



NGHIÊN CỨU THỜI GIAN SỐNG VẬN CHUYỂN VÀ THỜI GIAN SỐNG LƯỢNG TỬ TRONG MÔ HÌNH GIẾNG LƯỢNG TỬ PHA TẠP MỘT PHÍA

Ngô Thị Lan¹, Nguyễn Thị Thảo², Nguyễn Văn Căn³

TÓM TẮT

Chúng tôi đưa ra một lý thuyết về ảnh hưởng của pha tạp điều biến bất đối xứng lên hiện tượng vận chuyển của hạt tải trong giếng lượng tử vuông góc. Bằng việc sử dụng phương pháp biến phân chúng tôi đã đưa ra biểu thức giải tích của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía. Chúng tôi đã tính thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử cho các cơ chế tán xạ khác nhau RI, SR, và DP. Lý thuyết của chúng tôi có thể giải thích một số kết quả tính toán gần đây về tính chất vận chuyển của hạt tải, đặc biệt là tỉ số thời gian sống vận chuyển và lượng tử.

Từ khóa: Thời gian sống vận chuyển, thời gian sống lượng tử, giếng lượng tử, pha tạp một phía.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Thời gian sống vận chuyển và lượng tử là hai đại lượng quan trọng đối với một hệ lượng tử. Trong nghiên cứu tính chất vận chuyển của các hệ thấp chiều người ta nhận thấy rằng có sự khác biệt rõ rệt giữa hai thời gian đặc trưng nói trên. Thời gian sống vận chuyển τ_t là thời gian chuyển động tự do trung bình của hạt tải chuyển động theo phương riêng biệt (ví dụ của trường ngoài) khi tồn tại các tán xạ. Thời gian sống vận chuyển được rút ra khi đo độ linh động Hall với từ trường yếu. Thời gian sống khác là thời gian sống lượng tử τ_q là thời gian trung bình mà hạt tồn tại trên một trạng thái lượng tử khi tồn tại các tán xạ. Thời gian sống lượng tử được xác định từ hàm bao của dao động Shubnikov-de Haas.

Thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử là hai tham số quan trọng thường được sử dụng để đặc trưng cho hiệu suất của các cấu trúc bán dẫn có độ linh động cao. Để nâng cao hiệu suất của các linh kiện điện tử cần phải nghiên cứu và xác định được các cơ chế tán xạ gây bất lợi cho độ linh động [7,8,10,12]. Các nghiên cứu gần đây chỉ ra rằng, một trong các cách hiệu quả nhất để xác định các cơ chế tán xạ chủ đạo là nghiên cứu thời gian sống vận chuyển và lượng tử cũng như là tỉ số của chúng (Dingle ratio) [2,9]. Thời gian sống lượng tử còn liên quan đến sự mở rộng của các mức Landau của các điện tử trong từ trường ngoài và với năng lượng riêng của hạt. Việc lưu trữ và truyền thông tin bằng các hiện tượng lượng tử là lĩnh vực nghiên cứu nóng bỏng của các nhà khoa học trên toàn thế giới. Để làm điều đó người ta phải tìm cách kéo dài thời gian sống lượng tử của

¹ Giáo viên Trường Trung học phổ thông Hậu Lộc 2, huyện Hậu Lộc, tỉnh Thanh Hóa

^{2,3} Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

điện tử. Gần đây các nhà Vật lý đã sử dụng từ trường cực mạnh và nâng thời gian sống lượng tử của điện tử lên hơn 50 lần [9], điều này giúp cho việc xây dựng máy tính lượng tử tiến gần hơn đến hiện thực. Có thể nói rằng thời gian sống (vận chuyển và lượng tử) là đại lượng vừa mang đến cho chúng ta những thông tin quan trọng về hệ lượng tử vừa là đại lượng có tính quyết định cho việc ứng dụng các hệ đó trong các thiết bị lượng tử. Với những ý nghĩa đó, việc nghiên cứu thời gian sống của hệ hạt tải trong các giếng lượng tử pha tạp một phía là vấn đề nghiên cứu có tính khoa học và cấp thiết.

Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu thời gian sống vận chuyển và lượng tử của hạt tải trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía. Các tính toán này góp phần hoàn thiện thêm lý thuyết vận chuyển tuyến tính và giải thích rõ hơn về mặt Vật lý đại lượng thời gian sống của hạt tải cũng như tỉ số của thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử.

2. NỘI DUNG

2.1. Lý thuyết tính thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử

Theo lý thuyết vận chuyển tuyến tính, độ linh động ở nhiệt độ thấp được xác định bởi $\mu = e\tau / m^*$ với m^* là khối lượng hiệu dụng trong mặt phẳng của kênh dẫn. Thời gian sống của hạt tải (vận chuyển và lượng tử) được biểu diễn qua hàm tự tương quan:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar E_F} \int_0^{2k_F} dq \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{q^2}{(4k_F^2 - q^2)^{1/2}} \frac{\langle |U(q)|^2 \rangle}{\varepsilon^2(q)} \quad (1)$$

ở đây, $q = (q, \varphi)$ là xung lượng truyền hai chiều cho bởi các cơ chế tán xạ trong mặt phẳng x, y : $q = |q| = 2k_F \sin(\vartheta/2)$ với ϑ là góc tán xạ.

Năng lượng Fermi được xác định: $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ với $k_F = \sqrt{2\pi p_s}$ là số sóng Fermi.

Hàm tự tương quan trong phương trình (1) có $\langle |U(q)|^2 \rangle$ được định nghĩa là trung bình thống kê các biến đổi Fourier hai chiều của các thể tán xạ phụ thuộc vào hàm sóng bao.

$$U(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz |\zeta(z)|^2 U(q, z) \quad (2)$$

Hàm điện môi $\varepsilon(q)$ định lượng cho hiệu ứng chắn của thể tán xạ của hạt tải hai chiều.

Áp dụng gần đúng trường ngẫu nhiên ta có: $\varepsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}}{q} F_s(qL)[1 - G(q)]$.

Trong đó, $q_s = 2m^* e^2 / \varepsilon_L \hbar^2$ là nghịch đảo chiều dài chắn hai chiều Thomas-Fermi. Hiệu chỉnh trường cực bộ do tương tác trao đổi giữa các hạt với nhau được cho bởi:

$G(q) = \frac{q}{2\sqrt{q^2 + k_F^2}}$. Thừa số dạng chắn phụ thuộc vào tương tác của hạt dọc theo phương

nuôi, được xác định bởi: $F_s(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \zeta^2(z) \zeta^2(z') e^{-q|z-z'|}$ (3)

Sử dụng hàm sóng mô tả sự phân bố của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía có dạng [3]:

$$\zeta(z) = \begin{cases} B\sqrt{\pi/L} \cos(\pi z/L) e^{-cz/L} & \text{khi } |z| \leq L/2 \\ 0 & \text{khi } |z| > L/2, \end{cases} \quad (4)$$

trong đó, B là hằng số xác định từ điều kiện chuẩn hóa, c là tham số biến phân.

Thay biểu thức hàm sóng ở phương trình (4) vào phương trình (2), kết hợp với các hàm đơn giản $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ cho bởi (5), ta sẽ thu được biểu thức cho hàm tự tương quan $U(q)$, kết hợp với phương trình (1) ta sẽ thu được đại lượng thời gian sống cho từng cơ chế tán xạ.

$$\gamma_n(x) = \left[\frac{1}{x} + \frac{(-1)^n x}{x^2 + n^2 \pi^2} \right] \sinh x, \quad \omega_n(x) = \left[\frac{(-1)^n \pi x}{x^2 + n^2 \pi^2} \right] \sinh x \quad (5)$$

với $n = 0, 1, 2, \dots$ là số nguyên.

Ở nhiệt độ thấp, các hạt tải có thể có các cơ chế tán xạ sau: Tạp xạ (RI), độ nhám bề mặt (SR), thể biến dạng khớp sai (DP). Thời gian sống tổng cộng được xác định bởi quy tắc Matthiessen:

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_{SR}} + \frac{1}{\tau_{DP}} + \frac{1}{\tau_{RI}}, \quad (6)$$

Ở đây $\tau_{SR}, \tau_{DP}, \tau_{RI}$ lần lượt là thời gian sống gây bởi các cơ chế tán xạ do độ nhám bề mặt (SR), thể biến dạng khớp sai (DP), tạp xạ (RI).

Từ phương trình (1), ta thấy giá trị của thời gian sống vận chuyển được biểu diễn qua hàm tự tương quan cho mỗi cơ chế tán xạ. Mặt khác, theo [1, 4, 6] hàm tự tương quan của hệ hai chiều chứa đựng hầu như toàn bộ đặc trưng của hệ, cho phép tính toán các tính chất điện như: độ linh động của điện tử và sự mở rộng các mức Landau. Vì vậy, để tính toán các đặc trưng quan trọng của một hệ lượng tử, ta phải xác định biểu thức hàm tự tương quan ứng với từng cơ chế tán xạ trong hệ.

2.2. Các cơ chế tán xạ cơ bản trong giếng lượng tử pha tạp một phía

2.2.1. Tán xạ gây bởi độ nhám bề mặt (SR)

Ta biết rằng độ lớn của thể tán xạ trong không gian vectơ sóng được xác định bởi giá trị cục bộ của hàm sóng tại các vị trí biên $\zeta_m = \zeta(z = mL/2)$, giá trị của thể trong không gian vectơ sóng đối với các tán xạ từ bề mặt nhám phía đỉnh có dạng:

$$U_{SRm}(q) = V_0 |\zeta_m|^2 \Delta_q \quad (7)$$

ở đây, Δ_q là biến đổi Fourier hai chiều của cấu hình bề mặt.

Với chiều cao thể rào V_0 đủ lớn ta có thể thay thế hàm sóng trong (7) bằng đạo hàm sau:

$$V_0 |\zeta_{\mp}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m_z} |\zeta_{\mp}|^2 \quad (8)$$

Tiến hành tích phân phương trình Schrodinger 1 chiều với hàm sóng bao cho bởi (4) từ $z = \pm\infty$ tới $z = z_0$ ($z_0 > -L/2$). Ta được:

$$\begin{aligned} V_0 |\zeta_-|^2 = [E(c) - V_0(z_0)] \zeta^2(0) \mp \frac{\pi^3 e^2 B^4 p_s}{2 \varepsilon_L (c^2 + \pi^2)} \left\{ \pi^2 \frac{e^{-c}}{c} \Gamma_1(\pm c, \pm \delta) \right. \\ \left. - \left(\frac{2c^2 + \pi^2}{c} \right) \Gamma_1(\pm 2c, \pm \delta) - \frac{c}{2} [\Gamma_2(\pm 2c, \pm \delta) - \Gamma_0(\pm 2c, \pm \delta)] \pm \right. \\ \left. \pm \frac{\pi}{2} [\Omega_2(\pm 2c, \pm \delta) + 2\Omega_1(\pm 2c, \pm \delta)] \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

ở đây $E(c)$ là năng lượng tổng cộng của hạt ở trạng thái cơ bản [10].

2.2.2. Tán xạ gây bởi thế biến dạng khớp sai (DP)

Tiếp theo, như đã chứng minh trong [5], độ nhám bề mặt tạo ra thăng giáng của biên dạng trong giếng lượng tử có sự chênh lệch hằng số mạng. Chính sự chênh lệch này dẫn tới sự thay đổi của dạng biên, làm xuất hiện các cơ chế tán xạ mới. Thế tán xạ mới này phụ thuộc vào dạng đối xứng của tinh thể và loại hạt tải.

Sử dụng hàm sóng từ phương trình (4) chúng tôi xác định được biểu thức cho hàm tự tương quan cho thế biến dạng khớp sai cho điện tử có dạng phương trình (10) trùng với kết quả đã dẫn ra trong công trình [4]:

$$\begin{aligned} U_{DP}^{(t/b)}(q, z) = \left(\frac{\pi^{3/2} \alpha \in_{\parallel} \Lambda \Delta B^2}{4L} \right) F_{DP}^{(t/b)}(t) \times \\ \times \left\{ \frac{3}{2} [b_s(K+1)]^2 (1 + \sin^4 \varphi + \cos^4 \varphi) + \left(\frac{d_s G}{4c_{44}} \right)^2 (1 + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi) \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (10)$$

trong đó, thừa số dạng $F_{DP}(t) = t^2 e^{-t} [\gamma_1(c \pm t/2)]^2 F_R(t)$.

2.2.3. Tán xạ gây bởi Tạp xạ (RI)

Cuối cùng, hàm tự tương quan cho tán xạ từ sự phân bố ngẫu nhiên của tạp được xác định bởi tích phân trên toàn miền pha tạp [8]:

$$\langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle = \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_L q} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_i N_I(z_i) F_R^2(q, z_i) \quad (11)$$

Trong đó, $N_I(z_i)$ là sự phân bố của tạp và $F_R(q, z_i)$ là thừa số dạng đối với lá tạp ở vị trí $z = z_i$, được xác định bởi:

$$F_R(q, z_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |\zeta(z)|^2 e^{-q|z-z_i|} \quad (12)$$

Tính toán phương trình (9), (10) với hàm sóng cho bởi phương trình (4) ta được hàm tự tương quan cho tạp có dạng [6]:

$$\langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle_c = \left(\frac{2\pi e^2}{\epsilon_L q} \right)^2 \frac{N_I L^3}{4} F_{RI}(qL) \quad (13)$$

ở đây thừa số dạng chấn có dạng:

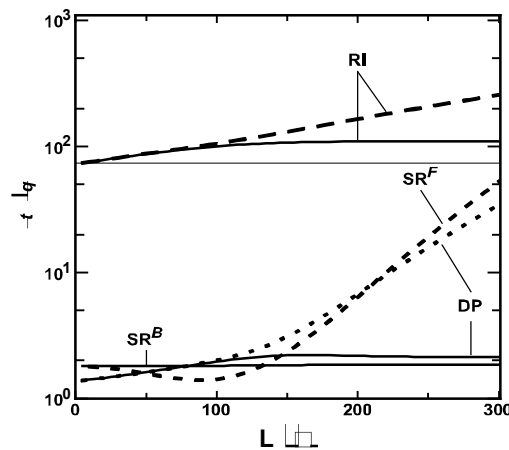
$$F_{RI}(t) = \frac{R^2(t)}{2} \frac{e^{-2st} - e^{-2dt}}{t^2(t+t_c)} \quad (14)$$

với $d = z_z / L$ và $s = z_s / L$ và $t_c = q_c L$.

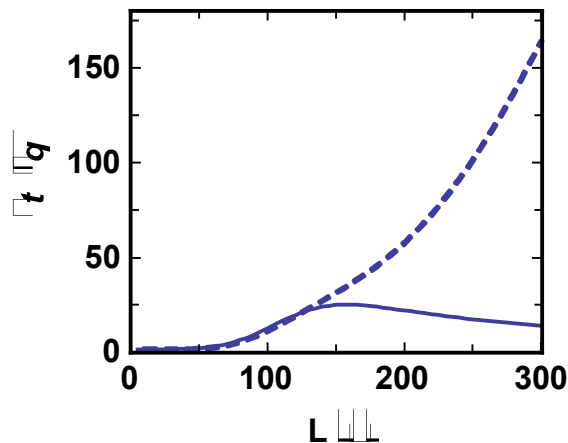
Như vậy, với việc sử dụng hàm sóng bao ở phương trình (4), chúng ta đã xác định được hàm tự tương quan cho tất cả các cơ chế tán xạ của giếng lượng tử pha tạp điều biến đối xứng ở dưới dạng giải tích. Các hàm tự tương quan trong không gian véc tơ sóng là thành phần quan trọng đóng góp vào việc xác định thời gian sống của hạt tải theo phương trình (1). Cụ thể, xác định được các hàm tương quan cho mỗi cơ chế tán xạ ta sẽ xác định được thời gian sống của hạt tải tương ứng với từng cơ chế tán xạ, từ đó thời gian sống tổng cộng được xác định bởi quy tắc Mathiessen cho bởi phương trình (6).

2.3. Kết quả và thảo luận

Tác giả cũng tiến hành so sánh tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử $\alpha = \frac{\tau_t}{\tau_q}$ (hình 1) do các cơ chế tán xạ khác nhau (hình 1) ảnh hưởng đến quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp một phía $\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}/\text{Ge}/\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ với số liệu thực nghiệm trong [7]: $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; $n = 4$; $\epsilon_L = 15.2$; vị trí biên dạng pha tạp có giá trị $L_d = 100 \text{ Å}$, $L_s = 150 \text{ Å}$, các tham số nhám bề mặt $\Delta = 5 \text{ Å}$, $\Lambda = 40 \text{ Å}$.



Hình 1. Tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử gây ra bởi tất cả các cơ chế tán xạ khác nhau trong giếng lượng tử pha tạp 1 phía phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L



Hình 2. Tỷ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử tổng cộng phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L

Đường đứt nét (dash line) là tỷ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử vẽ cho trường hợp giếng lượng tử không pha tạp (flat-band). Đường liền nét là tỷ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử vẽ cho trường hợp giếng lượng tử pha tạp một phía.

Hình 2 là tỷ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử tổng cộng được xác định theo quy tắc Mathiessen cho cả hai trường hợp: Flat-band (đường đứt nét) và pha tạp một phía (đường liền nét). Ta nhận thấy: $\alpha = \frac{\tau_t}{\tau_q} \approx 1$, tán xạ xảy ra đẳng hướng, đồng

thời cũng chỉ rõ các thể tương tác tầm gần như: không trật tự hợp bán dẫn (DP) và độ nhám bề mặt (SR) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Khi $\alpha = \frac{\tau_t}{\tau_q} \gg 1$, tán xạ xảy ra chủ yếu về phía

trước, trong đó các thể tương tác tầm xa như: tạp nền và tạp Coulomb xa (RI) là những cơ chế tán xạ cơ bản.

Hơn nữa, hình 1 cho thấy ảnh hưởng của các cơ chế tán xạ SR, DP, RI là khác nhau lên quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng. Tán xạ do độ nhám bề mặt là nguồn tán xạ chủ đạo, còn RI không đóng vai trò là nguồn gây ra tán xạ. Kết quả này cũng được dẫn ra trong công trình [11] khi nghiên cứu các cơ chế tán xạ cơ bản trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía.

Hình 2 cho thấy, tỷ số thời gian sống vận chuyển và lượng tử trong trường hợp pha tạp một phía không tăng đơn điệu như trong trường hợp flat-band mà có tồn tại một cực đại của tỷ số phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử, điều này cho thấy ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng do pha tạp một phía đã làm thay đổi đáng kể của tỷ số này so với trường hợp không pha tạp (flat-band). Đây cũng là cơ sở để chúng ta có thể nghiên cứu sâu về ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng lên tính chất điện của hạt tải trong mô hình giếng lượng tử có pha tạp.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã nghiên cứu tỉ số thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía. Kết quả của chúng tôi thu được bao gồm đóng góp của tất cả các cơ chế tán xạ khác nhau SR, DP, RI lên quá trình vận chuyển của hạt tải trong giếng. Tỉ số này cũng cho phép chúng ta kết luận về cơ chế tán xạ nào là cơ bản, cũng như dự đoán được chiều hướng của các tán xạ. Theo đó, khi tỉ số này xấp xỉ bằng 1, tán xạ gây bởi không trật tự hợp bán dẫn (DP) và độ nhám bề mặt (SR) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Khi tỉ số này lớn hơn nhiều so với một tán xạ gây bởi tạp nền và tạp Coulomb xa (RI) là những cơ chế tán xạ cơ bản. Những kết quả tính toán trên đây đóng góp một phần quan trọng vào việc xác định cơ chế tán xạ chủ đạo trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía, giúp hoàn thiện thêm lý thuyết về quá trình vận chuyển của hạt tải trong cấu trúc giếng lượng tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ando. T., Fowler. A. B., and Stern. F. (1982), *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. Vol. 54, 437.
- [2] Das Sarma. S. and Stern. F. (1985), *Single-particle relaxation time versus scattering time in an impure electron gas*, Physics Review B Vol. 32(12), pp. 8442-8444.
- [3] D. N. Quang and N. H. Tung (2008), *Band-bending effects on the electronic properties of square quantum wells*, Phys. Rev. B 77, pp.125335-125341.
- [4] D. N. Quang, N. H. Tung, L. Tuan, D. T. Hien, and Tran Thi Hai (2008), *Key scattering mechanisms for holes in strained SiGe/Ge/SiGe square quantum wells*, Journal of Applied physics, 104, 113711.
- [5] Feenstra. R. M. and Lutz. M. A. (1995), *Scattering from strain variations in high-mobility Si/ SiGe heterostructures*, J. Appl. Phys. Vol. 78, 6091.
- [6] Gold. A. (1987), *Electronic transport properties of two-dimensional electron gas in a silicon quantum-well structure at low temperature*, Phys. Rev. B. 35, 723.
- [7] Irisawa. T., Myronov. M., Parker. E. H. C., Nakagawa. K., Murata. M., Koh. S. and Shiraki. Y. (2003), *Hole density dependence of effective mass, mobility and transport time in strained Ge channel modulation-doped heterostructures*, Appl. Phys. Lett. 82, 1425.
- [8] Morris. R. J. H., Grasby. T. J., Hammond. R., Myronov. M., Mironov. O. A., Leadley. D. R., Whall. T. E., Parker. E. H. C., Currie. M. T., Leitz. C. W. and Fitzgerald. E. A. (2004), *High conductance Ge p-channel heterostructures realized by hybrid epitaxial growth*, Semicond. Sci. Technol. 19, L106
- [9] Manfra. M. J., Simon. S. H., Baldwin. K. W., Sargent. A. M., West. K. W., Molnar. R. J. and Caissie. J. (2004), *Quantum and transport lifetimes in a tunable low-density AlGaIn/GaN two-dimensional electron gas*, Appl. Phys. Lett. 85, 5278.



- [10] Sawano. K., Satoh. H., Kunishi. Y., Nakagawa. K. and Shiraki. Y. (2007), *Strain and hole-density dependence of hole mobility in strained-Ge modulation-doped structures*, Semicond. Sci. Technol. 22, S161.
- [11] Tran Thi Hai, Nguyen Manh An, Nguyen Thi Dung (2017), *The main scattering mechanisms in Single-side modulation doped square quantum wells*, Journal of Physics: Conf. Serie 865, 012004.
- [12] Xie. Y. H., Monroe. D., Fitzgerald. E. A., Silverman. P. J., Thiel. F. A. and Watson. G. P. (1993), *Very high mobility two-dimensional hole gas in Si/GexSily/Ge structures grown by molecular beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett. 63, 2263.

A STUDY OF TRANSPORT AND QUANTUM TIME IN ONE-SIDE DOPED SQUARE QUANTUM WELLS

Ngo Thi Lan, Nguyen Thi Thao, Nguyen Van Can

ABSTRACT

We present a theoretical study of the effects from asymmetric modulation of the envelop wave function on quantum transport in square quantum wells (QWs). Within the variational approach we obtain analytic expressions for the carrier distribution and their scattering in asymmetric one-side doped square QWs. We calculated transport and quantum time ratio for RI, SR and DP scattering mechanisms. Our theory can explain some recent calculations about the transport properties of interest, namely, the ratio of the transport to quantum lifetimes.

Keywords: *Transport lifetimes, quantum lifetimes, quantum wells, one-side doped.*