

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук

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

Выполнил: Карапетян С.А.

Руководитель: д-р физ.-мат. наук, проф. Синявский Э.П.

Приднестровский Государственный Университет им. Т.Г.Шевченко

Тирасполь, 2017

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. Квантование движения частиц имеет место, когда характерный размер системы близок по величине к длине волны де Броиля носителей. 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.

Глава 1

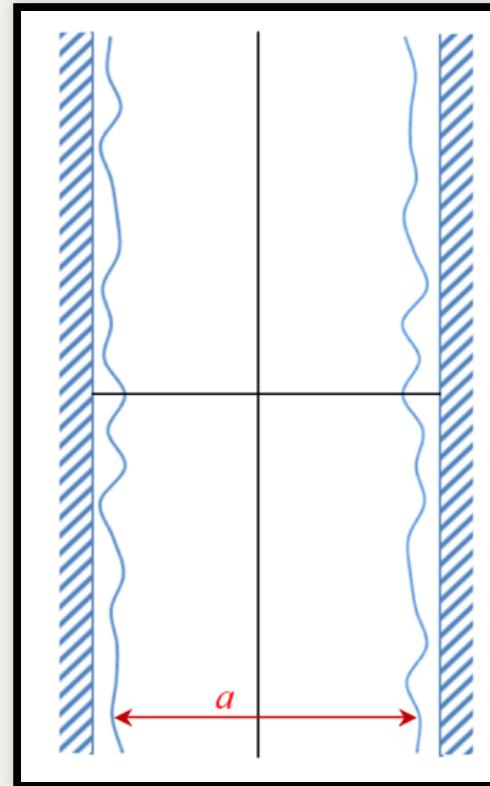
Рассеяние носителей на шероховатой поверхности

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. 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 кинетических коэффициентов от размеровnanoструктуры и по влиянию поперечного электрического поля на процессы рассеяния. Эти процессы рассеяния 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 нелегированных nanoструктурах 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.

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 двухмерного электронного газа может быть записана в следующем виде

Наиболее удачным для описания процессов рассеяния носителей на шероховатой поверхности является модель, когда размерыnanoструктур при движении заряженных частиц вдоль поверхности меняются случайным образом. В дальнейшем при описании кинетических явлений в размерно-ограниченных системах используется эта модель. Именно этот механизм рассеяния может описать большие значения подвижности носителей в области низких температур, наблюдаемые в экспериментальных исследованиях.

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:

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

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

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

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

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 тянувшего 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 заряженной частицы с эффективной массой \$me\$,

V - объем основной области системы,

$\$a^+ a\$$ - операторы рождения уничтожения

$\langle \dots \rangle$ - 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

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

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

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

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

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 флюктуацией 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 флюктуации 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 исследуемойnanoструктуры

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

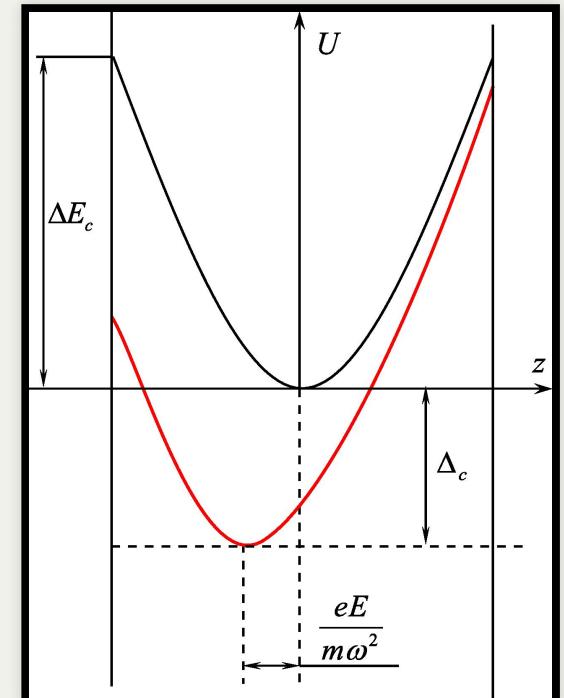
$$U(z) = \frac{m_e \omega^2}{2} z^2 + eEz$$

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

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

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

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



Особый интерес представляютnanoструктуры 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,

Δ_c - сдвиг энергии электрона в поперечном электрическом поле.

Из энергетического спектра следует что с ростом напряженности электрического поля, минимум зоны проводимости опускается в область запрещенной зоны на величину Δ_c (см. рисунок).

Будем рассматривать такие значения напряженности поперечного электрического поля, 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. Для параметров ПКЯ приведенных выше $E \leq 3 \cdot 10^4$ 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, ОY свободного движения носителей заряда ширина ПКЯ изменяется случайным образом, и, следовательно энергия размерного квантования E_n , определяемая шириной квантовой системы, флюктуирует. 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 фонах, на примесях) не зависят от величины поперечного электрического поля.

В случае δ -образной флюктуации поверхности получаем

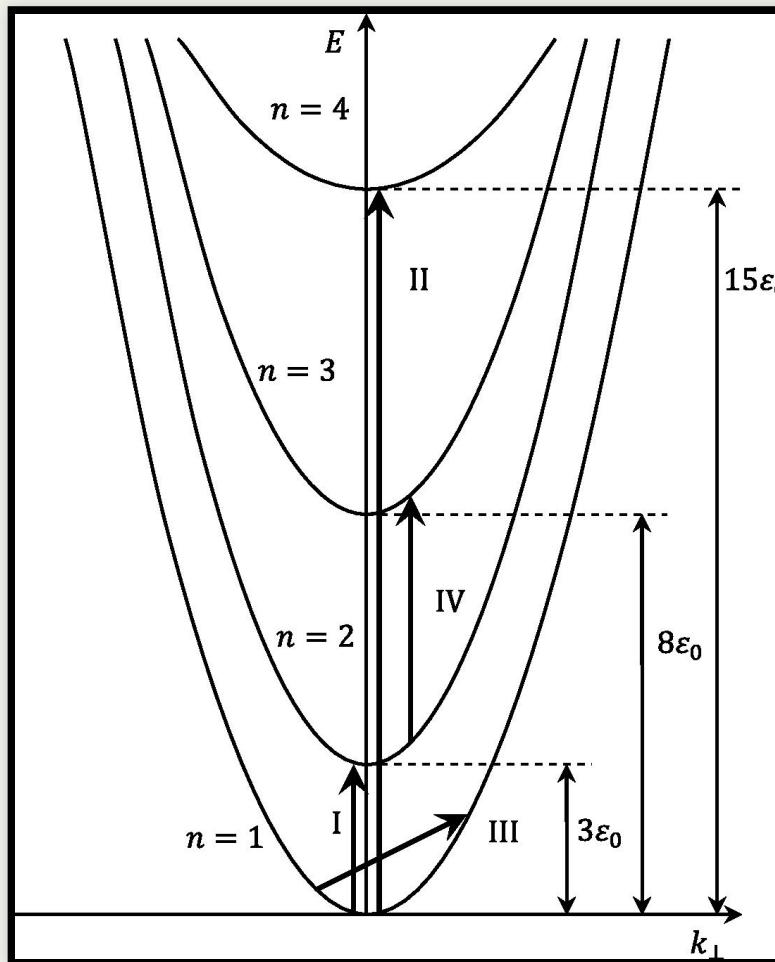
Глава 2

**Влияние рассеяния носителей на
шероховатой поверхности на
оптические свойства размерно-
ограниченных систем**

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.

Межподзонное поглощение света

Схема оптических переходов



На рисунке представлена схема энергетических зон размерноограниченной структуры.

I, II - межподзонные переходы III - внутризонный переход

При высоких уровнях возбуждения заполняются, как основная подзона, так и возбужденные состояния, что позволяет наблюдать поглощение инфракрасного излучения, связанного с переходами электрона между возбужденными состояниями (переход IV на рисунке). При этом коэффициент поглощения достигает больших значений ($\sim 10^3 \text{ cm}^{-1}$) при высоких температурах $T \simeq 300^\circ K$.

$$K(\Omega) = \frac{2\pi e^2}{V c n_0 \hbar \Omega m_e^2} (1 - e^{-\beta_0 \hbar \Omega}) \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{\alpha\alpha_1\beta\beta_1} \left\langle \alpha \left| (\hat{\mathbf{P}} \boldsymbol{\xi}) \right| \alpha_1 \right\rangle \left\langle \beta \left| (\hat{\mathbf{P}} \boldsymbol{\xi}) \right| \beta_1 \right\rangle \times \\ \times n_{\beta_1} (1 - n_{\beta}) \left\{ \left\langle \beta_1 \left| \exp\left(\frac{it\widetilde{H}}{\hbar}\right) \right| \alpha \right\rangle \left\langle \alpha_1 \left| \exp\left(-\frac{it\widetilde{H}}{\hbar}\right) \right| \beta \right\rangle \right\}_V$$

$n_{\alpha} = \{\exp[\beta(\varepsilon_{\alpha} - \xi)] + 1\}^{-1}$ – равновесная функция распределения для электронов с энергией ε_{α}

$$\left\langle \alpha \left| \hat{P}^{(z)} \right| \beta \right\rangle = \frac{2}{a} i \hbar \delta_{k_{\perp} k'_{\perp}} \frac{n n_1}{n^2 - n_1^2} [(-1)^{n+n_1} - 1], \quad n \neq n_1, \\ \left\langle \alpha \left| \hat{P}^{(x)} \right| \beta \right\rangle = \hbar k_x \delta_{\alpha\beta}, \quad \left\langle \alpha \left| \hat{P}^{(y)} \right| \beta \right\rangle = \hbar k_y \delta_{\alpha\beta}.$$

По формуле Кубо проведен расчет коэффициента поглощения слабой электромагнитной волны $K(\Omega)$ различной поляризации, как для внутризонных переходов (переход III), так и для межподзонных переходов (переходы I, II) с учетом взаимодействия электронов с шероховатой поверхностью в квантовой яме. При этом коэффициент поглощения электромагнитной волны вычисляется без использования теории возмущений по взаимодействию носителей с шероховатой поверхностью, что позволяет исследовать частотную зависимость $K(\Omega)$ в широкой области частот и сформулировать условия применимости теории возмущений и последовательно описать внутризонное поглощение света и при неслабых взаимодействиях электрона с шероховатой поверхностью.

Матричные элементы импульса формируют правила отбора для различных поляризаций падающего света. При z-поляризации невозможен внутризонный переход, а для x и у поляризаций межподзонный.

$$\frac{1}{\tau_{\alpha \alpha_1}} = \frac{1}{\tau_0} \left(n^4 + n_1^4 \right)$$

$$\frac{1}{\tau_0}=\frac{m_e}{2\hbar^3}\left(\frac{2\varepsilon_0}{a}\right)^2\gamma_0$$

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

$$K_M=\frac{2^{12}e^2a^5n_e}{\hbar cn_0\pi^5\gamma_03^3\cdot17},~\Delta_0=\hbar\Omega-3\varepsilon_0$$

Вычислено время релаксации при рассеянии носителей на шероховатой поверхности не зависит от волнового вектора электрона и заметным образом уменьшается с ростом n и n_1 .

Соответственно для невырожденного электронного газа, коэффициент поглощения света, связанный с переходом электрона из нижайшей зоны проводимости в ближайшую размерно-квантованную зону проводимости (переход I на рисунке), имеет следующий вид:

При записи коэффициента поглощения учитывалось, что в размерно-квантованной зоне, на которую происходит оптический переход носителя, электронов нет, поэтому $n_\beta \ll 1$. Последнее приближение вполне справедливо, если $3\epsilon_0 \gg kT$, т.е. почти все электроны находятся на нижайшей размерно-квантованной зоне проводимости ($n=1$).

Как видно частотная зависимость коэффициента поглощения света описывается лоренцовой 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.

Большие значения коэффициента поглощения света позволяют надеяться на практическое использование таких размерно-квантованных систем в качестве детекторов ИК-излучения в области низких температур.

Внутризонное поглощение света

$$K(\Omega) = \frac{2\pi e^2 n_e}{m_e c n_0 a \hbar \beta_0 \Omega^2} \int_0^\infty x dx \int_{-\infty}^\infty y dy \times \\ \times \exp \left\{ -2\Gamma_0 |y| \left[1 - \frac{\delta_0}{\pi x |y|} \sin^2 \left(\frac{x |y|}{\delta_0} \right) + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\frac{2x |y|}{\delta_0} \right) \right] \right\}$$

$$\delta_0 = 2\hbar\Omega\beta_0$$

$$\Gamma_0 = \pi^2 \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar\Omega} \right) \left(\frac{\gamma_0}{a^4} \right)$$

$$\text{Si}(z) = -\frac{\pi}{2} + \int_0^z d\tau \frac{\sin t}{\tau}$$

Рассмотрим TE-поляризованное излучение, для которого, как было показано выше, возможно поглощение света только в одной размерно-квантованной зоне проводимости (переход III).

В этом случае рассчитанное выражение для коэффициента полгощения имеет вид:

При низких температурах

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

В нижайшем приближении по взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью $\Gamma_0 \ll 1$:

$$K(\Omega) = \frac{2^4 e^2 n_e \gamma_0 m}{\pi c n_0 a \hbar^3 \beta_0} \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar \Omega} \right)^3$$

При сильном взаимодействии $\Gamma_0 \gg 1$:

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

В случае низких температур выражение для поглощения света принимает следующий вид:

Как показывают расчеты, $K(\Omega)$ при больших δ_0 мало отличается от точного. Например, при $\delta_0 > 5$ отличие менее 10% в широком интервале изменения Γ_0 .

в нижайшем приближении по взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью, которое соответствует обычной теории возмущений. Зависимость имеет вид $K(\Omega) \sim \Omega^{-3}$

При $\Gamma_0 \gg 1$, что соответствует сильному взаимодействию электрона с шероховатой поверхностью, коэффициент внутризонного поглощения электромагнитной волны определяется соотношением:

Из этого следует что в рассматриваемом приближении сильной связи $a^4/\gamma_0 = 1$, $\delta_0 = 10$ в области низких частот для узких квантовых ям с большой флуктуацией поверхности теория возмущений при исследовании внутризонного поглощения света может оказаться несправедливой.

Влияние лазерного излучения на оптические свойства квантовых пленок

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

Коэффициент межзонного поглощения электромагнитной волны

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

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 (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 могут проявляться в размерно-квантованных системах (параболические квантовые ямы), когда частота ИК лазерного излучения равна частоте размерного квантования (размерно-инфракрасный резонанс - РИР).

Рассмотрим систему когда магнитное поле $H \parallel OZ$, электрическое поле направлено вдоль H ,

Гамильтониан для электрона в такой системе в калибровке Ландау $A(-Hy, 0, 0)$ в поле лазерного излучения примет вид:

Коэффициент межзонного поглощения слабой электромагнитной волны частоты Ω и поляризации ξ согласно формуле Кубо можно привести к виду:

здесь $|\beta^c\rangle$ - 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

Магнитоинфракрасный резонанс в объемном материале

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

где

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

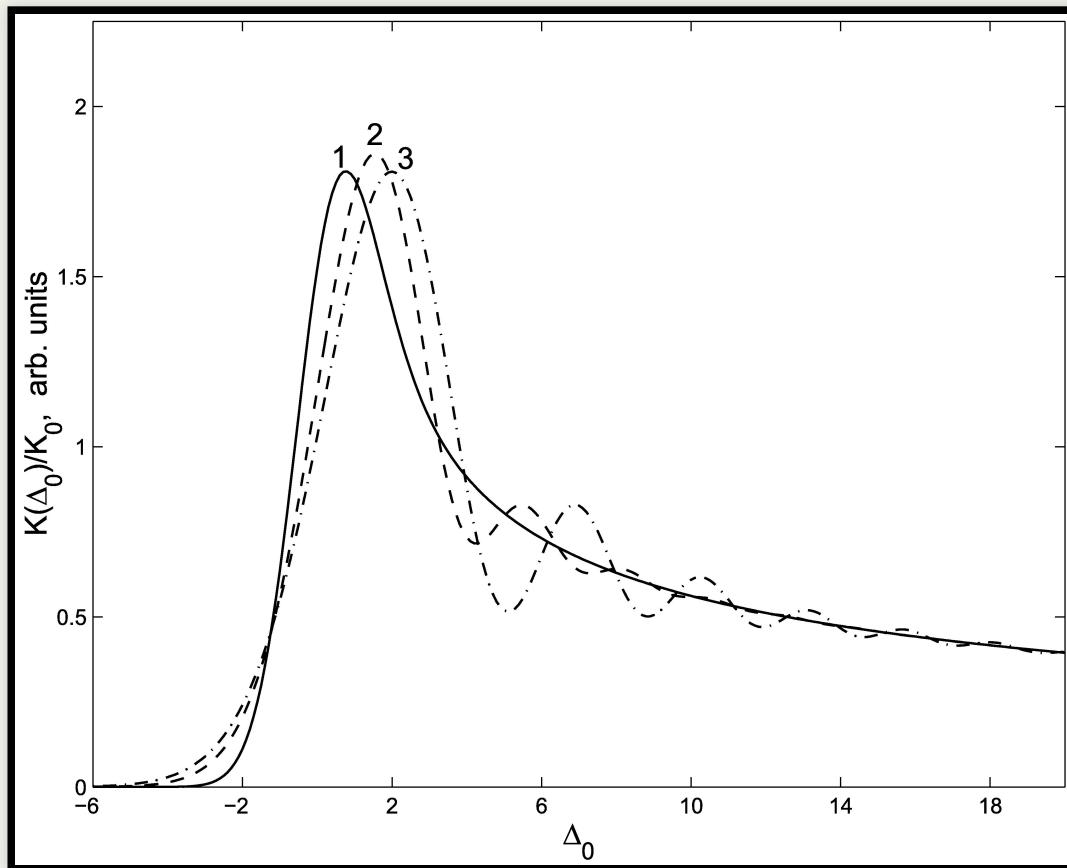
Рассмотрим объемный материал, когда электрическое поле линейно-поляризованного лазерного излучения перпендикулярно \mathbf{H} , т.е. лазерное излучение распространяется вдоль \mathbf{H} . Именно в такой поляризации интенсивная электромагнитная волна смешиает ближайшие уровни Ландау. Расчеты, для простоты, проводились в резонансном приближении (магнитоинфракрасный резонанс МИКР), и поэтому не учитывается взаимодействие дырок с лазерным излучением. В рассматриваемом приближении не учитываются двухфотонные процессы.

В результате, получается следующее выражение:

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

Как следует из выражения, в поле резонансного ИК лазерного излучения при МИКР возникает затухание гауссовского типа $\exp(-\tau^2/2)$, т.е. лазерное излучение приводит к нестационарности электронных состояний. При вычислении пренебрегалось влиянием электрон-фононного взаимодействия на форму линии магнетопоглощения. Это вполне оправдано для реальных полупроводниковых материалов даже при небольших интенсивностях резонансного ИК лазерного излучения.

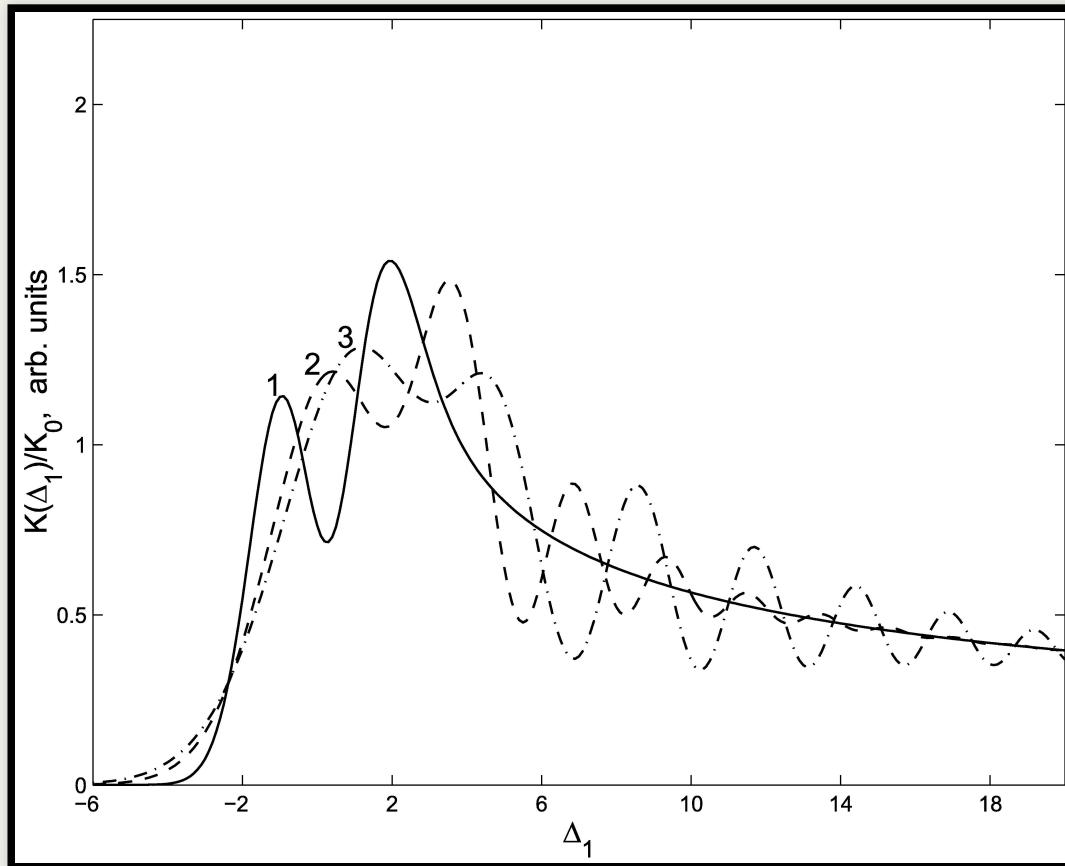
Частотная зависимость первого пика магнетопоглощения в режиме магнитоинфракрасного резонанса. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $a = 0$; $a = 0.4$; $a = 0.8$



На рисунке представлены частотные зависимости линии магнетопоглощения в относительных единицах 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 $a = 0$, $a = 0.4$, $a = 0.8$.

Из представленных результатов видно, что с ростом напряженности электрического поля величина первого пика магнетопоглощения уменьшается, полуширина увеличивается, и в высокочастотной области возникают осцилляции коэффициента поглощения света.

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



При переходе электрона на первый уровень Ландау частотная зависимость второго пика магнетопоглощения описывается двумя пиками, причем величина длинноволнового пика меньше величины пика в высокочастотной области спектра, 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 получены при $a = 0.4$, $a = 0.8$ соответственно).

Размерно-инфракрасный резонанс в ПКЯ

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

где

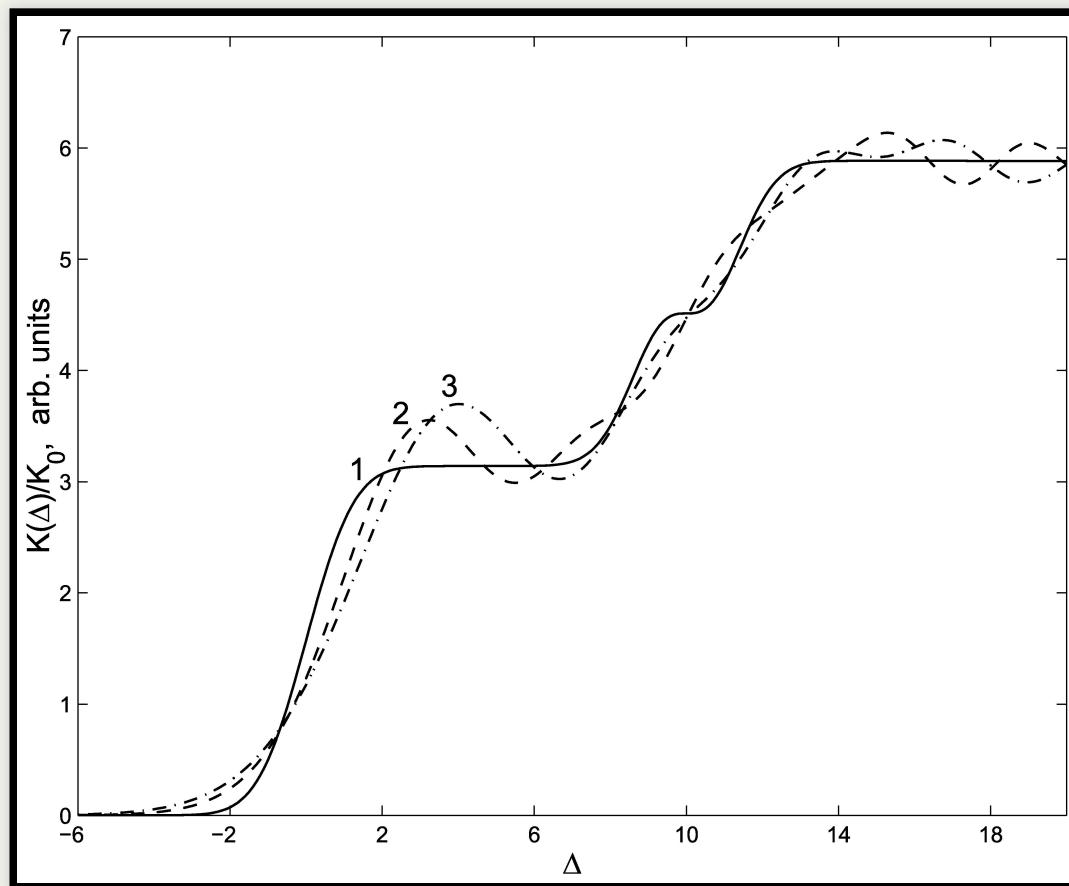
$$\Delta_n = \frac{\hbar\Omega - E_g - \hbar\omega^* \left(n + \frac{1}{2}\right)}{\hbar\sqrt{\gamma}}; \quad \omega^* = \omega_c + \omega_v$$

Рассмотрим межзонное поглощение слабой электромагнитной волны в поле резонансного лазерного излучения в параболических квантовых ямах, в которых благодаря размерному квантованию возникают эквидистантные зоны проводимости и валентные зоны.

Если электрическое поле линейно-поляризованного излучения направлено вдоль оси пространственного квантования, то инфракрасное лазерное излучение смещивает ближайшие эквидистантные зоны.

В условиях размерно-инфракрасного резонанса в зоне проводимости, когда частота лазерного излучения ω равна частоте размерного квантования ω_c , коэффициент поглощения света $K(\Omega)$, когда напряженность E постоянного электрического поля направлена параллельно поверхности параболической квантовой ямы, с учетом тех же что и выше приближений принимает следующий вид:

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



На рисунке 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. Кривая 2 получена при $a = 0.4$, кривая 3 при $a = 0.8$. Из рисунка видно, что постоянное 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.

Оптические свойства квантовых проволок в присутствии резонансного лазерного излучения

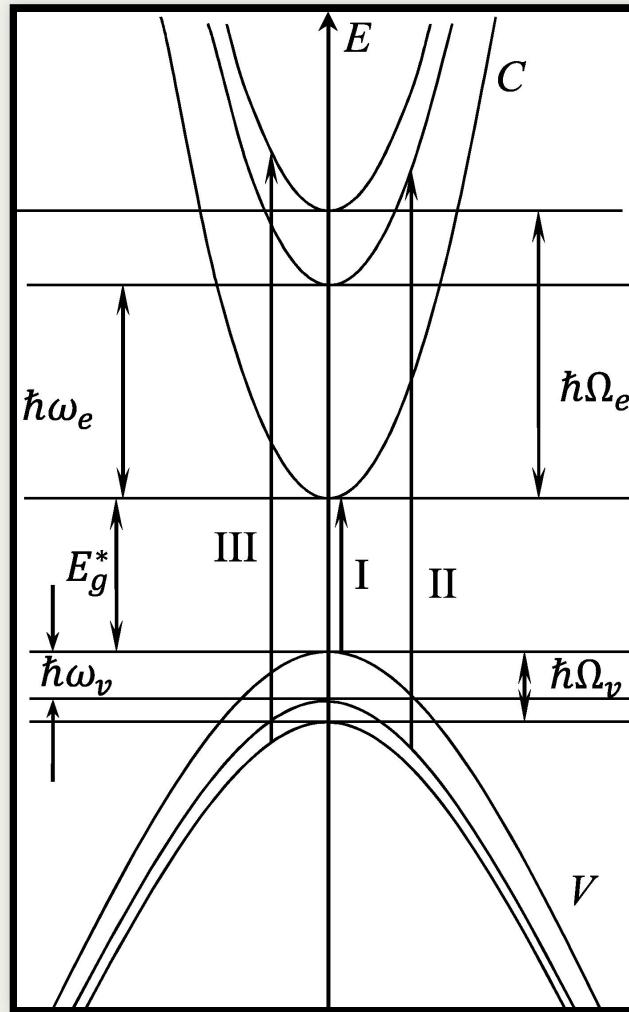
$$E_\alpha = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \hbar\Omega_e \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_e \left(m + \frac{1}{2} \right)$$

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

Рассмотрим явления, связанные с МИКР и размерно-инфракрасным резонансом (РИР) в квантовой проволоке в однородном магнитом поле ($B \parallel OZ$), направленном перпендикулярно оси исследуемой наноструктуры с учетом взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью. Такие одномерные структуры интересны тем, что имеют особенности в плотности энергетических состояний на дне размерно-квантованных зон, приводящие к особенностям оптических свойств. Энергетический спектр электрона в параболической нанопроволоке известен:

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

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



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

Гамильтониан в представлении вторичного квантования для электронов в зоне проводимости в состоянии α в поле лазерного излучения поляризацией $\boldsymbol{\xi}$

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

Матричные элементы оператора импульса $\mathbf{P}_{\alpha \alpha_1}$ на волновых функциях параболической квантовой проволоки в продольном магнитном поле

$$\left| P_{\alpha \beta}^X \right|^2 = \frac{\delta^2}{\sqrt{(1 + \delta^2)}} \left| P_{\alpha \beta}^Y \right|^2, \quad \delta = \frac{\omega_c}{\omega_e},$$

$$\left| P_{\alpha \beta}^Y \right|^2 = \frac{m_e \sqrt{(1 + \delta^2)} \hbar \omega_e}{2} [n \delta_{n, n_1 + 1} + (n + 1) \delta_{n, n_1 - 1}] \delta_{k_x, k'_x} \delta_{m, m_1},$$

$$\left| P_{\alpha \beta}^Z \right|^2 = \frac{m_e \hbar \omega_e}{2} [m \delta_{m, m_1 + 1} + (m + 1) \delta_{m, m_1 - 1}] \delta_{k_x, k'_x} \delta_{n, n_1}$$

Гамильтониан в представлении вторичного квантования для электронов в зоне проводимости в состоянии α в поле одномодового лазерного излучения поляризацией ξ записывается в следующем виде:

Матричные элементы операторов импульса $P_{\alpha\alpha_1}$ на волновых функциях параболической квантовой проволоки в продольном магнитном поле:

Коэффициент поглощения в поле ИК лазерного излучения Y-поляризации

$$K(\Omega) = K_0 \sum_{nm} |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left(-at^2 - \frac{\Gamma_0}{|k_x|} |t| \right) L_n(2at^2) \times \\ \times \exp \left\{ \frac{it}{\hbar} \left[\hbar\Omega - E_g^* - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu^*} - m(\hbar\omega_e + \hbar\omega_v) - n(\hbar\Omega_e + \hbar\Omega_v) \right] \right\}$$

$$K_0 = \frac{\hbar\Omega e^2}{4\mu^* E_g^* n_0 c s}, \quad a = \frac{e^2 E^2}{8m_e \hbar\Omega_e},$$

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_v^*}, \quad m_v^* = m_v \left(\frac{\Omega_v}{\omega_v} \right)^2$$

В случае РИР когда частота ω_L равна ω_e частоте размерного квантования или Ω_e (магнитно-инфракрасный резонанс). Из формулы Кубо для Y-поляризации получаем, выражение для коэффициента поглощения:

Здесь пренебрегаюсь взаимодействием интенсивного ИК излучения с электронами в валентной зоне т.к. для типичных полупроводниковых наноструктур эффективная масса электронов в зоне проводимости значительно меньше массы дырок ($m_e \ll m_v$).

$\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle$ - 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 вычислении K_0 учитывалось взаимодействие носителей с шероховатой поверхностью или с длинноволновыми акустическими фононами в приближении времени релаксации. $\Gamma_0 / |k_x|$ - описывает вероятность рассеяния электронов в единицу времени или на шероховатой поверхности, или упругое рассеяние на акустических фононах.

Оптический переход I

$$K(\Omega) = K_0 \sum_{nm} |\langle \alpha_c | \alpha_v \rangle|^2 \left[\frac{8\pi\mu^*\omega_f}{\hbar a} \right]^{\frac{1}{2}} \operatorname{Re} \int_0^\infty dx e^{f^2(x)} [1 - \Phi(f(x))]$$

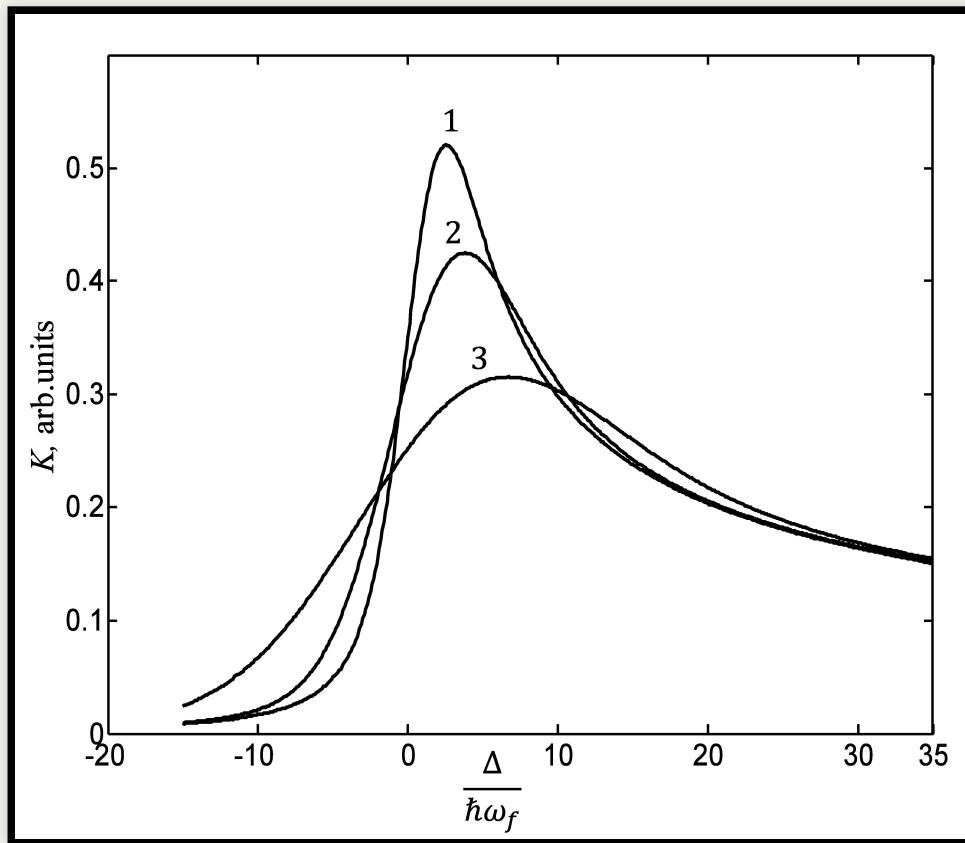
$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\tau^2} d\tau,$$

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

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 рисунке):

В отсутствии лазерного излучения ($a = 0$) при $\omega_f^2/4a \ll 1$ можно получить выражение для коэффициента межзонного поглощения света в нанопроволоках в однородном магнитном поле.

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



На рисунке представлена частотная зависимость коэффициента поглощения света (в относительных единицах) при различных значениях интенсивности лазерного излучения. Кривые 1, 2, 3 получены соответственно при $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ ($\xi = \omega_f^2/4a$). 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.

Оптический переход II

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

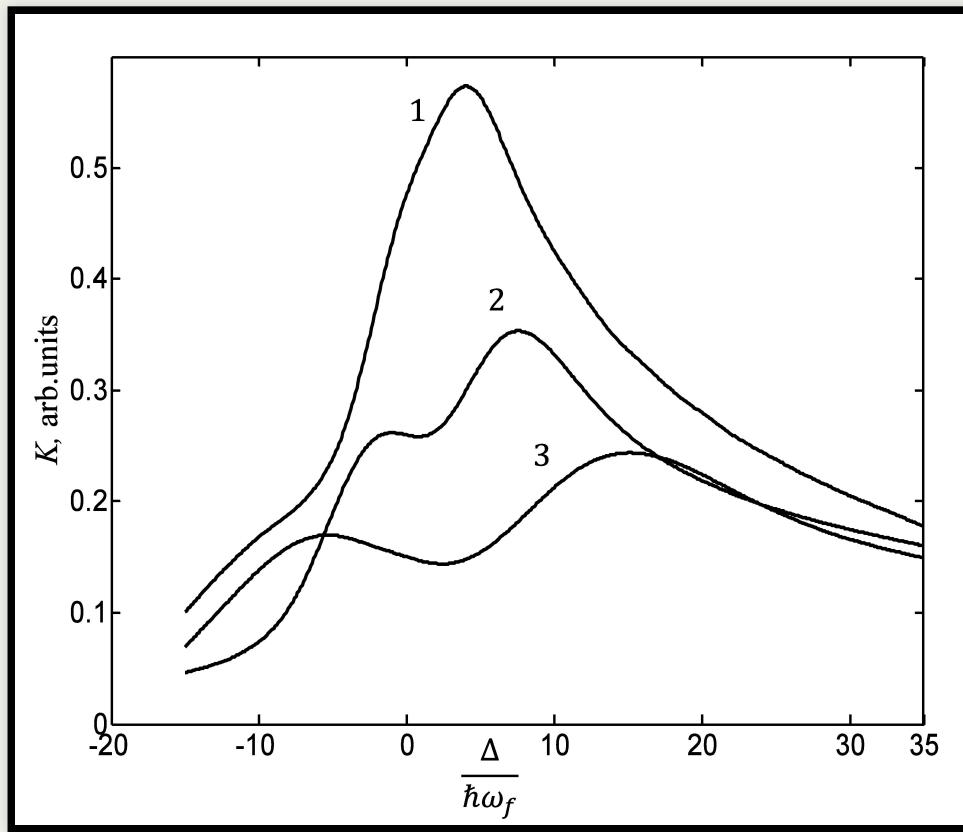
При $\xi < 1$ форма линии поглощения определяется интенсивностью резонансного ИК излучения

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

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

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

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



На рисунке приведена частотная зависимость второго пика магнетопоглощения при различных значениях ξ . Кривые 1, 2, 3 вычислены при $\xi = 0.25, 0.05, 0.01$ соответственно. С ростом напряженности E электрического поля пик магнетопоглощения 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.

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) качественно не отличается от частотной зависимости, приведенной на рисунках.

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. Следовательно, резонансное лазерное излучение заметно влияет на частотную зависимость межзонного поглощения света при небольших, вполне экспериментально доступных значениях интенсивности ИК-лазерного излучения.

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 этом параграфе 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.

Глава 3

Влияние шероховатой поверхности на кинетические эффекты в низкоразмерных системах

Квантовые системы с пониженной размерностью (квантовые ямы, сверхрешетки, квантовые проволоки) благодаря их уникальным свойствам, связанных 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 . 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. Следовательно, размеры квантовых систем принципиальным образом могут влиять на величину и температурную зависимость электропроводности.

В данной главе делается попытка объяснить особенности температурной зависимости электропроводности, экспериментально наблюдаемые в нелегированныхnanoструктурах, 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 флюкутирующей поверхности. Учет двух механизмов рассеяния позволил сформулировать условия на ширину размерно-ограниченной системы и температуру, когда рассеяние носителей на шероховатой поверхности преобладает над рассеянием на фононах.

Электропроводность в приближении времени релаксации

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

$$\frac{1}{\tau_{\alpha\beta}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\gamma} W_{\alpha\gamma} \delta(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\gamma})$$

Расчет электропроводности проводится согласно формуле Кубо для статической электропроводности.

Выражение в приближении времени релаксации получается 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. 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. Последнее обстоятельство является не случайным, т.к. выражение для электропроводности 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.

Электропроводность прямоугольной КЯ с бесконечным потенциалом с гауссовой флуктуацией поверхности

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3 \delta}{m_e^2 \pi^2 (\Delta \Lambda^2 V_1)^2 L} \int_0^\infty \frac{d\tau \cdot \tau \cdot \exp(\delta\tau - \beta_0 \tilde{\xi})}{\exp(-\tau) I_0(\tau) \cdot [\exp(\delta\tau - \beta_0 \tilde{\xi}) + 1]^2}$$

$$\beta_0 = \frac{1}{k_0 T}, \quad \delta = \frac{\beta_0 \hbar^2}{m_e \Lambda^2}, \quad \beta_0 \tilde{\xi} = \ln \left[\exp \left(\frac{\beta_0 \pi \hbar^2 n_s}{m_e} \right) - 1 \right]$$

Рассмотрим прямоугольную КЯ с бесконечным потенциалом с гауссовой флуктуацией поверхности. В этом случае время релаксации при рассеянии носителей в одной зоне определяется соотношением. При низких температурах когда электроны находятся на нижайшем размерно-квантованном уровне $n = 1$ прямоугольной КЯ выражение после суммирования по k_{\perp} принимает вид

Невырожденный электронный газ

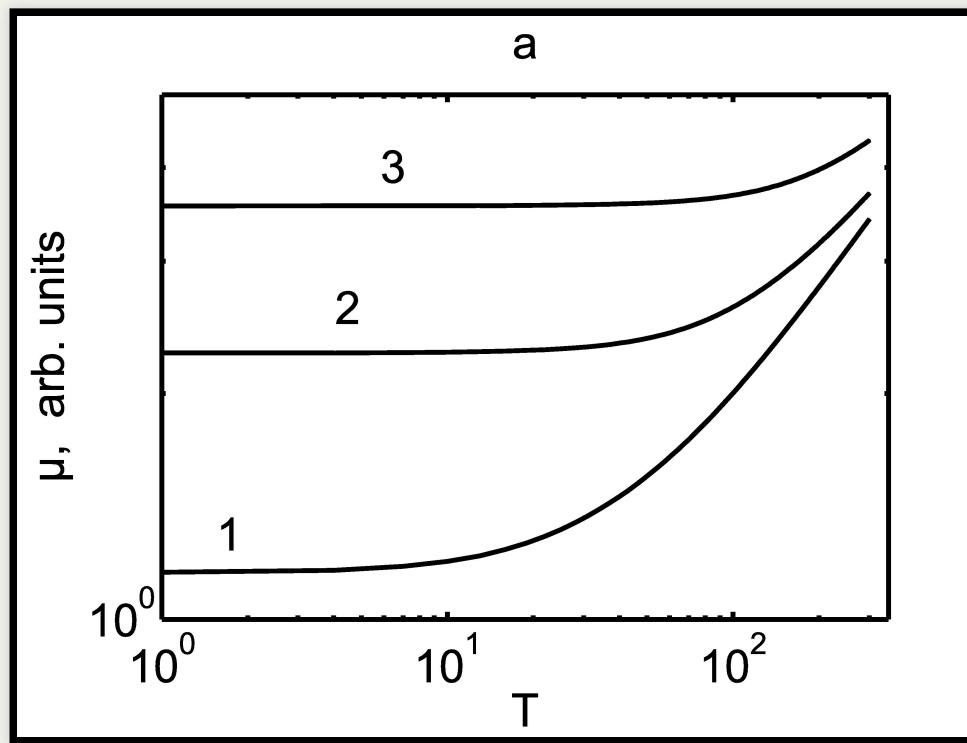
$$\mu^{(nd)} = \mu_0 \delta^2 \int_0^\infty d\tau \frac{\tau \cdot \exp[-(\delta - 1)\tau]}{I_0(\tau)}$$
$$\mu_0 = \frac{e}{\hbar \pi^5} \left(\frac{L^3}{\Delta \Lambda} \right)^2.$$

Вырожденный электронный газ

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

Для невырожденного электронного газа ($\beta_0 \pi \hbar^2 n_s / m_e \ll 1$) для вырожденного электронного газа $\beta_0 \pi \hbar^2 n_s / m_e \gg 1$ Следовательно, подвижность существенным образом зависит от толщины размерно-квантованной системы ($\mu_0 \sim L^6$).

Температурная зависимость подвижности (в относительных единицах) 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 $n_s = 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 7 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 1.5 \cdot 10^{12}\text{cm}^{-2}$



На рисунке (кривая 1) приведена температурная зависимость $\mu^{(nd)} / \mu_0$ с учетом зависимости химического потенциала от температуры . Как непосредственно следует из рисунка, 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 \cite{Sakaki1987}. При низких температурах $\mu^{(nd)} = \mu_0$, т.е. определяется только размером КЯ и параметрами флуктуирующей поверхности Δ, Λ .

Электропроводность прямоугольной КП с бесконечным потенциалом с гауссовой флуктуацией поверхности

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

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

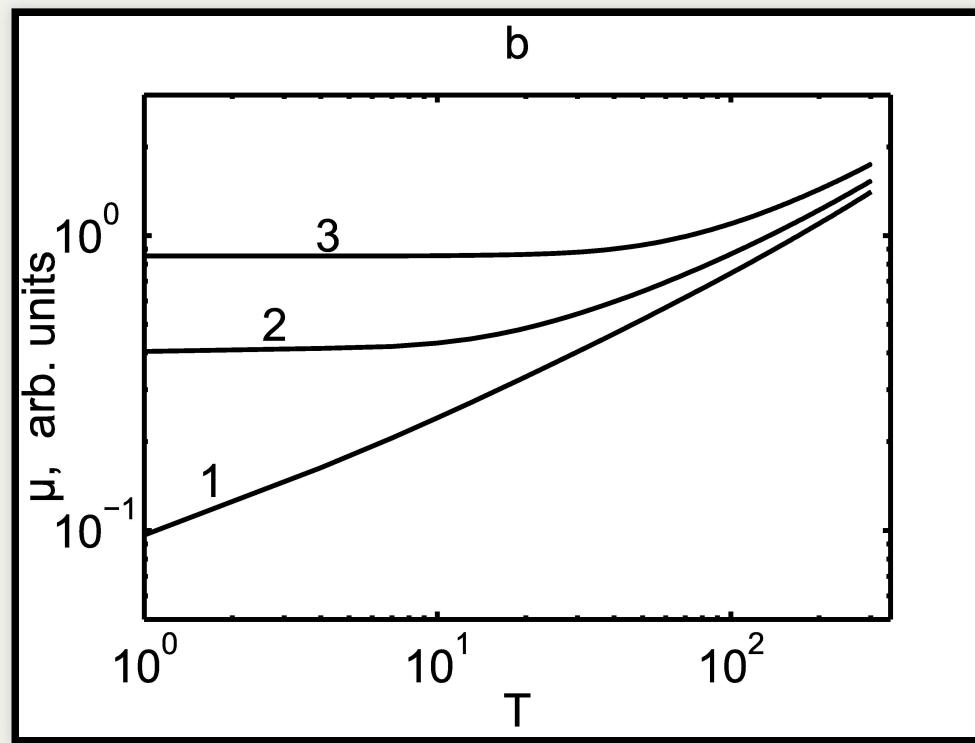
$$\int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \beta_0 \tilde{\xi}) + 1} = \frac{n_l \pi \hbar \sqrt{\beta_0}}{\sqrt{8m}}$$

Для КП потенциал взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью определяется выше и в случае гауссовской флуктуации поверхности с учетом волновых функций для квантовой проволоки время релаксации легко вычисляется и τ_{α}^{-1} принимает следующий вид:

Выражение для электропроводности:

Концентрация носителей находится из условия суммирования по всем уровням функции распределения.

Температурная зависимость подвижности (в относительных единицах) 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 $n_l = 10^5\text{cm}^{-1}$, $n_l = 5 \cdot 10^5\text{cm}^{-1}$, $n_s = 10^6\text{cm}^{-1}$



На рисунке 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 рисунке) электропроводность описывается корневой зависимостью от температуры.

Из рисунков 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 $T \sigma_{xx}$, а следовательно и подвижность, начинает увеличиваться. Однако как показывают экспериментальные исследования при высоких температурах подвижность уменьшается. Следовательно «включается» другой механизм рассеяния носителей, например, на колебаниях решетки. Поэтому для последовательного сравнения теории с экспериментом рассмотрим температурную зависимость электропроводности с учетом двух механизмов рассеяния (на шероховатой поверхности и на фонах). Это обстоятельство позволяет исследовать поведение подвижности в широкой области температур ($T \leq 200\text{K}$).

Учет двух механизмов рассеяния

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

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

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi^2 m^2 (\Delta \Lambda^2 V_1)^2 L} \delta^2 \gamma \times$$

$$\times \int_0^{\infty} d\tau \frac{\tau \cdot \exp(\delta\tau - \beta\tilde{\xi})}{[\delta\gamma \cdot \exp(-\tau) I_0(\tau) + 1] \cdot [\exp(\delta\tau - \beta\tilde{\xi}) + 1]^2}$$

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

Выражение для электропроводности с учетом двух механизмов рассеяния имеет вид:

τ - время релаксации, определяемое рассеянием электронов на шероховатой поверхности, τ^f - время релаксации, связанное с рассеянием электрона на фононах.

Для КП с бесконечным потенциалом для нижайшей зоны проводимости:

γ показывается отношение времен релаксации

Невырожденный электронный газ

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

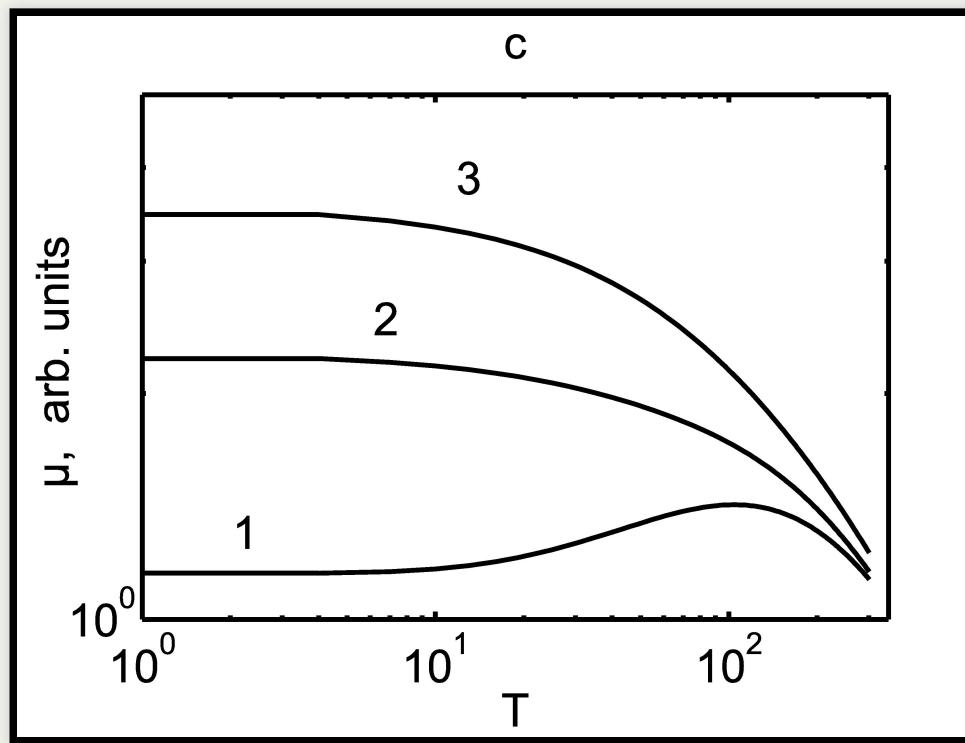
Вырожденный электронный газ

$$\sigma_{xx}^{(d)} = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi^2 m^2 (\Delta \Lambda^2 V_0)^2 L} \cdot \frac{\delta\gamma \cdot \delta_0}{\delta\gamma \cdot I_0(\delta_0) \exp(-\delta_0) + 1}$$

Для невырожденного электронного газа подвижность определяется соотношением:

Для случая вырожденного электронного газа:

Температурная зависимость подвижности (в относительных единицах) при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности и фононах в КЯ при $\Lambda = 70\text{\AA}$, $\Delta = 3\text{\AA}$, $L_0 = 100\text{\AA}$, кривые 1, 2, 3 получены соответственно для $n_s = 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 7 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $n_s = 1.5 \cdot 10^{12}\text{cm}^{-2}$



На рисунке 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. 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.

Рассеяние носителей на шероховатой поверхности в магнитном поле в КЯ

Продольное магнитное поле ($\mathbf{H} \parallel OX$, размерное квантование по OZ)

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

$$E_\alpha = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e} + \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

обозначения

$$\lambda = \frac{m_e \Omega}{\hbar}, \quad \Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_c^2}, \quad z_0^{(c)} = -\frac{\hbar \omega_c k_x}{m_e \Omega^2}$$

Рассмотрим особенности электропроводности, возникающие в квантовых ямах в присутствии однородного магнитного поля напряжённостью H . Волновые функции и собственные значения в таких системах известны и имеют вид ($H \parallel OX$, размерное квантование по OZ): $\hbar\omega$ - шаг пространственного квантования ω_c - циклотронная частота.

Взаимодействие с шероховатой поверхностью

$$V_\alpha = \frac{\partial E_\alpha}{\partial L} = \hbar \left[\frac{\hbar\omega}{m_e\Omega^2} \left(\frac{\omega_c}{\Omega} \right)^2 k_y^2 + \frac{\omega}{\Omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \frac{\partial \omega}{\partial L}$$

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{\gamma_0 m_e V_n^2}{\hbar^3} \left(\frac{\Omega}{\omega} \right)$$

$$P_{\alpha\beta}^{(x)} = \hbar k_x \delta_{\alpha\beta}.$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 k_0 T \hbar}{\pi \gamma_0 m_e L 4 V_0^2} \sum_n \frac{\ln \left\{ \exp \left[\beta \left(\tilde{\xi} - \hbar \Omega n \right) \right] + 1 \right\}^2}{\left(n + \frac{1}{2} \right)}$$

Первым слагаемым можно пренебречь когда

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} k_y^2 \ll \hbar\Omega$$

Последнее неравенство, как правило выполняется т.к. рассеяние на шероховатой поверхности вносит заметный вклад при низких температурах и заметном размерном квантовании. Тогда

время релаксации принимает вид:

Для вычисления электропроводности вдоль магнитного поля необходим матричный элемент импульса, который описывается соотношением:

Выражение для электропроводности для данного случая имеет вид:

Электропроводность в квантовом пределе, когда все носители находятся на
нижайшем уровне Ландау

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar^3 n_e}{m^2 \gamma V_0^2} \left[\frac{\omega}{\Omega} \right]$$

Подвижность

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

Заметим, что подвижность в размерно-ограниченных системах при учёте рассеяния носителей на длинноволновых колебаниях с ростом магнитного поля уменьшается. Это связано с ростом локализации зонных электронов. В противоположность этому, (как следует из формулы) в случае рассеяния на шероховатой поверхности с ростом магнитного поля увеличивается. Такое поведение зависимости подвижности от продольного магнитного поля может быть понято из следующих соображений. В параболической квантовой яме радиус локализации электрона с ростом напряженности магнитного поля уменьшается, число носителей тока, рассеивающихся на шероховатой поверхности размерно-ограниченной системы, становится меньше, что и приводит к росту подвижности.

Поперечное магнитное поле

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

Подвижность в диагональном приближении

$$\mu_{yy} = \frac{4e\hbar}{m^2\gamma} \left(\frac{\partial\omega}{\partial L} \right)^{-2} \left[1 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right]^{-\frac{3}{2}}$$

$$\left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \gg 1 \Rightarrow \mu_{xx} \sim \frac{1}{H}$$

В поперечном магнитном поле в плоскости квантовой ямы матричные элементы обобщённого импульса, входящие в общее выражение для электропроводности σ_{yy} определяются следующим образом:

Следовательно, матричный элемент обобщенного импульса имеет как диагональные элементы (первое слагаемое), 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 отсутствует).

Подвижность с учётом только диагонального слагаемого в матричном элементе обобщенного импульса (т.к. оно много больше недиагонального) имеет вид:

Следовательно, с ростом магнитного поля подвижность уменьшается и при

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.

Рассеяние носителей на шероховатой поверхности в магнитном поле в КП

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

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

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

Рассмотрим электропроводность в квантовых проволоках в однородном магнитном поле. Электропроводность в рассматриваемой модели параболической КП принимает вид:

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

Подвижность невырожденного электронного газа

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

Подвижность невырожденного электронного газа

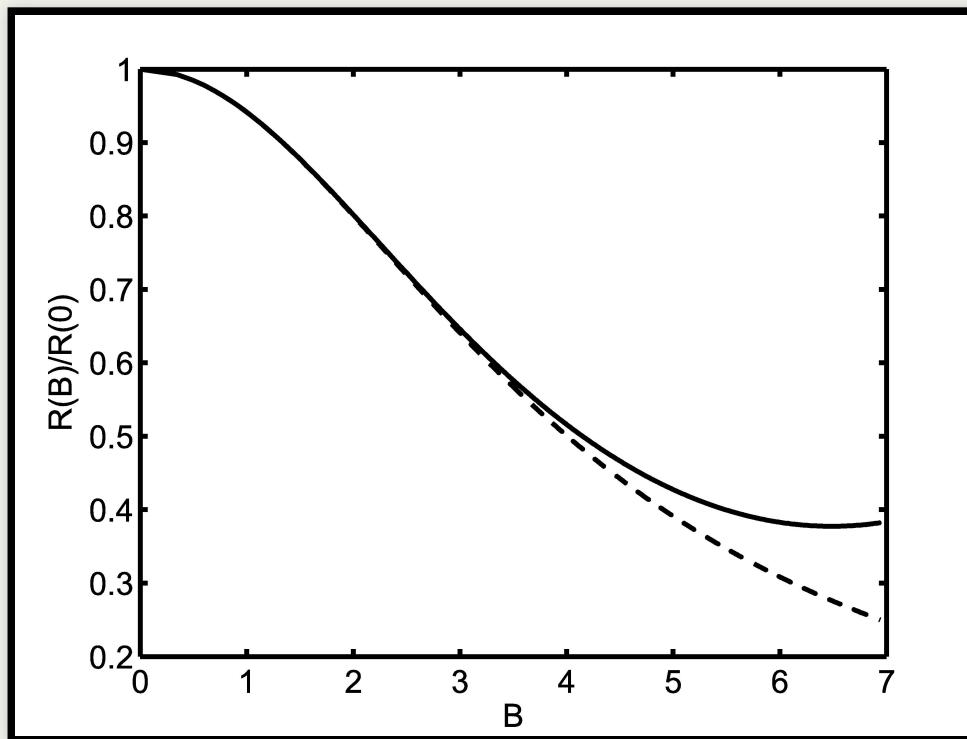
$$\mu_x^{(d)} = \frac{e\pi \left[4 + \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \right] n_e \hbar R_0^4}{8m_e \gamma_0 (\Delta E_c)}$$

Подвижность невырожденного электронного газа когда все носители находятся в основном размерно-квантованном состоянии ($n = \nu = 0$) записывается в виде:

Для вырожденного электронного газа

Следовательно, в продольном магнитном поле, подвижность, увеличивается $\sim H^2$ и существенным образом зависит от радиуса квантовой проволоки ($\mu_x \sim R_0^4$). Если для невырожденного электронного газа подвижность увеличивается с ростом температуры, то для вырожденной размерно-квантовой проволоки подвижность при низких температурах не зависит от T .

Зависимость относительного сопротивления от магнитного поля для нанопроволоки висмута ($d = 80 \text{ nm}$, $T = 4.2 \text{ K}$). Пунктирной линией показана зависимость $R(H)/R(0)$ при учете рассеяния носителей на поверхности, сплошной линией — при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности и акустических фононах.



На рисунке 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 шероховатой поверхности и при упругом рассеянии на акустических фононах. Именно, такая зависимость сопротивления от магнитного поля экспериментально наблюдалась в работе \cite{Nikolaeva2004}.

Глава 4

**Явления переноса в
nanoструктурах в поперечном
электрическом поле с учетом
рассеяния на шероховатой
поверхности**

Подвижность в поперечном электрическом поле

Из формулы Кубо получено выражение для электропроводности:

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

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

Расчет электропроводности проведем в приближении времени релаксации аналогично тому как это делалось ранее. Электропроводность для параболической квантовой ямы можно записать в виде:

Подвижность невырожденного газа

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

где

$$\mu_{xx}(0) = \frac{e}{m} \left(\frac{\hbar a^4}{2\gamma_0 \Delta E_c} \right)$$

ξ_n - химический потенциал исследуемой наноструктуры отсчитанный от дна n-ой зоны

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

$\mu(0)$ - где подвижность в ПКЯ в отсутствии поперечного электрического поля.

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.

Учет двух механизмов рассеяния

Правило Маттисена

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_f}$$

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{\gamma_0 m_e (\hbar\omega)^2}{2\hbar^3 a^2} (1 + 2N_c)^2, \quad N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega}$$

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

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 фонах при высоких температурах ($N_q \approx \frac{k_B T}{hvq} \gg 1$) время релаксации определяется соотношением:

E_1 - константа деформационного потенциала для электрона, ρ - плотность исследуемой квантовой системы, v -скорость звука, N_q - функция распределения равновесных фонаров.

$$\mu_{xx}=\mu_{xx}(0)\frac{1}{\left(1+2N_c\right)^2+\Delta}$$

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

Для ПКЯ с параметрами ($E_1 = 10$ eV, $\rho = 4$ g/cm³, $v = 3 \cdot 10^5$ cm/s, $\gamma^{\frac{1}{4}} = 40A$) при $E = 2.5 \cdot 10^4$ V/cm рассеяние носителей на акустических колебаниях определяет величину подвижности при $T \geq 100$ 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 рассматриваемой 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 \cite{Lax1960,Cohen1961}. Это приводит к тому, что процессы рассеяния электрона на акустических колебаниях становятся зависящими от E . Отметим, что рассмотренное нами влияние поперечного поля E на электропроводность принципиально отличается от эффекта поля в условиях размерного квантования, исследованного в \cite{Sandomirsky1967,Butenko1998}. 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.

Влияние поперечного электрического поля на подвижность в нанопроволоках

Энергия носителей заряда в параболической квантовой проволоке в поперечном электрическом поле

$$E_{\alpha}^c = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + E_{nm}^c,$$

$$E_{\alpha}^v = \Delta_0 - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_v} + E_{nm}^v$$

здесь

$$E_{nm}^c = \hbar\omega_e(n + k + 1) - \Delta_c,$$

$$E_{nm}^v = \hbar\omega_v(n + k + 1) - \Delta_v,$$

$$\Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_e \omega_y^2}, \quad \Delta_v = \frac{e^2 E^2}{2m_v \omega_v^2}$$

Рассмотрим влияние электрического поля на кинетические эффекты в параболической квантовой проволоке.

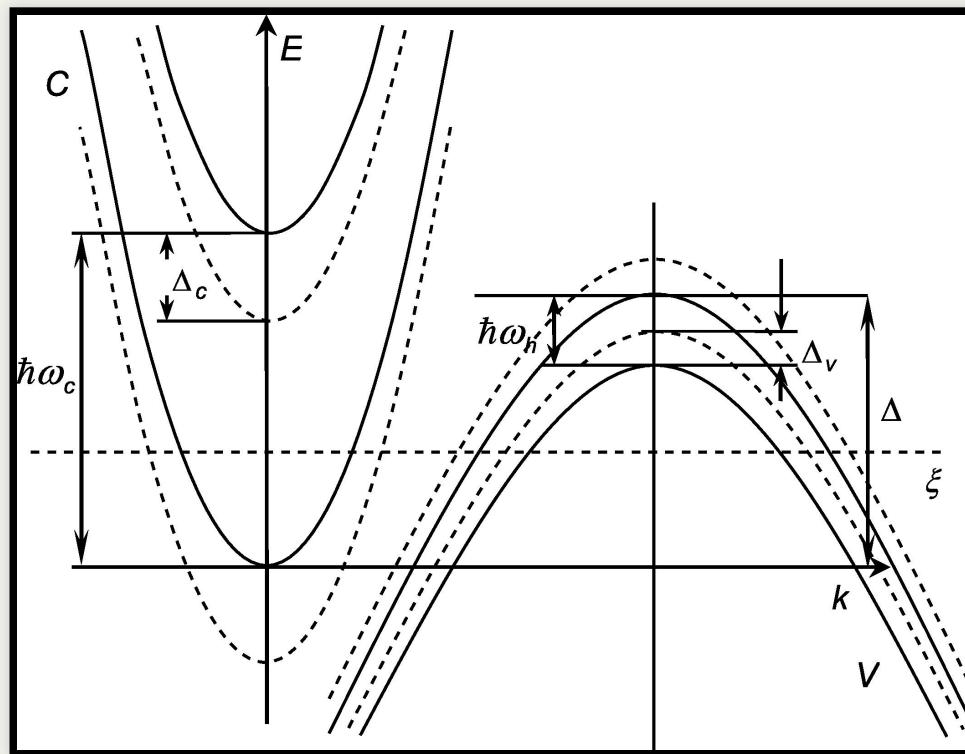
Для квантовых проволок электрическое поле E , направленное перпендикулярно оси наноструктуры, может заметным образом влиять на кинетические явления в размерно-ограниченной системе. В поперечном электрическом поле E энергия электронов с эффективной массой m_e в размерно-квантованной зоне проводимости c и энергетический спектр дырок с эффективной массой m_v в валентной зоне v имеют вид:

$\hbar\omega_e$, $\hbar\omega_v$ - шаг размерного квантования соответственно в зоне проводимости и валентной зоне, которые простым образом связаны с величиной потенциальной энергии ΔE_i на границе нанопроволоки диаметром a ,

Δ_0 - величина перекрытия зон, k_x - волновой вектор носителя вдоль оси нанопроволоки.

Схема зонной структуры рассматриваемой низкоразмерной системы.

Сплошными линиями показаны две нижайшие размерно-квантованные зоны (c — 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 Bi в простой модели, энергетический спектр которой изображен на рисунке. Как следует из выражения для собственных значений гамильтониана, с ростом напряженности электрического поля дно размерно-квантованных зон опускается на Δ_c в область запрещенных значений энергии, а экстремумы размерно-квантованных v зон поднимаются вверх на величину Δ_v .

Следует заметить, что 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.

Подвижность носителей заряда

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

Здесь введены обозначения:

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

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

$$\eta_{nm}^v = \frac{1}{k_0 T} [-\xi - \hbar\omega_v (n + m + 1) + \Delta_0 + \Delta_v],$$

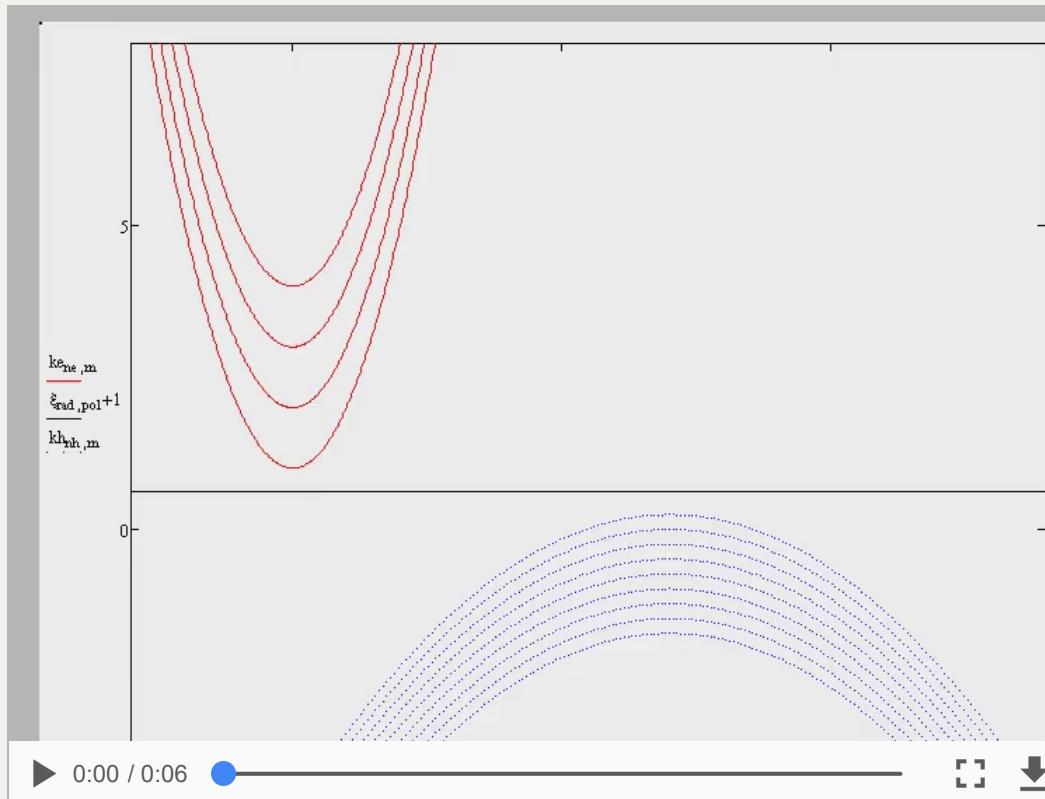
$$F(\eta_{nm}^c) = \int_0^\infty \frac{dx}{\exp(x^2 - \eta_{nm}^c) + 1},$$

Расчет электропроводности проведем так же как ранее используя время релаксации для рассеяния носителей на шероховатой поверхности в КП в поперечном электрическом поле. Выражение подвижности для электронов и дырок в рассматриваемой модели принимает вид:

p - число c зон, участвующих в процессах электропроводности.

Условие электронейтральности

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



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

Частные случаи

Невырожденный электронный газ

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

Вырожденный электронный газ

$$\mu = \frac{\sqrt{\mu_0 2\pi}}{4(1 + N_c)^2} \left[\frac{1}{k_0 T} (\Delta_0 + \Delta_c + \Delta_v - \hbar\omega_v - \hbar\omega_c) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Рассмотрим частные случаи, допускающие аналитическое решение уравнения электронейтральности. Пусть электронный (дырочный) газ является невырожденным. Это возможно, если радиус квантовой проволоки такой, что $\Delta_0 < \hbar\omega_c + \hbar\omega_v$.

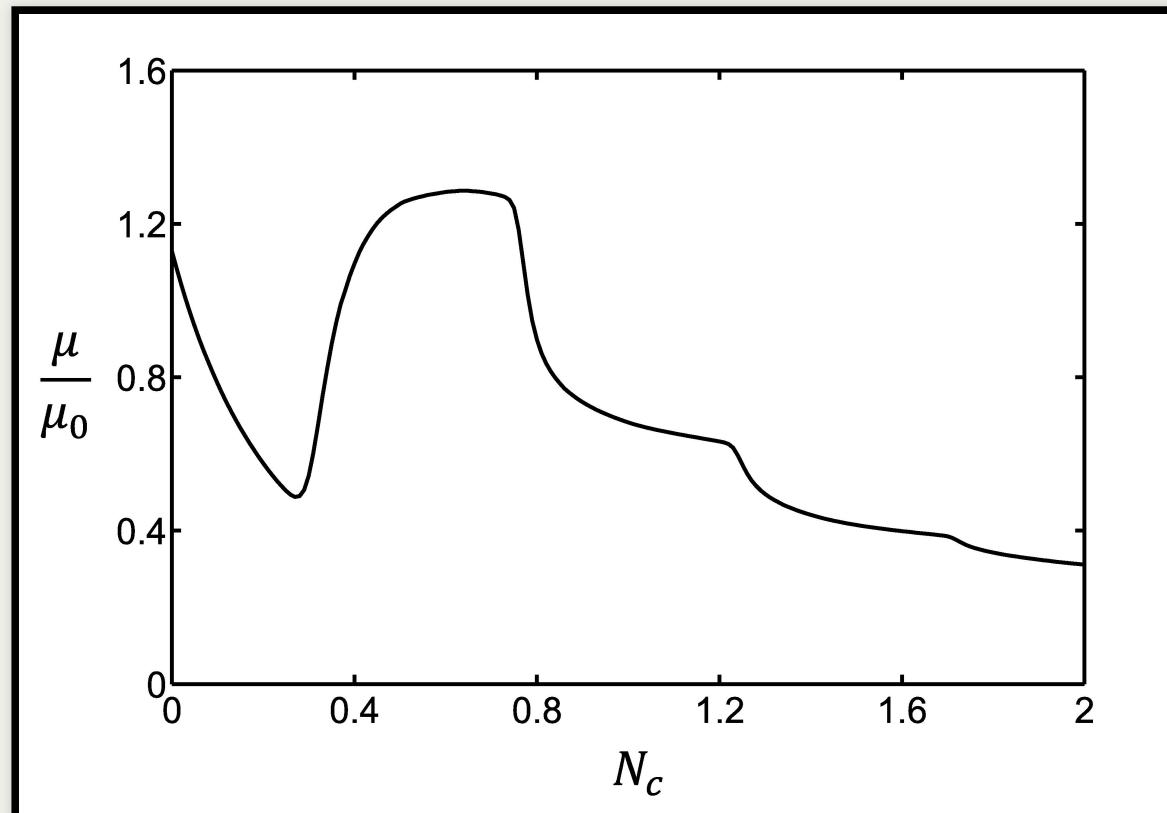
Как показали экспериментальные исследования \cite{Black2003a} при $R = 250\text{\AA}$ в нанопроволоках Ви $\Delta_0 = \hbar\omega_c + \hbar\omega_v$. Если $m_c \ll m_v$ и носители находятся в нижайших размерно-квантованных зонах ($n = m = 0$), подвижность можно записать в следующем виде:

Согласно выражению для невырожденного газа подвижность в рассматриваемом случае с ростом напряженности поперечного электрического поля убывает. Это связано с более сильным взаимодействием носителей с шероховатой поверхностью с увеличением электрического поля. 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:

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:

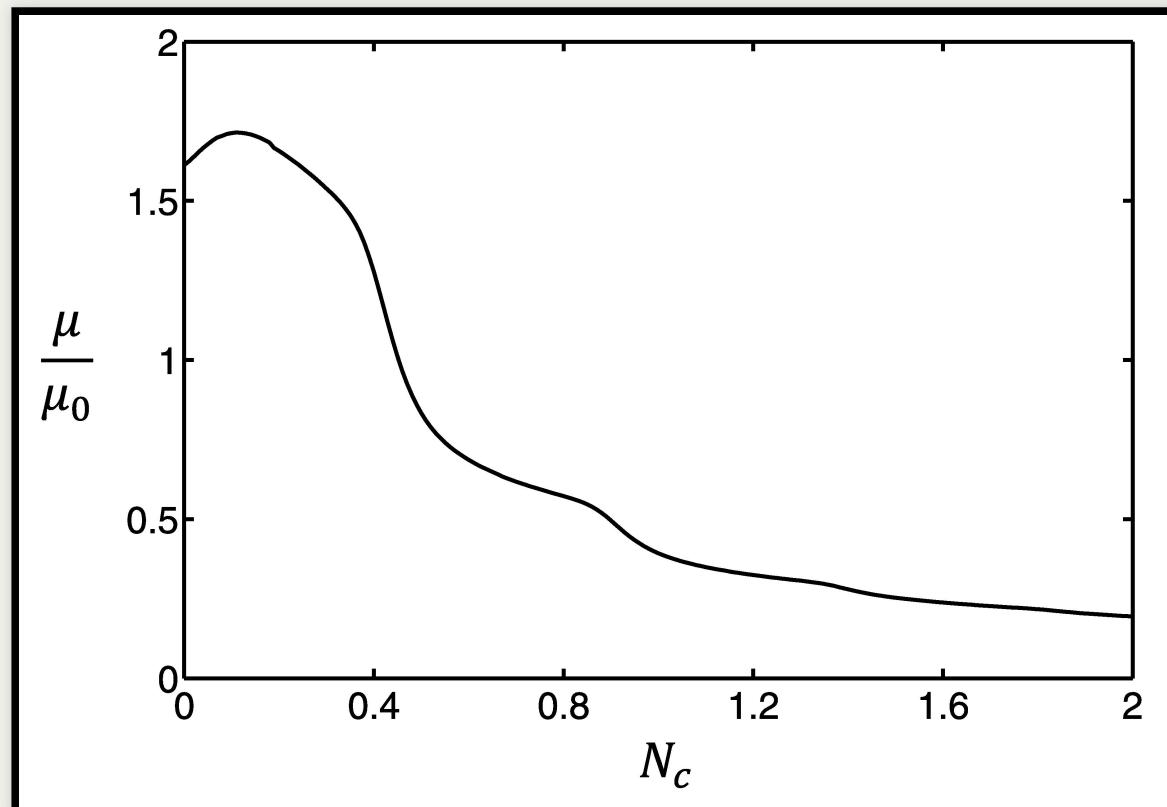
Как следует из выражения для вырожденного электронного газа, подвижность с ростом E убывает, но слабее, чем в случае невырожденного электронного газа. В общем случае зависимость подвижности от напряженности поперечного электрического поля можно найти только численно.

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 невырожден) подвижность сначала уменьшается, затем увеличивается, и в дальнейшем описывается осцилляционной кривой.

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



При больших радиусах нанопроволок, когда электронный (дырочный) газ изначально был вырожден, зависимость μ от E носит явно осциллирующий характер. Такое поведение подвижности в присутствии поперечного электрического поля связано с тем, что с ростом напряженности поперечного электрического поля, дно размерно-квантованных зон, опускаясь в область запрещенных значений энергии, пересекает 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 должна наблюдаться и для полупроводниковых квантовых проволок с вырожденным электронным газом.

Особенности подвижности в нанопроволоках в поперечных электрическом и магнитном полях

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

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

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

$$m_{ex}^* = m_{ex} \left(\frac{\Omega_y}{\omega_y} \right)^2$$

В присутствии однородного квантующего магнитного поля энергетический спектр носителей в квантовых проволоках заметным образом меняется, поэтому рассмотрим одновременное влияние поперечного магнитного и электрического полей $B \parallel E$) на явления переноса в квантовых проволоках.

Учитываем только диагональный член матричного элемента, т.к. недиагональные по осцилляторному квантовому числу матричные элементы оператора импульса при разумных параметрах КП дают незначительный вклад в искомую электропроводность:

В этих естественных приближениях соотношение для электропроводности, можно записать в следующем виде:

ξ - химический потенциал исследуемой наносистемы. Аналогично можно записать σ_{xx} для дырок в валентной зоне полуметалла Bi. В этом случае эффективные массы электронов нужно заменить на соответствующие массы дырок, а ξ на $-\xi$ плюс величину перекрытия с и v зон.

Необходимо заметить что, т.к. эффективные массы электронов (дырок) в однородном поперечном магнитном поле увеличиваются то электропроводность с ростом напряженности магнитного поля уменьшается.

Подвижность носителей (электронов и дырок) в нанопроволоке:

$$\mu_{xx} = \frac{eR^2\hbar^2}{m_x^*\gamma_0} \frac{1}{\sqrt{2m_x^*\beta_0} \sum_{nm} F(\xi_{nm})} \sum_{nm} \frac{\ln[1 + \exp(\beta\xi_{nm})]}{\left[\hbar\omega_y \frac{\omega_y}{\Omega_y} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(m + \frac{1}{2}\right) + 2\Delta_c\right]}$$

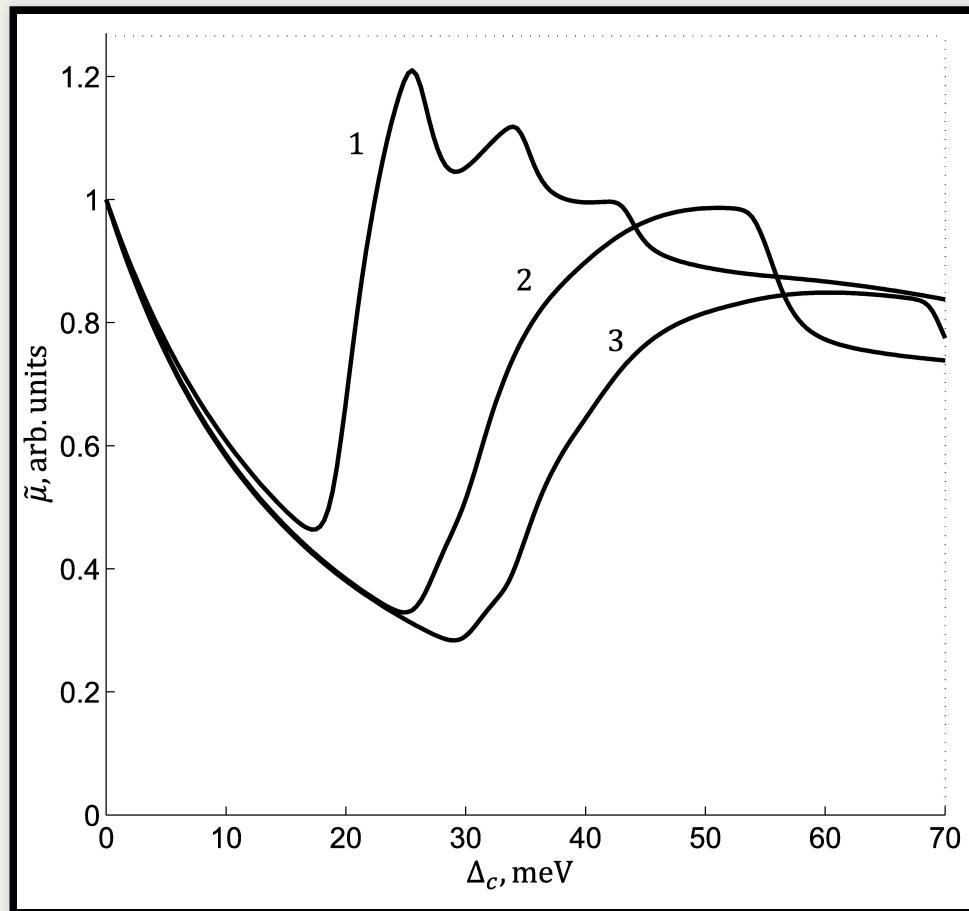
$$+ \frac{eR^2\hbar^2}{\mu_x^*\gamma_0} \frac{1}{\sqrt{2\mu_x^*\beta_0} \sum_{nm} F(\tilde{\xi}_{nm})} \sum_{nm} \frac{\ln[1 + \exp(\beta\tilde{\xi}_{nm})]}{p \left[\hbar\tilde{\omega}_y \frac{\tilde{\omega}_y}{\tilde{\Omega}_y} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\tilde{\omega}_z \left(m + \frac{1}{2}\right) + 2\Delta_v\right]^2}$$

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

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

Следовательно, подвижность носителей (электронов и дырок) в нанопроволоке записывается следующим образом: p - число зон, участвующих в процессах электропроводности. Химический потенциал ξ находится из условия электронейтральности исследуемой квантовой проволоки (число электронов в p зонах проводимости равно числу дырок в валентной зоне): Если магнитное поле направлено вдоль оси OZ , а постоянное поперечное электрическое поле перпендикулярно магнитному, то подвижность, как показывают расчеты, тоже описывается этим соотношением.

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



На рисунке 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 ($\delta = (\omega_x^c / \omega_y)^2$). При малых значениях Δ_c электронный газ (при рассмотренных параметрах квантовой проволоки) является невырожденным, поэтому с ростом напряженности поперечного электрического поля подвижность уменьшается. 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 пересечь дно размерно-квантованной зоны, в которой существуют особенности в плотности энергетических состояний. Первый пик связан с пересечением химического потенциала нижайшего состояния размерно-квантованной 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 б'ольших значений энергии, поэтому пересечение химического потенциала наступает при б'ольших значениях Δ_c . Именно по этой причине первый пик кривой 2 сдвинут по отношению первого пика кривой 1 в область б'ольших значений напряженности поперечного электрического поля.

ТермоЭДС в нанопроволоках Ві в поперечном постоянном электрическом поле

ТермоЭДС в массивных образцах

$$\alpha_{xx}(H) = \frac{\gamma_{yx}}{T\sigma_{yx}}$$

ТермоЭДС в низкоразмерных структурах

$$\alpha_{xx}(H) = \frac{\gamma_{xx}}{T\sigma_{xx}}$$

$$\gamma_{xx} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \hat{j}_x(t) \hat{Q}_x \right\rangle dt = \frac{e\hbar^2}{2k_0 TV m_e^2} \sum_{\alpha} (E_{\alpha} - \xi) k_x^2 \tau_{\alpha} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha})$$

$$\sigma_{xx} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \hat{j}_x(t) \hat{j}_x \right\rangle dt = \frac{e^2 \hbar^2}{2k_0 TV m_e^2} \sum_{\alpha} k_x^2 \tau_{\alpha} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha})$$

Исследования термомагнитных явлений в объемных материалах в поперечном магнитном поле представляются очень важными, поскольку квантовые эффекты в этом случае проявляются очень ярко. Именно по этой причине описание кинетических явлений с использованием классического уравнения Больцмана, которое неприменимо в квантующих магнитных полях, является сомнительным \cite{Askerov1970}. т.к. оно справедливо только в квазиклассическом случае, когда имеет место понятие траектории и состояния электронного газа задаются в фазовом пространстве.

В массивных образцах в поперечном магнитном поле термоэдс простым образом связана с потоком тепловой энергии и с электропроводностью (принцип Онзагера)

и при $\omega_c\tau \gg 1$ (ω_c - циклотронная частота, τ - время релаксации) не зависит от механизма рассеяния.

В низкоразмерных системах термоэдс в поперечном магнитном поле принципиальным образом отличается от массивных образцов. Это связано с тем, что диагональные по квантовым числам матричные элементы операторов плотности электрического тока, через которые определяются корреляционные функции плотности потока тепловой энергии и электропроводности, отличны от нуля. Поэтому термоэдс в рассматриваемом случае

зависит от механизмов рассеяния носителей в системах с пониженной размерностью (квантовые ямы, квантовые проволоки).

Для последовательного описания термоэдс в поперечном квантующем магнитном поле необходимо использовать общие соотношения неравновесной квантовой статистики для потока тепловой энергии и электропроводности, расчет которых можно провести без использования решения классического уравнения Больцмана.

Проводя усреднение по фононной подсистеме, усреднение по реализации случайного процесса при учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности проводится с использованием метода кумулянтного усреднения, получаем выражения для плотности потока и электропроводности:

$n(\alpha)$ - равновесная функция распределения носителей, α - набор квантовых чисел, описывающих квантовое состояние электрона, $1/\tau(\alpha)$ - полная квантово-механическая вероятность рассеяния частиц в единицу времени, χ_i - химический потенциал, k_x - волновой вектор вдоль оси ОХ для электрона с эффективной массой m_e , $\langle \rangle$ - описывает усреднение с равновесной матрицей плотности.

Термоэдс с учетом электронов и дырок

$$\begin{aligned}
\alpha_{xx} = & -\frac{k_0}{e} \left\{ \sum_{n,m} \left[\nu \frac{F_2(\eta_{nm}^c) - \eta_{nm}^c F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} - \frac{F_2(\eta_{nm}^v) - \eta_{nm}^v F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\} \times \\
& \times \left\{ \sum_{n,m} \left[\nu \frac{F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} + \frac{F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\}^{-1} \\
a = & \left(\frac{m_h}{m_c} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad b = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c}, \\
\eta_{nm}^c = & \beta [\Delta_c + \xi - \hbar\omega_c(n+m+1)], \\
\eta_{nm}^v = & \beta [\Delta + \Delta_v - \xi - \hbar\omega_v(n+m+1)],
\end{aligned}$$

В простейшей модели перекрывающихся зон для нанопроволок B_i выражение для подвижности принимает вид:

v - количество зон проводимости, участвующих в кинетических процессах

Интегралы Ферми

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

В частности для $k = 0$

$$F_0(\eta) = \frac{1}{e^{-\eta} + 1}$$

Для $k = 1$

$$F_1(\eta) = \ln(1 + e^{\eta})$$

Для $k = 1/2$

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = -\frac{\sqrt{(\pi)}}{2} \text{Li}_{\frac{1}{2}}[-\exp(\eta)]$$

Функция входящие в выражения для термоэдс и химического потенциала, при в некоторых случаях выражаются через элементарные функции

Химический потенциал

$$\nu \sqrt{\frac{m_e}{m_v}} \sum_{n,m} F_{\frac{1}{2}} (\eta_{nm}^c) = \sum_{n,m} F_{\frac{1}{2}} (\eta_{nm}^v)$$

Вырожденный электронный газ

$$\xi - \hbar\omega_c = \Delta_0 + \Delta_v - (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v), \left(\frac{\Delta_v}{\Delta_c} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} > 1 \right)$$

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

ТермоЭДС в случае невырожденного электронного газа

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

Химический потенциал ξ определяется как обычно из условия электронейтральности исследуемой наноструктуры (число электронов в размерно-квантованных зонах равно числу дырок в v зоне):

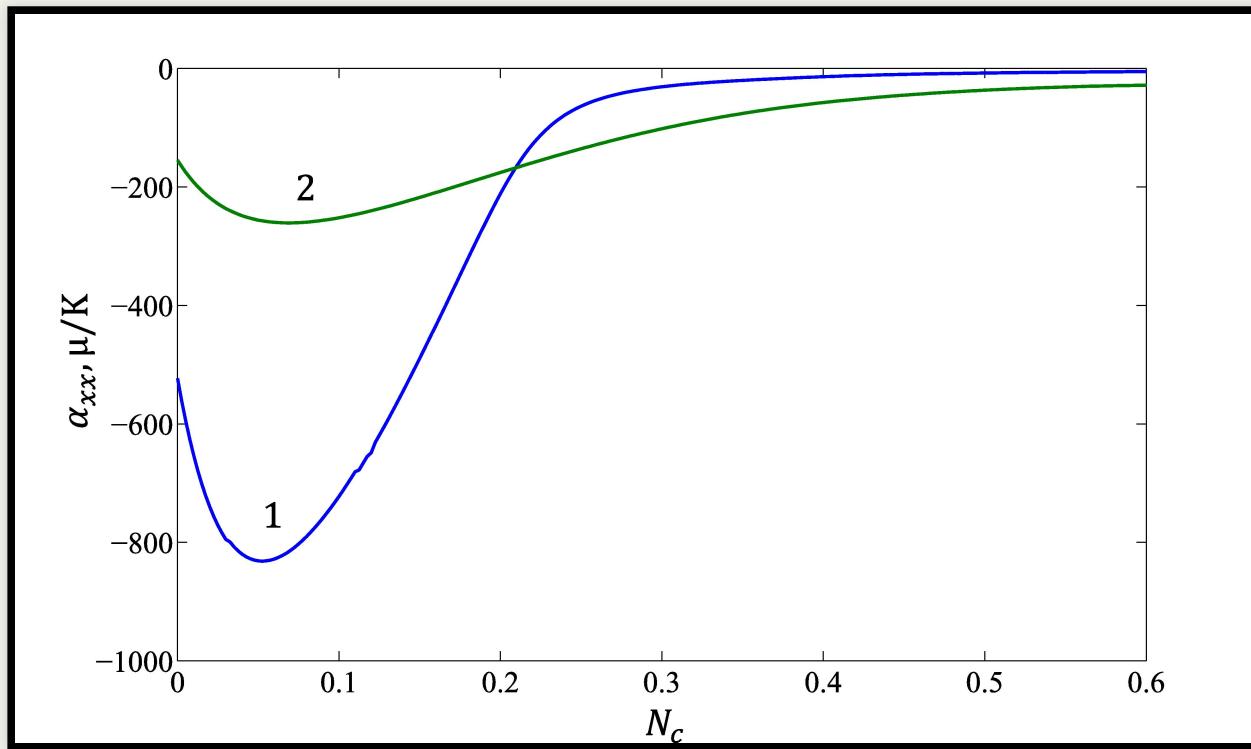
Если носители находятся на нижайшем размерно-квантованном уровне ($n = m = 0$), электронный и дырочный газ вырожден (химический потенциал положителен и $\beta\xi \gg 1$), то при $m_c \ll m_v$, то не трудно определить ξ :

В такой простой модели, термоэдс принимает вид:

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 $d \ll 500A$, при $T = 77\text{ K}$ \cite{Black2002}), термоэдс имеет вид:

Зависимость удельной термоэдс квантовой проволоки от напряженности поперечного электрического поля



Расчет термоэдс проведен в общем случае с учетом размерно-квантованных v и с зон при типичных значениях параметров квантовой проволоки:

$$\Delta E_c = 0.5 \text{ eV}, \Delta E_v = 0.3 \text{ eV}, \Delta_0 = 0.038 \text{ eV}, m_c = 0.01m_0, m_v = 0.1m_0, R = 500 \text{ A}.$$

Зависимость термоэдс в этом случае от напряженности постоянного электрического поля приведена на рисунке.

Кривая 1 получена при $T = 10 \text{ K}$, кривая 2 вычислена при $T = 50 \text{ K}$. Как показано на рисунке с ростом температуры величина термоэдс по абсолютной величине уменьшается и при увеличении E , стремится к нулю оставаясь при этом отрицательной.

В нанопроволоках, как следствие одномерностиnanoструктуры в плотности 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 возникает характерный минимум.

Следовательно, внешнее электрическое поле дает уникальную возможность управлять величиной термоэдс, что позволяет надеяться на приборное применение предсказанного эффекта. В заключение отметим, что сильная анизотропия эффективных масс в нанопроволоках Bi (в зависимости от направления кристаллографических осей массы для электронов в c -зоне меняются от $0,001m_0$ до $0,26m_0$, в валентной зоне от $0,059m_0$ до $0,634m_0$) влияет на величину рассматриваемого эффекта, но сохраняет зависимость термоэдс от E практически неизменной.

Спасибо за внимание