещается в область отрицательных значений z и опускается на величину $\Delta_c = e^2 E^2 / (2m\omega^2)$. Волновая функция уравнения Шредингера с потенциальной энергией $U(z)$ известна [52], и собственные значения энергии электрона с эффективной массой m в зоне проводимости имеют вид:

$$E_{n,k_\perp} = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} + E_n, \quad (4.1)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \Delta_c, \quad k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2.$$

$\hbar\omega$ – энергия размерного квантования, которая простым образом связана с величиной потенциальной энергии ΔE_c на границе ПКЯ с шириной a , $\hbar\omega = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m}}$, k_\perp – волновой вектор электрона в плоскости низкоразмерной системы.

Как непосредственно следует из (4.1) минимум зоны проводимости опускается в область запрещенной зоны на величину Δ_c . В дальнейшем рассматриваем такие значения напряженности поперечного электрического поля E , при которых параболическая форма потенциальной энергии сохраняется, и в ней остается много размерно-квантованных эквидистантных уровней, т.е. решения уравнения Шредингера с потенциальной энергией $U(z)$ остаются справедливыми [54]. Для типичных параметров ПКЯ ($\Delta E_c \sim 0.25$ эВ, $a = 10^3$ Э) $E \leq 3 \cdot 10^4$ В/см. При низких температурах T в нелегированных системах с пониженной размерностью

важным является механизм рассеяния носителей на шероховатой поверхности [1; 25]. В направлениях ОХ, ОУ свободного движения носителей заряда ширина ПКЯ изменяется случайным образом, и, следовательно энергия размерного квантования E_n , определяемая шириной квантовой системы, флуктурует. Именно по этой причине энергия взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью можно записать следующим образом [1]:

$$W_n = \frac{\partial E_n}{\partial a} \Delta(x, y) \equiv -\frac{1}{a} [E_n + 2\Delta_c] \Delta(x, y) = V_n \Delta(x, y), \quad (4.2)$$

Здесь $\Delta(x, y)$ – случайная функция.

Заметим, что энергия взаимодействия для рассматриваемого механизма рассеяния носителей зависит от величины поперечного электрического поля. Для δ -образной флуктуации поверхности

$$\{\Delta(x, y) \Delta(x', y')\} = \gamma \delta(x - x') \delta(y - y') \equiv F^{(\delta)}(x - x', y - y'). \quad (4.3)$$

В случае гауссовой флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности имеет вид [1]:

$$\{\Delta(x, y) \Delta(x', y')\} = \Delta^2 \exp \left[-\frac{1}{\Lambda^2} ((x - x')^2 + (y - y')^2) \right] \equiv F^{(G)}(x - x', y - y'), \quad (4.4)$$

Δ – высота гауссовской флуктуации, Λ – ее длина, $\{\}$ описывает усреднение по реализации случайного процесса. Заметим, что при низких температурах вид флуктуации поверхности практически не влияет на конечные результаты рассчитываемой наблюдаемой физической величины (например, на электропроводность).

Расчет электропроводности проведем, используя формулу Кубо [30]. В приближении времени релаксации [38] конечное выражение для электропроводности может быть записано в следующем виде (слабое тянущее электрическое поле направлено вдоль оси ОХ)

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{k_0 T V m^2} \sum_{\alpha, \beta} \left| P_{\alpha\beta}^{(x)} \right|^2 \tau_{\alpha} n_{\alpha} (1 - n_{\beta}), \quad (4.5)$$

$\alpha(\beta)$ – квантовые числа, описывающие состояние электрона, V – объем основной области размерно-квантованной системы, $P_{\alpha\beta}^{(x)}$ – матричный элемент х-ой компо-

ненты оператора импульса на волновых функциях электрона в зоне проводимости, n_α – равновесная функция распределения носителей с энергией E_{n,k_\perp} , $1/\tau_\alpha$ – квантово-механическая вероятность рассеяния электронов на шероховатой поверхности:

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\beta} \tilde{W}_{\alpha\beta} \delta(E_\alpha - E_\beta) V_\alpha V_\beta, \quad (4.6)$$

$$\tilde{W}_{\alpha\beta} = \int \Psi_\alpha^*(r) \Psi_\beta^*(r_1) F^{(\delta)}(x - x_1, y - y_1) \Psi_\alpha(r_1) \Psi_\beta(r) dr dr_1.$$

$\Psi_i(r)$ $i = (\alpha, \beta)$ – волновые функции электрона в ПКЯ в продольном электрическом поле [52].

В случае δ -образной флуктуации поверхности не трудно получить

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{8\gamma\Delta E_c}{\hbar a^4} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) + N_c \right]^2, N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega}. \quad (4.7)$$

При расчете времени релаксации при гауссовской флуктуации поверхности, когда $\frac{\hbar^2}{2m}\Lambda^{-2} \gg (3/2)k_B T$, что выполняется в широкой области температур, $\frac{1}{\tau_\alpha}$ описывается соотношением (4.7), в котором нужно γ заменить на $(\pi\Delta^2\Lambda^2)$. Заметим, что τ_α (для любого типа флуктуации) в точности равно транспортному времени релаксации, используемому при решении кинетического уравнения Больцмана. Как непосредственно следует из (4.7) время релаксации определяется только номером подзоны проводимости. После суммирования по k_\perp в (4.5) электропроводность можно записать в виде:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{a\pi\hbar^2\beta_0} \sum_n \tau_n \ln(1 + e^{-\beta\xi_n}), \xi_n = E_n - \xi, \quad (4.8)$$

ξ – химический потенциал.

Для невырожденного электронного газа ($\beta_0\xi_n \gg 1$) при низких температурах, когда все носители находятся в нижней размерно-квантованной зоне проводимости ($n = 0$), подвижность определяется соотношением:

$$\mu_{xx} = \mu_{xx}(0) \frac{1}{(1 + 2N_c)^2}, \mu_{xx}(0) = \frac{e}{m} \left(\frac{\hbar a^4}{2\gamma\Delta E_c} \right), \quad (4.9)$$

где $\mu_{xx}(0)$ – подвижность в ПКЯ в отсутствии поперечного электрического поля.

Для параметров ПКЯ ($m = 0.06m_0$) $\hbar\omega = \frac{14.5}{a_0}$ eV (a_0 – ширина ПКЯ в ангстремах), $N_c = 1.7 \cdot 10^{-18} E_0^2 a_0^3$ (E_0 – измеряется в V/cm). Таким образом, при $a_0 = 10^3 \text{ \AA}$, $E_0 = 2.5 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$, $N_c = 1$ и подвижность уменьшается почти на порядок. С ростом E носители тока «прижимаются» к одной из поверхностей квантовой ямы, поэтому их взаимодействие с шероховатой поверхностью увеличивается, что приводит к уменьшению времени релаксации, а следовательно и подвижности.

С ростом температуры процессы рассеяния носителей на длинноволновых акустических колебаниях начинают влиять на величину подвижности. Для случая упругого рассеяния электронов, находящихся на нижайшем уровне зоны проводимости $n = 0$ ($\hbar\omega \gg k_B T$), на акустических фононах при высоких температурах ($N_q \approx \frac{k_B T}{\hbar v q} \gg 1$) время релаксации имеет вид:

$$\frac{1}{\tau_f} = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E_1^2 m k_B T}{\hbar^3 v^2 \rho}, \quad (4.10)$$

E_1 – константа деформационного потенциала, ρ – плотность исследуемой квантовой системы, v – скорость звука, N_q – функция распределения равновесных фононов.

Заметим, что τ_f не зависит от волнового вектора электрона и поперечного электрического поля. Электропроводность с учетом рассеяния носителей на шероховатой поверхности (τ_0) и на акустических фононах (τ_f) определяется соотношением (8), в котором $\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_f}$. Конечное выражение для подвижности принимает вид:

$$\mu_{xx} = \mu_{xx}(0) \frac{1}{(1 + 2N_c)^2 + \Delta}, \quad (4.11)$$

$$\Delta = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_1}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{4k_B T a^2}{\rho v^2 \gamma}.$$

Для ПКЯ с параметрами ($E_1 = 10 \text{ eV}$, $\rho = 4 \text{ g/cm}^3$, $v = 3 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, $\gamma^{\frac{1}{4}} = 40 \text{ \AA}$) при $E = 2.5 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$ рассеяние носителей на акустических колебаниях определяет величину подвижности при $T \geq 100 \text{ K}$.

С ростом напряженности поперечного электрического поля минимум зоны проводимости смещается в запрещенную зону на Δ_c , а экстремум валентной зоны поднимается на величину $\Delta_v = e^2 E^2 / (2m_v \omega_v^2)$ ($\hbar\omega_v$ – шаг размерного квантования валентной зоны). Следовательно ширина запрещенной зоны E_g в рассматриваем-

мой модели низкоразмерных систем уменьшается на $\Delta_c + \Delta_v$. Именно это обстоятельство приводит к тому, что с увеличением E однозонное приближение при исследовании явлений переноса может оказаться не достаточным. В этом случае для расчета электропроводности необходимо учитывать нестандартность зоны проводимости [55; 56]. Это приводит к тому, что процессы рассеяния электрона на акустических колебаниях становятся зависящими от E . В заключении отметим, что рассмотренное в нами влияние поперечного поля E на электропроводность принципиально отличается от эффекта поля в условиях размерного квантования, исследованного в [57; 58]. В этих работах низкоразмерная система (пленка висмута) являются одной из обкладок конденсатора, и ее заряжают, прикладывая поле E , изменяя в ней концентрацию заряда. Именно поэтому при фиксированной толщине КЯ меняется положение уровня Ферми, что приводит к зависимости электропроводности от величины поперечного электрического поля.

4.2 Влияние поперечного электрического поля на подвижность в нанопроволоках

Для квантовых проволок электрическое поле E , направленное перпендикулярно оси наноструктуры, может заметным образом влиять на кинетические явления в размерно-ограниченной системе. В модели потенциала в форме параболоида вращения (такая модель часто применяется при расчетах кинетических коэффициентов в нанопроволоках [17; 59] и находит свое математическое подтверждение [60]), в поперечном электрическом поле E энергия электронов с эффективной массой m_c в размерно-квантованной зоне c и энергетический спектр дырок с эффективной массой m_v в валентной зоне v имеют вид:

$$\begin{aligned} E_\alpha^c &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_c} + E_{nm}^c ; E_{nm}^c = \hbar\omega_c (n + k + 1) - \Delta_c, \\ E_\alpha^v &= \Delta - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_v} + E_{nm}^v ; E_{nm}^v = \hbar\omega_v (n + k + 1) - \Delta_v. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Здесь $\hbar\omega_c$ – шаг размерного квантования в c зоне, $\hbar\omega_v$ – энергия размерного квантования в валентной зоне, которые простым образом связаны с величиной

потенциальной энергии ΔE_i на границе нанопроволоки диаметром a ,

$$\hbar\omega_i = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2\Delta E_i}{m_i}},$$

$$\Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_c \omega_c^2}, \Delta_v = \frac{e^2 E^2}{2m_v \omega_v^2},$$

k_x – волновой вектор носителя вдоль оси нанопроволоки.

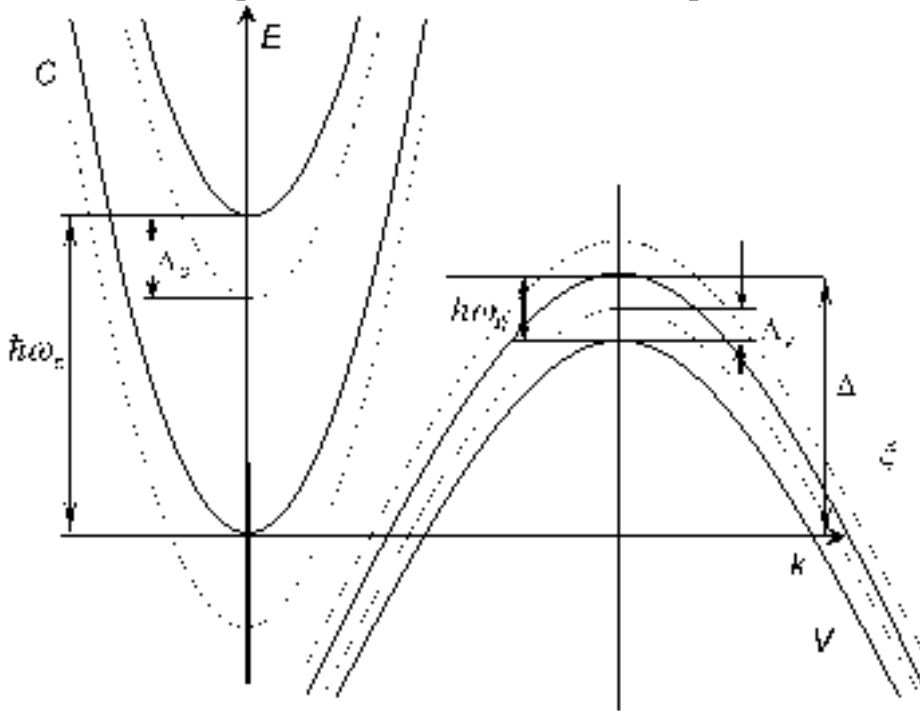


Рис. 1. Схема зонной структуры, рассматриваемой низкоразмерной структуры. Сплошными линиями показаны две нижайшие размерно-квантованные зоны (с – зоны проводимости, v – валентные зоны), пунктирными линиями изображены две нижайшие размерно-квантованные зоны в поперечном электрическом поле; ξ – химический потенциал.

В дальнейшем рассматриваем квантовую проволоку V_i в простой модели, энергетический спектр которой изображен на рис. 1. Как непосредственно следует из (1), с ростом напряженности электрического поля E дно размерно-квантованных с зон опускается на Δ_c в область запрещенных значений энергии, а экстремумы размерно-квантованных v зон поднимаются вверх на величину Δ_v .

В квантовых проволоках, как следствие одномерности квантовой системы, на дне размерно-квантованных зон возникают особенности в плотности энергетических состояний. Поэтому, если рассматривать случай вырожденного электронного (дырочного) газа, то с ростом E экстремумы, например размерно-

квантованных с зон, опускаясь вниз, пересекают химический потенциал, что может приводить к особенностям электропроводности (подвижности) в исследуемой наноструктуре.

Расчет электропроводности проведем, используя формулу Кубо [30]. В приближении времени релаксации [38] выражение для электронной электропроводности записывается следующим образом (слабое тянущее электрическое поле направлено вдоль оси нанопроволоки):

$$\sigma_{xx}^{(e)} = \frac{e^2}{k_0 T V m_c^2} \sum_{\alpha\beta} \left| \hat{P}_{\alpha\beta}^{(x)} \right|^2 \tau_{\alpha}^{(e)} n_{\alpha} (1 - n_{\beta}), \quad (4.13)$$

α, β – квантовые числа, описывающие состояние электрона, V – объем основной области размерно-квантованной системы, T – температура, k_0 – постоянная Больцмана, $\hat{P}_{\alpha\beta}^{(x)}$ – матричный элемент x -ой компоненты оператора импульса на волновых функциях электрона в нанопроволоке, n_{α} – равновесная функция распределения носителей с энергией E_{α} ; $1/\tau_{\alpha}^{(e)}$ – квантово-механическая вероятность рассеяния в единицу времени.

В дальнейшем исследуем случай рассеяния носителей на шероховатой поверхности, которое оказывается наиболее важным при низких температурах [1; 25]. В направлении x свободного движения носителей заряда в квантовой проволоке диаметр a меняется случайным образом и, следовательно, энергия размерного квантования $E_{nm}^{(i)}$, определяемая a , флуктуирует. Именно по этой причине энергию взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью записывают в виде [1]:

$$W_{nk}^{(i)} = \frac{\partial E_{nm}^{(i)}}{\partial a} \Delta(x) = -\frac{1}{a} [\hbar\omega_i (n + k + 1) + 2\Delta_i] \Delta(x) \equiv V_{nk} \Delta(x), \quad (3) \quad (4.14)$$

$\Delta(x)$ – случайная функция.

Как следует из (4.14), энергия взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью определяется величиной напряженности поперечного электрического поля и с ростом E увеличивается. Последнее обстоятельство приводит, как будет показано ниже, к заметной зависимости подвижности от E .

Для δ -образной флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности нанопроволоки имеет вид:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \gamma\delta(x - x'), \quad (4.15)$$

$\{\dots\}$ – описывает усреднение по реализации случайного процесса. Обратим внимание, что вид флуктуации (δ -образный или гауссовый [1]) при низких температурах практически не влияет на конечные результаты физической величины (например на подвижность).

Расчет времени релаксации τ_α проводится аналогично [61]:

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2m_c\omega_c^2\gamma}{\hbar a^2 |k_x|} (n + k + 1 + N_c)^2, N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega_c}. \quad (4.16)$$

Согласно (4.16) время релаксации зависит от всех квантовых чисел, определяющих состояние носителя, и в точности совпадает с транспортным временем релаксации, используемом при решении кинетического уравнения Больцмана.

Если использовать (4.13) и (4.16), то выражение для подвижности носителей в рассматриваемой модели принимает вид:

$$\mu = \mu_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2 \sum_{nm} F(\eta_{nm}^c)} \sum_{nm} \left\{ \frac{\ln [\exp (\eta_{nm}^c) + 1]}{(n + m + 1 + N_c)^2} + \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \right) \frac{1}{p} \frac{\ln [\exp (\eta_{nm}^v) + 1]}{(n + m + 1 + N_v)^2} \right\}. \quad (4.17)$$

Здесь введены обозначения:

$$\eta_{nm}^c = \frac{1}{k_0 T} [\xi - \hbar\omega_c (n + m + 1) + \Delta_c],$$

$$\eta_{nm}^v = \frac{1}{k_0 T} [-\xi - \hbar\omega_v (n + m + 1) + \Delta + \Delta_v],$$

$$\mu_0 = \frac{4R^4 e}{\gamma \Delta E_c} \sqrt{\frac{k_0 T}{2\pi m_c}}; R = \frac{a}{2}; N_v = \frac{2\Delta_v}{\hbar\omega_v},$$

$$F(\eta_{nm}^c) = \int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \eta_{nm}^c) + 1},$$

p – число зон, участвующих в процессах электропроводности. Химический потенциал ξ находится из условия электронейтральности исследуемой наноструктуры (число электронов в зонах проводимости равно числу дырок в валентной

зоне)

$$p\sqrt{\frac{m_c}{m_v}} \sum_{n,m} \int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \eta_{nm}^c) + 1} = \sum_{n,m} \int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \eta_{nm}^v) + 1}. \quad (4.18)$$

Положение химического потенциала при заданных параметрах наносистемы определяется величиной радиуса R квантовой проволоки и величиной напряженности поперечного электрического поля.

Рассмотрим частные случаи, допускающие аналитическое решение уравнения (4.18). Пусть электронный (дырочный) газ является невырожденным. Это возможно, если радиус квантовой проволоки такой, что $\Delta < \hbar\omega_c + \hbar\omega_v$. Как показали экспериментальные исследования [62] при $R = 250\text{Å}$ в нанопроволоках Bi $\Delta = \hbar\omega_c + \hbar\omega_v$. Если $m_c \ll m_v$ и носители находятся в нижайших размерно-квантованных зонах ($n = m = 0$), подвижность можно записать в следующем виде:

$$\mu = \mu_0 \frac{1}{(1 + N_c)^2}. \quad (4.19)$$

Согласно (4.19) подвижность в рассматриваемом случае с ростом напряженности поперечного электрического поля убывает. Если электронный газ вырожден и химический потенциал расположен между нижайшей и последующей размерно-квантованной зоной проводимости (аналогично и для размерно-квантованной v зоны), то подвижность описывается следующим соотношением:

$$\mu = \mu_0 \frac{\sqrt{2\pi}}{4(1 + N_c)^2} \left[\frac{1}{k_0 T} (\Delta + \Delta_A + \Delta_v - \hbar\omega_v - \hbar\omega_A) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.20)$$

Как непосредственно следует из (4.20), подвижность с ростом E убывает, но слабее, чем в случае невырожденного электронного газа. В общем случае зависимость подвижности от напряженности поперечного электрического поля можно найти только численно.

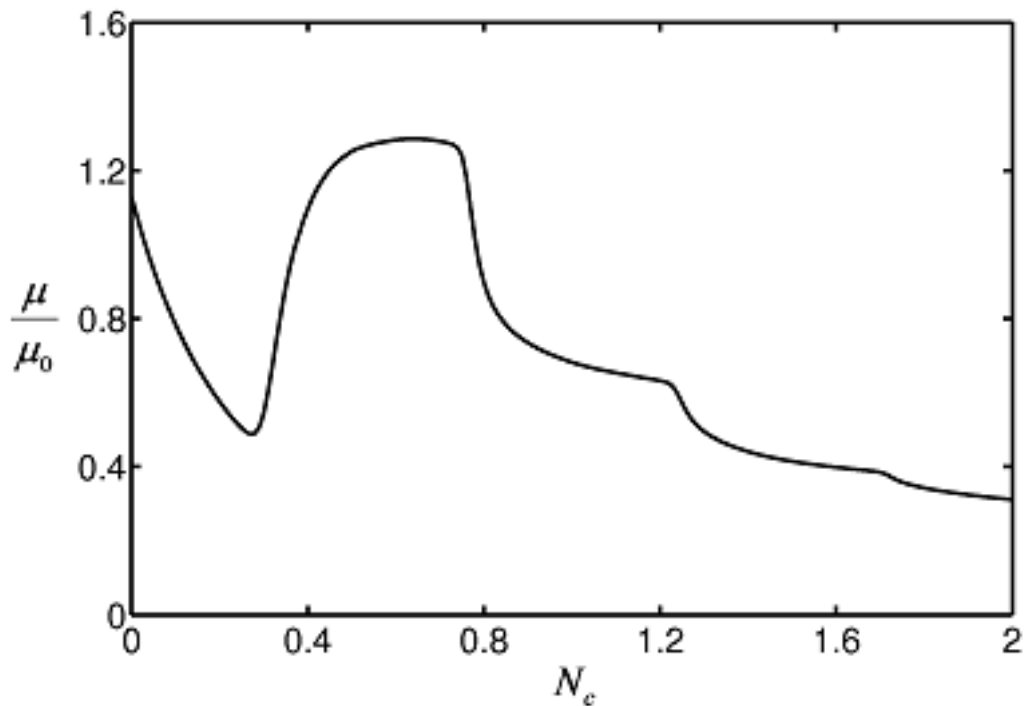


Рис. 2. Зависимость подвижности (в относительных единицах) от напряженности поперечного электрического поля. $R = 330 \text{ \AA}$

Влияние поперечного электрического поля на подвижность принципиальным образом зависит от радиуса нанопроволоки. При небольших значениях R , когда квантовая проволока представляет почти безщелевой полупроводник, с ростом E (при $E = 0$ электронный (дырочный) газ не вырожден) подвижность сначала уменьшается (см формулу (4.19)), затем увеличивается, и в дальнейшем описывается осцилляционной кривой (рис. 2). При больших радиусах нанопроволок, когда электронный (дырочный) газ изначально был вырожден, зависимость μ от E носит явно осциллирующий характер (рис. 3). Такое поведение подвижности от E связано с тем, что с ростом напряженности поперечного электрического поля, дно размерно-квантованных зон, опускаясь в область запрещенных значений энергии, пересекают химический потенциал, что приводит к увеличению подвижности. Заметим, что для типичных значений параметров нанопроволок Bi ($m_c = 0.01m_0, m_v = 0.1m_0, \Delta E_c/\Delta E_v = 1.5$) $N_v = 5.8N_c$, поэтому с ростом E влияние дырок на поведение μ от E слабее, чем для электронов. Следовательно, осцилляционная зависимость подвижности от E (рис. 3) должна наблюдаться и для полупроводниковых квантовых проволок с вырожденным электронным газом.

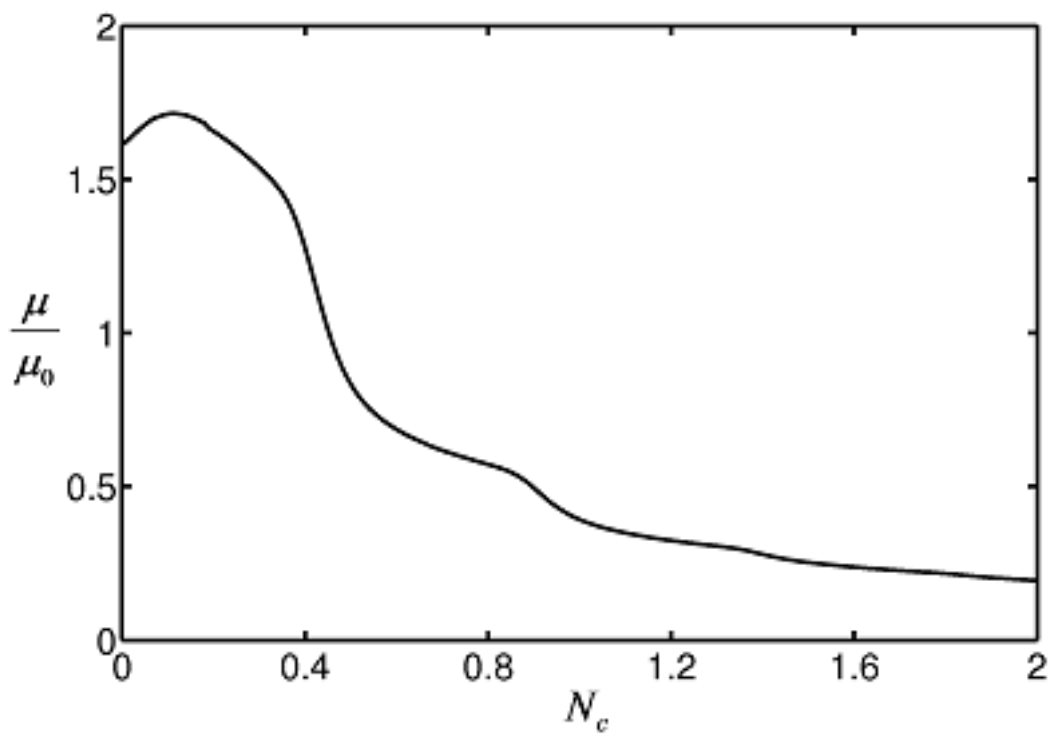


Рис. 3. Зависимость подвижности (в относительных единицах) от напряженности поперечного электрического поля. $R = 990 \text{ \AA}$

4.3 Особенности подвижности в нанопроволоках в поперечных электрическом и магнитном полях

В присутствии однородного квантующего магнитного поля энергетический спектр носителей в квантовых проволоках заметным образом меняется. В модели параболического потенциала для нанопроволок радиуса R энергия электрона с учетом анизотропии эффективных масс (магнитное поле H направлено перпендикулярно оси наноструктуры, электрическое поле E параллельно H) определяется аналогично [17].

$$E_{k_x, n, m} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \hbar\Omega_y \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(m + \frac{1}{2}\right) - \Delta_c, \quad (4.21)$$

$$m_x^* = m_x \left(\frac{\Omega_y}{\omega_y}\right)^2, \quad \Omega_y^2 = \frac{m_x}{m_y} (\omega_x^c)^2 + \omega_y^2, \quad \omega_x^c = \frac{eH}{m_x c}, \quad \omega_i = \frac{1}{R} \left[\frac{2\Delta E_c}{m_i} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta_c = \frac{(eER)^2}{4\Delta E_c}$$

k_x – волновой вектор электрона вдоль оси квантовой проволоки, $\hbar\omega_z$, $\hbar\Omega_y$ – энергии размерного квантования, ΔE_c – высота потенциальной энергии на границе наноструктуры.

Заметим, что с ростом напряженности электрического поля дно размерно-квантованной зоны проводимости опускается в область запрещенной зоны.

Расчет тензора электропроводности проведем с использованием формулы Кубо [30] (слабое тянущее электрическое поле направлено вдоль оси нанопроволоки). В приближении времени релаксации [38] электропроводность записывается следующим образом:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{k_0 T V m_x^2} \sum_{\alpha\beta} \left| \hat{P}_{\alpha\beta}^{(x)} \right|^2 \tau_{\alpha\beta} n_{\alpha} (1 - n_{\beta}) \quad (4.22)$$

$1/\tau_{\alpha\beta}$ описывает квантово-механическую вероятность рассеяния носителей в единицу времени, n_{α} – равновесная функция распределения электронов с энергией E_{α} , $\hat{P}_{\alpha\beta}^{(x)}$ – матричный элемент оператора импульса, V – объем исследуемой квантовой системы, k_0 – постоянная Больцмана, T – температура.

В дальнейшем рассмотрим случай рассеяния заряженных частиц на шероховатой поверхности наносистемы [1], который является доминирующим при малых радиусах квантовой проволоки и низких температурах. При этом энергию взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью записываем в следующем виде [1; 9]:

$$W_{\alpha} = \frac{\partial E_{\alpha}}{\partial R} \Delta(x) \equiv V_{\alpha} \Delta(x) \quad (4.23)$$

$$V_{\alpha} = -\frac{1}{R} \left[\left(\frac{\omega_y \omega_x^c}{\Omega_y^2} \right)^2 \frac{m_y}{m_x} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m_x} + \hbar \omega_y \left(\frac{\omega_y}{\Omega_y} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_z \left(m + \frac{1}{2} \right) + 2\Delta_c \right]$$

$\Delta(x)$ – случайная функция.

Для δ -образной флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности имеет вид:

$$\{\Delta(x) \Delta(x')\} = \gamma_0 \delta(x - x'),$$

а усреднение проводится по реализации случайного процесса. Как непосредственно следует из (4.23), с ростом напряженности поперечного электрического поля E взаимодействие электрона с шероховатой поверхностью увеличивается. Расчет

времени релаксации с учетом (4.23) проводится аналогично [61]. В результате

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \Gamma_\alpha \frac{1}{|k_x|}, \Gamma_\alpha = \frac{2\gamma_0 m_x^*}{\hbar^3} V_\alpha^2. \quad (4.24)$$

Заметим, что время релаксации (4.24) в точности равно транспортному времени релаксации, используемому при решении кинетического уравнения Больцмана.

Если учесть, что матричный элемент импульса определяется соотношением¹:

$$\hat{P}_{\alpha\beta}^{(x)} = \hbar k_x \left(\frac{\omega_y}{\Omega_y} \right)^2 \delta_{\alpha\beta},$$

то выражение для электропроводности (4.22) с учетом (4.24) принимает следующий вид;

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2 \hbar^2}{k_0 T V m_x^{*2}} \sum_{\alpha} k_x^2 \tau_\alpha n_\alpha (1 - n_\alpha) \quad (4.25)$$

В дальнейшем рассматриваем низкие температуры, когда $\hbar\omega_z \gg k_0 T$, поэтому зависимость V_α от волнового вектора электрона можно пренебречь. В этом естественном приближении соотношение (4.25), после интегрирования по k_x , можно записать:

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2 \hbar}{\beta_0 \pi^2 m_x^* \gamma_0} \sum_{nm} \frac{\ln [1 + \exp(\beta_0 \xi_{nm})]}{\left[\hbar \omega_y \frac{\omega_y}{\Omega_y} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_z \left(m + \frac{1}{2} \right) + 2\Delta_c \right]^2} \quad (4.26)$$

$$\xi_{nm} = \xi - \hbar \Omega_y \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_z \left(m + \frac{1}{2} \right) + \Delta_c, \quad \beta = \frac{1}{k_0 T}$$

ξ – химический потенциал исследуемой наносистемы. Аналогично можно записать σ_{xx} для дырок в Т валентной зоне полуметалла Vi. В этом случае в (4.26) эффективные массы электронов нужно заменить на соответствующие массы дырок μ_x, μ_y, μ_z , а ξ на $-\xi + \Delta_0$ (Δ_0 определяется перекрытием Т валентной зоны и зоны проводимости, $\Delta_0 \cong 39 \text{ meV}$ [63])

Энергия электронов в валентной зоне определяется соотношением:

$$E_\alpha^v = \Delta_0 - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x^*} - \hbar \tilde{\Omega}_y \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar \tilde{\omega}_z \left(m + \frac{1}{2} \right) + \Delta_v,$$

¹Недиагональные по осцилляторному квантовому числу матричные элементы при разумных параметрах КП дают незначительный вклад в искомую электропроводность

здесь обозначено

$$\mu_x^* = \mu_x \left(\frac{\tilde{\Omega}_y}{\tilde{\omega}_y} \right)^2, \quad \tilde{\Omega}_y^2 = \frac{\mu_x}{\mu_y} (\tilde{\omega}_x^c)^2 + \tilde{\omega}_y^2, \quad \tilde{\omega}_x^c = \frac{eH}{\mu_x c}, \quad \tilde{\omega}_i = \frac{1}{R} \left[\frac{2\Delta E_v}{\mu_i} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta_v = \frac{(eER)^2}{4\Delta E_v}$$

$\hbar\tilde{\Omega}_y, \hbar\tilde{\omega}_z$ – энергия размерного квантования в валентной зоне, ΔE_v – высота потенциальной энергии для дырок на границе квантовой проволоки.

Следовательно, подвижность носителей (электронов и дырок) в нанопроволоке записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu = & \frac{eR^2\hbar^2}{m_x^*\gamma_0} \frac{1}{\sqrt{2m_x^*\beta_0} \sum_{nm} F(\xi_{nm})} \sum_{nm} \frac{\ln [1 + \exp(\beta\xi_{nm})]}{\left[\hbar\omega_y \frac{\omega_y}{\tilde{\Omega}_y} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(m + \frac{1}{2}\right) + 2\Delta_c \right]^2} + \\ & + \frac{eR^2\hbar^2}{\mu_x^*\gamma_0} \frac{1}{\sqrt{2\mu_x^*\beta_0} \sum_{nm} F(\tilde{\xi}_{nm})} \sum_{nm} \frac{\ln [1 + \exp(\beta\tilde{\xi}_{nm})]}{p \left[\hbar\tilde{\omega}_y \frac{\tilde{\omega}_y}{\tilde{\Omega}_y} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\tilde{\omega}_z \left(m + \frac{1}{2}\right) + 2\Delta_v \right]^2} \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$F(\xi_{nm}) = \int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \beta\xi_{nm}) + 1},$$

$$\tilde{\xi}_{nm} = -\xi - \hbar\tilde{\Omega}_y \left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\tilde{\omega}_z \left(m + \frac{1}{2}\right) + \Delta_0 + \Delta_v$$

p – число S зон, участвующих в процессах электропроводности. Если магнитное поле направлено вдоль оси OZ , а постоянное поперечное электрическое поле E перпендикулярно H , то подвижность, как показывают расчеты, тоже описывается соотношением (4.27).

Химический потенциал ξ находится из условия электронейтральности исследуемой квантовой проволоки (число электронов в p зонах проводимости равно числу дырок в валентной зоне):

$$p \left(\frac{m_x^*}{\mu_x^*} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{nm} F(\xi_{nm}) = \sum_{nm} F(\tilde{\xi}_{nm}) \quad (8) \quad (4.28)$$

Как непосредственно следует из (4.28), величина химического потенциала ξ зависит от радиуса нанопроволоки и определяется напряженностью электрического и магнитного полей.

Дальнейшие оценки будем проводить для параметров, близких к полуметалу Bi: $m_x = 0.0011m_0$, $m_y = 0.26m_0$, $m_z = 0.0045m_0$, $\mu_x = \mu_y = 0.059m_0$, $\mu_z = 0.634$ [63], $\Delta_c = 0.5$ eV, $\Delta_v = 0.3$ eV (m_0 – масса свободного электрона). При этих параметрах

$$\hbar\omega_y = \frac{4.9}{R_0} \text{ (eV)}, \hbar\omega_z = \frac{37.6}{R_0} \text{ (eV)}, \hbar\tilde{\omega}_y = \frac{8}{R_0} \text{ (eV)}, \hbar\tilde{\omega}_z = \frac{2.4}{R_0} \text{ (eV)},$$

(R_0 – радиус нанопроволоки в ангстремах).

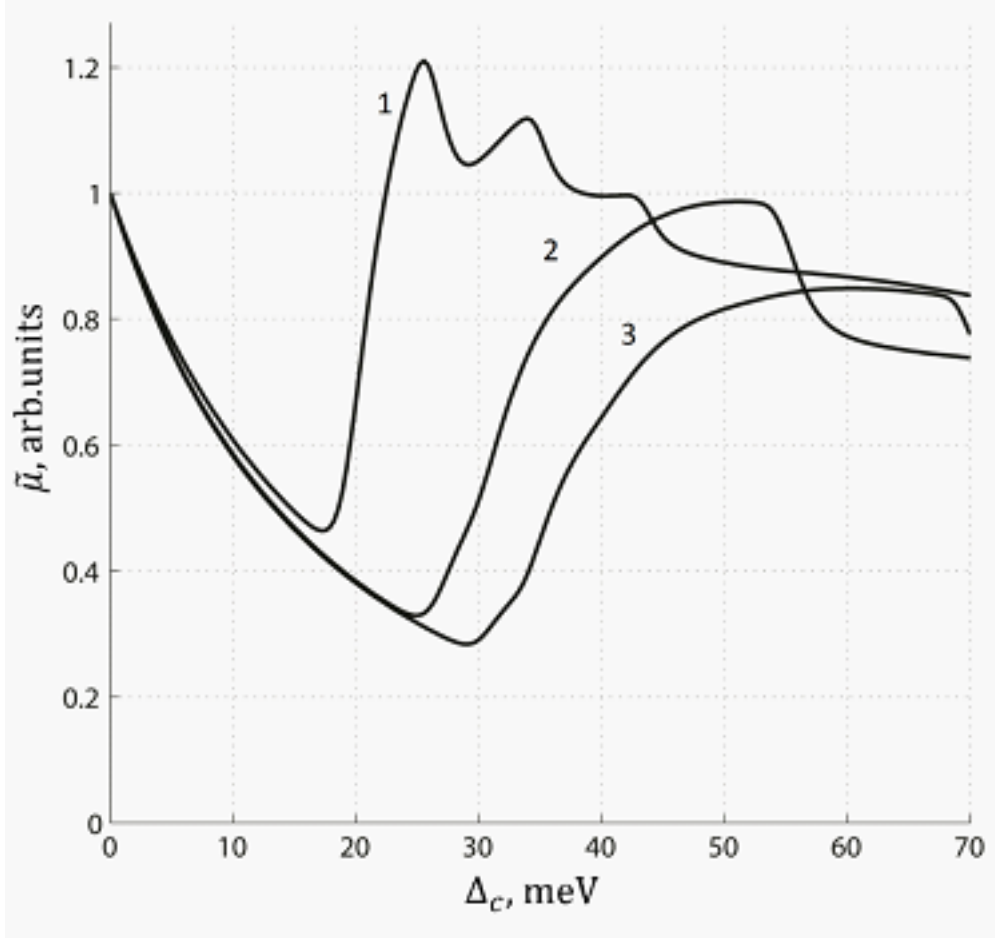


Рис. 1. Зависимость подвижности в относительных единицах $\tilde{\mu} = \mu(E)/\mu(0)$ от электрического поля.

На рис. 1 приведены численные расчеты зависимости подвижности (в относительных единицах) от напряженности поперечного электрического поля. Кривые 1,2,3 получены при $\delta = 0$, $\delta = 0.05$, $\delta = 0.1$ соответственно $\left(\delta = \left(\frac{\omega_x^c}{\omega_y}\right)^2\right)$. При малых значениях Δ_c электронный газ (при рассмотренных параметрах квантовой проволоки) является невырожденным, поэтому с ростом напряженности поперечного электрического поля уменьшается [39]. Кривая 1 (подвижность в отсутствии магнитного поля) описывается тремя максимумами. Такая осцилляционная

зависимость подвижности связана с тем, что с ростом E химический потенциал, отсчитанный от дна размерно-квантованной зоны проводимости, поднимается в область больших значений энергии и может «наткнуться» на дно размерно-квантованной C зоны, в которой существуют особенности в плотности энергетических состояний. Первый пик связан с пересечением химического потенциала нижайшего состояния размерно-квантованной C зоны ($n = 0, m = 0$), второй пик возникает из-за пересечения химического потенциала дна первой размерно-квантованной зоны ($m = 0, n = 1$), третий пик – из-за пересечения химического потенциала второй размерно-квантованной зоной ($m = 1, n = 0$). С ростом напряженности магнитного поля дно размерно-квантованной зоны проводимости поднимается в область больших значений энергии, поэтому пересечение химического потенциала наступает при больших значениях Δ_c . Именно по этой причине первый пик кривой 2 сдвинут по отношению первого пика кривой 1 в область больших значений напряженности поперечного электрического поля.

Заметим, что согласно (4.27) подвижность с ростом напряженности магнитного поля уменьшается. Это связано с тем, что эффективные массы электронов (дырок) в однородном поперечном магнитном поле увеличиваются (в $\left(\frac{\Omega_y}{\omega_y}\right)^2$ раз для электронов и в $\left(\frac{\tilde{\Omega}_y}{\omega_y}\right)^2$ раз для дырок).

4.4 Термоэдс в нанопроволоках Bi в поперечном постоянном электрическом поле

В квантовых проволоках, как следствие одномерности исследуемой наносистемы, на дне размерно-квантованных зон возникают особенности в плотности энергетических состояний. Именно это обстоятельство приводит, в частности, к особенностям оптических свойств нанопроволок [62—65], и заметным образом влияет, как будет показано ниже, на кинетические коэффициенты в нанопроволоках с вырожденным электронным (дырочным) газом. В настоящей диссертационной работе теоретически исследуется термоэдс в квантовых проволоках типа Bi в модели квадратичного потенциала. Такая модель часто применяется при расчетах кинетических коэффициентов в нанопроволоках [17; 66] и находит свое теоретическое обоснование [60]. Если постоянное электрическое поле E , направленное

вдоль оси размерного квантования наноструктуры при определенных условиях может существенным образом влиять на подвижность [61], то представляет интерес исследовать влияние E , на термоэдс в низкоразмерных системах.

В квантовых проволоках типа Vi с потенциальной энергией для носителей в форме параболоида вращения в постоянном электрическом поле E , направленном перпендикулярно оси исследуемой наноструктуры. В рассматриваемой модели энергия электронов с эффективной массой m_c в размерно-квантованной зоне проводимости имеет вид:

$$\varepsilon_c = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_c} + \hbar\omega_c (n + k + 1) - \Delta_c, \Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_c \omega_c^2}, \quad (4.29)$$

здесь k_x – волновой вектор носителя вдоль оси нанопроволоки, $\hbar\omega_c$ – шаг размерного квантования, который простым образом связан с величиной потенциальной энергии ΔE_c на границе наноструктуры с радиусом R :

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar}{R} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m_c}}.$$

Как непосредственно следует из (1) с ростом напряженности электрического поля дно размерно-квантованной зоны проводимости опускается в запрещенную зону. Именно это обстоятельство приводит к тому, что при учете рассеяния электронов на шероховатой поверхности время релаксации зависит от E , что и приводит к заметному изменению кинетических коэффициентов [61]. С ростом E носители «прижимаются» к поверхности наноструктуры, т.е. их взаимодействие с шероховатой поверхностью увеличивается, что приводит к уменьшению времени релаксации. Аналогичным образом можно вычислить энергию электронов с эффективной массой m_v в размерно-квантованной валентной зоне.

$$\varepsilon_v = \Delta - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_v} - \hbar\omega_v (n + k + 1) + \Delta_v, \quad (2) \quad (4.30)$$

$$\Delta_v = \frac{e^2 E^2}{2m_v \omega_v^2}, \hbar\omega_v = \frac{\hbar}{R} \sqrt{\frac{2\Delta E_v}{m_v}}$$



Рис. 1 Схема энергетических зон квантовой проволоки Вi в постоянном электрическом поле

В дальнейшем для нанопроволок Вi рассмотрим простейшую модель перекрывающихся зон (рис. 1). На рис. 1. сплошными линиями изображены размерно-квантованные уровни с и v зон. Пунктирными линиями представлены энергии носителей в постоянном электрическом поле. Расчет термоэдс α_{xx} (слабое тянущее электрическое поле направленно вдоль оси x) проводился с использованием общих соотношений, связывающих α_{xx} с плотностью потока тепловой энергии γ_{xx} для носителей и с электропроводностью для электронов и дырок [67]. В приближении времени релаксации [38] электропроводность и плотность потока тепловой энергии для электронов принимают вид:

$$\sigma_{xx}^{(e)} = \frac{\beta e^2 \hbar^2}{2V m_c^2} \sum_{\alpha} k_x^2 \tau_{\alpha}^{(e)} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \quad (3a) \quad (4.31)$$

$$\gamma_{xx}^{(e)} = \frac{\beta e^2 \hbar^2}{2V m_c^2} \sum_{\alpha} (E_{\alpha}^c - \xi) k_x^2 \tau_{\alpha}^{(e)} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \quad (3b) \quad (4.32)$$

здесь n_{α} – равновесная функция распределения носителей с энергией E_{α}^c , α – набор квантовых чисел, описывающих состояние электрона, $1/\tau_{\alpha}^{(e)}$ – определяет полную квантово-механическую вероятность рассеяния частицы в единицу времени, ξ – химический потенциал исследуемой системы, $\beta = 1/k_0 T$, T – температура, V – объем основной области наноструктуры.

Аналогично можно записать $\sigma_{xx}^{(h)}$, $\gamma_{xx}^{(h)}$ для дырок в v зоне. Расчет времени релаксации τ_{α} проведем с учетом рассеяния носителей на шероховатой поверхности аналогично [61]. В случае δ -образной флуктуации поверхности нетрудно получить:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^{(e)}} = \frac{2m_c \omega_c^2 \gamma_0}{\hbar R^2 |k_x|} [n + k + 1 + N_c]^2, \quad N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar \omega_c}, \quad (4.33)$$

γ_0 – описывает высоту флуктуации. При расчете времени релаксации для случая гауссовой флуктуации [25] при низких температурах (именно при низких температурах рассеяние носителей на шероховатой поверхности наиболее активно) $1/\tau_{\alpha}^{(e)}$ описывается соотношением (4), в котором нужно γ_0 заменить на $\pi \Delta_0^2 \Lambda^2$ (Δ_0 – высота гауссовой флуктуации, Λ – ее длина). Заметим, что $\tau_{\alpha}^{(e)}$ (для любого типа

флуктуации) в точности равно транспортному времени релаксации, используемому при решении кинетического уравнения Больцмана. Аналогично записывается $\tau_{\alpha}^{(h)}$ для дырок. В результате выражение для термоэдс после суммирования по k_x принимает вид:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \left\{ \sum_{n,m} \left[\nu \frac{F_2(\eta_{nm}^c) - \eta_{nm}^c F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} - \frac{F_2(\eta_{nm}^v) - \eta_{nm}^v F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\} \times \\ \times \left\{ \sum_{n,m} \left[\nu \frac{F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} + \frac{F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\}^{-1} \quad (4.34)$$

$$a = \left(\frac{m_h}{m_c} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_h} \right)^{\frac{3}{2}}, b = \frac{\Delta E_h}{\Delta E_c},$$

$$\eta_{nm}^c = \beta [\Delta_c + \xi - \hbar\omega_c (n+m+1)],$$

$$\eta_{nm}^v = \beta [\Delta + \Delta_v - \xi - \hbar\omega_v (n+m+1)],$$

$$F_k(\eta) = \int_0^\infty dx \cdot x^k \cdot \frac{e^{x-\eta}}{(e^{x-\eta} + 1)^2}, F_1(\eta) = \ln(e^\eta + 1)$$

v – количество зон проводимости, участвующих в кинетических процессах. Химический потенциал ξ определяется из условия электронейтральности исследуемой наноструктуры (число электронов в размерно-квантованных s зонах равно числу дырок в v зоне):

$$\nu \sqrt{\frac{m_c}{m_v}} \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^c) = \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^v). \quad (4.35)$$

Аналитическое решение уравнения (4.35) для химического потенциала можно найти для частных случаев.

Если носители находятся на нижайшем размерно-квантованном уровне ($n = m = 0$), электронный и дырочный газ вырожден (химический потенциал положителен и $\beta\xi \gg 1$), то при $m_c \ll m_v$, из (4.35) не трудно определить ξ :

$$\xi - \hbar\omega_c = \Delta + \Delta_v - (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v), \left(\frac{\Delta_v}{\Delta_c} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} > 1 \right).$$

$\xi - \hbar\omega_c$ – химический потенциал отсчитываемый от дна размерно-квантованной зоны.

В такой простой модели, термоэдс принимает вид:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^3}{3} \frac{1 - \frac{1}{b\nu} \left(\frac{1+N_c}{1+aN_c} \right)^2}{\Delta + \Delta_v - (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v)}. \quad (4.36)$$

Следовательно, термоэдс отрицательна, т.е. определяется электронами и с ростом напряженности электрического поля E уменьшается.

В противоположном случае невырожденного электронного и дырочного газов (это справедливо при малых радиусах квантовой проволоки $d \ll 500 \text{ \AA}$, при $T = 77 \text{ K}$ [65]). Как следует из уравнения (4.35), химический потенциал определяется из соотношения:

$$\nu \sqrt{\frac{m_c}{m_v}} \exp(\eta_{00}^c) = \exp(\eta_{00}^v). \quad (4.37)$$

В результате

$$\alpha_{xx}^{(nd)} = -\frac{k_0}{e} \left\{ 2 + \beta \left[\frac{1}{2} \ln(\nu^2 \frac{m_c}{m_h}) + (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v - \Delta + \Delta_v + \Delta_c) \right] \right\}, \quad (4.38)$$

Расчет термоэдс в общем случае проведен по соотношению (4.34) с учетом размерно-квантованных v и c зон при типичных значениях параметров квантовой проволоки: $\Delta E_c = 0.5 \text{ eV}$, $\Delta E_v = 0.3 \text{ eV}$, $\Delta = 0.038 \text{ eV}$, $m_c = 0.01m_0$, $m_v = 0.1m_0$, при $R = 500 \text{ \AA}$. Зависимость термоэдс от напряженности постоянного электрического поля приведена на рис. 2.

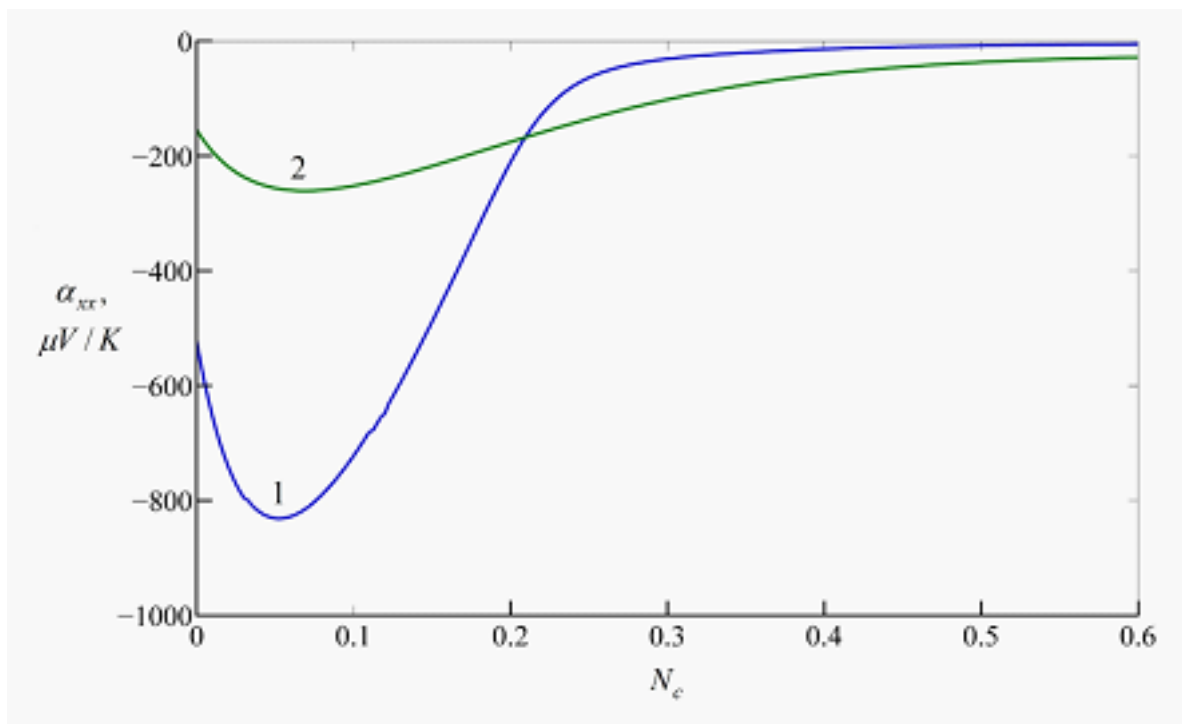


Рис. 2, Зависимость удельной термоэдс квантовой проволоки от напряженности поперечного электрического поля.

Кривая 1 получена при $T = 10$ К, кривая 2 вычислена при $T = 50$ К. Как непосредственно следует из рис. 2, с ростом температуры величина термоэдс по абсолютной величине уменьшается и при увеличении E , стремится к нулю оставаясь при этом отрицательной.

В нанопроволоках, как следствие одномерности наноструктуры, плотность состояний на дне каждой размерно-квантованной зоны возникают особенности. Поэтому с ростом напряженности постоянного электрического поля экстремумы, например, размерно-квантованных v зон, поднимаясь вверх по энергии, могут пересекать химический потенциал, что, естественно, приводит к особенностям кинетических коэффициентов (например, подвижности). Однако в термоэдс эти особенности не очень ярко проявляются, поскольку α_{xx} определяется отношением потока тепловой энергии носителей к электропроводности.

При $E = 0$ дырки вносят заметный вклад в термоэдс, уменьшая ее по абсолютной величине. С ростом напряженности электрического поля (для рассмотренных выше параметров нанопроволоки $a \sim 7$) вклад дырок в термоэдс быстро уменьшается, а это и приводит к тому, что в зависимости α_{xx} от N_c (рис. 2) возникает характерный минимум.

Следовательно, внешнее электрическое поле дает уникальную возможность управлять величиной термоэдс, что позволяет надеяться на приборное применение

ние предсказанного эффекта. В заключение отметим, что сильная анизотропия эффективных эффективных масс в нанопроволоках Bi (в зависимости от направления кристаллографических осей массы для электронов в С-зоне меняются от $0,001m_0$ до $0,26m_0$, валентной зоне от $0,059m_0$ до $0,634m_0$ [63]) влияет на величину рассматриваемого эффекта, что сохраняет зависимость термоэдс от E практически неизменной.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

Список литературы

1. Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum wells / H. Sakaki [et al.] // Applied Physics Letters. — 1987. — Vol. 51, no. 23. — P. 1934. — DOI: [10.1063/1.98305](https://doi.org/10.1063/1.98305).
2. *Stern F.* Calculated Temperature Dependence of Mobility in Silicon Inversion Layers // Physical Review Letters. — 1980. — June. — Vol. 44, no. 22. — Pp. 1469–1472. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.44.1469](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.44.1469).
3. *Cham K. M., Wheeler R. G.* Temperature-Dependent Resistivities in Silicon Inversion Layers at Low Temperatures // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Vol. 44, no. 22. — Pp. 1472–1475. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.44.1472](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.44.1472).
4. Effects of interface roughness and phonon scattering on intersubband absorption linewidth in a GaAs quantum well / T. Unuma [et al.] // Applied Physics Letters. — 2001. — Vol. 78, no. 22. — Pp. 3448–3450. — DOI: [10.1063/1.1376154](https://doi.org/10.1063/1.1376154).
5. Electron scattering spectroscopy by a high magnetic field in quantum cascade lasers / A. Leuliet [et al.] // Physical Review B. — 2006. — Feb. — Vol. 73, no. 8. — P. 085311. — DOI: [10.1103/PhysRevB.73.085311](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.085311).
6. *Gold A., Ghazali A.* Analytical results for semiconductor quantum-well wire: Plasmons, shallow impurity states, and mobility // Physical Review B. — 1990. — Vol. 41, no. 11. — Pp. 7626–7640. — DOI: [10.1103/PhysRevB.41.7626](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.7626).
7. Optical investigation of interface roughness and defect incorporation in GaAs/AlGaAs quantum wells grown with and without growth interruption / M. Gurioli [et al.] // Applied Physics Letters. — 1991. — Vol. 59, no. 17. — Pp. 2150–2152. — DOI: [10.1063/1.106109](https://doi.org/10.1063/1.106109).
8. *Ibragimov G. B.* Interface roughness induced intrasubband scattering in a quantum well under an electric field // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. — 2002. — Vol. 5, no. 1. — Pp. 39–41.
9. *Motohisa J., Sakaki H.* Interface roughness scattering and electron mobility in quantum wires // Applied Physics Letters. — 1992. — Vol. 60, no. 11. — P. 1315. — DOI: [10.1063/1.107328](https://doi.org/10.1063/1.107328).

10. *Tsetseri M., Triberis G. P.* Mobility in V-shaped quantum wires due to interface roughness and alloy scattering // *Physical Review B*. — 2004. — Feb. — Vol. 69, no. 7. — P. 075313. — DOI: [10.1103/PhysRevB.69.075313](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.075313).
11. Quantum and transport lifetimes due to roughness-induced scattering of a two-dimensional electron gas in wurtzite group-III-nitride heterostructures / D. N. Quang [et al.] // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Vol. 74, no. 20. — P. 205312. — DOI: [10.1103/PhysRevB.74.205312](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.205312).
12. *Борздов А. В., Поздняков Д. В.* Рассеяние электронов в транзисторной структуре GaAs/AlAs // *ФТТ*. — 2007. — Т. 49, № 5. — С. 913—916.
13. Mobility in Semiconducting Graphene Nanoribbons: Phonon, Impurity, and Edge Roughness Scattering / T. Fang [et al.] // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. — 2008. — July. — Vol. 78, no. 20. — DOI: [10.1103/PhysRevB.78.205403](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.205403). — arXiv: [0807.0183](https://arxiv.org/abs/0807.0183).
14. *Kamalakar M. V., Raychaudhuri A. K.* Low temperature electrical transport in ferromagnetic Ni nanowires // *Physical Review B*. — 2009. — May. — Vol. 79, no. 20. — P. 205417. — DOI: [10.1103/PhysRevB.79.205417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.205417).
15. *Liu L., Chen X.* Effect of surface roughness on thermal conductivity of silicon nanowires // *Journal of Applied Physics*. — 2010. — Feb. — Vol. 107, no. 3. — P. 033501. — DOI: [10.1063/1.3298457](https://doi.org/10.1063/1.3298457).
16. *Лозовик Ю. Е., Рувинский А. М.* Магнитоэкситонное поглощение света в неоднородных квазидвумерных системах // *ЖЭТФ*. — 1998. — Т. 4. — С. 1451. — DOI: [10.1134/1.558722](https://doi.org/10.1134/1.558722).
17. *Гейлер В., Маргулис В., Филина Л.* Проводимость квантовой проволоки в продольном магнитном поле // *ЖЭТФ*. — 1998. — Т. 113, № 4. — С. 1376.
18. *Бонч-Бруевич В., Калашников С.* Физика полупроводников. — Москва : Наука, 1977. — С. 672.
19. *Синявский Э. П., Хамидуллин Р. А.* Электропроводность квантовых проволок в однородном магнитном поле // *ФТП*. — 2006. — Т. 40, № 11. — С. 1368.
20. *Синявский Э. П., Костюкевич Н. С.* Особенности поглощения слабой электромагнитной волны в нанопроволоках // *Оптика и спектроскопия*. — 2013. — Т. 114, № 2. — С. 225—231. — DOI: [10.7868/S003040341302027X](https://doi.org/10.7868/S003040341302027X).

21. *Синявский Э. П., Соловенко В. Г.* Особенности термоэдс в квантовых прово-
локах Bi в поперечных магнитном и электрическом полях // ФТТ. — 2014. —
Т. 56, № 11. — С. 2197—2200.
22. *West L. C., Eglash S. J.* First observation of an extremely large-dipole infrared
transition within the conduction band of a GaAs quantum well // Applied Physics
Letters. — 1985. — June. — Vol. 46, no. 12. — Pp. 1156–1158. — DOI: [10.1063/
1.95742](https://doi.org/10.1063/1.95742).
23. *Wu C.-C., Lin C.-J.* Free-carrier absorption in n-type piezoelectric semiconductor
films // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1994. — Ноябрь. — Т. 6, № 46. —
С. 10147—10158. — DOI: [10.1088/0953-8984/6/46/030](https://doi.org/10.1088/0953-8984/6/46/030).
24. *Spector H. N.* Free-carrier absorption in quasi-two-dimensional semiconducting
structures // Physical Review B. — 1983. — Июль. — Т. 28, № 2. — С. 971—
976. — DOI: [10.1103/PhysRevB.28.971](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.28.971).
25. *Vurgaftman I., Meyer J. R.* TE- and TM-polarized roughness-assisted free-carrier
absorption in quantum wells at midinfrared and terahertz wavelengths // Physical
Review B. — 1999. — Nov. — Vol. 60, no. 20. — P. 14294. — DOI: [10.1103/
PhysRevB.60.14294](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.14294).
26. Light absorption and emission in InAs/GaAs quantum dots and stepped quantum
wells / V. Aleshkin [et al.] // Proceedings of SPIE - The International Society for
Optical Engineering. Vol. 5023 / ed. by Z. I. Alferov, L. Esaki. — International
Society for Optics, Photonics, June 2003. — Pp. 209–212. — DOI: [10.1117/12.
513802](https://doi.org/10.1117/12.513802).
27. Внутризонное поглощение и излучение света в квантовых ямах и квантовых
точках / Л. Воробьев [и др.] // ФТТ. — 2004. — Т. 46, № 1. — С. 119—122.
28. *Mahāwitthayālai Thammasāt. S., Kaewnopparat S., Pinsuwan S.* Thammasat in-
ternational journal of science and technology : TIJSAT. // Thammasat Interna-
tional Journal of Science and Technology. — 1997. — Vol. 2, no. 2. — Pp. 79–
83.
29. Optical characterization of interface disorder in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs multi-
quantum well structures / C. Weisbuch [et al.] // Solid State Communications. —
1981. — May. — Vol. 38, no. 8. — Pp. 709–712. — DOI: [10.1016/0038-1098\(81\)
90401-4](https://doi.org/10.1016/0038-1098(81)90401-4).

30. *Kubo R.* Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems // Journal of the Physical Society of Japan. — 1957. — June. — Vol. 12, no. 6. — Pp. 570–586. — DOI: [10.1143/JPSJ.12.570](https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570). — arXiv: [0211006](https://arxiv.org/abs/0211006) [cs].
31. *Синявский Э. П., Соковнич С. М., Хамидуллин Р. А.* Межзонное поглощение света в полупроводниках в однородном электрическом поле. // Вестник Приднестровского Университета. — 2004. — Т. 1. — С. 37—41.
32. *Glauber R. J.* The quantum theory of optical coherence // Physical Review. — 1963. — June. — Vol. 130, no. 6. — Pp. 2529–2539. — DOI: [10.1103/PhysRev.130.2529](https://doi.org/10.1103/PhysRev.130.2529).
33. *Eberly J. H.* Fundamentals of Quantum Optics. John R. Klauder and E. C. G. Sudarshan. Benjamin, New York, 1968. xii + 279 pp., illus. \$13.50. Mathematical Physics Monograph Series // Science. — 1968. — Vol. 162, no. 3860. — Pp. 1379–1380. — DOI: [10.1126/science.162.3860.1379](https://doi.org/10.1126/science.162.3860.1379).
34. *Синявский Э. П.* К теории магнетопоглощения в присутствии лазерного излучения // ФТТ. — 1974. — Т. 16, № 11. — С. 3201—3206.
35. *Синявский Э. П., Брусенская Е. И.* Магнетопоглощение света в размерно-ограниченных системах в поле резонансного лазерного излучения // ФТТ. — 2002. — Т. 44, № 6. — С. 1116—1120.
36. *Синявский Э. П.* Кинетические эффекты в электрон-фононных системах в поле лазерного излучения. — Кишинев : Штиинца, 1976.
37. Interband electron Raman scattering in a quantum wire in a transverse magnetic field / F. M. Hashimzade [et al.] // Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics. — 2005. — Apr. — Vol. 71, no. 16. — P. 165331. — DOI: [10.1103/PhysRevB.71.165331](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.165331). — arXiv: [0411416](https://arxiv.org/abs/0411416) [cond-mat].
38. *Синявский Э. П., Хамидуллин Р. А.* Особенности электропроводности параболической квантовой ямы в магнитном поле // ФТП. — 2002. — Т. 36, № 8. — С. 989—992.
39. *Синявский Э. П., Каранетян С. А.* Влияние поперечного электрического поля на подвижность в нанопроволоках // ФТП. — 2012. — Т. 46, № 8. — С. 1032—1034. — DOI: [10.1134/S1063782612080210](https://doi.org/10.1134/S1063782612080210).

40. *Синявский Э. П., Канаровский Е. Ю., Костюкевич Н. С.* Влияние магнитного поля на оптические свойства квантовых проволок // Оптика и спектроскопия. — 2015. — Т. 119, № 5. — С. 783—789. — DOI: [10.7868/S0030403415110215](https://doi.org/10.7868/S0030403415110215).
41. *Перлин Е., Коварский В.* Влияние резонансного лазерного излучения на собственное поглощение света в кристаллах // ФТТ. — 1970. — Т. 12, № 11. — С. 3105—3112.
42. Transport properties of Bi nanowire arrays / Y.-M. Lin [et al.] // Applied Physics Letters. — 2000. — Vol. 76, no. 26. — Pp. 3944–3946. — DOI: [10.1063/1.126829](https://doi.org/10.1063/1.126829).
43. *Lin Y.-M., Dresselhaus M. S.* Determination of carrier density in Te-doped Bi nanowires // Applied Physics Letters. — 2003. — Vol. 83, no. 17. — Pp. 3567–3569. — DOI: [10.1063/1.1614443](https://doi.org/10.1063/1.1614443).
44. Magnetoresistance of bismuth nanowire arrays: A possible transition from one-dimensional to three-dimensional localization / J. Heremans [et al.] // Physical Review B. — 1998. — Oct. — Vol. 58, no. 16. — R10091–R10095. — DOI: [10.1103/PhysRevB.58.R10091](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.R10091).
45. Electronic transport properties of single-crystal bismuth nanowire arrays / Z. Zhang [et al.] // Phys. Rev. B. — 2000. — Vol. 61, no. 7. — Pp. 4850–4861. — DOI: [10.1103/PhysRevB.61.4850](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.4850).
46. Bismuth nanowire arrays: Synthesis and galvanomagnetic properties / J. Heremans [et al.] // Phys. Rev. B. — 2000. — Vol. 61, no. 4. — Pp. 2921–2930. — DOI: [10.1103/PhysRevB.61.2921](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.2921).
47. *Ансельм А.* Введение в теорию полупроводников. — Москва, 1978. — С. 618.
48. *Constantinou N. C., Ridley B. K.* Effects of finite well depth on polar optical phonon scattering rates in cylindrical quantum well wires // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1989. — Mar. — Vol. 1, no. 12. — Pp. 2283–2288. — DOI: [10.1088/0953-8984/1/12/013](https://doi.org/10.1088/0953-8984/1/12/013).
49. Magneto-thermoelectric properties of bismuth quantum wires under elastic stretch / D. Gitsu [et al.] // International Conference on Thermoelectrics, ICT, Proceedings. 2003–Janua. — IEEE, 2003. — Pp. 413–416. — ISBN 078038301X. — DOI: [10.1109/ICT.2003.1287536](https://doi.org/10.1109/ICT.2003.1287536).

50. Semimetal- Semiconductor Transition in Bi Nanowires / A. A. Nikolaeva [et al.] // AIP Conf. Proc. — 2006. — Vol. 850. — Pp. 1446–1447. — DOI: [10.1063/1.2355246](https://doi.org/10.1063/1.2355246).
51. Pressure-dependent thermopower of individual Bi nanowires / D. Gitsu [et al.] // Applied Physics Letters. — 2005. — Mar. — Vol. 86, no. 10. — P. 102105. — DOI: [10.1063/1.1873045](https://doi.org/10.1063/1.1873045).
52. *Sinyavskii E., Sokovnich S., Pasechnik F.* Energy of the Bound State in a Parabolic Quantum Well in Magnetic and Electric Fields // *physica status solidi (b)*. — 1998. — Sept. — Vol. 209, no. 1. — Pp. 55–62. — DOI: [10.1002/\(SICI\)1521-3951\(199809\)209:1<55::AID-PSSB55>3.0.CO;2-V](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199809)209:1<55::AID-PSSB55>3.0.CO;2-V).
53. Confinement effect in single nanowires based on Bi / A. Nikolaeva [et al.] // *Physica B: Condensed Matter*. — 2004. — Vol. 346. — Pp. 282–286. — DOI: [10.1016/j.physb.2004.01.066](https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.01.066).
54. *Синявский Э. П., Канаровский Е. Ю.* Влияние постоянного электрического поля на оптические свойства параболических квантовых ям // *ФТТ*. — 1995. — Т. 37, № 9. — С. 2639—2645.
55. Infrared magnetoreflexion in bismuth. I. High fields / B. Lax [et al.] // *Physical Review Letters*. — 1960. — Sept. — Vol. 5, no. 6. — Pp. 241–243. — DOI: [10.1103/PhysRevLett.5.241](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.5.241).
56. *Cohen M. H.* Energy bands in the bismuth structure. I. A nonellipsoidal model for electrons in Bi // *Physical Review*. — 1961. — Jan. — Vol. 121, no. 2. — Pp. 387–395. — DOI: [10.1103/PhysRev.121.387](https://doi.org/10.1103/PhysRev.121.387).
57. *Сандомирский В. Б.* Квантовый эффект размеров в пленке полуметалла // *ЖЭТФ*. — 1967. — Т. 52, № 3. — С. 158—166.
58. Characterization of the electrical properties of semimetallic Bi films by electrical field effect / A. V. Butenko [et al.] // *Journal of Applied Physics*. — 1997. — Vol. 82, no. 3. — P. 1266. — DOI: [10.1063/1.365897](https://doi.org/10.1063/1.365897).
59. Raman scattering in quantum wells in a high magnetic field: Fröhlich interaction / A. Cros [et al.] // *Physical Review B*. — 1992. — Nov. — Vol. 46, no. 19. — Pp. 627–634. — DOI: [10.1103/PhysRevB.46.12627](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.12627).
60. *Beenakker C., Houten H. van* Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures // — 1991. — Pp. 1–228. — DOI: [10.1016/S0081-1947\(08\)60091-0](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60091-0).

61. *Синявский Э. П., Каранетян С. А.* Исследования подвижности в низкоразмерных системах в постоянном поперечном электрическом поле // ФТП. — 2011. — Авг. — Т. 45, № 8. — С. 1032—1034. — DOI: [10 . 1134 / S1063782611080185](https://doi.org/10.1134/S1063782611080185).
62. Optical absorption from an indirect transition in bismuth nanowires / M. R. Black [et al.] // *Physical Review B*. — 2003. — Dec. — Vol. 68, no. 23. — P. 235417. — DOI: [10.1103/PhysRevB.68.235417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.235417).
63. *Levin A. J., Black M. R., Dresselhaus M. S.* Indirect L to T point optical transition in bismuth nanowires // *Physical Review B*. — 2009. — Apr. — Vol. 79, no. 16. — P. 165117. — DOI: [10.1103/PhysRevB.79.165117](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.165117).
64. Intersubband transitions in bismuth nanowires / M. R. Black [et al.] // *Applied Physics Letters*. — 2000. — Vol. 77, no. 25. — Pp. 4142—4144. — DOI: [10.1063/1.1333402](https://doi.org/10.1063/1.1333402).
65. Infrared absorption in bismuth nanowires resulting from quantum confinement / M. R. Black [et al.] // *Physical Review B*. — 2002. — May. — Vol. 65, no. 19. — P. 195417. — DOI: [10.1103/PhysRevB.65.195417](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.195417).
66. *В.А. Гейлер, В.А. Маргулис* Проводимость квантовой проволоки в параллельном магнитном поле // ФТП. — 1999. — Т. 113, № 9. — С. 1141—1143.
67. *Kubo R., Yokota M., Nakajima S.* Statistical-mechanical theory of irreversible processes. II. Response to thermal disturbance // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 1957. — Nov. — Vol. 12, no. 11. — Pp. 1203—1211. — DOI: [10.1143/JPSJ.12.1203](https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.1203).