

# Теория Рассеяния Носителей На Шероховатой Поверхности В Квантовых Проволоках

Синявский Э.П.

Институт Прикладной физики  
Молдова, г. Кишинев, ул. Академическая, 5

Карапетыян С.А.

ПГУ им. Т.Г. Шевченко  
Молдова, г. Тирасполь, ул. 25 Октября, 128  
karapetyan.sa@gmail.com

Костюкевич Н.С.

ПГУ им. Т.Г. Шевченко  
Молдова, г. Тирасполь, ул. 25 Октября, 128  
gravitonchik@gmail.com

**Abstract**— We theoretically investigated various models of interaction processes with a rough surface in quantum wires. We received an analytical solution for the carrier relaxation time in quantum wires under various conditions. The graphs of the dependence of the parameters of interaction with a rough surface on the values of the electric field are shown. (*Abstract*)

**Index Terms**—Quantum wire, carrier scattering, roughness surface. (*key words*)

## I. ВВЕДЕНИЕ

В квантовых системах благодаря эффектам размерного квантования влияние шероховатой поверхности на кинетические и оптические параметры является существенным. Размерно-ограниченные системы (квантовые ямы (КЯ), квантовые проволоки (КП), нанотрубки) представляют научный интерес, так, как только в них может четко проявиться эффект рассеяния носителей на шероховатой поверхности [1], который (например, в узких КЯ, КП) может полностью определять оптические свойства [2], явления переноса в квантовых системах. В работе [3] показано, что для описания межподзонного поглощения слабой электромагнитной волны важно учитывать рассеяние носителей на шероховатой поверхности (высокие подвижности, большие значения коэффициента межподзонного поглощения света  $K(\Omega) \sim 5 \cdot 10 \text{ см}^{-1}$  [4]). В последние годы интенсивно исследовались оптические свойства полупроводниковых квантовых проволок типа ZnO, GaN, CdS, InP, GaAs, так как в таких квантовых системах наблюдаются большие подвижности носителей, и в них очень активны процессы рассеяния заряженных частиц на шероховатой поверхности.

## II. МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ В НАНОСТРУКТУРАХ

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  $E_\alpha$  при движении носителя параллельно поверхности исследуемой

квантовой системы. Следовательно, энергия взаимодействия электрона (дырки) с шероховатой поверхностью в случае двухмерного электронного газа может быть записана в следующем виде [1]:

$$V(x, y) = \frac{\partial E_\alpha}{\partial a} \Delta(x, y) \equiv V_\alpha \Delta(x, y) \quad (1)$$

$\Delta(x, y)$  — случайная функция.

Часто при расчетах кинетических коэффициентов используется случай гауссовой флуктуации поверхности, когда автокорреляционная функция для различных точек поверхности определяется соотношением [6]:

$$\{\Delta(x, y)\Delta(x', y')\}_V = \Delta_0^2 \exp\left\{-\frac{1}{\Lambda_0^2} [(x-x')^2 + (y-y')^2]\right\} \equiv F(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \quad (2)$$

здесь:  $\Delta_0, \Lambda_0$  — высота и ширина гауссовой флуктуации соответственно,  $\{\dots\}_V$  описывает усреднение по реализации случайного процесса  $\Delta(x, y)$ ,  $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'| = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}$ . Естественно, что можно рассматривать случай  $\delta$ -образной флуктуации, когда

$$\{\Delta(x, y)\Delta(x', y')\} = \gamma_0 \delta(x-x')(y-y') = \tilde{F}(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \quad (3)$$

$\gamma_0$  определяет квадрат амплитуды флуктуации.

Если исследовать случай одномерного электронного газа (примером могут служить квантовые проволоки, квантовые нанотрубки), то для гауссовой флуктуации поверхности автокорреляционная функция для различных точек поверхности по аналогии с (2) может быть записана следующим образом:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \Delta_0^2 \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{\Lambda_0^2}\right] = F_0(x-x') \quad (4)$$

Для случая  $\delta$ -образной флуктуации поверхности естественно положить:

$$\{\Delta(x)\Delta(x')\} = \gamma_0 \delta(x-x') = \tilde{F}_0(x-x') \quad (5)$$

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

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\beta} W_{\alpha\beta} \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \quad (6)$$

$$W_{\alpha\beta} = \int dr dr_1 \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) V_{\alpha} V_{\beta} F \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

$\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1)$  — волновая функция носителей в состоянии  $\alpha$  в размерно-квантованной системе  $F$ .

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

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

Согласно (6) для гауссовой флуктуации поверхности

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\sqrt{\pi} \Delta_0^2 \Lambda_0}{L_x} V_n^2 \exp \left[ -\frac{(k_x - k'_x)^2 \Lambda_0^2}{4} \right] \delta_{nm} \quad (8)$$

для -образной флуктуации поверхности

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\gamma_0}{L_x} V_n^2 \delta_{nm} \quad (9)$$

Наличие символов Кронекера указывает, что процессы рассеяния носителей происходят в одной зоне. Следовательно, согласно (6) время релаксации определяется соотношением

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \frac{L_x}{\hbar} \sum_{n_1} \int_{-\infty}^{\infty} W_{nk_x, n_1 k'_x} \delta(\varepsilon_{nk_x} - \varepsilon_{n_1 k'_x}) dk'_x \quad (10)$$

Тогда для квадратичного закона дисперсии

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

и для гауссовой флуктуации поверхности (4), из (10) нетрудно получить:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \frac{2m_e V_n^2 \Delta_0^2 \Lambda_0 \sqrt{\pi}}{\hbar^3 |k_x| 2} (1 + \exp[-\Lambda_0^2 k_x^2]) \quad (11)$$

аналогично для -образной флуктуации поверхности (5), время релаксации записывается в виде:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \frac{2m_e V_n^2}{\hbar^3 |k_x|} \gamma_0 \quad (12)$$

Из (11) и (12) следует, что время релаксации зависит от номера размерно-квантованной зоны и имеет особенности при  $k_x = 0$ , т.е. на дне зоны проводимости. Последнее обстоятельство является непосредственным следствием одномерности движения носителей заряда.

Для анизотропных параболических квантовых проволок (такая модель часто применяется при расчетах кинетических коэффициентов в нанопроволоках и находит свое математическое подтверждение) радиуса  $R$  энергетический спектр зонных электронов, когда магнитное поле  $\mathbf{B}$  направлено перпендикулярно оси нанопроволоки, а электрическое поле  $\mathbf{E}$  параллельно  $\mathbf{B}$ , определяется аналогично и имеет вид:

$$E_{k_x, n, m} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \hbar \Omega_y \left( n + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_z \left( m + \frac{1}{2} \right) - \Delta_c \quad (13)$$

Здесь обозначено:

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

$$m_x^* = m_x \left( \frac{\Omega_y}{\omega_y} \right)^2, \quad \Delta_c = \frac{(eER)^2}{4\Delta E_c}$$

$k_x$  – волновой вектор электрона вдоль оси квантовой проволоки,  $\hbar \omega_z$ ,  $\hbar \Omega_y$  – энергии размерного квантования,  $\Delta E_c$  – высота потенциальной энергии на границе наноструктуры. Аналогично случаю КЯ с ростом напряженности электрического поля дно размерно-квантованной зоны проводимости опускается в область запрещенной зоны.

Следовательно, согласно (1):

$$V_{\alpha} = -\frac{1}{R} \left[ \left( \frac{\omega_y \omega_x^c}{\Omega_y^2} \right)^2 \frac{m_y \hbar^2 k_x^2}{m_x} + \hbar \omega_y \left( \frac{\omega_y}{\Omega_y} \right) \left( n + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_z \left( m + \frac{1}{2} \right) + 2\Delta_c \right] \quad (14)$$

В дальнейшем исследуются кинетические явления при низких температурах, когда процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности являются наиболее активными. Но при низких температурах в процессах переноса принимают участие электроны с малыми значениями волнового вектора, поэтому зависимостью  $V_{\alpha}$  от волнового вектора можно пренебречь, если  $\hbar \omega_e \gg k_0 T$ . Последнее неравенство хорошо выполняется в области низких температур, когда размерно-квантованные уровни проявляются наиболее ярко. В рассматриваемых приближениях время релаксации с учетом (12), (14) для случая -образной флуктуации принимает вид:

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \Gamma_{\alpha} \frac{1}{|k_x|}, \quad \Gamma_{\alpha} = \frac{2\gamma_0 m_x^*}{\hbar^3} V_{\alpha}^2 \quad (15)$$

Для случая гауссовой флуктуации поверхности при  $\Lambda_0 k_x < 1$  нужно  $\gamma_0$  заменить на  $\Delta_0^2 \Lambda_0 \sqrt{\pi}$

Из (15) непосредственно следует, что с уменьшением размеров наноструктуры время релаксации существенно уменьшается ( $\tau_{\alpha} \sim R^4$ ). Это обстоятельство позволяет экспериментально выделять рассматриваемый механизм рассеяния от других конкурирующих механизмов рассеяния при исследовании явлений переноса. С ростом напряженности магнитного поля время релаксации уменьшается, что связано с увеличением локализации зонных носителей. Поперечное электрическое поле прижимает электроны к поверхности, исследуемой наноструктуры, поэтому вероятность рассеяния носителей на шероховатой поверхности увеличивается. Именно по этой причине время релаксации уменьшается, что, естественно, должно влиять на кинетические коэффициенты (электропроводность, термоэдс) исследуемой наноструктуры.

В изотропном случае, если  $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}$  (оба вектора расположены в плоскости перпендикулярной оси квантовой проволоки), то

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}} = \frac{2m_e \Omega_e^2 \gamma_0}{\hbar R^2 |k_x|} \times \left[ \left( \frac{\omega_e}{\Omega_e} \right) \left( n + \frac{1}{2} \right) + \left( m + \frac{1}{2} \right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar \Omega_e} \left( \frac{\omega_e}{\Omega_e} \right)^3 \right]^2 \quad (16)$$

При  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$ , как показывают расчеты:

$$\frac{1}{\tau_{00}} = \frac{2m_e \Omega_e^2 \gamma_0}{\hbar R^2 |k_x|} \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\omega_e}{\Omega_e} \right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar \omega_e} \right]^2 \quad (17)$$

$$\gamma = \frac{2m_e \Omega_e^2 \gamma_0}{\hbar R^2} \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\omega_e}{\Omega_e} \right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar \omega_e} \right]^2$$

Следовательно, заметная зависимость  $\tau_\alpha$  от напряженности поперечного электрического поля проявляется при больших значениях  $E$ , чем в случае  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$  (рис.1,2). На рис.1. представлена зависимость  $\gamma/\gamma_{00}$  от напряженности электрического поля при разных значениях магнитного поля в квантовой проволоки. Из рис.1 видно, что с ростом электрического поля  $\gamma/\gamma_{00}$  растет как  $\propto E^4$ , а при больших значениях величины магнитного поля  $\gamma/\gamma_{00}$  растет быстрее.

На рис. 2 показана зависимость  $\gamma/\gamma_{00}$  от величины электрического поля при различных радиусах квантовой проволоки, откуда следует, что при больших радиусах нанопроволоки время релаксации, определяемое рассеянием на шероховатой поверхности, больше.

Заметим, что только процессы рассеяния носителей на шероховатой поверхности (как для одномерного, так и для квазидвумерного электронного газа) зависят от напряженности постоянного поперечного электрического поля. В частном случае при  $\omega_c = 0$  из (16) получается выражение для времени релаксации только в поперечном электрическом поле:

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = \frac{2m_c \omega_e^2 \gamma}{\hbar R^2 |k_x|} (n + m + 1 + N_c)^2 \quad (18)$$

$$N_c = \frac{2\Delta_c}{\hbar \omega_e}$$

Согласно классической теории явлений переноса в конденсированных средах, использующей решение кинетического уравнения Больцмана, кинетические коэффициенты определяются транспортным временем релаксации, которое имеет вид:

$$\frac{1}{\tau_\alpha^{tr}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\beta W_{\alpha\beta} (1 - \cos\theta) \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \quad (19)$$

$\theta$  — угол между волновыми векторами  $k_x$  и  $k'_x$ , характеризующие движение электронов до и после процессов рассеяния. Для случая рассеяния носителей на гауссовой флуктуации

$$\frac{1}{\tau^{tr}} = \frac{\Delta_0^2 \Lambda_0}{\hbar^3} |V_n|^2 \frac{m_e}{2} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos\theta) e^{-\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2}(1 - \cos\theta)} =$$

$$= \frac{\pi m_e}{\hbar^3} (\Delta_0 \Lambda_0 V_n)^2 e^{-\frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2}} \left[ I_0 \left( \frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2} \right) - I_1 \left( \frac{k_\perp^2 \Lambda_0^2}{2} \right) \right] \quad (20)$$

Заметим, что при  $k_\perp^2 \Lambda_0^2 \ll 1$  (20) совпадает с временем релаксации (11).

Обратим внимание, что времена релаксации для размерно-ограниченных систем (квантовые ямы, нанопроволоки), определяемые рассеянием носителей на шероховатой поверхности, для  $\delta$ -образной флуктуации в точности совпадают с транспортным временем релаксации. С ростом температуры и с увеличением размеров наноструктуры (ширины квантовой ямы, радиуса нанопроволоки) на кинетические явления в исследуемых квантовых системах начинают влиять процессы рассеяния носителей на колебаниях кристаллической решетки. В случае упругого рассеяния носителей на длинноволновых

колебаниях, время релаксации определяется соотношением [7,8]:

$$\frac{1}{\tau_\alpha^{ph}} = \frac{2\pi E_1^2 k_0 T}{\pi \rho v^2} \sum_\alpha \int d\mathbf{r} |\Psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 |\Psi_\beta(\mathbf{r})|^2 \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \quad (21)$$

$E_1$  — константа деформационного потенциала для электронов,  $v$  — скорость звука в размерно-ограниченной системе плотностью  $\rho$ .

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

$$\frac{1}{\tau_\alpha^{ph}} = \frac{E_1^2 m_e^2 \omega_e k_0 T}{\pi \rho v^2 \hbar^4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{|k_x|} \quad (22)$$

Согласно (15) и (22), как показывают расчеты, влиянием рассеяния носителей заряда на длинноволновых акустических колебаниях можно пренебречь, если

$$T \left[ \frac{R \cdot 10^{-2}}{\gamma_0^{1/3}} \right] \ll 1 \quad (23)$$

При записи (23) учитывались параметры типичные для полупроводниковых квантовых проволок  $E_1 = 10$  eV,  $v = 1.5 \cdot 10^5$  cm/s,  $m_e = 0.06 m_0$ ,  $\rho = 5.4$  g/cm<sup>3</sup>. Следовательно при  $T = 4^\circ$  K  $\gamma_0^{1/3} \cong 12$  Å можно пренебрегать взаимодействием электронов с колебаниями кристаллической решетки, если  $R \ll 10^3$  Å.

### III. ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Исследованы модели описания взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью для квантовых проволок. Получены выражения для времен релаксации носителей в квантовых проволоках в присутствии внешних магнитного и электрического полей. Графически показаны зависимости параметров взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью от величины внешнего электрического поля при различных значениях радиусов квантовых проволок и различных значениях магнитных полей (рис.1, рис.2).

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka and T.Mutsusne. Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum wells // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 51, № 23. P. 1934–1936.
- [2] Sinyavskii E.P., Kostyukevich N.S. Features of absorption of a weak electromagnetic wave in nanowires // Opt. Spectrosc. 2013. Vol. 114, № 2. P. 205–210.
- [3] Agarwal R., Lieber C.M. Semiconductor nanowires: optics and optoelectronics // Appl. Phys. A. Springer-Verlag, 2006. Vol. 85, № 3. P. 209–215.
- [4] Pozdnyakov D., Galenchik V., Borzdov A. Electron Scattering in Thin GaAsQuantum Wires // Phys. Low-Dim. Struct. — 2006. — Т. 2. — С. 87—90.

[5] Coulomb interaction and transient charging of excited states in open nanosystems / V. Moldoveanu [et al.] // *Physical Review B*. — 2010. — Apr. — Vol. 81, no. 15. — P. 155442.

[6] Гейлер В. А., Маргулис В. Проводимость квантовой проволоки в параллельном магнитном поле // *ФТП*. — 1999. — Т. 113, № 9. — С. 1141—1143.

[7] Сиянский Э. П., Костюкевич Н. С. Особенности поглощения слабой электромагнитной волны в

нанопроволоках // *Оптика и спектроскопия*. — 2013. — Т. 114, № 2. — С. 225—231.

[8] Сиянский Э. П., Соловенко В. Г. Особенности термоэдс в квантовых проволоках  $B_i$  в поперечных магнитном и электрическом полях // *ФТТ*. — 2014. — Т. 56, № 11. — С. 2197—2200.

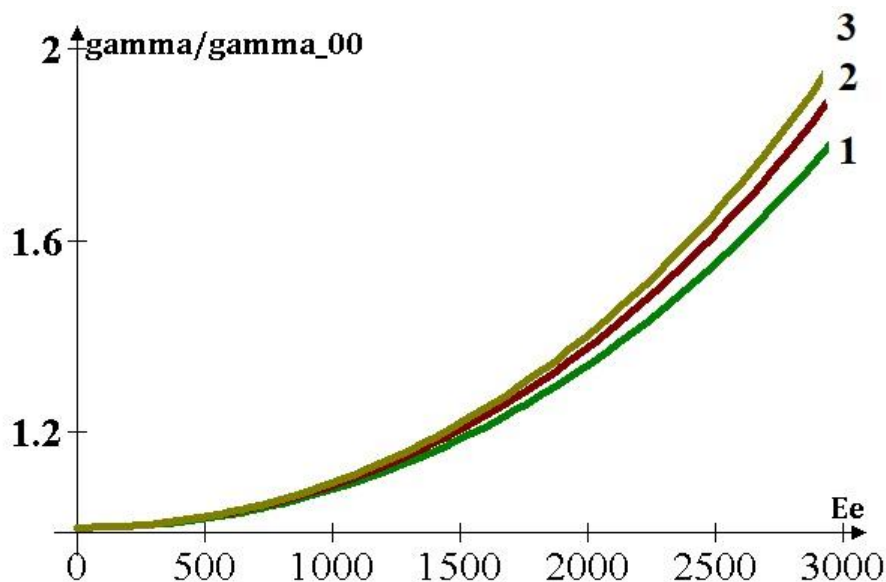


Рис.1 Зависимость  $\gamma/\gamma_{00}$  от величины напряженности электрического поля. Кривые 1-3 получены при различных значениях напряженности магнитного поля  $\delta = 0, 0.5, 1$  соответственно.

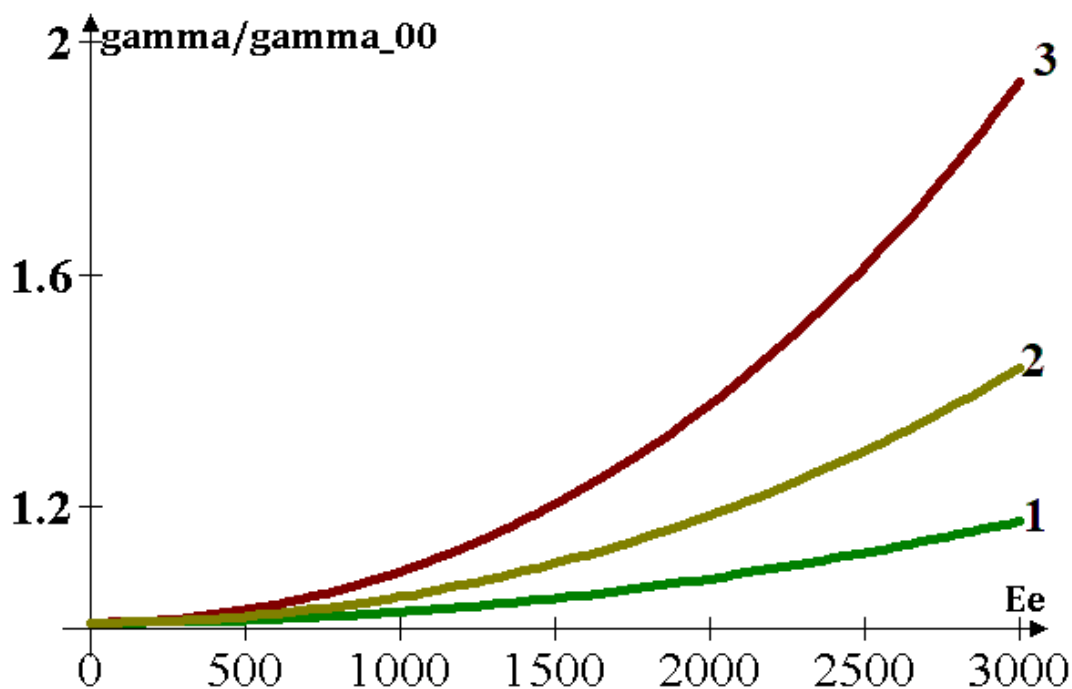


Рис. 2 Зависимость  $\gamma/\gamma_{00}$  от величины напряженности электрического поля. Кривые 1-3 получены при различных значениях радиуса квантовой проволоки  $R = 300, 400, 500 \text{ \AA}$  соответственно.