

ВЛИЯНИЕ ПОПЕРЕЧНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РАССЕЯНИЕ НОСИТЕЛЕЙ НА ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

Каранетян С.А.

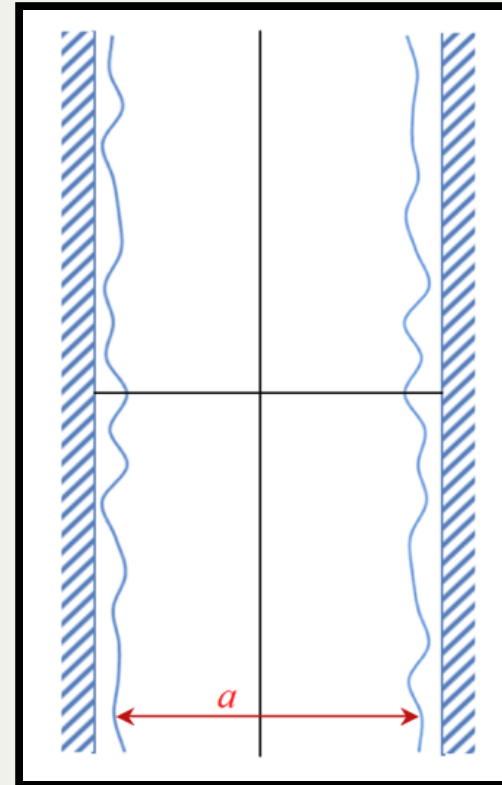
Приднестровский Государственный Университет им. Т.Г.Шевченко

Тирасполь, 2017

Механизм рассеяния на шероховатой поверхности

$$V(x, y) = \frac{\partial E_\alpha}{\partial a} \Delta(x, y) \equiv V_\alpha \Delta(x, y)$$

$\Delta(x, y)$ — случайная функция



Модель взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью строится следующим образом: из-за неровности поверхности случайным образом меняется ширина a размерно-ограниченной системы, что приводит к флуктуации энергии размерного квантования E_α при движении носителя параллельно поверхности исследуемой квантовой системы. Следовательно, энергия взаимодействия электрона (дырки) с шероховатой поверхностью в случае двумерного электронного газа может быть записана в следующем виде

Для прямоугольной квантовой ямы с бесконечными стенками:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \equiv E_0 n^2 \Rightarrow V_n = -\frac{2}{a} E_0 n^2$$

Для квантовой ямы с параболическим потенциалом:

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

$$\hbar\omega_e = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m_e}}$$

ΔE_c — высота параболического потенциала на границе наноструктуры,

$\hbar\omega_e$ — энергия размерного квантования.

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

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

Флуктуация поверхности в случае квантовой ямы

Гауссова:

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

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

δ -образная:

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

γ_0 определяет квадрат амплитуды флуктуации

Часто при расчетах кинетических коэффициентов используется случай гауссовой флуктуации поверхности, когда автокорреляционная функция для различных точек поверхности определяется соотношением здесь: Δ , Λ --- высота и ширина гауссовой флуктуации соответственно, $\{ \dots \}_V$ описывает усреднение по реализации случайного процесса

Естественно, что можно рассматривать случай δ -образной флуктуации, когда

γ_0 определяет квадрат амплитуды флуктуации.

Флуктуация поверхности для одномерного электронного газа

Гауссова:

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

δ -образная:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \gamma_0 \delta(x-x') = \tilde{F}_0(x-x')$$

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

Для случая δ -образной флуктуации поверхности естественно положить:

Формула Кубо

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

$$K(\Omega) = \frac{2\pi e^2}{Vcn_0\hbar\Omega m_e^2} (1 - e^{-\beta_0\hbar\Omega}) \sum_{\alpha\alpha_1\beta\beta_1} \langle \alpha | (\hat{\mathbf{P}}\boldsymbol{\xi}) | \alpha_1 \rangle \langle \beta | (\hat{\mathbf{P}}\boldsymbol{\xi}) | \beta_1 \rangle \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\Omega t} \langle a_{\alpha}^{+}(t) a_{\alpha_1}(t) a_{\beta}^{+} a_{\beta_1} \rangle$$

здесь:

$$a_{\alpha}^{+}(t) = \exp\left(\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right) a_{\alpha}^{+} \exp\left(-\frac{it\hat{H}}{\hbar}\right), \quad \hat{H} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+} a_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | \hat{V} | \beta \rangle a_{\alpha}^{+} a_{\beta}$$

Расчет электропроводности и коэффициента можно провести согласно формуле Кубо, которая в представлении вторичного квантования имеет вид:

Данные выражения справедливы для любых квантовых систем в произвольном магнитном поле. Единственное ограничение -- это малость тянущего электрического поля в случае электропроводности (т.е. область применимости закона Ома.) и малость амплитуды электромагнитной волны в случае поглощения света): $\hat{p}_{\alpha\beta}^{(i)}$ --- матричный элемент оператора импульса на сглаженных волновых функциях зонного электрона, $\beta_0 = 1/k_0 T$, α --- квантовые числа, описывающие состояние незаряженной частицы с эффективной массой m_e , V --- объем основной области системы, $[a_{\alpha}^{\dagger}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}}{\hbar}t\right)a_{\alpha}^{\dagger}\exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t\right),] \langle \dots \rangle$ --- описывает усреднение по системе равновесных электронов и по реализации случайного процесса. \hat{H} - Гамильтониан для электрона, взаимодействующего с шероховатой поверхностью размерно-ограниченной системы в представлении вторичного квантования записывается в виде^

Приближение времени релаксации

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

$$K(\Omega) = \frac{4\pi e^2}{\hbar c V n_0 \Omega} \left| \frac{\mathbf{P}_{\alpha\beta} \boldsymbol{\xi}}{m_e} \right|^2 \sum_{\alpha\beta} \frac{\tau_{\alpha\beta} n_{\alpha}}{1 + \frac{\tau_{\alpha\beta}^2}{\hbar^2} (\hbar\Omega + E_{\alpha} - E_{\beta})^2}$$

$$\frac{1}{\tau_{\alpha\beta}} = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\gamma} [W_{\alpha\gamma} \delta(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma}) + W_{\beta\gamma} \delta(\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\gamma})]$$

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

Усредняя по реализации случайного процесса (по шероховатой поверхности), получим выражения для электропроводности и коэффициента поглощения в которые входит время релаксации, которое является определяющей характеристикой процессов рассеяния. Время релаксации это фактически вероятность перехода носителя из данного состояния в любое другое состояние

Время релаксации для различных систем:

Квазидвумерные системы с бесконечным потенциалом и гауссовой флуктуацией поверхности

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

При низких температурах, когда $\Lambda k_{\perp} \ll 1$:

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

Для случая δ -образной флуктуации поверхности

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{m_e}{\hbar^3} \gamma_0 V_n^2$$

Для квазидвумерных систем с бесконечным потенциалом (квантовые ямы, гетероструктуры) в случае гауссовой флуктуации поверхности получаются следующие выражения для времени релаксации:

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

Аналогично можно записать для случая δ -образной флуктуации поверхности

Видно что рассеяние электронов происходит в одной зоне, и время релаксации зависит только от номера размерно-квантованной зоны n . При этом с ростом n τ_a уменьшается.

Одномерные квантовые системы с гауссовой флуктуацией поверхности

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

Одномерные квантовые системы с δ -образной флуктуацией поверхности

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2m_e}{\hbar^3} \cdot \frac{V_n^2}{|k_x|} \gamma_0$$

Для одномерных квантовых систем (например, нанопроволоки, нанотрубки), когда носители свободно движутся вдоль оси OX исследуемой наноструктуры

в случае гауссовой флуктуацией поверхности

в случае δ -образной флуктуации

Время релаксации зависит от номера размерно-квантованной зоны и имеет особенности при $k_x = 0$, т.е. на дне зоны проводимости. Это обстоятельство является непосредственным следствием одномерности движения носителей заряда.

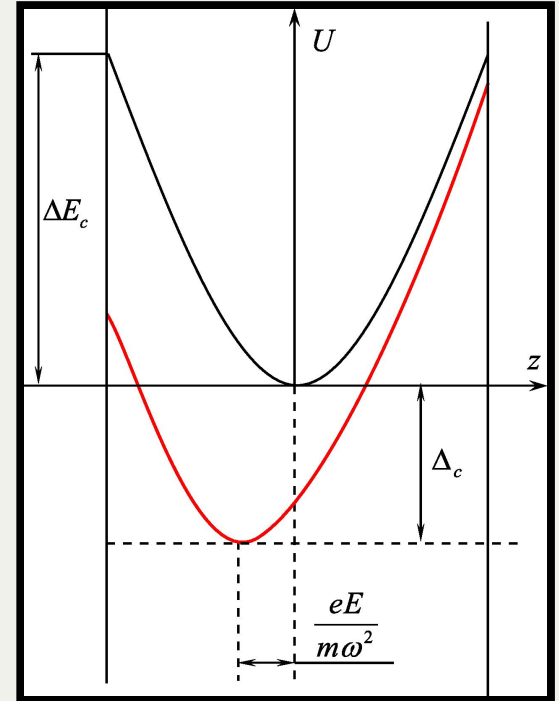
Влияние поперечного электрического поля на процессы рассеяния

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

$$\hbar\omega = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m_e}}$$

$$E_{n,k_\perp} = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_e} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \Delta_c$$

$$k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad \Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_e \omega^2}$$



$$\Psi_{k_x, n, m}^{(c)}(x, y, z) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left[(z - z_0) \sqrt{\lambda} \right] e^{-\frac{\lambda}{2} (z - z_0)^2}$$

Особый интерес представляют наноструктуры в поперечном электрическом поле, которое существенно влияет на явления переноса в таких структурах. В параболических квантовых ямах (ПКЯ), когда постоянное электрическое поле E направлено вдоль оси пространственного квантования, потенциальная энергия электрона определяется соотношением:

Волновая функция и собственные значения энергии электрона уравнения Шредингера с потенциальной энергией $U(z)$ известна

Заметим, что энергия размерного квантования убывает как a^{-1} (в прямоугольных квантовых ямах она уменьшается как a^{-2}).

k_{\perp} — волновой вектор электрона в плоскости низкоразмерной системы, $\Delta \epsilon_c$

— — — сдвиг энергии электрона в поперечном электрическом поле. Из энергетического спектра следует, что с ростом напряженности $\{c\}$

(см. рисунок). Будем рассматривать такие значения напряженности поперечного электрического поля, при которых параболическая остаются справедливыми. Для параметров ПКЯ приведенных выше $E \leq 3 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$.



Взаимодействие с шероховатой поверхностью

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

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{\gamma_0 m_e (\hbar\omega)^2}{\hbar^3 a^2} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) + N_c \right]^2, \quad N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega}$$

При низких температурах T в нелегированных системах с пониженной размерностью важным является механизм рассеяния носителей на шероховатой поверхности. В направлениях ОХ, ОУ свободного движения носителей заряда ширина ПКЯ изменяется случайным образом, и, следовательно энергия размерного квантования E_n , определяемая шириной квантовой системы, флуктуирует. Именно по этой причине энергию взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью можно записать следующим образом:

Необходимо заметить что в энергии, слагаемое отвечающее за взаимодействие носителя с поперечным электрическим полем зависит от энергии размерного квантования, которая непосредственно связана с шириной размерно-ограниченной системы, что приводит к дополнительному слагаемому $2\Delta_c/a$ в энергии взаимодействия носителя с шероховатой поверхностью. Такая зависимость механизма рассеяния от величины электрического поля представляется довольно интересной, т.к. другие механизмы рассеяния (на акустических фононах, на примесях) не зависят от величины поперечного электрического поля.

В случае δ -образной флуктуации поверхности получаем

Спасибо за внимание