

Рисунок 1 дает представление о влиянии параметра  $\tau$  на ход зависимости  $I(F)$ . Из рисунка видно, что увеличение  $\tau$  обуславливает смещение кривой вниз по оси ординат практически без изменения ее наклона. Причем величина  $\tau$  не влияет на начальный участок зависимости  $I(F)$ . Данный факт объясняется тем, что этот начальный участок определяется лишь процессами рассеяния электронов на ТА-фононах (процессами релаксации групповой скорости носителей заряда), в то время как остальная часть зависимости  $I(F)$  определяется, в основном, процессами рассеяния заряженных частиц на LA- и LO-фононах (процессами релаксации как групповой скорости, так и энергии электронов).

Сравнение доступных из литературы экспериментальных данных с полученными нами результатами указывает на то, что величина параметра  $\tau$  лежит в диапазоне от 2 до 100 фс для всех видов использованных в экспериментах диэлектрических матриц и подложек. Результаты основной массы проведенных опытов соответствуют величине времени релаксации  $\tau \sim 10$  фс. То есть вторая сверху кривая на рис. 1 отражает ход наиболее типичной вольт-амперной характеристики одностенных углеродных нанотрубок типа «armchair» (см., например, [4]).

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенные нами теоретические исследования позволили сделать вывод о том, что процессы релаксации LA- и LO-фононов в одностенных углеродных нанотрубках типа «armchair» являются очень значимыми. При этом варьирование такого параметра, как время релаксации LA- и LO-фононов в углеродных нанотрубках, приводит к значительной вариации протекающего по ним электрического тока. В частности, увеличение этого параметра от 1 до 100 фс обуславливает почти двукратное уменьшение тока.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Physica E. 2006. Vol. 33. P. 336.*
2. *Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328. P. 0Y-1.*
3. *Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Reviews and Short Notes to Nanomeeting-2007. 2007. P. 245.*
4. *Kuroda, M.A., Cangellaris, A., Leburton, J.-P. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 266803.*

## ВЛИЯНИЕ ПОПЕРЕЧНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДРЕЙФОВУЮ СКОРОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В ТОНКОЙ GaAs КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ

А. В. Борздов, Д. В. Поздняков, Д. С. Сперанский, В. М. Борздов

*Белорусский государственный университет, [borzdov@bsu.by](mailto:borzdov@bsu.by)*

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время достаточно много внимания уделяется исследованию влияния поперечного электрического поля на электрофизические свойства полупроводниковых структур с квазидвумерным и квазиодномерным электронным газом [1–4]. Такой интерес обусловлен использованием данных структур при создании новых наноразмерных элементов интегральных схем.

В настоящей работе методом Монте-Карло моделируется перенос электронов в нелегированной GaAs квантовой проволоке прямоугольного поперечного сечения при условии наличия поперечного электрического поля с целью установления степени влияния напряженности этого поля на интенсивность рассеяния и дрейфовую скорость электронов в тонких квантовых проволоках на основе GaAs.

## 2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим нелегированную GaAs квантовую проволоку, поперечное сечение которой схематически представлено на рис. 1. Перенос электронов происходит под действием продольного электрического поля, направленного перпендикулярно плоскости рисунка. Поперечное электрическое поле  $F$  направлено вдоль оси  $X$ .

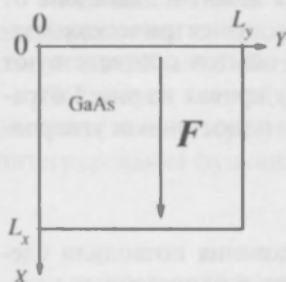


Рис. 1. Поперечное сечение GaAs квантовой проволоки с размерами  $L_x = L_y = L = 10$  нм

В рассматриваемой структуре электроны пространственно ограничены областью GaAs по направлениям  $X$  и  $Y$ , что ведет к образованию квазиодномерного электронного газа. Для того чтобы определить энергии подзон и волновые функции электронов, необходимо решить соответствующую систему уравнений Шредингера и Пуассона. В общем случае такая система решается численно с помощью процедуры самосогласования. В проведенных вычислениях мы пренебрегли влиянием концентрации электронного газа на электростатический потенциал в структуре, а также предположили наличие бесконечно большого потенциального барьера для электронов вне области GaAs. Таким образом, электростатический потенциал в GaAs определяется только внешним электрическим полем. Вычисления проводились в приближении электрического квантового

предела, т. е. полагалось, что все электроны находятся в основном квантовом состоянии. В таком случае в приближении параболического закона дисперсии при наличии поперечного электрического поля в структуре уравнение Шредингера принимает следующий вид [1–3]:

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + eFx \right) \psi_0(x, y) = E_0 \psi_0(x, y), \quad (1)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m^*$  – эффективная масса электрона в GaAs,  $e$  – абсолютная величина заряда электрона,  $\psi_0(x, y)$  – волновая функция электрона в основном квантовом состоянии,  $E_0$  – уровень энергии основного квантового состояния.  $E_0$  и  $\psi_0(x, y)$  находятся путем решения двумерного уравнения Шредингера (1).

Процедура моделирования переноса электронов включает в себя наиболее важные механизмы рассеяния электронов в тонкой нелегированной GaAs квантовой проволоке. В рассматриваемой нами модели доминирует рассеяние электронов на локализованных полярных оптических и акустических фононах, а также на шероховатостях поверхности [5–10]. Интенсивности рассеяния электронов рассчитываются с учетом столкновительного уширения согласно процедуре, описанной в [11, 12]. Поскольку концентрация электронов в проволоке считается пренебрежимо малой, то электронный газ в этом случае является невырожденным. В условиях электрического квантового предела выражения для расчета интенсивностей рассеяния электронов легко получаются из рассмотренных в [12]. В итоге формула для расчета интенсивности рассеяния электронов на акустических фононах запишется в виде

$$[W_{\text{об}}]_{\text{а}}(E, \Gamma) = \frac{B^2 k_{\text{в}} T \sqrt{2m^*}}{2n^2 v^2 \rho} D(E, \Gamma) \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} |\psi_0(x, y)|^4 dx dy, \quad (2)$$

$$D(E, \Gamma) = \Theta(E) \sqrt{\frac{\Gamma + \sqrt{E^2 + \Gamma^2}}{E^2 + \Gamma^2}},$$

где  $B_{\text{а}}$  – деформационный потенциал акустических фононов,  $k_{\text{в}}$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $v$  – скорость звука в GaAs,  $\rho$  – плотность GaAs,  $E$  – кинетическая энергия электрона,  $\Gamma$  – величина, характеризующая столкновительное уширение энергетического спектра электронов за счет всех рассматриваемых механизмов рассеяния,  $\Theta$  – единичная ступенчатая функция.

Выражение для расчета интенсивности рассеяния электронов на полярных оптических фононах имеет вид

$$[W_{\text{об}}]_{\text{рО}}(E, \Gamma) = \frac{e^2 \omega \sqrt{2m^*}}{\hbar L_x L_y} \left( \frac{1}{\epsilon^{\infty}} - \frac{1}{\epsilon^s} \right) \left( n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) D(E \pm \hbar\omega, \Gamma) \times$$

$$\times \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\left| \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} |\psi_0(x, y)|^2 \sin(p\pi x/L_x) \sin(r\pi y/L_y) dx dy \right|^2}{(q_{\text{об}}^{\text{рО}})^2 + (p\pi/L_x)^2 + (r\pi/L_y)^2}, \quad (3)$$

$$q_{\text{р}}^{\text{рО}} = \frac{\sqrt{2m^* E}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m^* (E \mp \hbar\omega)}}{\hbar},$$

$$q_{\text{б}}^{\text{рО}} = \frac{\sqrt{2m^* E}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m^* (E \mp \hbar\omega)}}{\hbar}.$$

Здесь  $\omega$  – циклическая частота полярных оптических фононов,  $\epsilon^{\infty}$  и  $\epsilon^s$  – оптическая и статическая диэлектрические проницаемости GaAs, соответственно,  $n$  – функция распределения Бозе – Эйнштейна,  $L_x$  и  $L_y$  – высота и ширина квантовой проволоки, соответственно. Верхний индекс «*ea*» обозначает процесс с испусканием/поглощением фонона, а нижние индексы «*f*» и «*b*» обозначают процессы с рассеянием вперед и назад, соответственно.

Наконец, для расчета интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях поверхности использовалось следующее соотношение:

$$[W_{\text{об}}]_{\text{шр}}(E, \Gamma) = \frac{1}{4} \left( \left( \frac{\partial E_0}{\partial L_x} \right)_1^2 + \left( \frac{\partial E_0}{\partial L_x} \right)_2^2 + \left( \frac{\partial E_0}{\partial L_y} \right)_1^2 + \left( \frac{\partial E_0}{\partial L_y} \right)_2^2 \right) \frac{\sqrt{\pi} \Delta^2 \Lambda \sqrt{2m^*}}{2\hbar^2} \times$$

$$\times \frac{D(E, \Gamma)}{1 + \pi \Lambda^2 k(E)^2 ((E \mp E + \Gamma)/2)}, \quad (4)$$

где  $k(E) = \sqrt{2m^* E}/\hbar$ ,  $\Lambda$  – длина корреляции шероховатостей, а  $\Delta^2 = \delta^2 g(L^{-1} \Lambda)$  ( $\Delta \leq \delta$ ) [13]. Здесь  $\Delta$  – амплитуда шероховатостей [9],  $\delta$  – высота шероховатостей, характе-

ризующая отклонение поверхности от плоскости [13]. Частные производные энергии основного квантового состояния  $E_0$  по поперечным размерам квантовой проволоки  $L_x$  и  $L_y$  определяют изменение последней при отклонении стенок квантовой проволоки от плоскости (индексы 1 и 2 обозначают каждую из рассеивающих поверхностей для направлений  $X$  и  $Y$ ) и рассчитываются при решении уравнения Шредингера (1).

Интенсивности рассеяния электронов можно рассчитать по формулам (2)–(4), используя следующее соотношение [11, 12]:

$$\Gamma = \frac{\hbar}{2} \sum_{q, \text{fb}} ([W_\eta]_{\text{LA}} + [W_\eta]_{\text{PO}} + [W_\eta]_{\text{SR}}). \quad (5)$$

Уравнение (5) необходимо решать численно для всех значений кинетической энергии электронов  $E$  из рассматриваемого интервала.

Перенос электронов в квантовой проволоке моделируется многочастичным методом Монте-Карло с использованием ансамбля из  $10^6$  частиц. С общей теорией реализации метода Монте-Карло для моделирования полупроводниковых структур можно ознакомиться в [14]. Детали, касающиеся реализации метода в структурах с одномерным электронным газом, описаны в [15–17].

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для обеспечения наибольшего быстродействия прибора на основе квантовых проволок, например полевого транзистора, необходимо обеспечить условие минимальной интенсивности рассеяния электронов. Создав высококачественные границы раздела, можно минимизировать влияние шероховатостей поверхности на дрейфовую скорость электронов. Но в принципе рассеяние электронов на шероховатостях поверхности может быть использовано для управления дрейфовой скоростью в тонких квантовых проволоках. В [12, 18] показано, что в транзисторной структуре на основе GaAs квантовой проволоки, находящейся в матрице AlAs, затворное напряжение существенно влияет на интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях поверхности. Такой эффект возникает вследствие возрастания абсолютной величины частных производных уровней энергии по ширине квантовой ямы, соответствующих рассеивающим поверхностям, перпендикулярным направлению внешнего электрического поля  $F$ . Учитывая достаточно сильную зависимость интенсивностей рассеяния электронов на шероховатостях поверхности от напряженности поперечного электрического поля, можно сделать вывод о том, что внешнее электрическое поле может быть использовано для управления дрейфовой скоростью электронов в квантовой проволоке.

На рисунке 2 представлены зависимости установившейся дрейфовой скорости электронов в рассматриваемой квантовой проволоке от напряженности поперечного электрического поля  $F$ . Дрейфовая скорость рассчитана для различных значений высоты шероховатостей  $\delta$  при постоянном значении их длины корреляции  $\Lambda = 6$  нм. Как видно из рисунка, для  $\delta = 0$  (рассеяние на шероховатостях поверхности отсутствует), поперечное электрическое поле оказывает незначительное влияние на дрейфовую скорость электронов как при 77, так и при 300 К. Небольшое уменьшение дрейфовой скорости обусловлено усилением взаимодействия электронов с фононами за счет изменения волновой функции электронов под действием внешнего электрического поля [12]. Для  $\delta > 0$  наличие шероховатостей поверхности начинает играть решающую роль в уменьшении дрейфовой скорости электронов с ростом напряженности

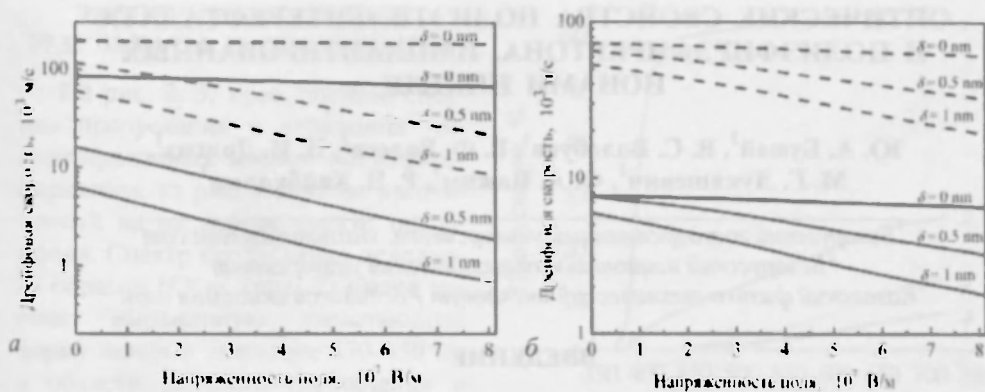


Рис. 2. Зависимости дрейфовой скорости электронов от напряженности поперечного электрического поля  $F$ , рассчитанные при  $T = 77$  К (а) и  $T = 300$  К (б) для различных значений высоты шероховатостей  $\delta$ . Сплошные кривые соответствуют случаю, когда напряженность продольного электрического поля равна  $10^4$  В/м, штриховые –  $10^5$  В/м

поперечного электрического поля. Влияние шероховатостей при этом значительно как для низких, так и для высоких температур. Интенсивности рассеяния электронов на шероховатостях поверхности не зависят от температуры, за исключением неявной зависимости за счет столкновительного уширения [12], в то время как интенсивности рассеяния на фонах растут и начинают доминировать при высоких температурах. Тем не менее, если параметр  $\delta$  имеет достаточно большую величину, то влияние шероховатостей поверхности заметно и при 300 К.

Таким образом, результаты расчетов показывают, что вследствие особенностей рассеяния электронов на шероховатостях поверхности существует возможность эффективного управления их дрейфовой скоростью в квантовых проволоках путем приложения внешнего поперечного электрического поля.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Juang, C., Chang C.Y. // Appl. Phys. Lett. 1991. Vol. 58. P. 1527–1529.
2. Lee, J., Spector, H.N. // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 97. P. 043511–1–043511–6.
3. Yi, G., Wei, G. et al. // Phys. stat. sol. (b). 2007. Vol. 244. P. 4651–4659.
4. Lima, F.M.S., Fonseca, A.L.A. et al. // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 92. P. 5296–5303.
5. Kim, K.W., Stroscio, M.A. et al. // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 70. P. 319–327.
6. Jiang W., Leburton, J.P. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. P. 2097–2099.
7. Jiang W., Leburton, J.P. // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. P. 1652–1659.
8. Mickevicius, R., Mitin, V. // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48. P. 17194–17201.
9. Motohisa, J., Sakaki, H. // Appl. Phys. Lett. 1992. Vol. 60. P. 1315–1317.
10. Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Phys. Low-Dim. Struct. 2006. Vol. 2. P. 87–90.
11. Borzdov, A.V., Pozdnyakov, D.V. et al. // Phys. stat. sol. (b). 2005. Vol. 242. P. R134–R136.
12. Борздов, А.В., Поздняков, Д.В. // ФТТ. 2007. Т. 49. С. 913–916.
13. Yamakawa, S., Ueno, H. et al. // J. Appl. Phys. 1996. Vol. 79. P. 911–916.
14. Jacoboni, C., Lugli, P. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation. Wien: Springer-Verlag, 1989. 359 p.
15. Hess, K. (ed.). Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond. Boston/Dordrecht/London: Kluwer Academic Publishers, 1991. 310 p.
16. Borzdov, V.M., Zhevnyak, O.G. et al. // Proc. SPIE. 2003. Vol. 5219. P. 159–166.
17. Borzdov, V., Komarov, F. et al. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6260. P. 1N–1–1N–11.
18. Borzdov, A.V., Pozdnyakov, D.V. et al. // Proceedings of the 17th International Conference «Microwave & Telecommunication Technology» (CriMiCo'2007), Sevastopol, Crimea, Ukraine, 2007 (Sevastopol: Weber, 2007). P. 595–597.