

01:06

## Моделирование методом Монте-Карло дрейфовой скорости электронов в одномерной GaAs-квантовой проволоке

© В.М. Борздов, О.Г. Жевняк, С.Г. Мулярчик, А.В. Хомич

Белорусский государственный университет

Поступило в Редакцию 14 августа 1996 г.

Работа посвящена моделированию электронного переноса в одномерной GaAs-квантовой проволоке в условиях электрического квантового предела с учетом рассеяний носителей заряда на полярных оптических фононах, ионах примеси и неоднородностях поверхности.

Большой интерес в настоящее время вызывает проблема изучения электронных свойств одномерных полупроводниковых квантовых проволок. Это обусловлено, прежде всего, возможностью использования уникальных свойств такого рода структур непосредственно в приборных приложениях. В этой связи весьма актуальной представляется задача исследования переноса электронов в одномерных квантовых проволоках на основе GaAs в умеренных и сильных электрических полях, характерных для реальных рабочих режимов полупроводниковых приборов микро- и нанoeлектроники.

Известно, что одним из наиболее перспективных методов, позволяющих достаточно эффективно решать подобного рода задачи, в объемных и квазидвумерных полупроводниковых системах является метод Монте-Карло (см., например, [1,3]). Однако необходимо отметить, что существует весьма ограниченное число работ, в которых этот метод использовался для расчета кинетических параметров переноса в квазиодномерных квантовых проволоках [4-6], а случай расчета дрейфовой скорости электронов  $v_{др}$  в квантовой структуре, когда имеет место электрический квантовый предел, насколько нам известно, был рассмотрен только в работе [7]. При этом модель учитывала всего лишь один механизм рассеяния носителей заряда — рассеяние на полярных оптических фононах.

В данной работе представлены результаты моделирования методом Монте-Карло переноса электронов в квантовой яме одномерной GaAs-квантовой проволоки квадратного сечения. Рассчитаны зависимости дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля  $\epsilon$  и длины стороны сечения  $L$ . Модель учитывала механизмы рассеяния на полярных оптических фононах с их испусканием и поглощением, на ионах примеси и на неоднородностях поверхности. Предполагалось, что заселен только самый нижний уровень размерного квантования, а эффектом непараболичности можно пренебречь. Использованный алгоритм одночастичного метода Монте-Карло аналогичен алгоритму, описанному в [7].

Полную энергию электрона  $E$  в квантовой проволоке с квадратным сечением со стороной  $L$  в приближении бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы можно представить в виде [7,8]

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{m^* L}, \tag{1}$$

где  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $\hbar$  — редуцированная постоянная Планка. Первое слагаемое в правой части (1) представляет собой кинетическую энергию электрона с волновым вектором  $k_x$  вдоль направления движения  $x$ , а второе — энергию дна "нулевой" подзоны.

Интенсивности рассеяния на полярных оптических фононах с их испусканием и поглощением рассчитывались соответственно по формулам [8]

$$W_{ph}^n(k_x) = \frac{\alpha}{2} \frac{\omega}{\pi} (N_q + 1) \frac{I^n[q_+^n(k_x)] + I^n[q_-^n(k_x)]}{\sqrt{(\hbar k_x^2)/(2m^*\omega) - I}}, \tag{2}$$

$$W_{ph}^p(k_x) = \frac{\alpha}{2} \frac{\omega}{\pi} N_q \frac{I^n[q_+^n(k_x)] + I^n[q_-^n(k_x)]}{\sqrt{(\hbar k_x^2)/(2m^*\omega) + I}}, \tag{3}$$

где  $\alpha$  — константа связи электрон-фононного взаимодействия,  $\omega$  — частота полярного оптического фонона,  $N_q$  — число термодинамически равновесных фононов. Явный вид интегралов  $I^n$  и  $I^p$  дан в [8]. В выписанных выше формулах (2) и (3) буква "и" соответствует процессу испускания фонона, а буква "п" — его поглощению.

Интенсивность рассеяния на удаленной заряженной примеси рассчитывалась по формуле [9]

$$W_l(k_x) = \frac{N_l m^* e^4}{4\pi^2 \hbar^3 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2 k_x} K^2 \left( 2dk_x \sin \frac{\vartheta}{2} \right), \quad (4)$$

где  $N_l$  — концентрация примеси на единицу длины проводника;  $e$  — заряд электрона;  $\varepsilon$  и  $\varepsilon_0$  — диэлектрические проницаемости GaAs и вакуума;  $K$  — модифицированная функция Бесселя второго рода;  $d$  — расстояние между примесным центром и началом координат, расположенным в центре квадратного сечения проволоки;  $\vartheta$  — угол рассеяния.

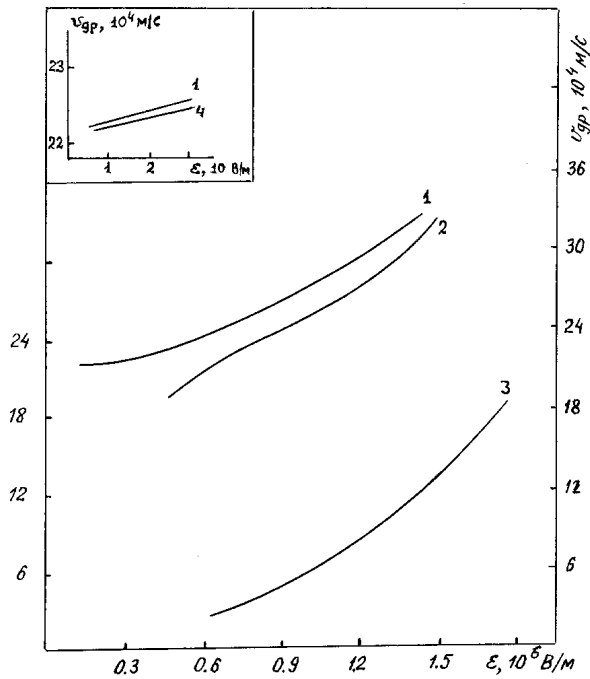
Определение конечного состояния электрона после рассеяния для данного механизма проводилось с учетом того, что в строго одномерном случае движение электрона возможно только вперед или назад, так что угол рассеяния  $\vartheta$  между начальным  $k_x$  и конечным  $k'_x$  волновыми векторами был равен либо  $0^\circ$ , либо  $180^\circ$ . С целью упрощения расчетов использовалась ступенчатая аппроксимация функции  $K(2dk_x)$  при  $dk_x \leq 1$  и приближенное равенство  $K(2dk_x) = 0.5\sqrt{\pi}/(dk_x) \exp(-2dk_x)$  при  $dk_x > 1$ . При этом было принято, что  $K(0)$  имеет конечное значение, равное 4.

Интенсивность рассеяния на неоднородностях поверхности рассчитывалась по формуле [10]

$$W_{sr}(k_x) = \frac{2\pi^{9/2} \Lambda \Delta^2 \hbar}{m^* L^6 k_x \exp\{k_x^2 \Lambda^2 \sin^2(\vartheta/2)\}}, \quad (5)$$

где  $\Lambda$  и  $\Delta$  — корреляционная длина и амплитуда неоднородностей. Здесь так же, как и в случае примесного рассеяния, угол  $\vartheta$  при рассеянии вперед равен  $0^\circ$ , а при рассеянии назад —  $180^\circ$ .

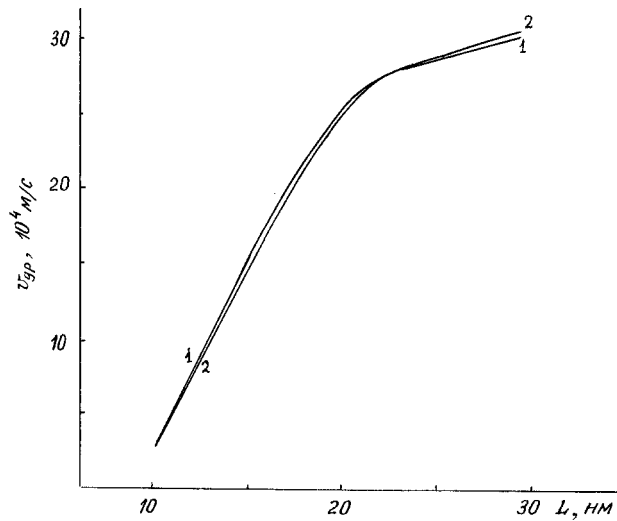
На рис. 1 приведены зависимости средней дрейфовой скорости  $v_{др}$  электронов от напряженности электрического поля, рассчитанные с учетом только одного механизма рассеяния — на полярных оптических фононах (кривая 1), двух — на полярных оптических фононах и ионах примеси (кривая 2) и всех трех рассмотренных выше механизмов рассеяния (кривая 3). Для сравнения с результатами работы [7] на этом же рисунке (вставка) показана зависимость  $v_{др}(\varepsilon)$ , рассчитанная при той же температуре  $T = 30$  К и для  $\varepsilon < 3 \cdot 10^5$  В/м (кривая 4). Практическое совпадение



**Рис. 1.** Зависимости средней дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля:  $d = 10$  нм,  $\Lambda = 20$  нм,  $\Delta = 0.283$  нм,  $N_i = 10^{-7} \text{ м}^{-1}$ , концентрация электронов  $n_e = 10^{-7} \text{ м}^{-1}$ ,  $L = 3L_0 = \sqrt{\hbar/(2m^*\omega)}$ ; на вставке данные получены для  $L = L_0$ .

кривых 1 и 4 на участке с напряженностью поля от  $1 \cdot 10^5$  до  $3 \cdot 10^5$  В/м свидетельствует об адекватности расчетов, выполненных для данных условий в [7] и настоящей работе.

Из поведения кривых на рис. 1 можно сделать вывод о том, что разогрев носителей заряда, сопровождающийся заметным увеличением дрейфовой скорости электронов, начинается при полях, приблизительно больших  $5 \cdot 10^5$  В/м. Легко также видеть, что значительное влияние на величину  $v_{др}$  в рассматриваемом интервале электрических полей оказывает рассеяние на неоднородностях поверхности.



**Рис. 2.** Зависимости средней дрейфовой скорости электронов от длины стороны сечения проволоки:  $d = 10$  нм,  $\Lambda = 20$  нм,  $\Delta = 0.283$  нм,  $N_i = 10^{-7} \text{ м}^{-1}$ , концентрация электронов  $n_e = 10^{-7} \text{ м}^{-1}$ ,  $\varepsilon = 10^6$  В/м.

На рис. 2 представлены зависимости дрейфовой скорости электронов от стороны  $L$  квадратного сечения проволоки для двух значений температуры  $T = 4.2$  и  $77$  К (кривые 1 и 2 соответственно), рассчитанные с учетом всех трех указанных механизмов рассеяния. Из этого рисунка следует, что с ростом величины  $L$  дрейфовая скорость увеличивается. Это объясняется значительным уменьшением интенсивности рассеяния на неоднородностях поверхности, а также уменьшением интенсивности рассеяния на полярных фононах. Поведение кривых свидетельствует также о том, что в условиях, когда реализуется электрический квантовый предел, дрейфовая скорость электронов практически не зависит от температуры кристалла.

Таким образом, в данной работе методом Монте-Карло была рассчитана дрейфовая скорость одномерных электронов, находящихся в квантовой яме GaAs-квантовой проволоки в условиях электрического квантового предела. Полученные результаты позволили сделать вывод о том, что заметный разогрев электронов в рассмо-

тренной структуре начинается при напряженностях электрического поля, больших  $5 \cdot 10^5$  В/м. Показано также, что в условиях принятых модельных приближений и допущений при полях, больших  $5 \cdot 10^5$  В/м, основное влияние на дрейфовую скорость оказывает рассеяние на полярных оптических фононах и неоднородностях поверхности.

## Список литературы

- [1] *Fawcett W., Boardman A.D., Swain S.* // J. Phys. Chem. Solids. 1970. V. 31. P. 1963–1990.
- [2] *Yokoyama K., Hess K.* // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 8. P. 5595–5606.
- [3] *Борздов В.М., Врубель В.М., Жевняк О.Г., Комаров Ф.Ф.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 7. С. 69–73.
- [4] *Briggs S., Leburton J.P.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 12. P. 8163–8170.
- [5] *Briggs S., Leburton J.P.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. N 6. P. 4785–4791.
- [6] *Mickevicius R., Mitin V.V., Kim K.W., Stroscio Michael A.* // Semicond. Sci. and Technol. 1992. V. 7. N 3B. P. B299–B301.
- [7] *Ghosal A., Chattopadhyay D., Bhattacharyya A.* // J. Appl. Phys. 1986. V. 59. N 7. P. 2511–2513.
- [8] *Leburton J.P.* // J. Appl. Phys. 1984. V. 56. N 10. P. 2851–2856.
- [9] *Sakaki H.* // Jap. J. Appl. Phys. 1980. V. 19. N 12. P. L735–L738.
- [10] *Motohisa J., Sakaki H.* // Appl. Phys. Lett. 1992. V. 60. N 11. P. 1315–1317.