



NGHIÊN CỨU THỪA SỐ DẠNG CHẮN ĐỂ KHẢO SÁT ẢNH HƯỞNG CỦA PHA TẠP LÊN TÍNH CHẤT ĐIỆN TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ

Trần Mai Loan¹, Trần Thị Hải², Nguyễn Văn Cẩn³

TÓM TẮT

Chúng tôi đưa ra một lý thuyết nghiên cứu về thừa số dạng chẵn hai chiều trong các mô hình giếng lượng tử pha tạp điều biến một phía và hai phía. Bằng việc xây dựng các công thức toán học phù hợp, giúp cho việc mô tả ảnh hưởng của pha tạp điều biến trong giếng lượng tử được dễ dàng hơn, chúng tôi đã đưa ra công thức tính toán chính xác cho thừa số dạng chẵn hai chiều. Chúng tôi cũng tiến hành tính số các dạng của thừa số dạng chẵn trong mô hình giếng lượng tử pha tạp điều biến một phía và hai phía. Ảnh hưởng của chẵn tăng lên khi tăng bề rộng giếng lượng tử và nồng độ pha tạp.

Từ khóa: Thừa số dạng chẵn, giếng lượng tử, pha tạp điều biến.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Khoa học công nghệ nano là một ngành khoa học đang được quan tâm và thúc đẩy phát triển mạnh mẽ hiện nay [1,2,6,9,10], công nghệ nano đã mở ra một bước ngoặt mới, con đường mới cho ngành khoa học, đã mở ra một triển vọng mới trong việc ứng dụng những dụng cụ thông tin kỹ thuật có những chức năng mà trước kia chưa từng có. Các dòng máy tính điện tử ngày càng được nâng cấp nhờ tăng mật độ và tốc độ xử lý thông tin bằng cách thu nhỏ kích thước của những thành tố cơ bản. Sự hoạt động của các cấu trúc nano có độ linh động cao được quy định bởi các tính chất vận chuyển (tính chất điện) của chúng. Vì vậy việc nghiên cứu tính chất điện của hạt tải là vấn đề được nhiều nhà khoa học trong và ngoài nước quan tâm.

Các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm [3] chỉ ra rằng cơ chế giam hãm gây bởi pha tạp có ảnh hưởng rất lớn lên độ linh động của cấu trúc dị tính. Với mẫu vùng năng lượng bị uốn cong do pha tạp [3] người ta đã giải thích được một số vấn đề có tính chất thách đố của hệ hạt tải hai chiều như sự phụ thuộc không đơn điệu của độ linh động vào độ rộng giếng và nguyên nhân của sự giảm độ linh động khi mẫu được pha tạp điều biến bất đối xứng.

Kết quả tính toán từ công trình [4,5] cho thấy rằng dưới ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng, hình dạng của hàm sóng biểu thị sự phân bố của các hạt tải trong giếng có sự thay đổi đáng kể, không còn đối xứng như trong mô hình flat-band mà nó tăng về phía có pha tạp và giảm về phía không có pha tạp trong trường hợp pha tạp một phía và

¹ Trường Trung học phổ thông Nguyễn Mộng Tuân, huyện Đông Sơn, Thanh Hóa

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



tập trung về cả hai phía trong trường hợp giếng lượng tử pha tạp hai bên. Sự thay đổi này phụ thuộc vào mức pha tạp và bề rộng kênh dẫn.

Hiệu ứng uốn cong vùng (band bending) ảnh hưởng lên tính chất điện trong giếng lượng tử được thể hiện rất rõ nét ở thừa số dạng chắn bởi thừa số dạng chắn phụ thuộc vào sự phân bố của hạt tải theo phương z (phương giam hãm) [3]. Với những ý nghĩa đó, việc nghiên cứu thừa số dạng chắn của hệ hạt tải trong các cấu trúc giếng lượng tử là vấn đề nghiên cứu mang ý nghĩa khoa học lớn và cần thiết.

Tuy nhiên, một trong những trở ngại chính của các lý thuyết hiện có là việc sử dụng hàm Fang-Howard [2]. Hàm sóng được xác định bằng phương pháp biến phân này đã cho ta công cụ toán học đơn giản mô tả giam hãm lượng tử gây bởi pha tạp, áp dụng rất tốt cho các trường hợp giếng lượng tử tam giác được tạo bởi các tiếp xúc dị tính. Khi áp dụng cho các giếng lượng tử vuông góc, mô hình Fang-Howard chỉ có thể mô tả gần đúng sự phụ thuộc của độ linh động vào nhiệt độ, vào mật độ hạt tải chứ hoàn toàn không thể dẫn ra sự phụ thuộc vào độ rộng của giếng. Cho đến nay người ta mới xây dựng được lý thuyết về ảnh hưởng của pha tạp lên giam hãm lượng tử cho giếng tam giác, đối với các giếng lượng tử vuông góc vẫn chưa đưa ra được biểu thức tính toán tường minh và thỏa đáng. Vì vậy, trong bài báo này chúng tôi tập trung tính toán thừa số dạng chắn trong các mô hình giếng lượng tử vuông góc và so sánh giữa các mô hình pha tạp khác nhau để thấy được sự ảnh hưởng của thừa số dạng chắn lên tính chất điện của điện tử trong cấu trúc giếng lượng tử.

2. NỘI DUNG

2.1. Lý thuyết tính thừa số dạng chắn

Một tập hợp các điện tích phân bố đều (uniform/ homogenous) trong không gian sẽ không tạo ra trường. Giả sử ta thả một điện tích thử Q vào trong hệ điện tích. Điện tích Q sẽ đẩy các điện tử gần nó, xung quanh Q có một vùng không gian thiếu điện tích âm, khối điện tử bị phân cực. Như vậy, dưới tác dụng của một nguồn ngoài nào đó thì hệ điện tích sẽ phân bố lại và phân bố trở nên không đều, hệ bị phân cực, sự phân cực tạo ra một trường phụ, trường phụ có xu hướng chống lại nguồn đã sinh ra nó, tác dụng ngược chiều với trường chính. Khi đó, trường tổng hợp bao gồm trường chính cộng với trường phụ sẽ yếu hơn trường chính. Đó là hiện tượng chắn. Các phần tử tham gia vào chắn là các điện tích linh động. Dưới tác dụng của nguồn ngoài nào đó (điện tích thử, đono, axepto, độ nhám bề mặt...) các điện tích này sẽ di chuyển, phân bố lại không đều, chúng bị phân cực, tạo ra trường phụ làm yếu trường ban đầu.

Điều kiện để có chắn: Phụ thuộc vào độ linh động của các điện tích và các điện tích phải tương tác với nhau.

Các yếu tố để xác định chắn

(i) Chắn được xác định dựa vào độ cơ động của các điện tích. Khi điện tích dễ di chuyển, chúng sẽ dễ bị phân bố lại, từ đó hệ điện tích dễ bị phân cực và vì thế chắn sẽ tăng lên. Bên cạnh đó, số điện tích tham gia vào chắn cũng ảnh hưởng đến chắn.

(ii) Chấn trong ba chiều mạnh hơn trong hai chiều, chấn trong hai chiều còn phụ thuộc vào cấu trúc của giếng lượng tử chứa điện tích.

(iii) Ngoài ra, nguyên lý Pauli không cho phép hai hạt nằm trong cùng một trạng thái, điều này làm giảm khả năng di chuyển của các điện tích, chấn vì thế cũng giảm. Tất cả các tương tác (Coulomb, độ nhám bề mặt, thế biến dạng khớp sai...) làm thay đổi phân bố của khí điện tử đều bị chấn động.

Hiệu ứng chấn động được định lượng bằng hàm điện môi $\varepsilon(q)$. Để xác định $\varepsilon(q)$ ta sử dụng biểu thức trong gần đúng pha ngẫu nhiên được đưa ra bởi [1].

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}}{q} F_s(qL)[1 - G(q)] \text{ với } q \leq 2k_F \quad (1)$$

với $q_{TF} = \frac{2m^* e^2}{\varepsilon_L \hbar^2}$ là nghịch đảo bán kính chấn Thomas-Fermi hai chiều.

$F_s(qL)$ là thừa số dạng chấn phụ thuộc vào sự phân bố của khí lỗ trống hai chiều theo phương z.

$$F_s(qL) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' |\zeta(z)|^2 |\zeta(z')|^2 e^{-q|z-z'|} \quad (2)$$

$G(q)$ là hiệu chỉnh trường cục bộ khi tính đến tương tác trao đổi, tức là tương tác của các điện tử xuất hiện do nguyên lý Pauli. Theo nguyên lý Pauli, không thể tồn tại quá hai hạt Fermion cùng nằm trong một trạng thái, điều này đã hạn chế khả năng di chuyển của các điện tích, làm giảm sự phân cực của hệ, làm yếu trường phụ, chấn vì thế cũng giảm đi.

Trong phép gần đúng Hubbard, $G(q)$ có dạng [7]:

$$G(q) = \frac{q}{2(q^2 + k_F^2)^{1/2}} \quad (3)$$

Thừa số dạng chấn F_s (2) phụ thuộc vào sự phân bố của khí lỗ trống theo phương z. Khi hàm sóng thay đổi thì thừa số dạng chấn thay đổi, có nghĩa là khi dạng pha tạp (doping) thay đổi thì chấn thay đổi. Để khảo sát ảnh hưởng của pha tạp (doping) lên tính chất điện trong giếng lượng tử, người ta xác định thừa số dạng chấn.

2.1.1. Thừa số dạng chấn trong giếng lượng tử pha tạp một phía

Sử dụng biểu thức (2) ở trên và hàm sóng trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía cho bởi phương trình (1) trong tài liệu tham khảo [4], kết hợp với các hàm phụ $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ cho bởi (A1) và (A2) trong phần phụ lục của tài liệu tham khảo [4], ta thu được:

Thừa số dạng chấn phụ thuộc vào tương tác của hạt dọc theo phương nuôi, được xác định bởi:

$$F_s(t) = \frac{\pi^2 B^4}{8} [F_U(t) + F_L(t)] \quad (4)$$

$$\begin{aligned}
 F_L(t) = & \left(\frac{L}{2}\right)^2 \left\{ -\frac{1}{2c+t} \left[e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \phi(a, 2c) \right] - \right. \\
 & - \frac{c + \frac{t}{2}}{4[a^2 + (c + \frac{t}{2})^2]} \left[2\cos a e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \phi(2a, 2c) - 2\phi(a, 2c) + \phi(0, 2c) \right] \\
 & \left. + \frac{a}{4[a^2 + (c + \frac{t}{2})^2]} \left[2\sin a e^{-(c+\frac{t}{2})} \phi(a, c - \frac{t}{2}) - \psi(2a, 2c) - 2\psi(a, 2c) \right] \right\}, \quad (5)
 \end{aligned}$$

và

$$\begin{aligned}
 F_U(t) = & \left(\frac{L}{2}\right)^2 \left\{ \frac{1}{2c-t} \left[e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) - \phi(a, 2c) \right] + \right. \\
 & + \frac{c - \frac{t}{2}}{4[a^2 + (c - \frac{t}{2})^2]} \left[2\cos a \cdot e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) - \phi(2a, 2c) - 2\phi(a, 2c) + \phi(0, 2c) \right] + \\
 & \left. \frac{a}{4[a^2 + (c - \frac{t}{2})^2]} \times \left[2\sin a e^{(c-\frac{t}{2})} \phi(a, c + \frac{t}{2}) + \psi(2a, 2c) + 2\psi(a, 2c) \right] \right\}, \quad (6)
 \end{aligned}$$

$t = qL$ là số sóng hai chiều.

2.1.2. Thừa số dạng chắn trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía

Sử dụng biểu thức (2) ở trên và hàm sóng trong mô hình giếng lượng tử pha tạp hai phía cho bởi phương trình (1) trong tài liệu tham khảo [8], kết hợp với các hàm phụ $\gamma_n(x)$ và $\omega_n(x)$ [7] ta thu được biểu thức giải tích dạng tường minh của thừa số dạng chắn cho trường hợp giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía như sau:

$$\begin{aligned}
 F_s(t) = & \frac{\pi^2 B^4}{8} \left\{ \frac{4t}{t^2 - 4c^2} [\gamma_1(2c) + 1] + \frac{8}{t} [2\gamma_1(c) - e^{-t/2} \gamma_1(t/2) + 1] + \right. \\
 & + \left(\frac{t-2c}{(t-2c)^2 + 4\pi^2} + \frac{t+2c}{(t+2c)^2 + 4\pi^2} \right) [\gamma_2(2c) + 2\gamma_1(2c) - \gamma_0(2c) + 1] + \\
 & + \frac{8t}{t^2 + 4\pi^2} [\gamma_2(c) + 2\gamma_1(c) - \gamma_0(c) + e^{-t/2} \gamma_1(t/2) + 1/2] + \frac{16\pi ct}{[(t-2c)^2 + 4\pi^2][(t+2c)^2 + 4\pi^2]} \quad (6) \\
 & \times [\omega_2(2c) + 2\omega_1(2c)] - 8\pi^2 \left[\frac{e^{c-t/2}}{(t-2c)[(t-2c)^2 + 4\pi^2]} + \right. \\
 & \left. + \frac{e^{-(c+t/2)}}{(t+2c)[(t+2c)^2 + 4\pi^2]} + \frac{4e^{-t/2}}{t[t^2 + 4\pi^2]} \right] \{ \gamma_1(c+t/2) + \gamma_1(c-t/2) \} \}
 \end{aligned}$$

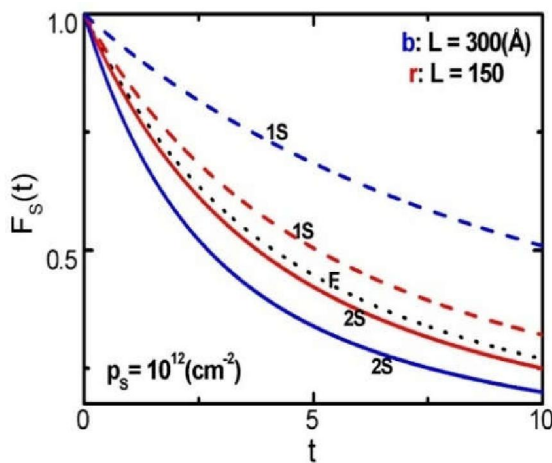
(5), (6) và (7) là biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn trong mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía và pha tạp đối xứng hai phía. Việc tính toán ra biểu thức thừa số dạng chắn này hết sức khó khăn do sự phức tạp của quá trình tính toán. Vì các tác giả trước trong [2] chỉ đưa ra biểu thức gần đúng của thừa số dạng chắn mà không thể nào tìm được biểu thức giải tích chính xác. Nhóm tác giả chúng tôi, bằng việc xây dựng một số hàm phụ [4] giúp cho việc tính toán được dễ dàng hơn, chúng tôi đã đưa ra biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn theo các phương trình (5), (6) và (7).

2.2. Kết quả và thảo luận

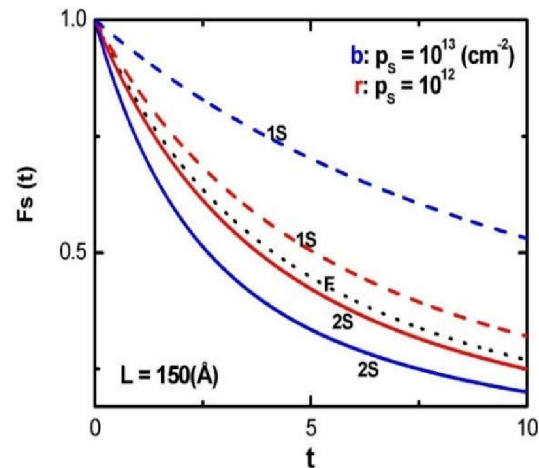
Chúng tôi tiến hành khảo sát thừa số dạng chắn phụ thuộc vào các tham số của giếng lượng tử như nồng độ hạt tải và bề rộng của giếng.

Đồ thị hình 1 cho biết sự phụ thuộc của thừa số dạng chắn vào xung lượng vô hướng t đối với khí lỗ trống hai chiều trong giếng lượng tử vuông góc GaAs [8] với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử $L = 150, 300 \text{ \AA}$.

Đồ thị hình 2 cho biết sự phụ thuộc của thừa số dạng chắn vào xung lượng vô hướng t đối với khí lỗ trống hai chiều trong giếng lượng tử vuông góc GaAs [8] với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải $p_s = 10^{12}, 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.



Hình 1. F_s phụ thuộc vào t với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử L



Hình 2. F_s phụ thuộc vào xung lượng t với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải p_s

Trong đó, các đường đứt nét (dot line) là thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band, đường đứt nét (dash line) là thừa số dạng chắn trong mô hình bent-band do pha tạp một phía và đường liền nét là thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp đối xứng hai phía.

Quan sát hình 1 ta thấy, khi ta thay đổi bề rộng giếng lượng tử bằng các giá trị $L = 150 \text{ \AA}$ và $L = 300 \text{ \AA}$ ứng với cùng một giá trị của nồng độ pha tạp là $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ thì thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band (dot line) không thay đổi, thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp một phía (dash line) và pha tạp hai phía (đường liền nét) thay đổi rõ rệt, đặc biệt khi ta tăng bề rộng của giếng lượng tử thừa số dạng chắn trong hai mô hình trên càng



khác biệt nhau, điều này dẫn tới tính chất điện của điện tử trong hai mô hình pha tạp một phía và pha tạp hai phía là khác nhau rõ rệt.

Quan sát hình 2 ta thấy, khi ta thay đổi nồng độ hạt tải trong giếng lượng tử bằng các giá trị $p_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ và $p_s = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ứng với cùng một giá trị của bề rộng giếng lượng tử $L = 150 \text{ \AA}$ thì thừa số dạng chắn trong mô hình flat-band (dot line) không thay đổi, thừa số dạng chắn trong mô hình pha tạp một phía (dash line) và pha tạp hai phía (đường liền nét) thay đổi rõ rệt, đặc biệt khi ta tăng nồng độ hạt tải trong giếng thừa số dạng chắn trong hai mô hình trên càng khác biệt nhau, điều này dẫn tới tính chất điện của điện tử trong hai mô hình pha tạp một phía và pha tạp hai phía là khác nhau rõ rệt.

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi tính toán thừa số dạng chắn của các mô hình giếng lượng tử không pha tạp (flat-band), giếng lượng tử pha tạp một phía và giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía. Các tính toán này hết sức phức tạp, mà các nhóm trước đây chưa đưa ra được biểu thức giải tích. Tuy nhiên, bằng việc sử dụng các công cụ toán học thích hợp với việc đặt các hàm phụ, chúng tôi đã đưa ra được dạng tường minh của các biểu thức dạng chắn. Chúng tôi cũng tiến hành tính số và kết quả cho thấy, đối với các giếng lượng tử pha tạp khác nhau thì chắn là khác nhau. Dạng của chắn tăng khi ta tăng bề rộng giếng lượng tử và nồng độ hạt tải trong giếng. Điều này giải thích được tính chất điện, tính chất vận chuyển của hạt tải trong các mô hình giếng lượng tử pha tạp khác nhau là khác nhau, phụ thuộc vào nồng độ hạt tải và độ rộng của giếng lượng tử.

Tính toán ra biểu thức giải tích của thừa số dạng chắn và mô phỏng để tính số, so sánh đại lượng này giữa các mô hình giếng lượng tử khác nhau đã góp phần hoàn thiện thêm lý thuyết nghiên cứu tính chất điện của hạt tải trong các 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] B. PÖDÖR (1995), *Variational calculation for triangular quantum wells using modified trial function*, Acta physica polonica A, Vol. 88, No.5.
- [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] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Do Thi 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] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Nguyen Trung Hong, and Tran Thi Hai (2011), *Two-Side Doping Effects on the Mobility of Carriers in Square Quantum Wells*, Journal of the Physical Society of Japan 80, 044714.



- [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] Jonson M. (1976), *Electron correlations in inversion layers*, J. Phys. C 9, 3055.
- [8] Manfra. M. J., Pfeiffer. L. N., West. K. W., Stormer. H. L., Baldwin. K. W., Hsu. J. W. P., Lang. D. V., and Molnar. R. J. (2000), *High-mobility AlGaIn/GaN heterostructures grown by molecularbeam epitaxy on GaN templates prepared by hydride vapor phase epitaxy*, Appl. Phys. Lett. 77, 2888.
- [9] Scha"ffer. F. (1997), *High-mobility Si and Ge structures*, . Sci. Technol. 12, 1515.
- [10] Van de Walle. C. G. (1989), *Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory*, Phys. Rev. B. 39, 1871.

STUDY SCREENING FORM FACTOR TO INVESTIGATE MODULATION-DOPING EFFECTS ON ELECTRIC CHARACTERISTICS IN QUANTUM WELLS

Tran Mai Loan, Tran Thi Hai, Nguyen Van Can

ABSTRACT

We present a theoretical study of the 2-dimensional (2D) screening form factor in a single-side and double-side doped square quantum well (QW). By introducing some mathematical functions, which make up a helpfu tool l to the description of the modulation-doping effects in an infinite square QW, we derive a special formula allowing to exactly calculate the 2-dimensional screening form factor. We have carried out numerical calculations to evaluate the band-bending effects from single-side and double-side modulation doping on the 2D screening form factor. The bent-band screening is raised with a rise of the channel width and of the doping level.

Keywords: *Screening form factor, quantum well, modulation-doping.*