ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Trần Thị Hải

NGHIÊN CỨU MỘT SỐ CƠ CHẾ TÁN XẠ ẢNH HƯỞNG ĐẾN THỜI GIAN SỐNG VẬN CHUYỂN VÀ THỜI GIAN SỐNG LƯỢNG TỬ TRONG CÁC HỆ HAI CHIỀU

Chuyên ngành: Vật Lý Lý thuyết và Vật Lý toán
Mã số: 62 44 01 01

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Hà Nội – 2010

Công trình được hoàn thành tại: Bộ môn Vật lý lý thuyết-Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên - Đại học Quốc Gia Hà Nội.

Người hướng dẫn khoa học:

1. PGS. TS Nguyễn Huyền Tụng
2. GS. TS Nguyễn Quang Báu

Phản biện 1: GS. TS. Vũ Văn Hùng

Phản biện 2: GS. TS. Nguyễn Toàn Thắng

Phản biện 3: PGS. TS. Nguyễn Đình Dũng

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng cấp nhà nước chấm luận án tiến sĩ họp tại Đại học Khoa học Tự Nhiên-Đại học Quốc Gia Hà Nội.

vào hồi 15 giờ 00 ngày 23 tháng 11 năm 2010.

Có thể tìm hiểu luận án tại:

Thư viện Quốc gia Việt Nam

Trung tâm Thông tin - Thư viện, Đại học Quốc gia Hà Nội

MỞ ĐẦU

Như đã biết, độ linh động được xác định bằng công thức:

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} \tag{1.2}$$

với m* là khối lượng hiệu dụng**, τ là thời gian sống vận chuyển** của điện tử. Công thức (1.2) cho thấy việc một trong các biện pháp nâng cao độ linh động là tìm cách kéo dài thời gian sống. Trong nhiều bài toán của hiện tượng vận chuyển, vấn đề trung tâm chuyển sang các bài toán nghiên cứu thời gian sống và kết luận về hai đại lượng trên trong nhiều trường hợp là đồng nhất.

Thời gian sống vận chuyển và thời gian lượng tử là hai tham số quan trọng thường được sử dụng để đặc 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. Người ta 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 tải và lượng tử cũng như là tỉ số của chúng (Dingle ratio). 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 các thông tin bằng các hiện tượng lượng tử là lĩnh vực nghiên cứu nóng bỏng của các nhà khoa học trên toàn thế giới. 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.

Các nội dung cơ bản sẽ được tập trung nghiên cứu và giải quyết trong luận án bao gồm:

1. Luận án nghiên cứu ảnh hưởng của các cơ chế tán xạ cũng như của các hiệu ứng chắn lên thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử. Trong một thời gian dài tỉ số Dingle $D = \tau_t / \tau_s$ được sử dụng như một tiêu chí xác định cơ chế tán xạ nào đóng vai trò chính trong thời gian sống vận chuyển (và độ linh động) của hạt tải. Các nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết gần đây đã chỉ ra sự không chính xác của kết luận trên.
2. Ảnh hưởng của cơ chế giam hãm khi tính đến hiện tượng uốn cong vùng năng lượng lên thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử. Xác định các cơ chế tán xạ cơ bản ảnh hưởng lên các thời gian sống của hạt tải trong giếng thế vuông góc ở nhiệt độ thấp.
3. Khả năng nâng cao độ linh động của các hạt tải trong linh kiện bán dẫn bằng cách tác động lên thế giam hãm và hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng.
4. Nghiên cứu tỉ số của các thời gian sống của hạt tải trong giếng thế vuông góc ở nhiệt độ thấp, ở đó tán xạ trên độ nhám bề mặt đóng vai trò quyết định. Từ tỉ số của các thời gian sống, xác định các tham số đặc trưng cho phẩm chất của bề mặt vật liệu đó là các tham số Δ và Λ.

Các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm gần đây 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 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… Trong luận án của mình, tác giả sử dụng phát triển mô hình uốn cong vùng năng lượng do pha tạp điều biến đối xứng nhằm tìm ra cơ

chế có thể nâng cao độ linh động của các hạt tải trong giếng lượng tử. Để đạt mục đích nói trên, người ta cần xác định được các cơ chế tán xạ chủ yếu tác động lên tính chất vận chuyển của hạt tải và tìm cách làm yếu đi các ảnh hưởng này. Với mục đích đó cần phải biết được sự phụ thuộc của độ linh động vào các điều kiện thực nghiệm như: nhiệt độ, mật độ hạt tải và độ rộng của giếng lượng tử.

Như đã biết, ở nhiệt độ thấp, độ nhám bề mặt và thế biến dạng là những cơ chế tán xạ chủ đạo trong tiếp xúc dị tính, đặc biệt là trong các giếng lượng tử hẹp. Những kết quả gần đây cho thấy rằng pha tạp bất đối xứng (pha tạp một phía) các giếng lượng tử vuông góc dẫn đến sự biến đổi bất đối xứng hàm bao. Phân bố các hạt tải cũng trở nên bất đối xứng và bị dồn về phía pha tạp. Điều này là mạnh thêm các tán xạ của hạt tải trên độ nhám bề mặt và thế biến dạng làm cho độ linh động giảm đi đáng kể. Bởi vậy chúng tôi đề xuất khả năng làm tăng độ linh động thông qua việc giảm bớt sự bất đối xứng của hàm bao nhờ ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng gây bởi pha tạp đối xứng hoặc trường ngoài.

Nghiên cứu và giải quyết vấn đề được đề cập đến ở trên, về mặt khoa học, chúng ta có thể hiểu sâu hơn bản chất các hiện tượng được thực nghiệm phát hiện nhưng đến nay vẫn chưa có giải thích lý thuyết. Về mặt ứng dụng, các kết quả nghiên cứu sẽ trực tiếp góp phần giải quyết bài toán cấp bách: Làm thế nào để nâng độ linh động của hạt tải trong vật liệu?

Để nâng cao độ linh động của hệ hạt tải hai chiều trong các giếng lượng tử cần tác động lên các yếu tố quyết định nó như: cấu trúc điện tử, các cơ chế tán xạ và các nguồn giam hãm. Những nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm gần đây cho thấy ảnh hưởng của pha tạp lên cơ chế giam hãm có tác động rất lớn lên độ linh động của cấu trúc dị tính.

Từ trước đến nay với giả thiết cấu trúc vùng phẳng người ta nhận được kết quả là độ linh động bị hạn chế bởi độ nhám bề mặt phụ thuộc độ rộng giếng L theo qui luật $\mu \sim L^6$. Gần đây, một số thực nghiệm cho thấy sự phụ thuộc μ vào L không đơn điệu (có cực đại) và là vấn đề cho đến nay chưa có lý thuyết giải thích thỏa đáng.

Với mẫu vùng năng lượng bị uốn cong các vấn đề được đề cập và giải quyết trong luận án là mô hình vật lý hiện thực phản ánh những vấn đề cấp bách cần được giải quyết trong lý thuyết các hệ bán dẫn thấp chiều có cấu trúc nano.

Hoàn toàn có thể hy vọng rằng lý thuyết mà chúng tôi phát triển sẽ là giải thích lý thuyết cho một số hiện tượng được thực nghiệm phát hiện chưa có lời giải, ví dụ như: Pha tạp 2 phía một giếng lượng tử sẽ làm tăng độ linh động của hạt tải so với pha tạp một phía của giếng trong cùng điều kiện. Giải quyết vấn đề này đồng nghĩa với việc đề xuất một phương pháp làm tăng độ linh động của vật liệu.

Để thực hiện luận án này chúng tôi sử dụng phương pháp biến phân: tìm được nghiệm biến phân của hệ phương trình Schrodinger-Poisson cho hạt tải trong giếng lượng tử vuông góc bằng việc xây dựng một hệ thống các công cụ toán học phù hợp. Đây là điều mà nhiều tác giả trước đó phải dừng lại do sự quá phức tạp của qúa trình tính toán.

Chương 1:

CÁC CƠ CHẾ TÁN XẠ CƠ BẢN ẢNH HƯỞNG ĐẾN THỜI GIAN HỒI PHỤC CỦA HẠT TẢI.

1.1. Các khái niệm ban đầu.

Thời gian sống vận chuyển τ_t (hay thời gian sống cổ điển, thời gian hồi phục động lượng, thời gian tán xạ vận chuyển) được định nghĩa là khoảng thời gian trung bình giữa hai lần tán xạ liên tiếp khi hạt tải di chuyển định hướng dưới tác dụng của điện trường. Thời gian sống vận chuyển liên quan đến độ linh động Hall.

Thời gian sống lượng tử τ_q (hay còn gọi là thời gian tán xạ lượng tử), được định nghĩa là thời gian tồn tại một trạng thái xung lượng bền của hạt tải (điện tử, lỗ trống). Thời gian sống lượng tử liên quan đến sự mở rộng mức Landau trong từ trường và nó được rút ra từ hiệu ứng Shubnikov-de Haas.

1.2. Các cơ chế tán xạ.

Đối với khí điện tử hai chiều ở nhiệt độ thấp, các hạt có năng lượng xấp xỉ bằng năng lượng Fermi mới tham gia trực tiếp quá trình dẫn điện vì chúng có khả năng lớn nhất để nhận năng lượng từ trường ngoài và chuyển lên mức cao hơn. Tuy nhiên hạt tải chuyển động được xem không chỉ đơn thuần như là một chất điểm mà phải là một bó sóng có kích thước hữu hạn. Vì vậy hạt tải chịu ảnh hưởng bởi các nguồn tán xạ khác nhau, tương ứng với các trường thế tán xạ tác động lên độ linh động của hạt tải. Việc chỉ ra đầy đủ các cơ chế tán xạ sẽ xác định chính xác độ linh động, tức là độ dẫn điện của các vật liệu. Trong luận án này chúng tôi xét đến các cơ chế tán xạ sau đây:

1.2.1. Độ nhám bề mặt (SR).

Ngày nay người ta sử dụng công nghệ epitaxy bằng chùm phân tử - một công nghệ phổ biến nhất để tạo ra các cấu trúc với phân bố thành phần tuỳ ý và với độ chính xác tới từng lớp đơn nguyên tử riêng lẻ. Tuy nhiên, độ gồ ghề của bề mặt tiếp xúc là không thể loại trừ hoàn toàn. Cho nên chuyển động của điện tử hay lỗ trống không thể tránh khỏi ảnh hưởng của địa hình bề mặt tiếp xúc.

Ở bề mặt tiếp xúc giữa giếng và rào thế ngoài độ nhám còn có thể tồn tại ứng gây ra bởi sự không phù hợp về hằng số mạng và loại mạng tinh thể của hai lớp vật liệu bán dẫn. Với bất kỳ giếng lượng tử nào (dù có ứng suất hay không), độ nhám bề mặt sẽ làm thay đổi vị trí rào thế một cách ngẫu nhiên và tạo ra một trường thế tán xạ đối với chuyển động của khí điện tử hay lỗ trống. Độ nhám bề mặt trong trường hợp có tồn tại ứng suất sẽ gây ra hai cơ chế tán xạ mới, đó là thế biến dạng khớp sai và thế áp điện.

1.2.2. Thế biến dạng khớp sai (DP).

Khi ta ghép hai vật liệu có hằng số mạng khác nhau lại với nhau thì lớp vật liệu có hằng số mạng lớn hơn sẽ co lại, lớp vật liệu có hằng số mạng nhỏ hơn sẽ nống ra để đạt tới sự thống nhất chung về hằng số mạng tại mặt phân cách. Trong hệ sẽ có sự trao đổi năng lượng đàn hồi giữa hai bên, quá trình này sẽ dừng lại khi năng lượng đàn hồi đạt giá trị cực tiểu.

Hiện tượng này ảnh hưởng lên chuyển động của các hạt tải bị giam cầm theo phương z, nhưng chuyển động trong mặt phẳng (x, y) ở gần với bề mặt phân cách, như là một thế tán xạ mới với tên gọi là thế tán xạ khớp sai.

1.2.3. Không trật tự hợp kim bán dẫn (AD).

Thế tán xạ gây bởi sự không trật tự hợp kim sinh ra do ta ghép các vật liệu khác nhau với các mức độ pha tạp khác nhau để tạo thành giếng lượng tử. Tán xạ do sự không trật tự hợp kim bán dẫn sẽ mạnh nếu như cả khí hạt tải và khối bán dẫn định xứ trong cùng một không gian.

1.2.4. Tạp chất bị ion hóa (RI)

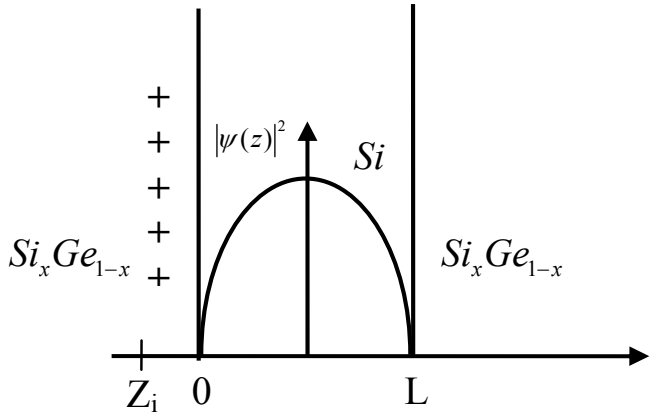
Ta đã biết trong quá trình nuôi tinh thể, môi trường bị nhiễm bẩn làm xuất hiện các tâm tạp phân bố ngẫu nhiên trong mẫu đóng vai trò là nguồn tán xạ lên khí điện tử hai chiều. Va chạm của hạt tải và tâm tán xạ có thể là va chạm đàn hồi hoặc không đàn hồi. Va chạm là đàn hồi khi động năng của các hạt tham gia được bảo toàn. Nếu động năng của các hạt sau khi va chạm lớn hơn hoặc nhỏ hơn trước khi va chạm thì va chạm là không đàn hồi. Các tâm tán xạ (tạp ion hóa) thường không định xứ trong mặt phẳng màng mỏng mà ở một khoảng cách nào đó đến màng mỏng. Trong các cấu trúc pha tạp có chủ ý các ion tạp chất bị loại bỏ một cách có chủ định khỏi mặt phẳng của khí điện tử. Đây chính là phương pháp làm giảm ảnh hưởng của tán xạ gây bởi các ion tạp chất.

Chương 2

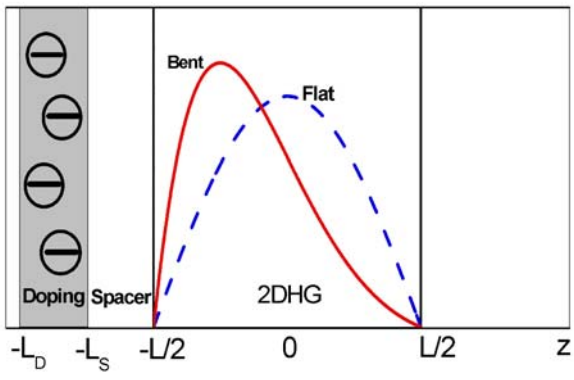
HIỆN TƯỢNG VẬN CHUYỂN CỦA HẠT TẢI TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ PHA TẠP MỘT PHÍA

2.1. Giếng lượng tử vuông góc.

Ta biết rằng một trong những tham số quan trọng của chất bán dẫn là độ rộng vùng cấm. Bằng kỹ thuật epitaxy chúng ta có thể tạo ra các lớp tiếp xúc dị chất của hai bán dẫn với độ rộng vùng cấm khác nhau. Trong luận án này chúng tôi đặc biệt quan tâm đến mô hình giếng lượng tử, đó là cấu trúc một lớp mỏng chất bán dẫn này được đặt giữa hai chất bán dẫn khác, ví dụ SiGe/Ge/SiGe... Sự khác biệt giữa các cực tiểu vùng dẫn của hai chất bán dẫn tạo nên một giếng thế năng đối với điện tử. Các hạt tải điện nằm trong mỗi lớp chất bán dẫn này không thể xuyên qua mặt phân cách để đi đến lớp bán dẫn bên cạnh. Như vậy trong cấu trúc này các hạt tải điện bị định xứ mạnh, chúng cách li lẫn nhau trong các cấu trúc giếng lượng tử hai chiều.



Hình 2.2 Mô hình giếng lượng tử vuông góc



Hình 2.3 Mô hình giếng lượng tử vuông góc pha tạp một phía

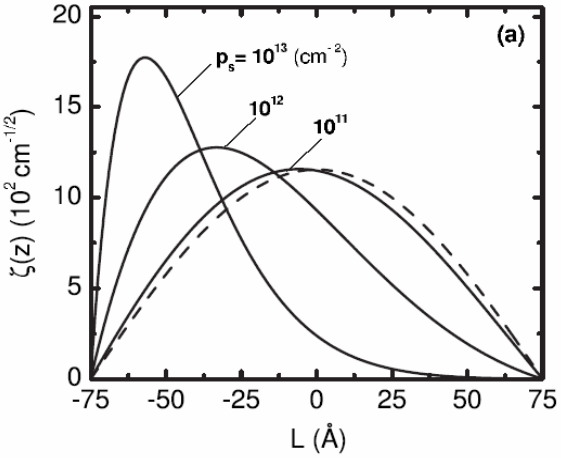
Với mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía như trên, sẽ dẫn tới hiệu ứng uốn cong vùng làm cho sự phân bố của hạt tải có dạng bất đối xứng: Tăng về phía có pha tạp ($z < 0$), giảm về phía không có pha tạp ($z > 0$). Vì vậy,

đối với giếng lượng tử có chiều cao rào thế là vô hạn, chúng tôi đưa ra hàm sóng bao ở trạng thái cơ bản có dạng như sau:

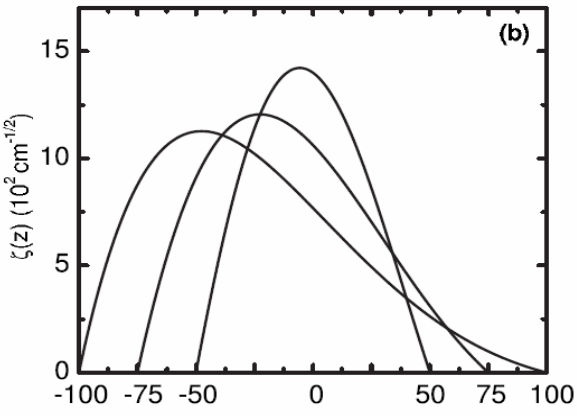
$$\zeta(z)=\begin{cases} B\sqrt{\pi / L}\cos\left(\pi z / L\right)e^{-cz/L} & \text{khi } |z|\le L/2 \\ 0 & \text{khi } |z|>L/2, \end{cases} \tag{2.7}$$

với L là bề rộng của kênh dẫn

B, c là các tham số biến phân.



Hình 2.5(a) Đồ thị của hàm sóng với L=150Å, $p_s = 10^{11}, 10^{12}, 10^{13} cm^{-2}$



Hình 2.5(b) Đồ thị của hàm sóng với $p_s = 5.10^{11} cm^{-2}, L = 100,150,300 Å$

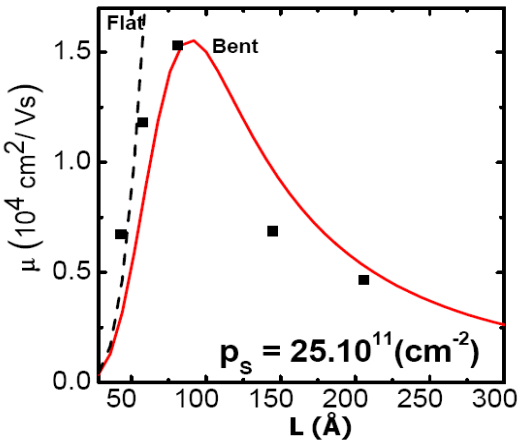
Quan sát hình 2.5(a) và 2.5(b) ta thấy rằng dưới ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng, hình dạng của hàm sóng biểu thị sự phân bố của các lỗ trống trong giếng có sự thay đổi đáng kể, không còn đối xứng như trong mô hình flat-band mà nó tăng về phía có pha tạp và giảm về phía không có pha tạp. Sự thay đổi này phụ thuộc vào mức pha tạp và bề rộng kênh dẫn.

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

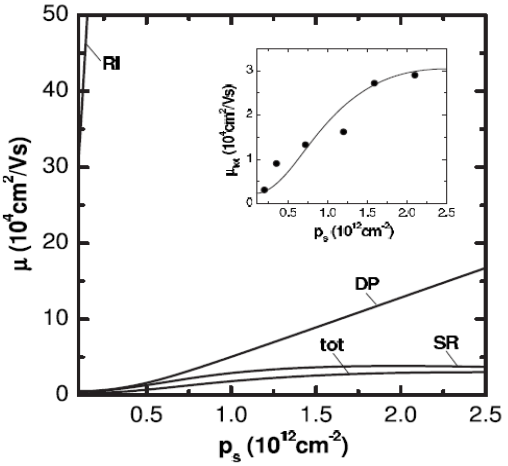
$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_{RI}} + \frac{1}{\tau_{SR}^{tot}} + \frac{1}{\tau_{DP}^{tot}} \tag{2.25}$$

2.2. Kết quả tính toán thời gian sống và độ linh động của hạt tải trong mô hình pha tạp một phía.

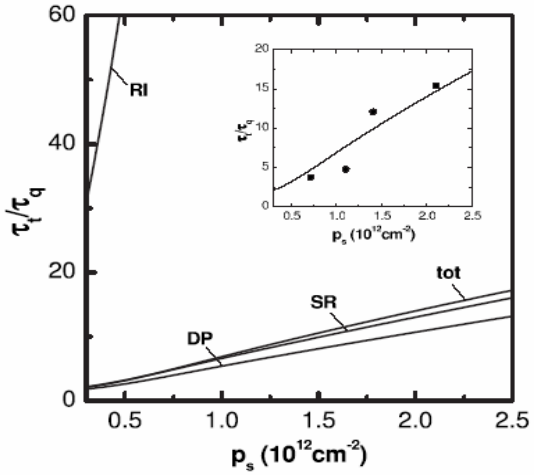
Trong chương hai chúng tôi đã đưa ra lí thuyết về hiện tượng vận chuyển của khí lỗ trống trong giếng lượng tử pha tạp điều biến SiGe/Ge/SiGe ở nhiệt độ thấp. Ngoài các cơ chế tán xạ truyền thống như: độ nhám bề mặt hay tạp xa, lí thuyết còn bao gồm cả tán xạ do thế biến dạng khớp sai.



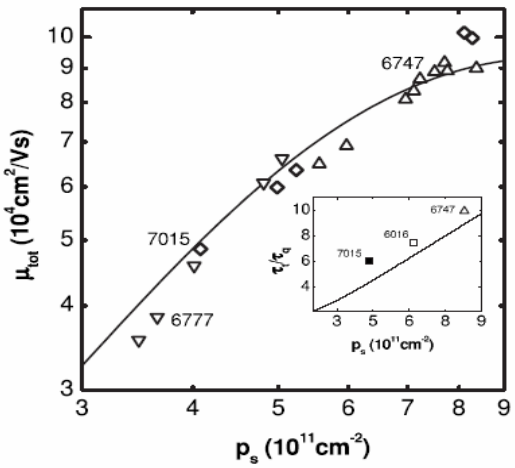
Hình 2.7 Độ linh động tổng cộng trong hai mô hình flat-band và bent-band



Hình 2.9 Độ linh động trong giếng lượng tử $Si_{0.3}Ge_{0.7}$/Ge/ $Si_{0.3}Ge_{0.7}$ pha tạp một phía.



Hình 2.10 Tỉ số τ_t / τ_q phụ thuộc vào nồng độ hạt tải p_s. So sánh với thực nghiệm Irisawa et al. Appl. Phys. Lett. **82**, 1425 (2003).



Hình 2.11 Độ linh động tổng cộng và tỉ số τ_t / τ_q trong giếng lượng tử pha tạp một phía $Si_{0.3}Ge_{0.7}$/Ge/ $Si_{0.3}Ge_{0.7}$. So sánh với thực nghiệm Rössneret et al. Thin Solid Films **508**, 351 (2006).

Chúng tôi đã chứng minh rằng, dưới ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng tán xạ do độ nhám bề mặt và thế biến dạng khớp sai là tán xạ chủ đạo. Lý thuyết của chúng tôi đã giải thích được các thực nghiệm về đặc tính quan trọng của hiện tượng vận chuyển, cụ thể là sự phụ thuộc của độ linh động và tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử vào nồng độ hạt tải. Hơn nữa, những nghiên cứu về độ linh động của hạt tải trong giếng lượng tử SiGe/Ge/SiGe đã đưa đến một kết quả quan trọng đó là có tồn tại một cực đại rõ nét của độ linh động phụ thuộc vào độ rộng kênh dẫn, mà lí thuyết của chúng tôi đã đưa ra một kết qủa giải thích thỏa đáng (hình 2.7 và 2.9).

Các hình 2.7, 2.9 và 2.10 cho thấy tán xạ do độ nhám bề mặt (SR) là nguồn tán xạ chủ đạo, còn tán xạ do tạp chất bị ion hóa (RI) không đóng vai trò là nguồn gây ra tán xạ. Hơn nữa, tán xạ do độ nhám bề mặt giữ vai trò ưu thế đối với độ linh động của khí lỗ trống hai chiều trong tất cả các giá trị của mật độ hạt tải và độ rộng kênh dẫn, trong khi cơ chế tán xạ do thế biến dạng khớp sai (DP) chỉ giữ vai trò quan trọng đối với trường hợp mật độ hạt tải thấp và kênh dẫn hẹp.

Các hình 2.10 và 2.11 đã mô tả tốt với thực nghiệm về hiện tượng vận chuyển của khí lỗ trống với kênh dẫn Ge trong giếng lượng tử vuông góc pha tạp một phía. Lý thuyết của chúng tôi đã giải thích thành công một số thực nghiệm về sự phụ thuộc của độ linh động (hình 2.10) và tỉ số giữa thời gian sống vận chuyển và thời gian sống lượng tử (hình 2.11) vào nồng độ hạt tải và độ rộng kênh dẫn. Lý thuyết cũng đã giải thích thành công sự tồn tại một cực đại rõ nét của độ linh động phụ thuộc vào độ rộng kênh dẫn, mà nguồn gốc sâu xa của cực đại này chính là ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng do pha tạp.

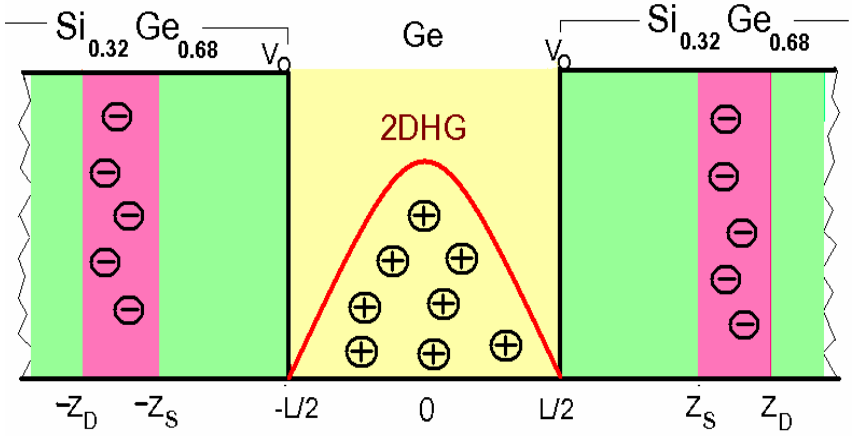
Chương 3

HIỆN TƯỢNG VẬN CHUYỂN CỦA HẠT TẢI TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ PHA TẠP ĐỐI XỨNG HAI PHÍA

Các kênh dẫn với độ linh động cao là một trong những vấn đề thách thức của vật lý bán dẫn hiện đại và có tầm quan trọng lớn đối với việc ứng dụng các thiết bị, máy móc. Để nâng cao phẩm chất của các linh kiện (tức là tăng độ dẫn điện $\sigma = en\mu$), không những phải tăng mật độ hạt tải n mà còn phải tăng độ linh động của hạt tải μ. Độ linh động lớn sẽ giúp giảm toả nhiệt và cho phép chúng ta chế tạo những linh kiện có tốc độ chuyển mạch nhanh. Vậy vấn đề sống còn của vật lý bán dẫn là phải tìm cách nâng cao được độ linh động.

3.1. Mô hình giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía.

Chương ba đưa ra lý thuyết nghiên cứu ảnh hưởng của pha tạp điều biến đối xứng hàm sóng lên quá trình vận chuyển lượng tử trong giếng lượng tử vuông góc. Mô hình của giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai bên:



Đối với giếng lượng tử có chiều cao rào thế là vô hạn, chúng tôi đưa ra hàm sóng bao ở trạng thái cơ bản có dạng như sau:

$$\zeta(z)=\begin{cases}2B\sqrt{\dfrac{\pi}{L}}\cos(\dfrac{\pi z}{L})\cosh(\dfrac{cz}{L}) & \text{khi } |z|\le\dfrac{L}{2}\\ 0 & \text{khi } |z|>\dfrac{L}{2}\end{cases} \qquad (3.1)$$

Bằng việc sử dụng phương pháp biến phân, luận án đã đưa ra được biểu thức giải tích về sự phân bố của hạt tải và tán xạ của chúng trong giếng lượng tử vuông góc pha tạp điều biến đối xứng. Trong đó, tán xạ gây bởi độ nhám bề mặt và thế biến dạng khớp sai là nhỏ hơn so với mô hình pha tạp điều biến bất đối xứng. Điều này đã chứng tỏ được rằng việc điều biến đối xứng hàm sóng là một phương pháp hiệu qủa để nâng cao độ linh động của hạt tải trong giếng lượng tử. Từ đó, trạng thái tối ưu đối của độ dẫn điện được thiết lập. Lý thuyết của chúng tôi đã thành công trong việc giải thích các các thí nghiệm gần đây về tính chất vận chuyển, phải kể đến là sự phụ thuộc của độ linh động vào độ rộng kênh dẫn.

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 vận chuyển được biểu diễn qua hàm tự tương quan:

$$\frac{1}{\tau}=\frac{1}{(2\pi)^2\hbar E_F}\int_0^{2k_F}dq\int_0^{2\pi}d\varphi\frac{q^2}{(4k_F^2-q^2)^{1/2}}\frac{\left\langle|U(q)|^2\right\rangle}{\varepsilon^2(q)} \qquad (3.22)$$

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

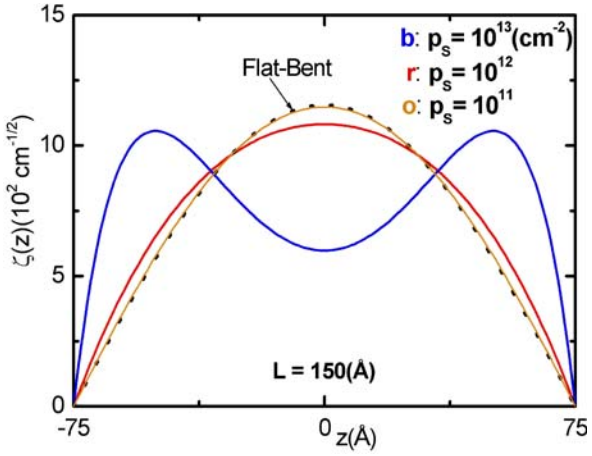
$$\frac{1}{\tau_{tot}}=\frac{2}{\tau_{RI}}+\frac{2}{\tau_{SR}}+\frac{2}{\tau_{DP}} \qquad (3.31)$$

Ở đây, hệ số 2 xuất hiện do có hai lớp pha tạp và hai mặt nhám.

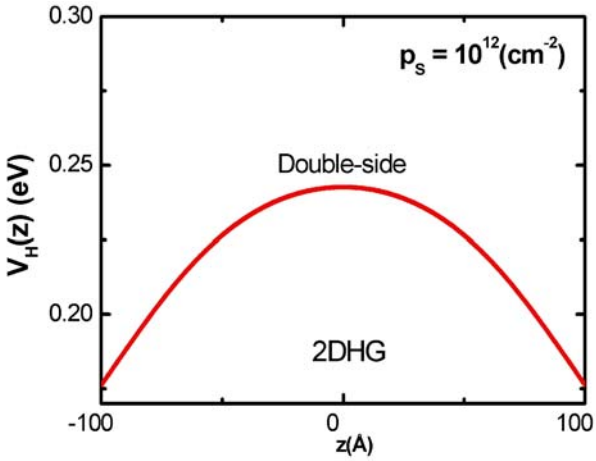
3.2 Ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng từ sự pha tạp chọn lọc hai phía lên tính chất điện trong giếng lượng tử.

3.2.1. Sự phân bố hạt tải trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai phía.

Trong mô hình flat-band hàm sóng có dạng đối xứng và không phụ thuộc vào nồng độ hạt tải trong giếng. Tại nồng độ hạt tải nhỏ cỡ $10^{11}cm^{-2}$ hàm sóng flat-band và bent-band gần như trùng nhau. Khi ta tăng nồng độ hạt tải p_s, hàm sóng trong pha tạp 2 bên biến dạng nhưng vẫn có dạng đối xứng. Tiếp tục tăng p_s, hàm sóng biến dạng mạnh mẽ hơn, các hạt tải có xu hướng dồn về 2 phía nhiều hơn. (Hình 3.3)



Hình 3.3. Hàm sóng $\zeta(z)$ trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai bên với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải p_s.

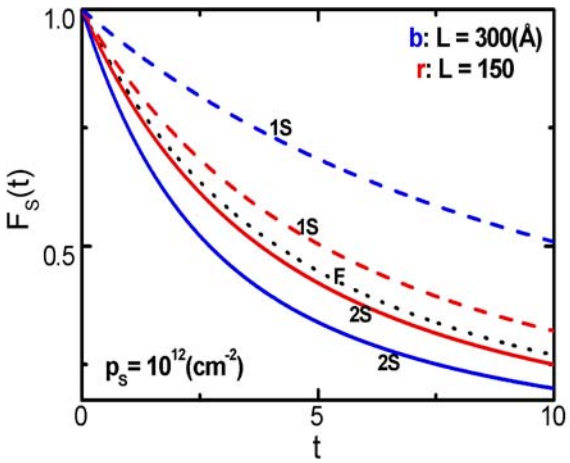


Hình 3.4. Thế Hartree trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai bên

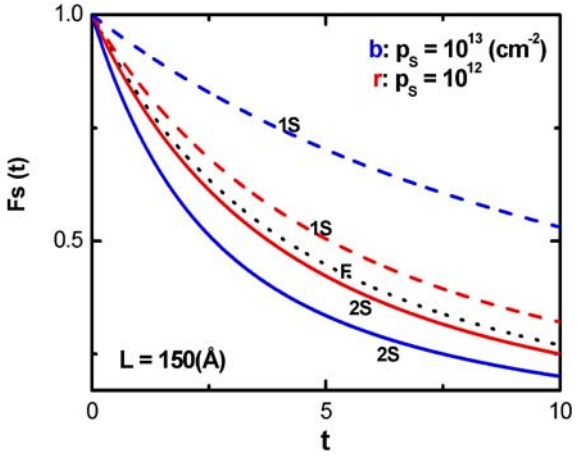
Dưới ảnh hưởng của hiệu ứng band bending, do các nguồn giam cầm có mặt trong hệ gây ra, làm cho thế Hartree biến đổi. Hình 3.4 do pha tạp đối xứng 2 bên, nên thế Hartree bị uốn cong ở cả 2 bên thành giếng và có dạng đối xứng, giống như 2 giếng lượng tử tam giác móc nối với nhau.

3.2.2. Thừa số dạng chắn

Hiệu ứng uốn cong vùng (band bending) ảnh hưởng lên tính chất điện trong Qws còn thể hiện ở thừa số dạng chắn.



Hình 3.6(a)



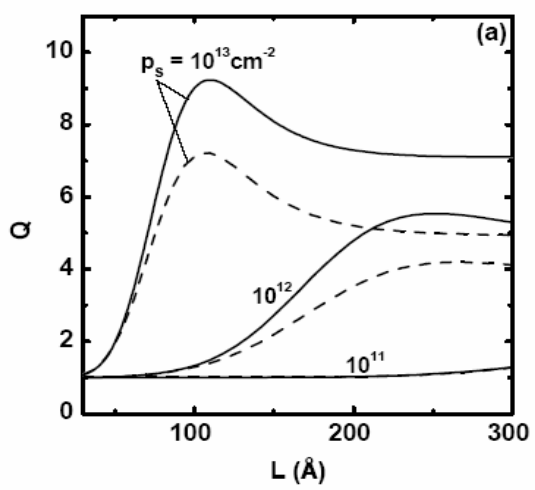
Hình 3.6(b)

Hình 3.6(a) Thừa số dạng chắn trong cả ba mô hình: flat-band, pha tạp một phía, pha tạp đối xứng hai phía (đường liền nét) với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử L. Hình 3.6(b) Thừa số dạng chắn trong cả ba mô hình: flat-band (đường chấm), pha tạp một phía (đường đứt nét), pha tạp đối xứng hai phía (đường liền nét) với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải p_s.

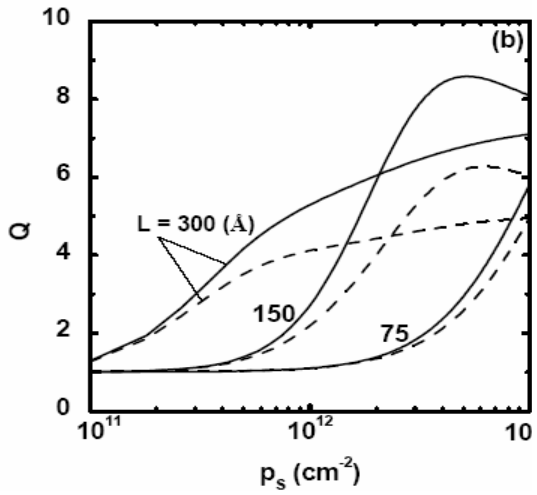
3.2.3 Khả năng nâng cao độ linh động của hạt tải bằng pha tạp đối xứng.

Để đánh giá khả năng nâng cao độ linh động của trường hợp pha tạp đối xứng hai bên, luận án đã đưa ra một đại lượng gọi là hệ số nâng cao độ linh động Q: là tỉ số độ linh động giữa trường hợp pha tạp hai phía μ_{tot}^{sym} và pha tạp một phía μ_{tot}^{asym} với cùng nồng độ hạt tải và dạng bề mặt.

$$Q^{(L,P_s,\Lambda)} = \frac{\mu_{tot}^{sym}(L, p_s; \Delta, \Lambda)}{\mu_{tot}^{asym}(L, p_s; \Delta, \Lambda)} \qquad (3.49)$$



Hình 3.7

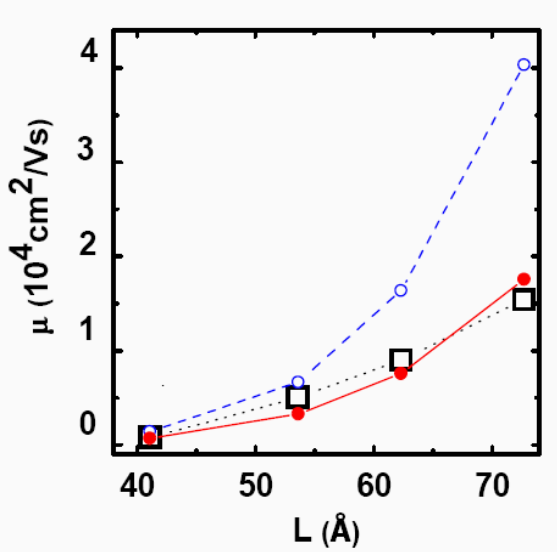


Hình 3.11

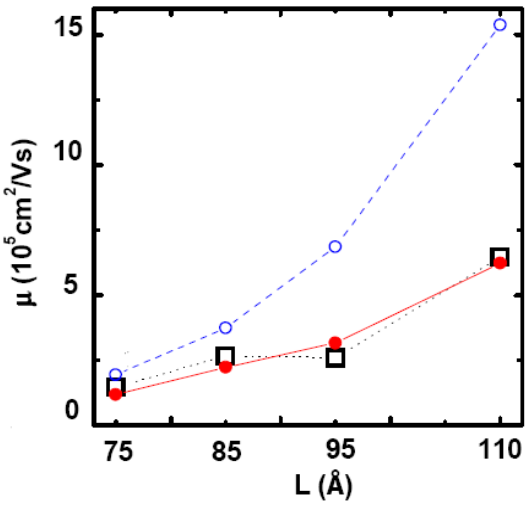
Hình 3.7. Hệ số nâng cao độ linh động Q phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L. Với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải $p_s = 10^{11}, 10^{12}, 10^{13} cm^{-2}$ trong hai trường hợp, $\Lambda = 10\,\text{Å}$ (đường liền nét), $\Lambda = 100\,\text{Å}$ (đường đứt nét). Ta nhận thấy, khi ta tăng nồng độ hạt tải hệ số nâng cao độ linh động Q tăng lên.

Hình 3.11. Hệ số nâng cao độ linh động Q phụ thuộc vào nồng độ hạt tải p_s với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử, trong hai trường hợp, $\Lambda = 10\,\text{Å}$ (đường liền nét), $\Lambda = 100\,\text{Å}$ (đường đứt nét). Ta nhận thấy, khi tăng bề rộng giếng lượng tử L thì hệ số nâng cao độ linh động Q tăng lên.

Quan sát các hình 3.7 và 3.11 ta thấy hệ số nâng cao độ linh động $Q \approx 10$. Như vậy pha tạp điều biến đối xứng hai phía đã mở ra một triển vọng đó là nâng cao độ linh động lên gấp nhiều lần so với pha tạp một phía. Trong khi đó, với các phương pháp điều biến trước đây chỉ có thể làm tăng độ linh động lên gấp đôi: $Q \leq 2$.



Hình 3.9



Hình 3.10

Hình 3.9 Độ linh động tổng cộng của khí điện tử hai chiều trong giếng lượng tử GaSb/GaAs/GaSb pha tạp điều biến đối xứng, phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L với các tham số nhám bề mặt $\Delta = 3.2$ Å, $\Lambda = 15$ Å. Các điểm tròn đen, tròn rỗng và vuông rỗng tương ứng với giá trị độ linh động trong mô hình bent-band, flat-band và điểm thực nghiệm trong công trình (Szmulowicz et al. Appl. Phys. Lett. 69, 2554 (1996)).

Hình 3.10 Độ linh động tổng cộng của khí điện tử hai chiều trong giếng lượng tử $Al_{0.3}Ga_{0.7}Al/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}Al$ pha tạp điều biến đối xứng, phụ thuộc vào bề rộng giếng lượng tử L với các tham số: $\Delta = 2$ Å, $\Lambda = 15$ Å. Các điểm tròn đen, tròn rỗng và vuông rỗng tương ứng với giá trị độ linh động trong mô hình bent-band, flat-band và điểm thực nghiệm trong công trình (Campman et al. J. Appl. Phys. 101, 04706 (2007)). Như vậy, lý thuyết mà tác giả xây dựng đã giải thích thành công các kết quả thực nghiệm về sự phụ thuộc của độ linh động vào bề rộng kênh dẫn trong giếng lượng tử pha tạp đối xứng hai bên.

Chương 4

XÁC ĐỊNH ĐỘC LẬP CÁC THAM SỐ BỀ MẶT Λ VÀ Δ

4.1 Vai trò của Λ và Δ trong lý thuyết và thực nghiệm.

Độ nhám của bề mặt được xem như xác định bởi biên độ các gồ ghề (Δ) và với chu kỳ tương ứng Λ (độ dài tương quan), chúng phụ thuộc điều kiện công nghệ tạo mẫu cụ thể và bản chất của các vật liệu.

Mặc dù sự gồ ghề trên mặt phân cách là ngẫu nhiên nhưng giữa chúng luôn có mối liên hệ, giữa chỗ lõm và chỗ lồi. Sự gồ ghề ở nơi này sẽ có liên quan đến sự gồ ghề ở xung quanh, nhưng sự ảnh hưởng đó cũng chỉ diễn ra trong một khoảng không gian nhất định, nếu xa quá thì coi như độ nhám giữa các điểm đó không có liên hệ gì với nhau.

Độ nhám bề mặt được xác định bởi sự phân bố của nhám trong mặt phẳng (x, y). Nó được xác định bởi hai tham số: biên độ nhám Δ và độ dài tương quan Λ. Với phương pháp luận như trên, dạng bề mặt nhám trong không gian véctơ sóng của hệ hai chiều được xác định như sau:

$$\left\langle \left|\Delta_{\bar{q}}\right|^2 \right\rangle = \pi\Delta^2\Lambda^2 F_R\left(q\Lambda\right) \qquad (4.1)$$

4.2 Những khó khăn của các lý thuyết có trước về việc xác định Λ và Δ một cách độc lập.

Từ (4.1) ta nhận thấy, Δ xuất hiện dưới dạng đơn giản như một hệ số tỉ lệ, vì vậy có thể cố định nó đối với mỗi độ dài tán xạ, trong khi Λ xuất hiện không chỉ trong tích $\Lambda\Delta$ mà còn trong hệ số $F_R\left(q\Lambda\right)$, vì vậy phải cố định cả độ dài và góc của tán xạ. $F_R\left(q\Lambda\right)$. Vì vậy trong lý thuyết về ảnh hưởng của nhám người ta phải chấp nhận Λ và Δ như một tham số đầu vào. Việc xác định Λ và Δ riêng lẻ là vô cùng quan trọng để kiểm tra sự thay đổi của nhám và tìm cơ chế tán xạ chủ đạo.

4.3 Thời gian hồi phục của hạt tải phụ thuộc vào độ dài tương quan Λ dưới ảnh hưởng của các cơ chế tán xạ.

Thời gian sống được xác định bởi giá trị cục bộ của hàm sóng tại hai bên thành giếng $\zeta_{\mp} = \zeta\left(z = \mp L/2\right)$ có dạng:

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{4m^*}{\hbar^3}\left(\Delta\Lambda V_0 \,|\, \zeta_{\mp}\,|^2\right)^4 J_r(L, p_S; \Lambda),\ (r = t, q) \qquad (4.2)$$

Với V_0 là chiều cao rào thế, $J_r(L, p_S; \Lambda)$ là tích phân tán xạ xác định bởi thời gian sống vận chuyển:

$$J_t(L, p_S; \Lambda) = \int_0^1 du \frac{u^2}{\sqrt{1-u^2}} \frac{F_R(u)}{\varepsilon^2(u)} \qquad (4.3)$$

và thời gian sống lượng tử:

$$J_q(L, p_S; \Lambda) = \int_0^1 du \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \frac{F_R(u)}{\varepsilon^2(u)}. \qquad (4.4)$$

ở đây, các tham số mà tích phân $J_r(L, p_S; \Lambda)$ phụ thuộc đã được chỉ rõ, đó là: độ rộng giếng lượng tử L, nồng độ hạt tải p_s và độ dài tương quan Λ. Biến tích phân u chính là xung lượng truyền với đơn vị $2k_F$, k_F là số sóng Fermi. Hàm điện môi $\varepsilon(u)$ xác định bởi chắn hai chiều.

4.4 Phương pháp xác định độc lập Λ và Δ.

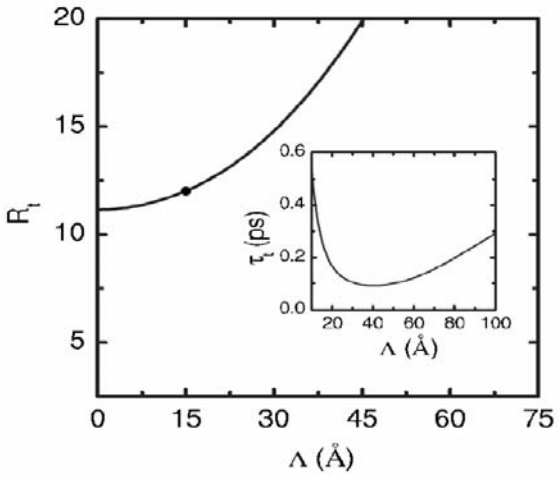
Thay vì nghiên cứu đại lượng thời gian sống riêng lẻ ta xét tỉ số các thời gian sống khác nhau phụ thuộc vào cùng một tham số Λ v*à* Δ. Giản ước Δ khỏi tỉ số, khi đó $R_r(\Lambda)$ chỉ còn phụ thuộc vào Λ (r = t, q). Tỉ số của thời gian sống vận chuyển và lượng tử lúc này gọi là tỉ số Dingle được xác định qua giá trị của bề rộng giếng lượng tử L và nồng độ hạt tải p_s.

Từ các phương trình 4.2 đến 4.6 ta thấy thời gian sống hồi phục cũng như tỉ số giữa chúng phụ thuộc vào hàm sóng. Vì vậy, tỉ số thời gian được xác

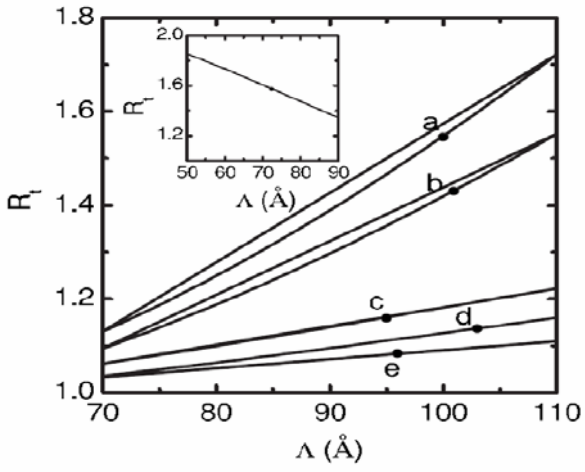
định bởi mô hình giam hãm. Nếu biết chiều cao rào thế và nguồn band-bending, thì tỉ số này được xác định như là hàm của các độ dài tương quan trong giếng. Hay nói một cách khác các giá trị này được suy ra từ sự phụ thuộc của thời gian sống vào mật độ hạt tải và bề rộng của giếng. Vì vậy, ta cần phải tách đại lượng Λ từ đường cong $R_r(\Lambda)$ vẽ theo Λ. Sau khi cố đinh Λ ta cần phải định lượng giá trị của Δ bằng cách thay vào một thời gian sống nào đó. Kết quả là ta có thể tách riêng giá trị của hai tham số nhám bề mặt.

$$R_q(\Lambda) = \frac{\tau_t(L, p_S; \Lambda)}{\tau_q(L, p_S; \Lambda)} = \frac{J_t(L, p_S; \Lambda)}{J_q(L, p_S; \Lambda)} \tag{4.5}$$

$$R_t(\Lambda) = \frac{\tau_t(L, p_S; \Lambda)}{\tau_t(L', p'_S; \Lambda)} = \frac{J_t(L, p_S; \Lambda)}{J_t(L', p'_S; \Lambda)} \tag{4.6}$$



Hình 4.2 Tỉ số thời gian sống vận chuyển phụ thuộc vào độ dài tương quan Λ trong giếng lượng tử GaSb/ InAs/ GaSb.



Hình 4.3 tỉ số thời gian sống vận chuyển phụ thuộc vào độ dài tương quan Λ trong mô hình trong giếng lượng tử AlAs/ GaAs/ AlAs.

Áp dụng phương pháp trên để tìm các tham số nhám bề mặt qua một số thực nghiệm. Xét hệ khí điện tử hai chiều trong giếng lượng tử GaSb/ InAs/ GaSb (hình 4.2) mà tán xạ nhám bề mặt là cơ chế tán xạ chủ đạo và có dạng Gaussian trong mô hình flat-band.

Từ kết quả thực nghiệm trong công trình của nhóm F. Szmulowicz et al. Appl. Phys. Lett. 69, 2554 (1996) chúng ta suy ra kết quả về tỉ số của thời gian sống vận chuyển trong hình 4.2 với các giá trị khác nhau của bề rộng giếng lượng tử và nồng độ hạt tải:

$L = 41.1\text{Å}, p_s = 0.9.10^{12} cm^{-2}$ và $L' = 62.3\,\text{Å}, p'_s = 1.6.10^{12} cm^{-2}$.

Từ tỉ số giữa chúng ta xác định được $R_t(\Lambda) = 12$ và suy ra $\Lambda = 15\,\text{Å}$, giá trị này rất gần với giá trị $\Lambda = 14\,\text{Å}$ trong F. Szmulowicz et al. Appl. Phys. Lett. 69, 2554 (1996).

Cũng từ thực nghiệm có trong Noda et al. Appl. Phys. Lett. 57, 1651 (1990), tác giả cũng tính được tỉ số thời gian vận chuyển trong trong (hình 4.3) với bề rộng của giếng bằng nhau L =L'=65Å, nhưng nồng độ khí điện tử p_s khác nhau (đơn vị 10^{11}cm^{-2}).

$(p_s, p'_s) = (39.5, 23.5), (36.5, 23.5), (39.5, 33.7), (33.7, 29.4), (39.5, 36.5)$

tương ứng với các đường a, b, c, d, e. Từ đó xác định được tỉ số $R_t(\Lambda) = 1.55, 1.43, 1.16, 1.14, 1.08$, và các giá trị của Λ tương ứng sẽ là $\Lambda = 100, 100.5, 95, 103, 96\,\text{Å}$. Giá trị trung bình của chúng là 98.9Å xung quanh giá trị 100 Å được sử dụng trong thực nghiệm của nhóm Noda et al. Appl. Phys. Lett. 57, 1651 (1990).

Quan sát hình (4.2), (4.3) ta thấy, tỉ số thời gian sống vân chuyển chỉ phụ thuộc vào độ dài tương quan Λ, trong khi trong biểu thức thời

gian sống lại phụ thuộc vào cả hai đại lượng của tham số nhám bề mặt (như đã chỉ ra trong hình (4.2).

Hình (4.3) đã chỉ ra một số thực nghiệm có thể xác định được độ dài tương quan Λ . Giá trị trung bình của các điểm thực nghiệm này khi tìm Λ sai khác so với giá trị chính xác <10%. Như vậy giá trị này có thể mô tả tốt với thực nghiệm.

Lý thuyết của chúng tôi có thể áp dụng để thiết lập tỉ số của bất kỳ thời gian sống nào khác nhau về tham số và giam cầm lượng tử, nhưng giới hạn bởi độ nhám bề mặt. Ưu việt của phương pháp này là có thể thiết lập tỉ số thời gian sống vận chuyển mà không cần đo bằng dao động Shubnikov-de Hass. Hơn nữa ta có thể thay tỉ số các thời gian sống bằng tỉ số độ linh động, và do đó có thể dễ dàng giản ước được thành phần khối lượng hiệu dụng m^* .

KẾT LUẬN

Trong luận án, chúng tôi trình bày các kết quả nhận được khi nghiên cứu lý thuyết về hiện tượng vận chuyển trong mô hình giếng lượng tử bán dẫn vuông góc hai chiều pha tạp đối xứng và bất đối xứng cho các hệ Si/SiGe và GaAs/ GaAsAl ở nhiệt độ thấp với nhiều cơ chế tán xạ và giam hãm khác nhau, những kết quả chính thu được trong luận án bao gồm :

1. Đã chứng minh được : Cơ chế giam hãm đóng một vai trò quan trọng trong các hiện tượng vận chuyển.

2. Nhận được biểu thức giải tích về sự phụ thuộc của thời gian sống vào độ rộng giếng L bằng việc xây dựng các công cụ toán thích hợp. Ảnh hưởng của sự biến thiên độ rộng giếng lên hiệu ứng chắn hai chiều cũng được khảo sát và nhận được biểu thức định lượng.

3. Các nghiên cứu của chúng tôi cho thấy pha tạp điều biến đối xứng và bất đối xứng làm vùng năng lượng bị uốn cong, ảnh hưởng lên cơ chế giam hãm. Sự uốn cong vùng năng lượng làm thay đổi phân bố hạt tải trong giếng lượng tử, điều này làm thay đổi tính chất điện của vật liệu.

4. Phân tích các kết quả nhận được từ mô hình lý thuyết và các kết thực nghiệm tương tự cho thấy pha tạp đối xứng làm cho phân bố hệ hạt tải có tính đối xứng và cách xa mặt tiếp giáp tạo thành hai thành giếng. Độ linh động của hạt tải được nâng lên, phù hợp với kết quả thực nghiệm.

5. Nghiên cứu đồng thời hai mô hình pha tạp đối xứng và bất đối xứng, chúng tôi đề xuất hệ số phẩm chất Q là tỉ số độ linh động giữa hai mô hình. Nghiên cứu sự phụ thuộc Q (L, p_s) ta có thể xác định được các tham số cần thiết (tối ưu) để nâng cao động linh động bằng pha tạp đối xứng.

6. Trong luận án này chúng tôi đề xuất một phương pháp hoàn toàn mới cho phép xác định độc lập các tham số phẩm chất bề mặt Δ và Λ.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ CỦA TÁC GIẢ

[1] Tran Thi Hai, Nguyen Trung Hong, Nguyen Huyen Tung, Đoan Nhat Quang (2010), "Theory of the channel-width dependence of the low-temperature hole mobility in double-side doped square quantum wells", Communication in Physics, Vol. 20, No.4 (2010), pp. 319-324.

[2] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Le Tuan, Nguyen Trung Hong, and Tran Thi Hai (2010), "Two-side doping effects on the mobility of carriers in square quantum wells". To be published in Journal of Applied physics.

[3] Nguyen Quang Bau, Tran Thi Hai (2010), "Effect of electron-phonon coupling on the mobilities of carriers confined in a single-side doped square quantum well". To be published in Journal of Science, VNU.

[4] Tran Thi Hai, Nguyen Trung Hong, Nguyen Huyen Tung, Đoan Nhat Quang (2010), "Mobility enhancement in square quantum wells: Symmetric modulation of the envelop wave function", Communication in Physics, Vol. 20, No.3 (2010), pp. 193-200.

[5] Tran Thi Hai, Nguyen Trung Hong, Nguyen Huyen Tung (2010), Report "Effect from doping of quantum wells on enhancement of the mobility limited by one-interface roughness scattering", The 34th National conference on theoretical physics (Tp Ho Chi Minh, 2-6/8/2010).

[6] Doan Nhat Quang, Nguyen Huyen Tung, Le Tuan, Nguyen Trung Hong, and Tran Thi Hai (2009), "Correlation-length dependence of lifetime ratios: Individual estimation of interface profile parameters", Applied Physics Letters, 94, 072106.

[7] Tran Thi Hai, Nguyen Trung Hong, Nguyen Huyen Tung, Đoan Nhat Quang (2009), "Band-bending effects from double-side selective doping on the electronic properties of QWs", Communication in Physics, Vol. 19, No.3, pp. 167-173.

[8] 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.

[9] Nguyen Quang Bau, Nguyen Vu Nhan, Luong Van Tung, Tran Thi Hai (2006), Report "Parametric transformation coefficient of acoustic and optical phonons in cylindrical quantum wires with parabol potential", The 31th National conference on theretical physics (Cua Lo, Nghe An, 3-7/8/2006).