

## РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ПОДВИЖНОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ С ПОЛЯРНЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ ФОНОНАМИ

*Артур АСКЕРОВ, Евгений ПОКАТИЛОВ, Денис НИКА*

*Кафедра теоретической физики*

În articol este cercetată dependența mobilității electronice de dimensiunile canalului conductiv în heterostructura planară AlN/GaN/AlN. Se demonstrează teoretic că dependența mobilității electronice de dimensiunile canalului conductiv are un caracter oscilatoriu. Acest caracter oscilatoriu este explicat de interacțiunea tranzițiilor electronilor între subbenzi și în cadrul subbenzilor.

The investigation of the dependence of the electron mobility on the conductivity channel thicknesses in planar zinc-blende AlN/GaN/AlN heterostructures was fulfilled in the presented paper. It was theoretically shown that the electron mobility manifests an oscillatory dependence on the channel thickness. This non-monotonic behaviour was explained by the interplay of intra- and inter-subband electron transitions.

### Введение

Теоретически нами исследована зависимость электронной подвижности, лимитированной полярным оптическим рассеянием, от ширины канала в наноразмерных полярных гетероструктурах, с учётом межподзонных переходов электронов. Численные расчёты выполнены с использованием параметров zinc-blende AlN/GaN/AlN гетероструктуры. Как показано в нашей работе, межподзонное рассеяние сильно модифицирует монотонный рост подвижности, полученный при учете только внутризонного рассеяния. Включение межподзонных переходов, происходящее когда энергетическое расстояние от уровня Ферми до возбужденной подзоны становится сравнимым с энергией оптического фонона, преобразует зависимость подвижности от толщины канала в немонотонную функцию.

Мы изучили влияние межподзонных электронных переходов, обусловленных оптическими фононами, на подвижность электронов в плоских гетероструктурах, принимая во внимание (i) несколько размерно-квантованных электронных подзон, (ii) дисперсии оптических фононов и (iii) неупругость электрон-фононного взаимодействия.

Расчеты проведены для гетероструктуры AlN/GaN/AlN (zinc-blende) с толщиной наружных обкладок AlN, равной 3 нм. Во вюртцитных структурах существует встроенное электрическое поле, сильно влияющее на свойства кристалла. Zinc-blende кристаллы GaN были выбраны с целью устранения эффектов, обусловленных встроенным электрическим полем, которые доминируют во вюртцитных материалах. Рассматриваемый эффект присущ всем полярным гетероструктурам, однако большие энергии оптических фононов в GaN и AlN способствуют усилению осцилляций.

### Теоретическая модель

В данном случае мы ограничимся рассмотрением таких толщин GaN-канала указанной гетероструктуры, когда в межподзонные переходы электронов вовлечено не более трёх нижних подзон. Для описания межподзонных переходов достаточно при этом использовать систему из трёх уравнений Больцмана [1-2]:

$$\sum_{\substack{\vec{p}', m=\pm 1, \\ \lambda, n=1, 2}} [W(n, \vec{p} \rightarrow n', \vec{p}') \frac{(1 - f^0(\varepsilon_n + m \cdot \hbar \omega_\lambda(q))}{(1 - f^0(\varepsilon_n))} (\tau_n(\vec{p}) - \tau_{n'}(\vec{p}')) \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}'}{p^2}] = 1, \quad (1)$$

где  $n=1, 2, 3$ .

В уравнении (1)  $W(\gamma \rightarrow \gamma') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \gamma' | \hat{H}_{e-ph} | \gamma \rangle \right|^2 \delta(E_\gamma - E_{\gamma'})$  – вероятность перехода электрон-фононной системы из состояния  $\gamma$  с энергией  $E_\gamma$  в состояние  $\gamma'$  с энергией  $E_{\gamma'}$ ;

$f^0(\varepsilon) = (\exp(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}) + 1)^{-1}$  – функция распределения Ферми-Дирака;  $T$  – абсолютная температура;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $\varepsilon$  – энергия электрона;  $q$  – волновое число фонона;  $\vec{p}$  и  $\vec{p}'$  – импульсы электрона в начальном и конечном состояниях;  $\lambda$  – поляризационный индекс (квантовое число) конфейнмент и интерфейсных фононных ветвей;  $\mathcal{H}_{e-ph}$  – гамильтониан взаимодействия электрона с конфейнмент и интерфейсными оптическими фононными модами;  $\tau_1(\varepsilon)$  – кинетическое время рассеяния электрона с энергией  $\varepsilon$  в первой (основной) подзоне, которое включает переходы ( $1 \leftarrow 1$ ), ( $1 \rightarrow 2$ ) и ( $1 \rightarrow 3$ );  $\tau_2(\varepsilon)$  – кинетическое время рассеяния электрона во второй подзоне, которое включает переходы ( $2 \rightarrow 1$ ), ( $2 \leftarrow 2$ ) и ( $2 \rightarrow 3$ );  $\tau_3(\varepsilon)$  – кинетическое время рассеяния электрона в третьей подзоне, которое включает переходы ( $3 \rightarrow 1$ ), ( $3 \rightarrow 2$ ) и ( $3 \leftarrow 3$ ).

Подвижность электрона вычислялась по формуле:

$$\mu(T) = \frac{e}{k_B T} \frac{\sum_{n=1}^3 \frac{1}{\bar{m}_n} \int_0^{\infty} \varepsilon \tau_n(\varepsilon) f^0(\varepsilon) (1 - f^0(\varepsilon)) d\varepsilon}{\sum_{n=1}^3 \int_0^{\infty} f^0(\varepsilon_n^0 + \varepsilon) d\varepsilon}, \quad (2)$$

где  $e$  – заряд электрона;  $\bar{m}_n$  – эффективная масса электрона, усреднённая на электронных волновых функциях  $n$ -го энергетического уровня [3];  $T$  – абсолютная температура. Процедура усреднения волновой функции необходима для того, чтобы учесть конечное проникновение волновой функции в барьеры и различие эффективной массы электрона в проводящем канале и барьерах.

### Результаты и обсуждение

Необходимые для расчёта матричных элементов перехода электронные волновые функции находились из решения уравнения Шрёдингера, с учётом конечной высоты барьеров на интерфейсных границах. Внутриподзонаное рассеяние, а также переходы между первой и третьей подзонами, происходят благодаря взаимодействию электрона с чётными оптическими модами, тогда как ( $1 \leftarrow 2$ ) межподзональные переходы обусловлены нечётными фононными модами.

На **рис. 1** представлены графики функций  $\Delta_{nF}(d, N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}) = \varepsilon_n^0 - \varepsilon_F$  ( $\varepsilon_n^0$  – энергия  $n$ -го уровня электрона,  $\varepsilon_F$  – энергия уровня Ферми), в зависимости от ширины проводящего канала  $d$  (GaN) для  $n=2$  и 3. Горизонтальными линиями отмечены максимальная  $\hbar\omega_{\max} \sim 110$  мэВ и минимальная  $\hbar\omega_{\min} \sim 66$  мэВ энергия интерфейсных и конфейнмент оптических фононов в рассматриваемой гетероструктуре. Точками на графиках отмечены пересечения кривых  $\Delta_{nF}(d, N_s = 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2})$  с фононными уровнями.

На **рис. 2** показаны зависимости подвижности от ширины канала  $d$ . Непрерывной линией на этом графике показана подвижность электронов, рассчитанная с учётом трёх электронных подзон, штриховой – с учётом двух электронных подзон и штрихпунктирной линией – с учётом рассеяния только в основной электронной подзоне. При учёте только внутризонального рассеяния (штрихпунктирная линия на **рис. 2**) с ростом  $d$  происходит монотонное увеличение подвижности, описанное в [4]. Есть две основных причины для такого роста подвижности: во-первых, плотность волновой функции  $|\varphi_n(z, d)|^2$  размерно-квантованного состояния уменьшается с ростом  $d$ , что ведёт к уменьшению матричного элемента электрон-фононного взаимодействия, во-вторых, ослабляется взаимодействие электрона с интерфейсными фононами. Как видно из **рис.2**, применение однозонной модели возможно только для очень тонких каналов ( $d < 5$  нм), когда велико расстояние между энергетическими подзонами (больше нескольких  $k_B T$ ).

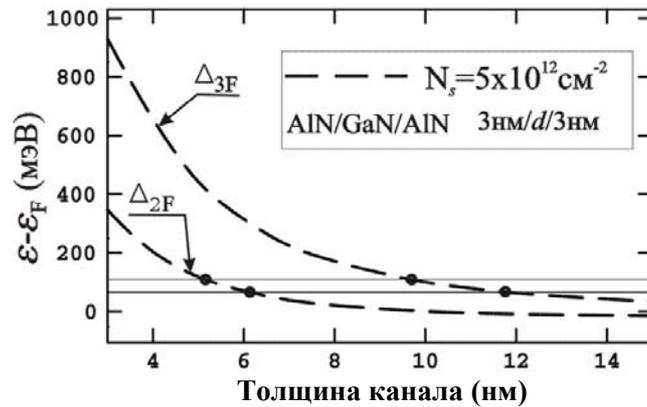


Рис.1. Разница между энергией второго  $\Delta_{2F}$  и третьего  $\Delta_{3F}$  энергетических уровней электронов и энергией Ферми как функция толщины проводящего канала.

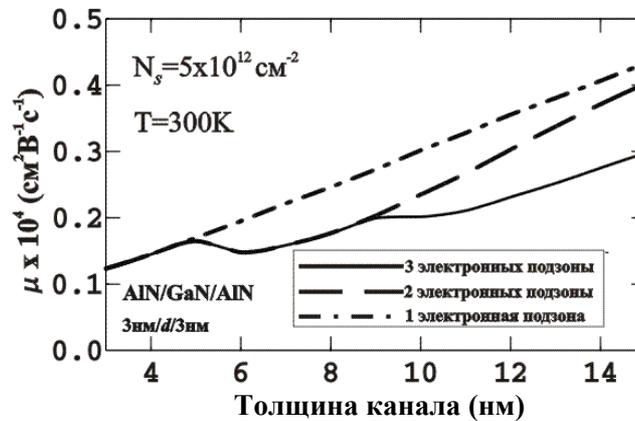


Рис.2. Зависимости подвижности от ширины канала  $d$  с учётом различного количества подзон. Результаты показаны для температуры  $T=300\text{K}$  и поверхностной концентрации  $N_s=5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ .

### Заключение

Теоретически мы показали, что подвижность электронов в zinc-blende гетероструктурах демонстрирует немонотонную (осцилляционную) зависимость от толщины проводящего канала. Таким образом, учёт межподзонных переходов при оптическом рассеянии электронов может быть существенным для определения верхней границы подвижности при комнатных температурах в полярных наноразмерных гетероструктурах. Немонотонное поведение подвижности объясняется размерным квантованием электронных состояний и одновременным участием в рассеянии внутри- и межподзонных переходов электронов.

Полученные эффекты могут быть использованы для инженерии электронных и фононных состояний в наноразмерных электронных устройствах.

### Литература:

1. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 89. – P. 112110.
2. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 89. – P. 113508.
3. E.P. Pokatilov, D.L. Nika and A.A. Balandin // J. Appl. Phys. – 2004. – Vol. 95. – P. 5626.
4. D.R. Anderson, N.A. Zakhleniuk, M. Babiker, B.K. Ridley, and C.R. Bennett // Phys. Rev. B – 2001. – Vol. 63. – P. 245313.

Проведенные исследования частично были спонсированы фондом CRDF-MRDA (проект MOE2-3057-CS-03), государственными проектами Республики Молдова (06.408.036F и 06.35.CRF) и фондом Intas (грант no. 05-104-7656).

Prezentat la 02.08.2007