TÍNH CHẤT VẬN CHUYỂN CỦA LỖ TRỐNG TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ VUÔNG HỮU HẠN $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$

Trương Văn Tuấn[1,2] **Nguyễn Quốc Khánh**[1] **Võ Văn Tài**[1]

[1]Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM [2]Trường Đại học Trần Đại Nghĩa

Email: tuanbo83@gmail.com; nqkhanh@phys.hcmuns.edu.vn; vvtaiphys17@gmail.com

TÓM TẮT: Chúng tôi khảo sát độ linh động μ và suất nhiệt điện S của lỗ trống trong giếng lượng tử vuông hữu hạn $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$ gây bởi tán xạ hợp kim (AD), bề mặt nhám (SR), biến dạng (DP), áp điện (PE), tạp chất tích điện xa (RI) và tán xạ phonon âm (ac) thông qua thế áp điện (acPE), biến dạng (acDP) cho hai miền BG và EP. Chúng tôi chỉ ra rằng, tán xạ ac chiếm ưu thế ở nhiệt độ cao, tán xạ AD vượt trội đối với giếng thế rộng và mật độ hạt tải thấp. Trong khi đó tán xạ SR chiếm ưu thế đối với giếng thế hẹp khi nhiệt độ và mật độ hạt tải thấp. Ngoài ra chúng tôi cũng so sánh suất nhiệt điện S và tính tỉ số của độ linh động R trong hai trường hợp giếng hữu hạn và vô hạn. Kết quả cho thấy rằng: R_{AD}, R_{SR}, R_{PE}, R_{ac}, R_{total} luôn lớn hơn 1 và R_{ac},R_{DP} luôn nhỏ thua 1 còn S lớn nhất cho giếng vô hạn.

LÝ THUYẾT

- Giếng lượng tử chúng tôi xét ở đây là giếng $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$ với độ sâu hữu hạn, hàm sóng có dạng như sau: $\xi(z)=\begin{cases} A\kappa^{1/2}\,e^{\kappa(z+L/2)} & z<-L/2 \\ Bk^{1/2}\cos(kz) & |z|<L/2 \\ A\kappa^{1/2}e^{-\kappa(z-L/2)} & z>L/2 \end{cases}$

- Độ linh động lỗ trống trong hình thức luận phương trình vận chuyển Boltzmann cho gần đúng thời gian hồi phục được cho bởi: $\mu=\dfrac{e\langle\tau_t(E)\rangle}{m^*}$; trong đó thời gian hồi phục là: $\dfrac{1}{\tau(E)}=\dfrac{m^*}{\pi\hbar^3}\int_0^{\pi}d\theta(1-\cos\theta)\dfrac{\langle|U(q)|^2\rangle}{\varepsilon^2(q,T)}$

- Đối với thế tán xạ bề mặt nhám SR, thế ngẫu nhiên có dạng: $\left\langle\left|U_{SR}(\vec{q})\right|^2\right\rangle=\left(\dfrac{\hbar^2B^2a^3}{2m_zL^3}\right)^2\left\langle\left|\Delta_{\vec{q}}\right|^2\right\rangle$

- Trong trường hợp thế biến dạng DP, thế tán xạ có dạng: $\left\langle\left|U_{DP}^{(v)}(\vec{q})\right|^2\right\rangle=\left(\dfrac{\alpha\in_{\parallel}B^2a}{2L}\right)^2\left\langle\left|F_{DP}(z)\right|^2\right\rangle U_{DP}^{(v)}(\varphi)\left\langle\left|\Delta_{\vec{q}}\right|^2\right\rangle$

- Đối với tán xạ tạp chất tích điện xa RI, thế tán xạ có dạng: $\left\langle\left|U_{\rm RI}(q)\right|^2\right\rangle=N_{\rm RI}\left(\dfrac{2\pi e^2}{\varepsilon_{\rm L}}\dfrac{1}{q}\right)^2F_{\rm RI}(q,z_i)^2$

- Tán xạ phonon âm miền EP: $\left\langle\left|U_{acDP}^{EP}(q)\right|^2\right\rangle=\dfrac{k_BT}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dq_z\dfrac{\left|C_{DP}(\mathbf{Q})\right|^2}{\hbar\omega_{\rm Q}}\left|I(q_z)\right|^2$; $\left\langle\left|U_{acPE(l;t)}^{EP}(q)\right|^2\right\rangle=\dfrac{k_BT}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dq_z\left|I(q_z)\right|^2\dfrac{\left|C_{PE(l;t)}(\mathbf{Q})\right|^2}{\hbar\omega_{\rm Q}}=\dfrac{e^2k_BT}{2\rho u_{(l;t)}^2}\dfrac{1}{q}f_{(l;t)}^{W}(q)$; trong đó: $I(q_z)=\int_{-\infty}^{+\infty}\xi^2(z)\exp(iq_zz)dz$; $|C_{DP}(Q)|^2=\dfrac{D^2\hbar Q}{2\rho u_l}=\dfrac{D^2\hbar\sqrt{q^2+q_z^2}}{2\rho u_l}$; $|C_{PE;l}(Q)|^2=\dfrac{(eh_{14})^2\hbar}{2\rho u_l}\dfrac{1}{Q}A_l(Q)$;$|C_{PE;t}(Q)|^2=\dfrac{(eh_{14})^2\hbar}{2\rho u_t}\dfrac{1}{Q}A_t(Q)$

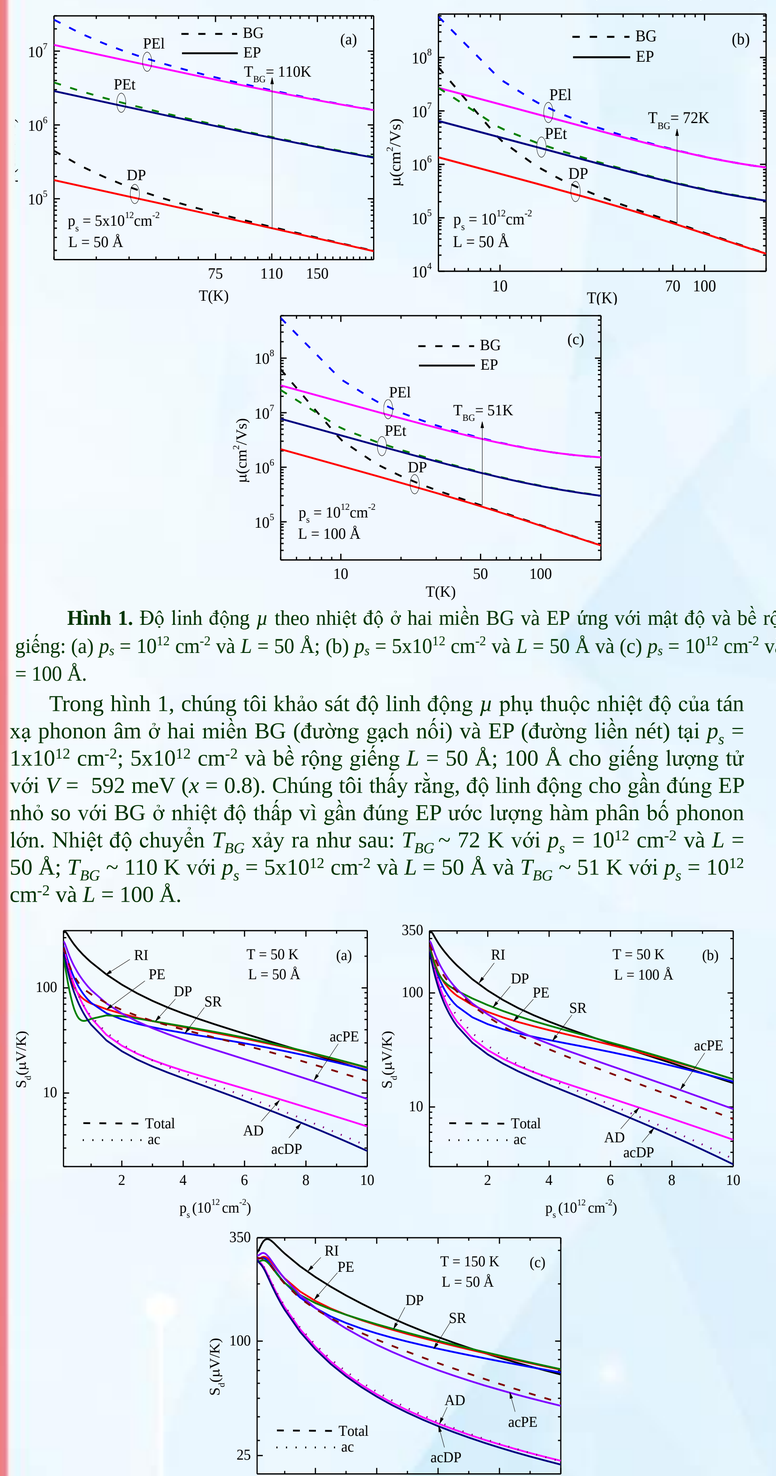
- Cho tán xạ AD, hàm tự tương quan có dạng: $\left\langle\left|U_{AD}(q)\right|^2\right\rangle=x(1-x)u_{al}^2\Omega_0\left(\dfrac{B^4a^2}{L}\right)F_{AD}(a)$

- Đối với tán xạ PE, thế ngẫu nhiên có dạng: $\left\langle\left|U_{PE}^{(v)}(\vec{q})\right|^2\right\rangle=\left(\dfrac{3\pi^{3/2}ee_{14}G\alpha\in_{\parallel}\sin2\theta}{8\varepsilon_Lc_{44}}\right)^2\left\langle\left|F_{PE}(q,L)\right|^2\right\rangle\left\langle\left|\Delta_{\vec{q}}\right|^2\right\rangle$

- Tán xạ phonon âm miền BG: $\left\langle\left|U_{acBG}(q)\right|^2\right\rangle=\dfrac{1}{\pi}\int_0^{\infty}dq_z\left|C_{DP}(\mathbf{Q})\right|^2\left|I(q_z)\right|^2\Delta E$

- Suất nhiệt điện khuếch tán S_d: $S_d=(1/eT)[-E_{\rm F}+\langle E\tau(E)\rangle/\langle\tau(E)\rangle]$

- Suất nhiệt điện phonon drag S_g: $S_g=\sum_s S_{gs}$ với $S_{gs}=\dfrac{|e|\tau_{ps}}{2\pi^2\sigma k_BT^2\hbar}\sum_{\mathbf{Q}}\dfrac{\hbar\omega_Q f_0(E(\boldsymbol{k}))(1-f_0(E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})))}{\varepsilon^2(q,T)\sinh^2\left(\dfrac{\hbar\omega_Q}{2k_BT}\right)}\left|C_j(\mathbf{Q})\right|^2\left|I(q_z)\right|^2N_Q\tau_ku_s\dfrac{q^2}{(q^2+q_z^2)^{1/2}}$



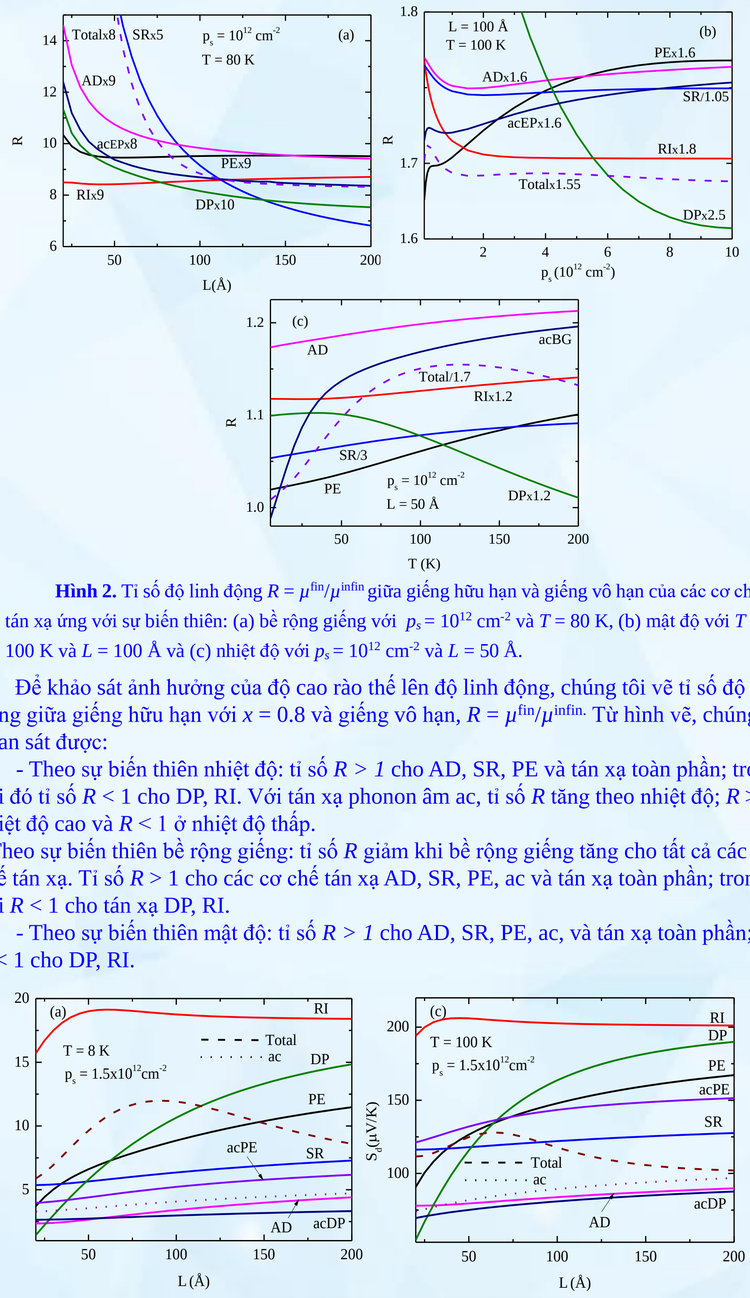
Hình 1. Độ linh động μ theo nhiệt độ ở hai miền BG và EP ứng với mật độ và bề rộng giếng: (a) $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $L = 50$ Å; (b) $p_s = 5x10^{12}$ cm^{-2} và $L = 50$ Å và (c) $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $L = 100$ Å.

Trong hình 1, chúng tôi khảo sát độ linh động μ phụ thuộc nhiệt độ của tán xạ phonon âm ở hai miền BG (đường gạch nối) và EP (đường liền nét) tại $p_s = 1x10^{12}$ cm^{-2}; $5x10^{12}$ cm^{-2} và bề rộng giếng $L = 50$ Å; 100 Å cho giếng lượng tử với $V = 592$ meV ($x = 0.8$). Chúng tôi thấy rằng, độ linh động cho gần đúng EP nhỏ so với BG ở nhiệt độ thấp vì gần đúng EP ước lượng hàm phân bố phonon lớn. Nhiệt độ chuyển T_{BG} xảy ra như sau: $T_{BG} \sim 72$ K với $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $L = 50$ Å; $T_{BG} \sim 110$ K với $p_s = 5x10^{12}$ cm^{-2} và $L = 50$ Å và $T_{BG} \sim 51$ K với $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $L = 100$ Å.

Hình 4. Suất nhiệt điện khuếch tán S_d theo mật độ: (a) $T = 50$ K, $L = 50$ Å, (b) $T = 50$ K, $L = 100$ Å, (c) $T = 150$ K, $L = 100$ Å.

Trong hình 4, chúng tôi tính S_d theo mật độ p_s cho các cơ chế tán xạ và tán xạ toàn phần ứng với nhiệt độ và bề rộng giếng khác nhau. Chúng tôi nhận thấy rằng, S_d của các cơ chế tán xạ đều giảm theo mật độ. Với bề rộng giếng và nhiệt độ khảo sát ở hình 4a, tán xạ DP, SR, acPE chiếm ưu thế đối với tán xạ toàn phần theo mật độ. Khi tăng bề rộng giếng và giữ nhiệt độ không đổi, tán xạ phonon âm với thế áp điệh acPE và tán xạ AD chiếm ưu thế so với các tán xạ còn lại ở mật độ cao. Ngược lại giữ bề rộng giếng không đổi, ở nhiệt độ cao thì tán xạ phonon âm với thế áp điện acPE hoàn toàn chiếm ưu thế.

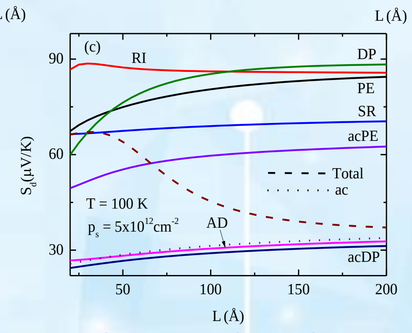
KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN



Hình 2. Tỉ số độ linh động $R = \mu^{fin}/\mu^{infin}$ giữa giếng hữu hạn và giếng vô hạn của các cơ chế tán xạ ứng với sự biến thiên: (a) bề rộng giếng với $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $T = 80$ K, (b) mật độ với $T = 100$ K và $L = 100$ Å và (c) nhiệt độ với $p_s = 10^{12}$ cm^{-2} và $L = 50$ Å.

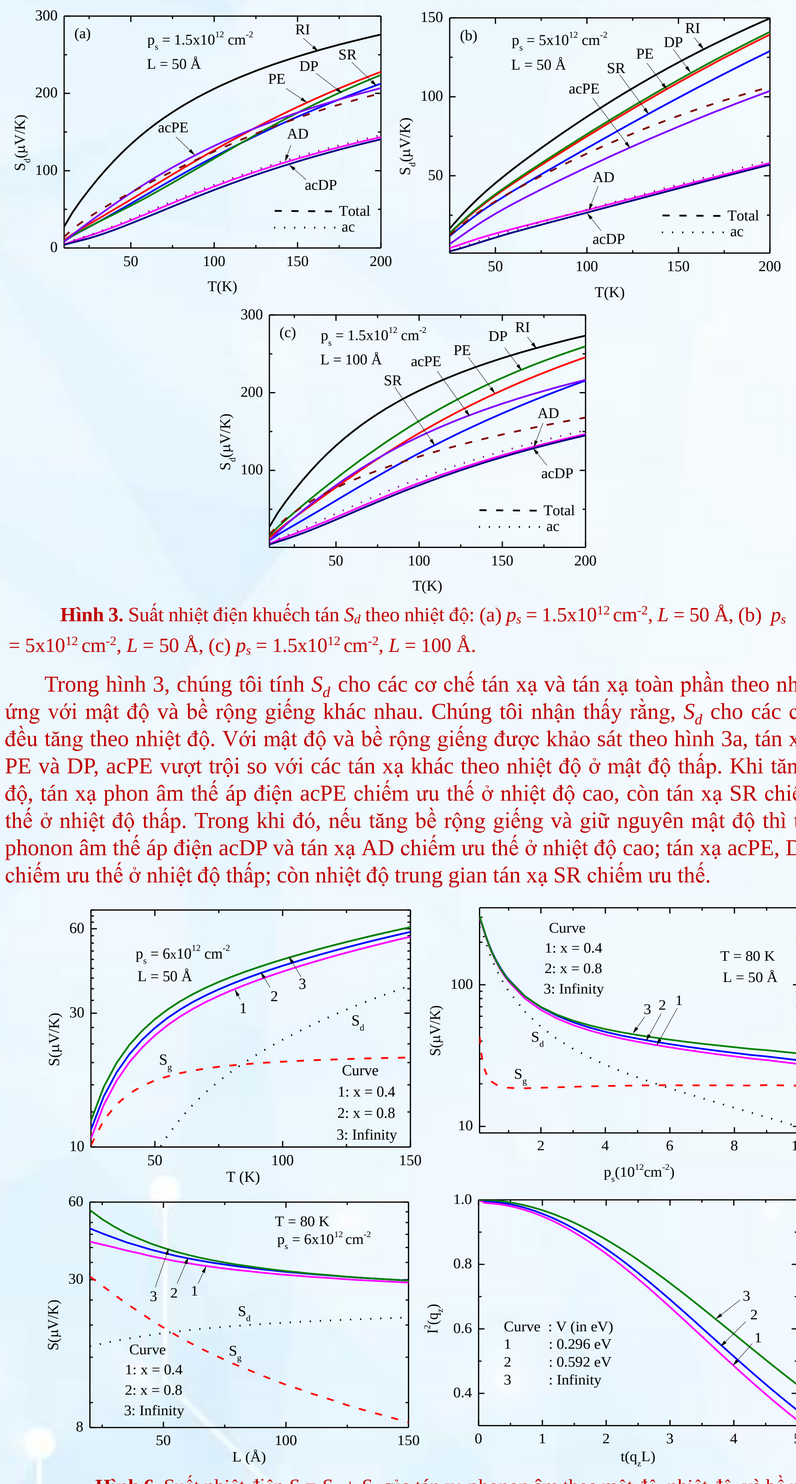
Để khảo sát ảnh hưởng của độ cao rào thế lên độ linh động, chúng tôi vẽ tỉ số độ linh động giữa giếng hữu hạn với $x = 0.8$ và giếng vô hạn, $R = \mu^{fin}/\mu^{infin.}$ Từ hình vẽ, chúng tôi quan sát được:

- Theo sự biến thiên nhiệt độ: tỉ số $R > 1$ cho AD, SR, PE và tán xạ toàn phần; trong khi đó tỉ số $R < 1$ cho DP, RI. Với tán xạ phonon âm ac, tỉ số R tăng theo nhiệt độ; $R > 1$ ở nhiệt độ cao và $R < 1$ ở nhiệt độ thấp.
- Theo sự biến thiên bề rộng giếng: tỉ số R giảm khi bề rộng giếng tăng cho tất cả các cơ chế tán xạ. Tỉ số $R > 1$ cho các cơ chế tán xạ AD, SR, PE, ac và tán xạ toàn phần; trong khi $R < 1$ cho tán xạ DP, RI.
- Theo sự biến thiên mật độ: tỉ số $R > 1$ cho AD, SR, PE, ac, và tán xạ toàn phần; tỉ số $R < 1$ cho DP, RI.



Hình 5. Suất nhiệt điện khuếch tán S_d theo bề rộng giếng: (a) $p_s = 1.5x10^{12}$ cm^{-2}, $T = 8$K, (b) $p_s = 1.5x10^{12}$ cm^{-2}, $T = 100$ K, (c) $p_s = 5x10^{12}$ cm^{-2}, $T = 100$ K.

Trong hình 5, chúng tôi khảo sát S_d theo bề rộng giếng cho các cơ chế tán xạ và tán xạ toàn phần ứng với mật độ và nhiệt độ khác nhau. Từ hình vẽ, chúng ta quan sát thấy rằng với tán xạ SR hoàn toàn chiếm ưu thế ở bề rộng giếng hẹp ($L < 30$ Å); khi bề rộng giếng tăng, tán xạ phonon âm và tán xạ AD đóng góp chủ yếu vào tán xạ toàn phần. Trong tán xạ phonon âm, tán xạ acDP chiếm ưu thế so với tán xạ acPE ngoại trừ ở nhiệt độ thấp và mật độ thấp.



Hình 3. Suất nhiệt điện khuếch tán S_d theo nhiệt độ: (a) $p_s = 1.5x10^{12}$ cm^{-2}, $L = 50$ Å, (b) $p_s = 5x10^{12}$ cm^{-2}, $L = 50$ Å, (c) $p_s = 1.5x10^{12}$ cm^{-2}, $L = 100$ Å.

Trong hình 3, chúng tôi tính S_d cho các cơ chế tán xạ và tán xạ toàn phần theo nhiệt độ ứng với mật độ và bề rộng giếng khác nhau. Chúng tôi nhận thấy rằng, S_d cho các cơ chế đều tăng theo nhiệt độ. Với mật độ và bề rộng giếng được khảo sát theo hình 3a, tán xạ SR, PE và DP, acPE vượt trội so với các tán xạ khác theo nhiệt độ ở mật độ thấp. Khi tăng mật độ, tán xạ phon âm thế áp điện acPE chiếm ưu thế ở nhiệt độ cao, còn tán xạ SR chiếm ưu thế ở nhiệt độ thấp. Trong khi đó, nếu tăng bề rộng giếng và giữ nguyên mật độ thì tán xạ phonon âm thế áp điện acDP và tán xạ AD chiếm ưu thế ở nhiệt độ cao; tán xạ acPE, DP, PE chiếm ưu thế ở nhiệt độ thấp; còn nhiệt độ trung gian tán xạ SR chiếm ưu thế.

Hình 6. Suất nhiệt điện $S = S_d + S_g$ của tán xạ phonon âm theo mật độ, nhiệt độ, và bề rộng giếng cho các chiều cao rào thế $V = 296$ meV (đường cong 1), $V = 592$ meV (đường cong 2), và $V = \infty$ (đường cong 3) với $\Lambda = 1$ μm. Đường gạch nối và đường chấm chấm biểu diễn tương ứng cho S_g và S_d của giếng lượng tử với $V = 592$ meV: (a) $p_s = 6x10^{12}$ cm^{-2}, $L = 50$ Å, (b) $T = 80$ K, $L = 50$ Å, (c) $T = 80$ K, $p_s = 6x10^{12}$ cm^{-2}, (d) sự biến thiên của tích phân xen phủ $I^2(q_z)$ cho ba giá trị của độ cao rào thế.

Trong hình 6, đường cong gạch nối biểu diễn sự biến thiên của S_g. Đường cong chấm chấmbiểu diễn sự biến thiên của S_d, và đường cong liền nét biểu diễn sự biến thiên S theo nhiệt độ, mật độ, và bề rộng giếng tương ứng với ba độ cao rào thế $V = 296$ meV ($x = 0.4$), $V = 592$ meV ($x = 0.8$), và độ cao rào thế vô hạn. Từ hình vẽ, cho những giá trị thông số được chọn chúng ta thấy rằng:

- Theo sự biến thiên nhiệt độ: S_g chiếm ưu thế ở nhiệt độ thấp, S_d chiếm ưu thế ở nhiệt độ cao. S lớn nhất cho giếng vô hạn và sự khác biệt giữa S cho ba độ cao rào thế là đáng kể.
- Theo sự biến thiên mật độ: S_d chiếm ưu thế ở mật độ thấp, S_g chiếm ưu thế ở mật độ cao. S lớn nhất cho giếng vô hạn; sự khác biệt giữa S cho ba độ cao rào thế là đáng kể ở mật độ cao và ít đáng kể ở mật độ thấp.
- Theo sự biến thiên bề rộng giếng: S_g chiếm ưu thế ở bề rộng giếng hẹp, S_d chiếm ưu thế ở bề rộng giếng rộng. S lớn nhất cho giếng vô hạn; sự khác biệt giữa S cho ba độ cao rào thế là đáng kể ở bề rộng giếng hẹp và ít đáng kể ở bề rộng giếng rộng.
- Sự khác biệt giữa S cho ba độ cao rào thế phù hợp với hình *6d*, chỉ sự biến thiên của tích phân xen phủ $I^2(q_z)$, lớn nhất đối với rào thế vô hạn.

KẾT LUẬN: Độ linh động μ và suất nhiệt điện S của lỗ trống trong giếng lượng tử vuông hữu hạn $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$ gây bởi tán xạ hợp kim (AD), bề mặt nhám (SR), biến dạng (DP), áp điện (PE), tạp chất tích điện xa (RI) và tán xạ phonon âm (ac) thông qua thế áp điện (acPE), biến dạng (acDP) cho hai miền BG và EP phụ thuộc mật độ, nhiệt độ và bề rộng giếng đã được khảo sát. Nó chỉ ra rằng, trong tán xạ phonon âm ở nhiệt độ cao chúng ta có thể sử dụng dạng giải tích của gần đúng EP thay vì gần đúng BG; và tán xạ acDP chiếm ưu thế so với tán xạ acPE ngoại trừ ở nhiệt độ thấp và mật độ thấp; Ngoài ra, S_g chiếm ưu thế ở nhiệt độ thấp, mật độ cao, và bề rộng giếng hẹp so với S_d trong suất nhiệt điện S của tán xạ phonon âm. Bên cạnh đó, xét đến ảnh hưởng của các tán xạ qua suất nhiệt điện khuếch tán S_d, tán xạ ac chiếm ưu thế ở nhiệt độ cao, tán xạ AD vượt trội đối với giếng thế rộng; trong khi đó tán xạ SR chiếm ưu thế đối với giếng thế hẹp. Hơn nữa, khảo sát so sánh giữa giếng hữu hạn và vô hạn qua tỉ số R và S, cho thấy R_{AD}, R_{SR}, R_{PE}, R_{ac}, R_{total} luôn lớn hơn 1 và R_{ac},R_{DP} luôn nhỏ thua 1 còn S lớn nhất cho giếng vô hạn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO: **1**. R. G. Vaidya, N. S. Sankeshwar, and B. G. Mulimani, AIP ADVANCES 4, 017107 (2014); **2.** S. S. Kubakaddi, V. S. Katti, and D. Lehmann, J. Appl. Phys. 107, 123716 (2010); **3.** Doan Nhat Quang, PHYSICAL REVIEW B 75, 073305 , 2007; **4.** B.L. Galaghar, P.N. Butcher, in: P.T. Landsberg (Ed.), Handbook on Semiconductors, Vol. 1, Elsevier, Amsterdam, 1992, p. 817. **5.** Chihiro Hamaguchi (2017), Basic Semiconductor Physics, 3rd edition,Springer, Switzerland; **6.** Transport properties of a GaAs/InGaAs/GaAS quantum well: Temperature, Magnetic field and Many-body Effects, Communications in Physics, Vol.30, No.2 (2020), pp. 123-132**; 7.** T. Kawamura and S. Das Sarma, Phys. Rev. B 45, 3612 (1992); **8.** Nguyen Quoc Khanh and Vo Van Tai, Superlatt. Microstruct. 100, 792 (2016).