

УДК 621.315

## ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА С ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ПОЛОЖЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ В КВАНТОВОЙ ПЛЕНКЕ

А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 мая 2006 г.)

Исследовано рассеяние электронов на заряженных примесных центрах в квантовой пленке с параболическим ограничивающим потенциалом с учетом координатной зависимости эффективной массы электрона в пленке. Рассчитана подвижность для различных распределений примесных центров (однородное распределение в пленке, в области барьера и во всем пространстве). Показано, что учет координатной зависимости приводит к уменьшению подвижности.

### 1. Введение

Низкоразмерные электронные системы, в которых реализуется квантовый режим поведения носителей заряда (НЗ), весьма чувствительны к изменениям их размеров, геометрической формы и состава [1,2]. Важной характеристикой таких систем является время жизни НЗ при различных механизмах рассеяния.

Исследованию примесного рассеяния в двумерных системах посвящены работы [3,4], где показано, что вероятность рассеяния НЗ на примесях уменьшается с уменьшением ширины квантовой ямы, т.е. в таких системах возможно подавление рассеяния на заряженных примесях и получение больших, чем для массивных образцов, значений подвижности НЗ. Как показали исследования примесного рассеяния в квантовых проволоках (см., например, [5-8]), размерное квантование в двух направлениях приводит к еще большему подавлению рассеяния, и подвижность НЗ становится на несколько порядков больше, чем в массивном образце и в квантовой пленке.

В последние годы предметом особо пристального внимания теоретиков и экспериментаторов стали размерно квантованные системы с параболическим ограничивающим потенциалом [1], создаваемые методом плавного изменения концентрации сплава в гетероструктуре [9]. В модели прямоугольной квантовой ямы НЗ в яме приписывается постоянная эффективная масса, однако в случае параболической ямы такой подход эквивалентен пренебрежению зависимостью эффективной массы от положения в яме, что *a priori* не очевидно и не обосновано.

В работах [10-12] рассмотрены одномерные системы с зависящей от координаты эффективной массой  $m^*$ . Исследованы граничные условия для огибающей волновой функции, когда эффективная масса электрона меняется скачком при переходе из одной среды в другую, а также рассмотрены точнорешаемые задачи, когда эффективная масса электрона и ограничивающий квантовую яму потенциал меняются по закону гиперболического тангенса.

Следует особо отметить работы [13-17], в которых изложен метод суперсимметрии в квантовой механике для частиц с зависящей от координаты эффективной массой. С помощью метода суперсимметрии для заданной зависимости массы можно найти виды потенциалов, для которых уравнение Шредингера имеет точные аналитические решения. Однако эти потенциалы не всегда имеют реальный физический смысл.

В данной работе рассмотрены электронные состояния в полупроводниковой квантовой пленке, где концентрация сплава  $x$ , следовательно, эффективная масса и ограничивающий потенциал меняются по квадратичному закону. С помощью приближенного метода, предложенного в [18], где получены энергетические уровни и волновые функции электрона для основного и нескольких возбужденных состояний, рассмотрено рассеяние электронов на заряженных примесных центрах для различных распределений примесных центров (однородное распределение в пленке, в области барьера и во всем пространстве). Рассчитана также подвижность электронов для рассмотренных распределений примесей.

## 2. Электронные состояния

Рассмотрим квантовую яму  $\text{Ga}_{1-x_{\max}}\text{Al}_{x_{\max}}\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-x_{\max}}\text{Al}_{x_{\max}}\text{As}$  с параболическим ограничивающим потенциалом, в которой концентрация сплава  $x$  зависит от координаты  $z$  по квадратичному закону и меняется от нулевого значения в центре ямы до значения  $x_{\max}$  на ее границе:

$$x(z) = x_{\max} 4z^2 / a^2 \quad \text{при } |z| \leq a/2 \quad \text{и} \quad x(z) = x_{\max} \quad \text{при } |z| > a/2, \quad (1)$$

где  $a$  – ширина квантовой ямы (КЯ). Эффективная масса электрона и его потенциальная энергия в области ямы и барьера даются выражениями

$$m(z) = \begin{cases} m_1(1 + \alpha z^2), & |z| \leq a/2, \\ m_2, & |z| > a/2, \end{cases} \quad V(z) = \begin{cases} V_0 \frac{4z^2}{a^2}, & |z| \leq a/2, \\ V_0, & |z| > a/2, \end{cases} \quad (2)$$

где  $m_1 = 0.067m_0$  и  $m_2 = (0.067 + 0.083x_{\max})m_0$  – эффективные массы электрона в GaAs и  $\text{Ga}_{1-x_{\max}}\text{Al}_{x_{\max}}\text{As}$ , соответственно,  $m_0$  – масса свободного электрона,  $V_0 = 1.247Q_e x_{\max}$  эВ – высота потенциального барьера,  $Q_e = 0.6$  – доля разрыва потенциальной энергии, приходящаяся на зону проводимости,  $\alpha = (83/67)4x_{\max}/a^2$ .

Представив решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \varphi(z), \quad (3)$$

где  $k_x$  и  $k_y$  – проекции двумерного волнового вектора  $\mathbf{k}_\perp$ ,  $S$  – площадь пленки, для функции  $\varphi(z)$  получим уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m(z)} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m(z)} \varphi + V(z) \varphi = E \varphi. \quad (4)$$

Энергию движения электрона в плоскости пленки запишем в виде

$$\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m(z)} = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_\perp} + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2} \left( \frac{1}{m(z)} - \frac{1}{m_\perp} \right). \quad (5)$$

где единая для всей системы эффективная масса электрона  $m_\perp$  определяется из требования равенства нулю среднего значения возмущения (второго слагаемого в уравнении (5)) [19]. При пренебрежении возмущением в (4) и воспользовавшись приближением, предложенным в [18], для функции  $\varphi(z)$  получим:

$$\varphi(z) = C_1 \begin{cases} C_2 e^{k_b z}, & z < -a/2, \\ (1 + \alpha z^2)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} B z^2} F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, B z^2\right), & |z| \leq a/2, \\ C_2 e^{-k_b z}, & z > a/2, \end{cases} \quad (6)$$

где  $F(a, b, z)$  – вырожденная гипергеометрическая функция,  $k_b = \frac{[2m_2(V_0 - E_n)]^{1/2}}{\hbar}$ ,

$$A = \left( \frac{2m_1 E_n}{\hbar^2} + \alpha \right)^{1/2}, \quad B = \left( \frac{8m_1 V_0}{\hbar^2 \alpha^2} - \frac{2m_1 E_n \alpha}{\hbar^2} + 4\alpha^2 \right)^{1/2},$$

$$C_1 = \left\{ \frac{C_2^2}{k_b} e^{-k_b a} + \int_{-a/2}^{a/2} (1 + \alpha z^2) e^{-B z^2} F^2\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, B z^2\right) dz \right\}^{-1/2},$$

$$C_2 = e^{k_b a/2} \left( 1 + \frac{\alpha a^2}{4} \right)^{1/2} e^{-B a^2/8} F\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, B \frac{a^2}{4}\right).$$

Энергетические уровни  $E_n$  определим из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе  $z = a/2$ , а для эффективной массы  $m_\perp$  получим:

$$\frac{1}{m_\perp} = C_1^2 \left\{ \frac{1}{m_1} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-B z^2} F^2\left(\frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, B z^2\right) dz + \frac{1}{m_2} \frac{C_2^2}{k_b} e^{-k_b a} \right\}. \quad (7)$$

### 3. Расчет подвижности

Рассмотрим рассеяние электрона на заряженном примесном центре. Энергия взаимодействия электрона с примесью

$$V(\rho, z) = -\frac{e^2}{\chi \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}, \quad (8)$$

где  $\rho$  – диэлектрическая постоянная среды,  $z_i$  – аппликата примесного центра.

В условиях заполнения только первой подзоны размерного квантования для расчета темпа импульсной релаксации воспользуемся формулой [3]

$$\tau^{-1}(k_{\perp}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'_{\perp}} \int dz_i N_i(z_i) |\langle 1, \mathbf{k}'_{\perp} | V(\rho, z) | 1, \mathbf{k}_{\perp} \rangle|^2 (1 - \cos \theta) \delta(E_{k'_{\perp}} - E_{k_{\perp}}), \quad (9)$$

где  $N_i(z_i)$  – плотность примесей в точке  $z_i$ ,  $\theta$  – угол рассеяния,  $E_{k_{\perp}} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_{\perp}$ . Для расчета матричного элемента перехода из состояния  $|1, \mathbf{k}_{\perp}\rangle$  в состояние  $|1, \mathbf{k}'_{\perp}\rangle$  воспользуемся выражением для двумерного фурье-образа кулоновского потенциала (8):  $V(\mathbf{q}, z) = (2\pi e^2 / \chi q) \exp(-q |z - z_i|)$ , где  $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_{\perp} - \mathbf{k}_{\perp}$  [19].

Расчет времени импульсной релаксации и подвижности электронов проведем для трех случаев распределения примесных центров в системе.

а) Примеси распределены однородно внутри пленки (background impurities):

$$N_i(z_i) = Sn_i \quad \text{при} \quad |z| \leq a/2 \quad \text{и} \quad N_i(z_i) = 0 \quad \text{при} \quad |z| > a/2. \quad (10)$$

После подстановки (10) в (9) для темпа импульсной релаксации получим:

$$\begin{aligned} \tau_b^{-1}(k_{\perp}) = \tau_0^{-1} \frac{C_1^4 m_{\perp}}{k_{\perp}^2 a_B^2 m_1} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-a/2}^{a/2} \frac{dz_i}{a_B} \left\{ \frac{C_2^2 e^{-(k_b + k_{\perp} \sin \theta/2)a}}{k_b + k_{\perp} \sin \theta/2} \operatorname{ch}(2k_{\perp} z_i \sin \theta/2) + \right. \\ \left. + \int_{-a/2}^{a/2} (1 + \alpha z^2) e^{-Bz^2} F^2 \left( \frac{1}{4} - \frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2 \right) e^{-2k_{\perp} |z - z_i| \sin \theta/2} dz \right\}^2, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\tau_0^{-1} = 2\pi m_i a_B^3 E_R / \hbar$ ,  $a_B = \hbar^2 \chi / m_1 e^2$  – эффективный боровский радиус,  $E_R = e^2 / 2a_B \chi$  – эффективная ридберговская энергия.

б) Примеси распределены однородно в области барьера (remote impurities):

$$N_i(z_i) = 0 \quad \text{при} \quad |z| \leq a/2 \quad \text{и} \quad N_i(z_i) = Sn_i \quad \text{при} \quad |z| > a/2. \quad (12)$$

В этом случае для темпа импульсной релаксации получим:

$$\begin{aligned} \tau_r^{-1}(k_{\perp}) = & \tau_0^{-1} \frac{C_1^4 m_{\perp}}{k_{\perp}^2 a_B^2 m_1} \left[ \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{-a/2} \frac{dz_i}{a_B} \left\{ C_2^2 \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + \right. \right. \\ & + \int_{-a/2}^{a/2} (1+\alpha z^2) e^{-Bz^2} F^2\left(\frac{1}{4}-\frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + C_2^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz \left. \right\}^2 + \\ & + \int_0^{2\pi} d\theta \int_{a/2}^{\infty} \frac{dz_i}{a_B} \left\{ C_2^2 \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + \right. \\ & + \int_{-a/2}^{a/2} (1+\alpha z^2) e^{-Bz^2} F^2\left(\frac{1}{4}-\frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + C_2^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz \left. \right\}^2 \Bigg]. \end{aligned} \quad (13)$$

с) Примеси распределены однородно во всем пространстве. В этом случае для темпа импульсной релаксации получим:

$$\begin{aligned} \tau_r^{-1}(k_{\perp}) = & \tau_0^{-1} \frac{C_1^4 m_{\perp}}{k_{\perp}^2 a_B^2 m_1} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_i}{a_B} \left\{ C_2^2 \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + \int_{-a/2}^{a/2} (1+\alpha z^2) e^{-Bz^2} \times \right. \\ & \times F^2\left(\frac{1}{4}-\frac{A^2}{4B}, \frac{1}{2}, Bz^2\right) e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz + C_2^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2k_b z} e^{-2k_{\perp}|z-z_i|\sin\theta/2} dz \left. \right\}^2. \end{aligned} \quad (14)$$

Как известно, примесное рассеяние является основным механизмом рассеяния при низких температурах, когда фононным рассеянием можно пренебречь. При низких температурах, когда электронный газ вырожден, подвижность  $\mu = e\tau(k_F)/m_{\perp}$ , где фермиевское волновое число  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ , а  $n_e$  – концентрация двумерного электронного газа в пленке. Заметим, что при  $n_e = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  условие вырожденности имеет место при  $T \ll T_0 \sim 40 \text{ К}$ . Для того, чтобы рассеяние НЗ имело место только в первой подзоне, необходимо, чтобы  $k_F \leq k_{\max} = \sqrt{2m_1(E_2 - E_1)/\hbar^2}$ ,  $k_F \leq k_{\max} = \sqrt{2m_{\perp}(E_2 - E_1)/\hbar^2}$ , где  $E_1$  и  $E_2$  – дискретные энергии в направлении квантования. Для ямы с шириной  $a = 2a_B \approx 200 \text{ \AA}$   $k_{\max} \approx 3.3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ , следовательно, условие заполнения только первой подзоны выполняется для плотностей  $n_e \leq 1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ .

#### 4. Обсуждение результатов

Численные расчеты нами были проведены для квантовой ямы  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  с использованием эффективной ридберговской энергии  $E_R = 5.2 \text{ мэВ}$  и эффективного борковского радиуса  $a_B = 104 \text{ \AA}$  [9].

На рис.1 представлены зависимости электронных энергетических уровней от ширины КЯ (здесь и на последующих рисунках пунктирные линии соответствуют постоянной эффективной массе электрона в КЯ). Как видно из рис.1, учет зависимости эффективной массы от положения в КЯ приводит к смещению уровней в область низких энергий. При этом, чем выше энергетический уровень, тем больше величина этого смещения. Однако для

значений  $a \leq 0.22a_B$  энергия основного состояния электрона с эффективной массой  $m_1$  опускается ниже энергии при учете координатной зависимости эффективной массы, что объясняется большим просачиванием электрона с меньшей эффективной массой в область барьера. При увеличении ширины КЯ влияние барьера уменьшается, и энергия электрона с зависящей от положения массой понижается. Так, для  $a = 1.5a_B$  относительное изменение энергии для основного состояния составляет около 9% (абсолютное –  $0.79E_R$ ), для первого возбужденного состояния – 9.1% ( $2.35E_R$ ), а для второго возбужденного состояния – 8.7% ( $3.54E_R$ ).

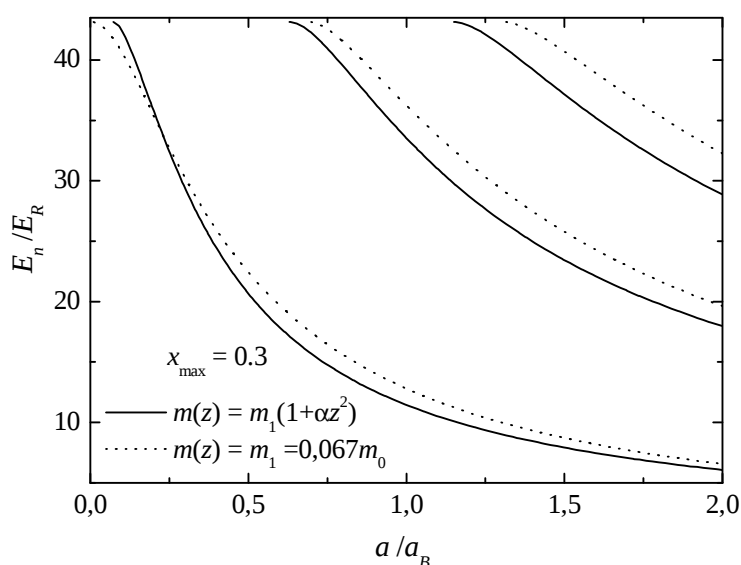


Рис.1. Зависимость энергетических уровней от ширины КЯ.

На рис.2а приведена зависимость эффективной массы  $m_\perp$  от концентрации сплава  $x_{\max}$  для различных значений толщины пленки. С увеличением  $x_{\max}$  эффективная масса увеличивается из-за роста массы электрона как в пленке, так и в области барьера. При этом отличие зависимостей эффективной массы от  $x_{\max}$  для различных значений толщины пленки обусловлено зависимостью вероятности туннелирования электрона из пленки в область барьера и определяется зависимостью эффективной массы и ограничивающего потенциала от концентрации сплава.

На рис.2б представлена зависимость эффективной массы  $m_\perp$  от толщины пленки  $a$ . С увеличением  $a$  эффективная масса уменьшается, потому что электрон в основном находится в центральной части ямы, где масса наименьшая. Для фиксированного значения  $a$  учет зависимости массы от координаты приводит к увеличению массы  $m_\perp$ , поскольку эффективная масса электрона в яме увеличивается.

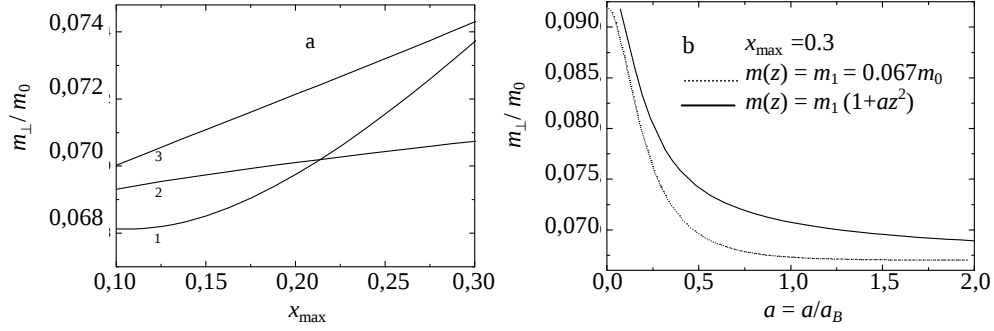


Рис.2. Зависимость эффективной массы  $m_{\perp}$  от концентрации сплава  $x_{\max}$  (а) и от толщины пленки (б).

На рис.3 показана зависимость подвижности от толщины пленки в случае, когда примеси распределены внутри пленки. При уменьшении толщины пленки подвижность увеличивается из-за увеличения вероятности нахождения НЗ в области барьера, и вероятность рассеяния на примесных центрах, находящихся в области пленки, уменьшается. Учет зависимости эффективной массы электрона от координаты приводит к уменьшению подвижности вследствие увеличения массы частицы. Этот эффект хорошо заметен для значений толщины пленки  $0.3a_B \leq a \leq 1.5a_B$ .

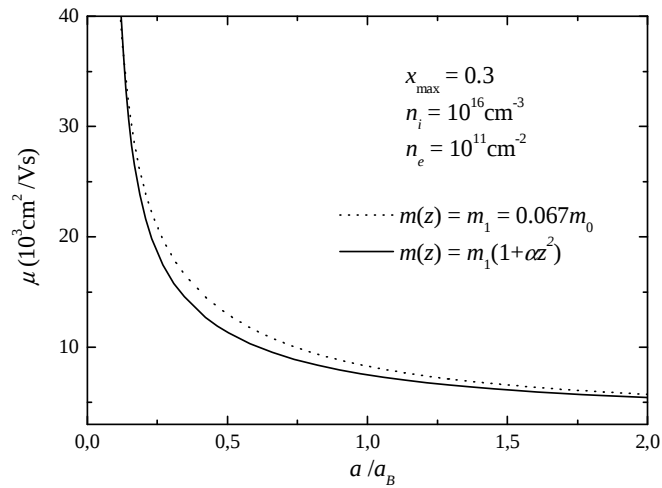


Рис.3. Зависимость подвижности электронов от толщины пленки.

На рис.4 приведена зависимость подвижности НЗ от толщины пленки в случае, когда примеси распределены снаружи (кривая 1) и однородно во всем пространстве (кривая 2). Для малых значений  $a$  электроны рассеиваются только на внешних примесях и кривые совпадают. При увеличении толщины пленки в обоих случаях подвижность растет из-за увеличения роли размерного квантования. Однако в случае внешних примесей подвижность растет

быстрее, а кривая находится выше, потому что с ростом толщины пленки электроны локализируются в области, где отсутствуют примеси.

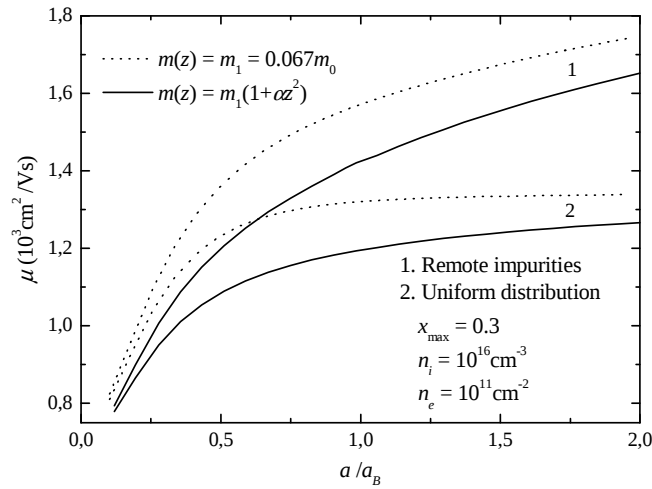


Рис.4. Зависимость подвижности электронов от толщины пленки в случае внешних и однородных примесей.

Таким образом, в работе рассмотрена более реалистичная модель квантовой пленки с параболическим ограничивающим потенциалом, в которой эффективная масса электрона зависит от положения, учет которого приводит к смещению энергетических уровней в область низких энергий и к уменьшению подвижности.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения “Полупроводниковая наноэлектроника” и при поддержке гранта ANSEF 05-PS-nano-0811-228.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **J.H.Davies.** The physics of low-dimensional semiconductors. Cambridge University Press, NY, 1998.
2. **P.Harrison.** Quantum wells, wires, and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons ltd, NY, 1999.
3. **J.Lee, H.N.Spector, V.K.Arora.** J. Appl. Phys., **54**, 6995 (1983).
4. **J.L.Thobel, L.Baudry, F.Dessenne, M.Charef, R.Fauquembergue.** J. Appl. Phys., **73**, 233 (1993).
5. **H.Sakaki.** Jpn. J. Appl. Phys., **19**, L735 (1980).
6. **J.W.Brown, H.N.Spector.** J. Vacuum Sci. Technol. B, **4**, 453 (1986).
7. **G.Timp, R.E.Behringer, J.E.Chunningham.** Phys. Rev. B, **42**, 9259 (1990).
8. **P.Vagner, M.Mosko.** J. Appl. Phys., **81**, 3196 (1997).
9. **S.Adachi.** J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
10. **M.E.Pistol.** Phys. Rev. B, **60**, 14269 (1999).
11. **L.Dekar, L.Chetouani, T.F.Hammann.** J. Math. Phys., **39**, 2551 (1998).
12. **L.Dekar, L.Chetouani, T.F. Hammann.** Phys. Rev. A, **59**, 107 (1999).
13. **R.Koc, M.Koca.** J. Phys. A: Math. Gen., **36**, 8105 (2003).
14. **N.Moiseyev, R.Lefebvre.** Phys. Rev. A, **64**, 052711 (2001).
15. **A.R.Plantino, A.Rigo, M. Casas, F.Garcias, A.Plantino.** Phys. Rev. A, **60**, 4318 (1999).

16. **B.Gonul, D.Tutcu, O.Ozer.** Mod. Phys. Lett. A, **17**, 2057 (2002).
17. **A. De Souza Dutra, M.Hott, C.A.S.Almeida.** EuroPhys. Lett., **62**, 8 (2003).
18. **А.Х.Манаселян.** Изв. НАН Армении, Физика, **39**, 384 (2004).
19. **G.Bastard.** Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les editions de Physique. Les Ulis, Cedex, France, 1988.

**ԴԻՐՔԻՑ ԿԱԽՎԱԾ ԱՐԴՅՈՒՆԱՐԱՐ ԶԱՆԳՎԱԾՈՎ ԼԻՑՔԱԿԻՐՆԵՐԻ  
ՇԱՐԺՈՒՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԹԱՂԱՆԹՈՒՄ**

Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված է էլեկտրոնների ցրումը լիցքավորված խառնուրդային կենտրոնների վրա պարաբոլական սահմանափակող պոտենցիալով քվանտային թաղանթում, էլեկտրոնի արդյունաբար զանգվածի կոորդինատային կախվածության հաշվառմամբ: Հաշվարկված է էլեկտրոնի շարժունությունը խառնուրդային կենտրոնների տարբեր բաշխումների դեպքում (համասեռ բաշխում թաղանթում, արգելքի տիրույթում և ամբողջ տարածությունում): Ցույց է տրված, որ կոորդինատային կախվածության հաշվառումը բերում է շարժունության նվազման:

**MOBILITY OF CHARGE CARRIERS  
WITH POSITION-DEPENDENT EFFECTIVE MASS IN A QUANTUM FILM**

A.KH. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The scattering of electrons on charged impurity centers in a quantum film with the parabolic confining potential is investigated, taking into account the coordinate dependence of the electron effective mass in the film. The mobility is calculated for various distributions of impurity centers (homogeneous distribution in the film, barrier region and the whole space). It is shown that the consideration of the coordinate dependence leads to the mobility decrease.