

Các tính chất vận chuyển và hệ số Seebeck của khí điện tử giả hai chiều trong giếng lượng tử AlP

• **Võ Văn Tài**

Trường CĐ Bán công Công nghệ & QTDN HCM

• **Nguyễn Quốc Khánh**

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 04 tháng 12 năm 2014, nhận đăng ngày 23 tháng 09 năm 2015)

TÓM TẮT

Chúng tôi khảo sát độ linh động của khí điện tử giả hai chiều trong giếng lượng tử AlP có độ suy biến valley $g_v = 1$ ứng với bề rộng $L < L_c = 45.7\text{\AA}$ và độ suy biến valley $g_v = 2$ ứng với bề rộng $L > L_c = 45.7\text{\AA}$. Với nhiệt độ thấp, chúng tôi tính độ linh động như một hàm theo mật độ điện tử cho tán xạ

bề mặt nhám và tạp chất với hiệu chỉnh trường cục bộ Hubbard. Chúng tôi khảo sát điện trở theo nhiệt độ hữu hạn và từ trường song song. Chúng tôi cũng tính hệ số Seebeck cho từng cơ chế tán xạ và cơ chế tổng theo mật độ điện tử, bề rộng giếng lượng tử.

Từ khóa: giếng lượng tử AlP; độ linh động; điện trở suất; hệ số Seebeck

MỞ ĐẦU

Trong nhiều thập niên gần đây do yêu cầu của công nghệ điện tử, việc tìm kiếm các vật liệu bán dẫn, đặc biệt là bán dẫn cấu trúc lớp có độ linh động cao, nhận được sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu [1-7]. Biết rằng độ linh động được quyết định bởi các cơ chế tán xạ của hạt tải như tán xạ tạp chất ion hóa, bề mặt nhám, mất trật tự hợp kim, phonon vv...[8-11]. Tùy thuộc vào vật liệu, cấu trúc, nhiệt độ, độ pha tạp... mà tầm quan trọng của từng cơ chế tán xạ có thể thay đổi. Để xác định cơ chế tán xạ ảnh hưởng chủ yếu đến độ linh động người ta đã thực hiện các thí nghiệm ở các điều kiện khác nhau. Gần đây, người ta còn sử dụng từ trường để nghiên cứu các cơ chế tán xạ. Sự có mặt của từ trường cũng gây nên các hiệu ứng vật lý mới và cho chúng ta các khả năng ứng dụng trong tương lai [12-15].

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung nghiên cứu các tính chất vận chuyển (độ linh động và điện trở) và hệ số Seebeck của hệ điện tử trong giếng lượng tử GaP/AlP/GaP (khảo sát bề mặt của AlP theo hướng (001)) [16]. Vì cực tiểu năng lượng nằm tại điểm X của vùng Brillouin nên năng lượng có độ suy biến bội ba. Do sự biến dạng hai trục (st) nằm trong lớp AlP, nên xuất hiện sự tách năng lượng cực tiểu thành một mức bội hai và một mức đơn. Mức bội hai có năng lượng thấp hơn mức đơn. Sự biến dạng này dẫn đến tách năng lượng, $\Delta E_{st} = 40\text{meV}$, thành hai vùng, một vùng với $g_v = 2$ (g_v là độ suy biến valley), và một vùng với $g_v = 1$. Hai vùng được đặt trung qua các khối lượng hiệu dụng khác nhau, khối lượng của hạt dẫn m_z (khối lượng giam giữ) theo hướng z , và khối lượng m^* (khối lượng vận chuyển) theo hướng (xy).

PHƯƠNG PHÁP

Mô hình giếng lượng tử

Chúng tôi xét hệ các điện tử có thể chuyển động hoàn toàn tự do trong mặt phẳng (xy), nhưng chuyển động của chúng theo phương z bị giới hạn. Hệ như thế tạo thành hệ điện tử giả hai chiều. Khi kích thước của vật rắn giảm xuống vào cỡ nanomet thì hạt tải điện tự do trong cấu trúc này sẽ thể hiện tính chất giống như một hạt chuyển động trong giếng thế $V(z)$. Để đơn giản, có thể giả sử $V(z)$ có dạng giếng thế sâu vô hạn (Hình 1):

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq z \leq L \\ \infty, & z < 0 \vee z > L \end{cases}$$

Hình 1. Giếng lượng tử GaP/AlP/GaP

Các điện tử tự do chuyển động trong giếng lượng tử ($0 \leq z \leq L$) có hàm sóng và năng lượng tương ứng là:

$$\psi_{n_z}(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right), & 0 \leq z \leq L \\ 0, & z < 0 \vee z > L \end{cases} \quad (n_z = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\varepsilon_{n_z} = \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_z L^2}, \quad (n_z = 1, 2, 3, \dots)$$

Khối lượng dọc $m_l = 0,9m_e$ và khối lượng ngang $m_t = 0,3m_e$ trong AlP đã được xác định trong thực nghiệm [17]. Điều này có nghĩa rằng, với vật liệu phát triển theo hướng (001) và bề rộng giếng lượng tử $L < L_c$, thì khối lượng vận chuyển $m^* = 0,3m_e$ trong khi đó khối lượng theo hướng z là $m_z = 0,9m_e$. Đối với các giếng lượng tử có bề rộng $L > L_c$, thì sẽ có $m^* = 0,52m_e = \sqrt{m_l m_t}$ và $m_z = 0,3m_e$ [17]. Với các thông số này, độ dài tới hạn được xác định qua $L_c = \sqrt{[(m_l - m_t)/(2m_l m_t)](\pi^2 \hbar^2 / \Delta E_{st})} = 45,7 \text{ \AA}$.

Hiện nay, sự phát triển các giếng lượng tử có bề rộng trong khoảng $20 \text{ \AA} \leq L \leq 150 \text{ \AA}$ với mật độ điện tử $N < 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ám chỉ rằng các giếng lượng tử với $L < L_c$ và $L > L_c$ có thể được khảo sát bằng thực nghiệm.

Lý thuyết

Thời gian hồi phục

Sử dụng gần đúng nhiễu loạn cấp một, có thể nhận được công thức sau cho thời gian vận chuyển [18-20],

$$\frac{1}{\tau_t} = \frac{1}{2\pi\hbar E_F} \int_0^{2k_F} \frac{\langle |U(q)|^2 \rangle}{[\epsilon(q)]^2} \frac{q^2 dq}{\sqrt{4k_F^2 - q^2}} \quad (1)$$

với $E_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m^*)$.

Trong gần đúng pha ngẫu nhiên (RPA), hàm điện môi được dẫn ra như sau:

Tại $T = 0$:

$$\epsilon(q) = 1 + V(q)[1 - G(q)]\Pi^0(q) \quad (2)$$

Tại $T \neq 0$:

$$\epsilon(q) = 1 + V(q)[1 - G(q)]\Pi(q, T) \quad (3)$$

Trong gần đúng Hubbard (chỉ tính đến tương tác trao đổi) đối với hệ có xét đến phân cực spin,

$$G_H(q) = \frac{1}{g_s g_v} \frac{q}{\sqrt{q^2 + k_F^2}}$$

với g_s và g_v là hệ số phân cực spin và suy biến valley [21-22]. $V(q)$ (là ảnh Fourier của các tương tác điện tử - điện tử):

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_L} \frac{1}{q} F_C(q)$$

Thừa số cấu trúc $F_C(q)$ phụ thuộc vào tương tác giữa hai điện tử dọc theo phương z , được xác định qua biểu thức

$$F_C(q) = \frac{1}{4\pi^2 + L^2 q^2} \left(3Lq + \frac{8\pi^2}{Lq} - \frac{32\pi^4}{L^2 q^2} \frac{1 - e^{-Lq}}{4\pi^2 + L^2 q^2} \right)$$

$\langle |U(q)|^2 \rangle$ mô tả thế tương tác phụ thuộc vào từng cơ chế tán xạ. Xét 2 cơ chế tán xạ sau: tán

xạ lên bề mặt nhám và tán xạ tạp chất ion hóa pha tạp xa.

Tán xạ lên bề mặt nhám

Cơ chế tán xạ thứ nhất mà chúng ta khảo sát là tán xạ bề mặt nhám (interface roughness scattering-IRS) theo ý tưởng của Prange và Nee [23]. Độ nhám tại biên của giếng thế lượng tử được đặc trưng bởi chiều cao Δ và chiều dài Λ của các thăng giáng tựa Gauss. Chúng tôi giả thiết rằng độ nhám tại $z=0$ và $z=L$ có thể được đặc trưng bởi cùng các thông số và không có giao thoa giữa hai mặt phân cách. Vì vậy, thế ngẫu nhiên được diễn đạt như sau:

$$\langle |U_{IRS}(q)|^2 \rangle = 2 \left(\frac{4\pi}{L^2} \right) \left(\frac{m^*}{m_z} \right)^2 \left(\frac{\pi}{k_F a} \right)^4 (\varepsilon_F \Delta \Lambda)^2 e^{-q^2 \Lambda^2 / 4} \quad (4)$$

Pha tạp xa

Tán xạ tạp chất xa (remote impurity scattering-RIS) (pha tạp có chủ ý): để hệ dẫn điện ta phải pha tạp nhằm cung cấp điện tử cho hệ, pha tạp chất cách khí điện tử một khoảng đệm. Giả sử rằng, mật độ của lớp chất cho (donor) hai chiều N_i được phân bố trên mặt phẳng tại z_i so với biên của giếng lượng tử. Thế ngẫu nhiên $U_{RIS}(q)$ theo số sóng q có dạng như sau:

$$\langle |U_{RIS}(q)|^2 \rangle = N_i \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_L} \frac{1}{q} \right)^2 F_R(q, z_i)^2 \quad (5)$$

trong đó F_R được gọi là thừa số cấu trúc cho lớp tạp chất hai chiều tại mặt phẳng $z = z_i$

$$F_R(q, z_i) = \frac{8\pi^2}{Lq} \frac{1}{4\pi^2 + L^2 q^2} \begin{cases} \frac{1}{2} e^{iq_i} (1 - e^{-Lq}), & z_i < 0 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-iq_i} - \frac{1}{2} e^{-q(L-z_i)} + \frac{L^2 q^2}{2\pi^2} \sin^2 \left(\frac{\pi z_i}{a} \right), & 0 \leq z_i \leq L \\ \frac{1}{2} e^{-q(L-z_i)} (1 - e^{-Lq}), & z_i > L \end{cases}$$

Hệ số Seebeck

Hệ số Seebeck cho khí điện tử suy biến được dẫn ra qua công thức Mott [24]

$$S^d = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \left[\frac{d}{dE} \ln \sigma(E) \right]_{E=E_F} \quad (6)$$

trong đó e là độ lớn của điện tích, k_B là hằng số Boltzmann. $\sigma(E)$ là độ dẫn điện tại năng lượng E và được dẫn ra như sau

$$\sigma(E) = \frac{N(E) e^2 \tau(E)}{m^*} \quad (7)$$

Giả sử thời gian hồi phục phụ thuộc vào năng lượng $\tau(E) \propto E^p$ [25] với tham số tán xạ

$$p = \left[\frac{E_F}{\tau(E_F)} \right] \left[\frac{d\tau(E)}{dE} \right]_{E=E_F} \quad (8)$$

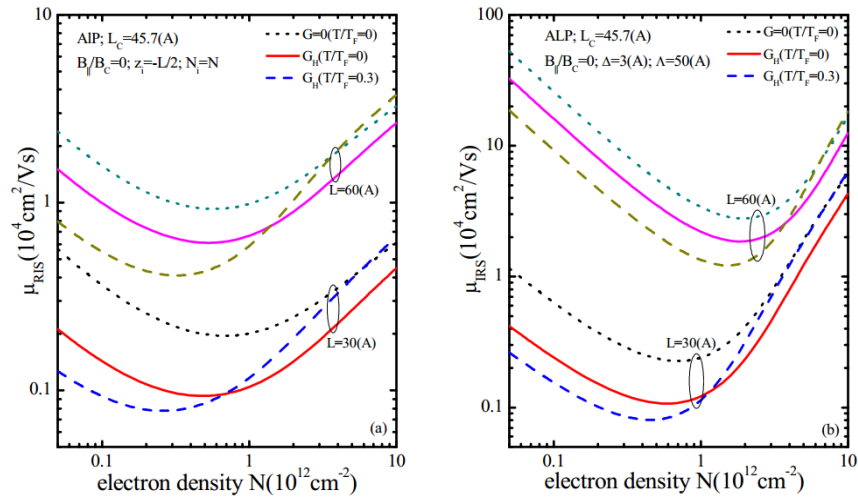
thì phương trình (6) được viết lại như sau

$$S^d = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e E_F} (p + 1) \quad (9)$$

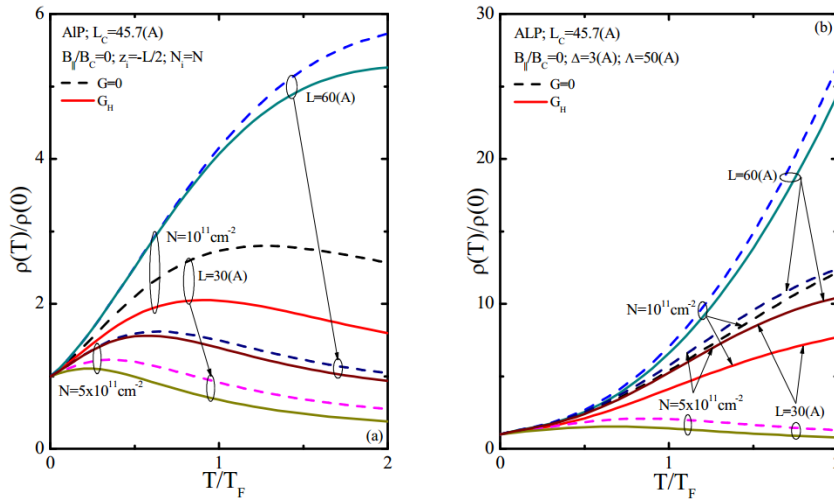
KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Các hằng số sử dụng: với $L < L_C$ thì $g_v = 1$; $m^* = 0,3m_e$; $m_z = 0,3m_e$, và với $L > L_C$ thì $g_v = 2$; $m^* = 0,52m_e$; $m_z = 0,3m_e$, hằng số điện môi $\varepsilon_L = 9,8$.

Hình 2 trình bày độ linh động theo mật độ điện tử cho cơ chế tán xạ RIS và IRS. Chúng tôi đưa bổ chính trường định xứ và nhiệt độ vào trong tính toán. Trong Hình 2A, tại mật độ thấp thì $\mu_{RIS} \propto 1/N$ với $N_i = N$, với mật độ cao $F_R^2 \propto e^{-k_F L}$ và độ linh động phụ thuộc vào bề rộng của giếng thế. Với $\mu_{RIS} \propto e^{k_F L} / N$, chúng ta thấy rằng nhân tố $e^{k_F L}$ làm tăng độ linh động và chiếm ưu thế hơn so với $1/N$. Tại $N = g_v / (2\pi L^2)$, μ_{RIS} đạt giá trị cực tiểu. Trong Hình 2B, tại mật độ thấp $\mu_{IRS} \propto 1/N$, với mật độ cao $\mu_{IRS} \propto N^{3/2}$. Nhận thấy ảnh hưởng của bổ chính trường định xứ lên độ linh động ở mật độ thấp, nên không thể bỏ qua tương quan tầm ngắn giữa các hạt.



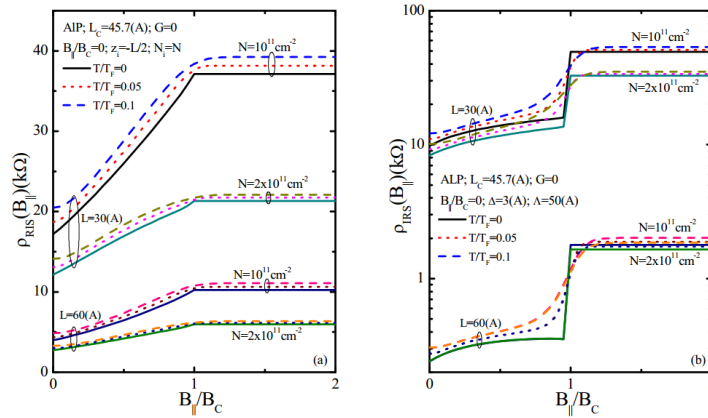
Hình 2. Độ linh động μ theo mật độ điện tử N cho (A) RIS và (B) IRS.



Hình 3. Tỷ số điện trở $\rho(T)/\rho(0)$ theo nhiệt độ trong gần đúng RPA và Hubbard cho (A) RIS và (B) IRS.

Trong Hình 3, chúng tôi thảo luận tỷ số điện trở $\rho(T)/\rho(0)$ theo nhiệt độ ứng với $L = 30 \text{ \AA} < L_c$ và $L = 60 \text{ \AA} > L_c$. Tỷ số $\rho(T)/\rho(0)$ lớn khi mật độ thấp và bề rộng giếng lượng tử

lớn. Trong Hình 3, lúc đầu tỷ số tăng theo nhiệt độ sau đó giảm khi nhiệt độ tăng và nó đi qua một cực đại tại nhiệt độ phụ thuộc vào mật độ, tức là $d\rho/dT$ thay đổi dấu tại cực đại.

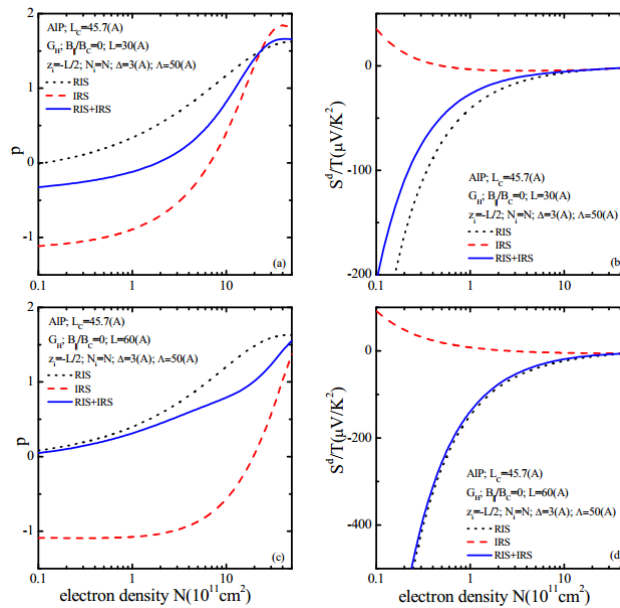


Hình 4. Điện trở $\rho(B_{||})$ theo từ trường song song trong gần đúng RPA và Hubbard cho (A) RIS và (B) IRS.

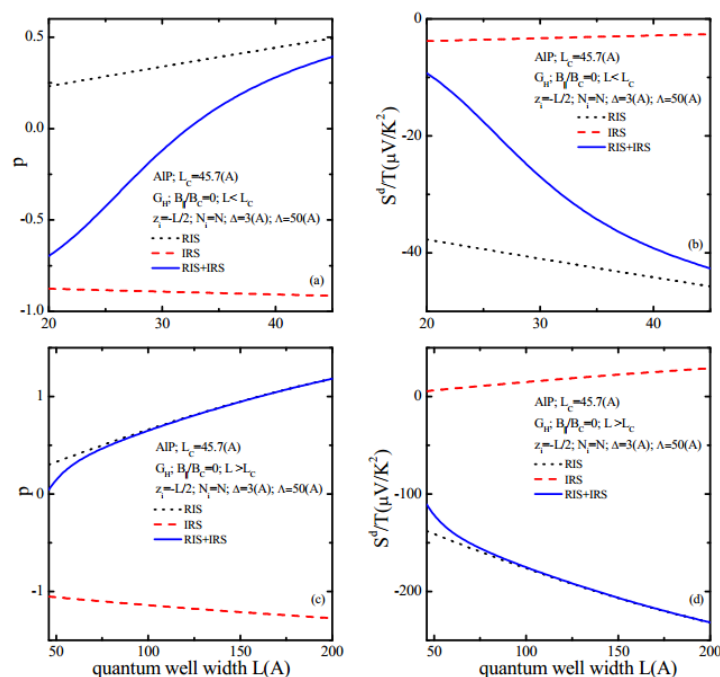
Trong Hình 4, chúng tôi tính điện trở $\rho(B_{||})$ theo từ trường song song với mật phân cách ứng với mật độ, bề rộng giếng lượng tử và nhiệt độ khác nhau trong gần đúng RPA ($G=0$). Trong Hình 4A tính cho cơ chế tán xạ RIS, chúng tôi nhận thấy rằng khi $B_{||}$ tăng thì điện trở tăng và khi $B_{||} \approx B_C$ thì điện trở (xét trong nhiệt độ thấp) gần như không thay đổi. Với bề rộng giếng lượng tử hẹp thì điện trở phụ thuộc vào mật độ điện tử lớn hơn so với bề rộng giếng lượng tử lớn. Trong Hình 4B tính cho cơ chế tán xạ IRS, chúng tôi

nhận thấy rằng tại $B_{||} \approx B_C$ thì điện trở tăng nhanh do khi hệ phân cực hoàn toàn thì thời gian tán xạ giảm, dẫn đến độ linh động giảm vì vậy điện trở tăng.

Trong Hình 5A và 5B với bề rộng giếng lượng tử $L = 30(\text{\AA})$ và $N < 10^{12} \text{cm}^{-2}$ thì tán xạ tổng có sự đóng góp của cả hai cơ chế tán xạ. Nhưng với Hình 5C và 5D ứng với bề rộng giếng lượng tử $L = 60(\text{\AA})$, cơ chế tán xạ RIS chiếm ưu thế, phù hợp với các tính toán độ linh động trong bài báo [16].



Hình 5. Tham số tán xạ p và hệ số hệ số Seebeck không phụ thuộc vào nhiệt độ S^d/T tính theo mật độ điện tử với gần đúng Hubbard. (A, B) $L = 30(\text{\AA})$ và (C, D) $L = 60(\text{\AA})$.



Hình 6. Tham số tán xạ p và hệ số hệ số Seebeck không phụ thuộc vào nhiệt độ S^d/T tính theo bề rộng giếng lượng tử với gần đúng Hubbard và $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.
(A, B) $L < L_c$ và (C, D) $L > L_c$.

Trong Hình 6A, tham số tán xạ p được chỉ ra như một hàm theo bề rộng giếng $L < L_c$ tại $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ và chúng tôi nhận thấy rằng với $L < 30(\text{\AA})$ thì IRS chiếm ưu thế hơn so với RIS, nhưng với $L > 30(\text{\AA})$ thì RIS chiếm ưu thế hơn so với IRS. Hình 6B tính cho hệ số Seebeck không phụ thuộc nhiệt độ S^d/T theo $L < L_c$. Trong Hình 6C, tham số tán xạ p theo $L > L_c$ và tổng của cả hai cơ chế trùng với RIS.

KẾT LUẬN

Chúng tôi đã khảo sát độ linh động và điện trở của khí điện tử giả hai chiều trong giếng lượng tử GaP/AIP/GaP do các cơ chế tán xạ bề

mặt gồ ghề và tạp chất ion hóa. Chúng tôi nghiên cứu sự phụ thuộc của điện trở vào nhiệt độ và từ trường song song. Chúng tôi thấy rằng bổ chính trường định xứ trong gần đúng Hubbard mô tả độ linh động và điện trở của khí điện tử giả hai chiều ở mật độ hạt tải thấp tốt hơn gần đúng RPA. Chúng tôi cũng khảo sát hệ số Seebeck và nhận thấy rằng với bề rộng giếng lượng tử $L > 30(\text{\AA})$ thì cơ chế tán xạ tạp chất (RIS) chiếm ưu thế hơn so với tán xạ bề mặt nhám (IRS).

Lời cảm ơn: Công trình này được tài trợ bởi Quỹ phát triển Khoa học và Công nghệ quốc gia (NAFOSTED) trong khuôn khổ đề tài 103.01-2014.01.

Transport properties and seebeck coefficient of the quasi-two-dimensional electron gas in ALP quantum wells

• **Vo Van Tai**

College of Technology and Industrial Management

• **Nguyen Quoc Khanh**

University of Science VNU-HCM

ABSTRACT

We consider the mobility of a quasi-two-dimensional electron gas in a GaP/AlP/GaP quantum well with a valley degeneracy $g_v = 1$ for quantum well width $L < L_c = 45.7$ Å and a valley degeneracy of $g_v = 2$ for quantum well width $L > L_c = 45.7$ Å. We calculate the mobility as a function of electron density for interface-roughness and impurity scattering with using different

approximations for the local-field correction. In the case of zero temperature and Hubbard local-field correction our results reduce to those of [16]. We also study the dependence of resistivity on temperature and parallel magnetic field. The Seebeck coefficient as a function of electron concentration and quantum well width are also calculated.

Key words: quantum wells ALP; mobility; resistivity; Seebeck coefficient.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. N.Q. Khánh, Quá trình vận chuyển trong hệ hai chiều (Đề tài KHCN Cấp Đại học Quốc gia), Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM (2010).
- [2]. A. Gold, Electronic transport properties of a two-dimensional electron gas in a silicon quantum-well structure at low temperature, *Phys. Rev. B*, 35, 723-733 (1987).
- [3]. S. Madhavi, V. Venkataraman, J.C. Sturm, Y.H. Xie, Low-and high-field transport properties of modulation-doped Si/SiGe and Ge/SiGe heterostructures: Effect of phonon confinement in germanium quantum wells, *Phys. Rev. B*, 61, 16807-16818 (2000).
- [4]. A. Gold, V.T. Dolgoplov, Temperature dependence of the conductivity for the two-dimensional electron gas: Analytical results for low temperatures, *Phys. Rev B*, 33, 1076-1084 (1986).
- [5]. A. Gold, Scattering time and single-particle relaxation time in a disordered two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. B*, 38, 10798-10811 (1988).
- [6]. A. Gold, Temperature dependence of mobility in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures for impurity scattering, *Phys. Rev., B*, 41, 8537-8540 (1990).
- [7]. T. Ando, Self-consistent results for a $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ heterojunction. I. Subband structure and light-scattering spectra, *J. Phys. Soc. Japan*, 51, 3893-3899 (1982).
- [8]. C. Hamaguchi, *Basic semiconductor physics* (Springer, 2010).

- [9]. John H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors. an introduction* (Cambridge, 1998).
- [10]. F. Stern, Polarizability of a two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. Lett.*, 18, 546-547 (1967).
- [11]. T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern, Electronic properties of two-dimensional systems, *Rev. Mod. Phys.*, 54, 437-672 (1982).
- [12]. A. Gold, V.T. Dolgoplov, Resistivity of the spin-polarized two-dimensional electron gas: scaling and width effect, *Physica E*, 17, 280-283 (2003).
- [13]. S.D. Sarma, E.H. Hwang, Low-density spin-polarized transport in two-dimensional semiconductor structures: Temperature-dependent magnetoresistance of Si MOSFETs in an in-plane applied magnetic field, *Phys. Rev. B*, 72, 205303-205314 (2005).
- [14]. A.A. Shashkin, E.V. Deviatov, V.T. Dolgoplov, A.A. Kapustin, S. Anissimova, A. Venkatesan, S.V. Kravchenko, T.M. Klapwijk, Conductivity of a spin-polarized two-dimensional electron liquid in the ballistic regime, *Phys. Rev. B*, 73, 115420-115420 (2006).
- [15]. V.T. Dolgoplov, A. Gold, Magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in a parallel magnetic field, *JETP Letters*, 71, 27-30 (2000).
- [16]. A. Gold, R. Marty, Transport properties of the two-dimensional electron gas in AlP quantum wells at zero temperature, *Phys. Rev. B*, 76, 165309-165411 (2007).
- [17]. M.P. Semtsiv, S. Dressler, W.T. Masselink, V.V. Rylkov, J. Galibert, M. Goiran, J. Leotin, Symmetry of the conduction-band minimum in AlP-GaP quantum wells, *Phys. Rev. B*, 74, 041303(R)- 041303(R) (2006).
- [18]. N.Q. Khanh, Transport properties of a spin-polarized quasi-two-dimensional electron gas in an InP/In_{1-x}Ga_xAs/InP quantum well including temperature effects, *Physica E*, 43, 1712-1716 (2011).
- [19]. N.Q. Khanh, V.V. Tai, Transport properties of the two-dimensional electron gas in AlP quantum wells at finite temperature including magnetic field and exchange-correlation effects, *Physica E*, 58, 84-87 (2014).
- [20]. A. Gold, The local-field correction for the interacting electron gas: many-body effects for unpolarized and polarized electrons, *Z. Phys. B*, 103, 491-500 (1997).
- [21]. A. Gold, Mobility and metal-insulator transition of the two-dimensional electron gas in SiGe/Si/SiGe quantum wells, *Journal of Applied Physics*, 108, 063710-063715 (2010).
- [22]. A. Gold, Metal-insulator transition in Si/SiGe heterostructures: mobility, spin polarization and dingle temperature *Semicond. Sci. Technol.*, 26, 045017 (2011).
- [23]. R.E. Prange, T.W. Nee, Quantum Spectroscopy of the low-field oscillations in the surface impedance, *Phys. Rev.*, 168, 779-786 (1968).
- [24]. J.M. Ziman, *Principles of Theory of Solid*, Cambridge University Press, Cambridge, 1972.
- [25]. M.J. Smith, P.N. Butcher, Inelastic scattering and the temperature dependence of thermoelectric power in quasi-2D systems, *J. Phys.: Condens. Matter*, 1, 4859-4864 (1989).