

# NGHIÊN CỨU ĐỘ LINH ĐỘNG CỦA HẠT TẢI TRONG KÊNH DẪN GE PHA TẠP ĐIỀU BIẾN PHỤ THUỘC VÀO NHIỆT ĐỘ

Trần Thị Hải<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Thảo<sup>2</sup>, Nguyễn Thị Dung<sup>3</sup>, Nguyễn Thị Tú<sup>4</sup>

## TÓM TẮT

*Trong bài báo này chúng tôi tính toán sự phụ thuộc của độ linh động lỗ trống vào thành phần nhiệt độ trong cấu trúc kênh dẫn Ge pha tạp điều biến ở nhiệt độ cao. Trong vùng nhiệt độ này, chúng tôi đưa ra hàm tự tương quan cho sự phân bố của hạt tải và các cơ chế tán xạ của chúng. Chúng tôi đã xem xét các cơ chế tán xạ cơ bản, đặc biệt là tán xạ gây bởi phonon. Kết quả chỉ ra rằng, tán xạ gây bởi độ nhám bề mặt và phonon âm đóng vai trò quan trọng trong việc giới hạn độ linh động của hạt tải. Chúng tôi xác định độ linh động phụ thuộc vào nhiệt độ lên tới 300°K. Lý thuyết của chúng tôi có thể mô tả khá tốt thực nghiệm về hiện tượng vận chuyển của lỗ trống trong kênh Ge pha tạp điều biến trong khoảng nhiệt độ từ 50K đến 300°K.*

**Từ khóa:** Độ linh động, tán xạ phonon âm, pha tạp điều biến, kênh dẫn Ge.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các cấu trúc bán dẫn dị chất chứa Ge và SiGe ngày càng nhận được nhiều sự quan tâm nghiên cứu của các nhà khoa học trong nước và quốc tế vì tầm quan trọng của chúng trong việc ứng dụng các máy móc, thiết bị [1-5]. Các nghiên cứu về kênh dẫn Ge pha tạp điều biến ở nhiệt độ thấp cho thấy tán xạ do nhám bề mặt là cơ chế tán xạ cơ bản giới hạn độ linh động của hạt tải [4,6]. Ở nhiệt độ cao hơn 150K, tán xạ phonon âm và phonon quang có đóng góp quan trọng và là một trong những cơ chế tán xạ cơ bản giới hạn độ linh động của hạt tải [2,7].

Trong những năm gần đây một vài nhóm tác giả [4,5,8,9] đã đưa ra lý thuyết nghiên cứu về độ linh động của hạt tải giam cầm trong các cấu trúc giếng lượng tử pha tạp điều biến. Các tác giả này đã tính đến độ linh động phụ thuộc vào mật độ hạt tải và độ rộng kênh dẫn nhưng chưa tính đến độ linh động phụ thuộc vào nhiệt độ. Chính vì vậy, nhóm chúng tôi lựa chọn bài toán nghiên cứu và tính toán độ linh động của hạt tải trong kênh dẫn Ge ở nhiệt độ cao. Trong nghiên cứu trước đây [8], chúng tôi đã áp dụng mô hình lý thuyết cho mẫu kênh dẫn dị chất Ge pha tạp một phía. Các kết quả tính toán được so sánh với số liệu của nhóm Irisawa [3] với độ rộng kênh dẫn  $L = 7.5\text{nm}$ ,  $L_d = 10\text{nm}$ ,  $L_s = 20\text{nm}$ , lớp Ge được nuôi cấy ở nhiệt độ 350°C. Trong bài báo này, chúng tôi tiếp tục áp dụng phương pháp biến phân để mô tả giam cầm lượng tử trong

<sup>1,2,3</sup> Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

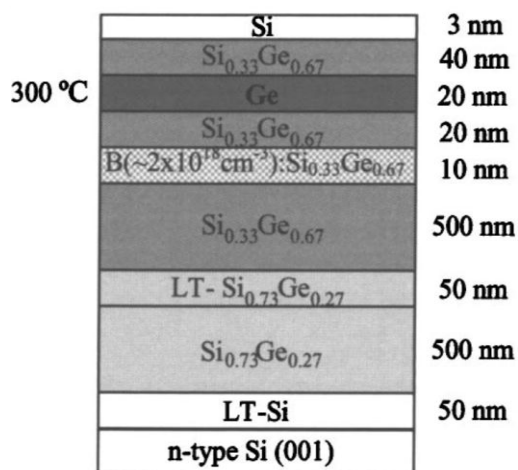
<sup>4</sup> Học viên cao học Khoa khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

cấu trúc kênh dẫn Ge pha tạp điều biến một phía. Kết quả được so sánh với thực nghiệm của nhóm Myronov [2] với độ rộng kênh dẫn  $L = 20\text{nm}$ ,  $L_d = 10\text{nm}$ ,  $L_s = 20\text{nm}$ , lớp Ge được nuôi cấy ở nhiệt độ  $300^\circ\text{C}$ , trong đó tất cả các cơ chế tán xạ phonon âm, phonon quang, độ nhám bề mặt và tạp chất bị ion hóa đều được tính đến. Cấu trúc của bài báo như sau: trong phần II chúng tôi dẫn ra phương pháp tính toán các cơ chế tán xạ trong cấu trúc kênh dẫn Ge pha tạp điều biến một phía ở nhiệt độ cao. Từ đó rút ra độ linh động của hệ hạt tải trong cấu trúc trên. Phần III là một số kết quả và thảo luận.

## 2. NỘI DUNG NGHIÊN CỨU

### 2.1. Mô hình nghiên cứu

Chúng tôi tiến hành nghiên cứu cấu trúc kênh dẫn Ge được nuôi cấy trên nền vật liệu Si (Hình 1). Bằng việc nuôi cấy liên tục các lớp vật liệu trên lớp nền Si, người ta sẽ tạo ra được kênh dẫn Ge, mà ở đó tập trung các hạt tải mang điện.

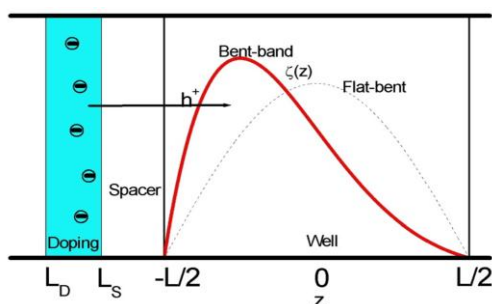


Hình 1. Cấu trúc mẫu [2]

Với mô hình như trên, ta có được một kênh dẫn Ge nằm giữa hai lớp  $\text{Si}_{0.33}\text{Ge}_{0.67}$  và được pha tạp bởi một lớp nguyên tử B cỡ  $10\text{nm}$ . Như vậy, ta có thể xem vật liệu bán dẫn trên có cấu trúc là một kênh dẫn có dạng một giếng lượng tử pha tạp điều biến một phía với độ rộng của kênh dẫn là bề rộng của lớp Ge kích thước  $20\text{nm}$ , hai lớp rào chính là hai lớp vật liệu  $\text{Si}_{0.33}\text{Ge}_{0.67}$  và được pha tạp một phía bởi lớp nguyên tử B có bề rộng  $10\text{nm}$ .

Chúng tôi đã mô hình hóa cấu trúc trên bằng hình vẽ 2.

Khi nghiên cứu cấu trúc bán dẫn dị chất như trên, chúng ta đã xét ảnh hưởng của các nguồn giam cầm có mặt trong hệ như: Các tạp ion hoá, bản thân khí hạt tải 2 chiều, tức là thay vì chỉ xét giếng vuông góc phẳng, chúng ta phải xét đến hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng (band bending).



**Hình 2. Mô hình giếng lượng tử pha tạp một phía**

Lý thuyết uốn cong vùng năng lượng giữ một vai trò khá quan trọng đối với sự hình thành kênh dẫn trong cấu trúc dị chất. Khi có pha tạp một phía kênh dẫn, sẽ dẫn tới hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng làm cho sự phân bố của hạt tải trong kênh Ge có dạng bất đối xứng: tăng về phía có pha tạp ( $z < 0$ ), giảm về phía không có pha tạp ( $z > 0$ ).

Cụ thể là, dưới ảnh hưởng của hiệu ứng uốn cong vùng năng lượng, các hạt tải trong trường hợp pha tạp một phía không còn đối xứng như trong mô hình flat-band mà lệch về phía có pha tạp. Theo mô hình này thì việc điều biến bất đối xứng hàm sóng, nghĩa là độ dốc của hàm sóng thay đổi, làm tăng tán xạ do độ nhám bề mặt gây nên mà tán xạ này là tán xạ chủ đạo, vì thế độ linh động của hạt tải giảm mạnh.

Kênh dẫn có chiều cao rào thế là vô hạn, chúng tôi sử dụng hàm sóng bao ở trạng thái cơ bản có dạng như sau [8]:

$$\zeta(z) = \begin{cases} B\sqrt{\frac{\pi}{L}} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) e^{-\frac{cz}{L}} & \text{khi } |z| \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{khi } |z| > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (2.1)$$

Ở đây  $L$  là độ rộng của kênh dẫn,  $B$  và  $c$  là những tham số biến phân xác định.  $B$  và  $c$  được xác định dựa vào điều kiện chuẩn hóa hàm sóng.

## 2.2. Xác định độ linh động của hệ hạt tải

Trong lý thuyết vận chuyển tuyến tính, độ linh động của hạt tải được cho bởi:  $\mu = \frac{e \cdot \tau}{m^*}$  với  $m^*$  là khối lượng hiệu dụng của hạt tải. Thời gian sống vận chuyển được biểu diễn qua hàm tự tương quan (AFC) đối với mỗi nhiễu loạn bằng [10]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar E_F} \int_0^{2k_F} dq \int_0^\pi d\varphi \frac{q^2}{(4k_F^2 - q^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\langle |U_{(q)}|^2 \rangle}{\varepsilon^2(q)}. \quad (2.2)$$

Ở đây,  $q = (q, \varphi)$  là xung lượng truyền hai chiều cho bởi các cơ chế tán xạ trong mặt phẳng  $x, y$ :  $q = |q| = 2k_F \sin(\vartheta/2)$  với  $\vartheta$  là góc tán xạ. Năng lượng Fermi được

xác định:  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$  với  $k_F = \sqrt{2\pi p_s}$  là số sóng Fermi,  $p_s(z)$  là nồng độ hạt tải hai chiều xác định trong [11].

Hàm điện môi  $\varepsilon(q)$  định lượng cho hiệu ứng chắn của thế tán xạ của hạt tải hai chiều. Áp dụng gần đúng trường ngẫu nhiên ta có [12,13] :

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{q_s}{q} F_s(q)[1 - G(q)], \text{ for } q \leq 2k_F,$$

Trong đó,  $q_s = 2m^* e^2 / \varepsilon_L \hbar^2$  là nghịch đảo chiều dài chắn hai chiều Thomas-Fermi. Hiệu chỉnh trường cục bộ do tương tác trao đổi giữa các hạt với nhau được cho bởi [14]:

$$G(q) = \frac{q}{2\sqrt{q^2 + k_F^2}}.$$

Thừa số dạng chắn  $F_s(q)$  phụ thuộc vào tương tác của hạt dọc theo phương nuôi được xác định bởi [12,13]:

$$F_s(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 e^{-q|z-z'|}. \quad (2.3)$$

Sử dụng hàm sóng ở phương trình (2.1), chúng ta sẽ xác định được thừa số dạng chắn cho bởi phương trình (2.3). Các hạt tải trong kênh dẫn Ge chịu tác động của nhiều nguồn tán xạ khác nhau, mỗi nguồn tán xạ tương ứng với một hàm tự tương quan  $\langle |U_{(q)}|^2 \rangle$  trong không gian véc tơ sóng. Do vậy, để xác độ linh động tổng cộng ta phải xác định các cơ chế tán xạ ảnh hưởng đến quá trình vận chuyển của hạt tải trong kênh dẫn Ge. Ở nhiệt độ cao, các hạt tải có thể có các cơ chế tán xạ sau: Tụ chất bị ion hóa (RI), độ nhám bề mặt (SR), thế biến dạng khớp sai (DP), tán xạ phonon âm (AP). Thời gian sống tổng cộng được xác định bởi quy tắc Matthiessen:

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_{AC}} + \frac{1}{\tau_{PZ}} + \frac{1}{\tau_{RI}} + \frac{1}{\tau_{SR}}. \quad (2.4)$$

### 2.2.1. Tán xạ phonon âm

Tán xạ phonon là nguồn gốc quan trọng giới hạn độ linh động của hạt tải. Theo lý thuyết vận chuyển tuyến tính, thời gian hồi phục xung lượng của tán xạ phonon âm cho bởi [15]:

$$\frac{1}{\tau(E)} = \sum_k W(k, k') (1 - \cos \alpha), \quad (2.5)$$

Ở đây  $W(k, k')$  là xác suất chuyển tiếp từ trạng thái  $k$  tới trạng thái  $k'$ ,  $\theta$  là góc tán xạ. Trong khoảng nhiệt độ mà chúng ta tìm độ linh động của hạt tải thì tán xạ phonon được xem là đàn hồi. Xác suất chuyển tiếp được cho dưới dạng:

$$W(k, k') = \frac{2k_B T}{\hbar^2} L \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{|M(q)|^2}{\omega_q S^2(q_{\perp})} |I(q_z)|^2 \delta(E_k - E_{k'}). \quad (2.6)$$

*Thế biến dạng khớp sai (DP - Deformation Potential).*

Đối với các phonon âm được tạo bởi thế biến dạng khớp sai thì yếu tố ma trận tán xạ được cho bởi [16]:

$$|M(q)|^2 = \frac{D^2 \hbar \omega_q}{2C_1 V}, \quad (2.7)$$

Trong đó, D là hằng số dạng khớp sai.

Thời gian hồi phục xung lượng của tán xạ phonon âm trong thế biến dạng khớp sai (DP) được cho bởi:

$$\frac{1}{\tau_{DP}(E)} = \frac{m^* D^2 k_B T}{4\pi h^3 C_1} \int_{-\infty}^{\infty} |I(q_z)|^2 dq_z \int_0^{\pi} \frac{1 - \cos \alpha}{S^2(q_{\perp})} d\alpha, \quad (2.8)$$

Trong đó,  $q_{\perp} = 2k \sin \alpha/2$ .

*Thế điện áp tích điện (PZ - Piezoelectric coupling).*

Các phân tử ma trận trong thế điện áp tích điện (PZ) có dạng [16]:

$$|M(q)|^2 = \frac{e^2 P^2 \hbar \omega_q}{2\epsilon_0 \epsilon_r q^2 V}, \quad (2.9)$$

với P là hằng số điện áp.

Khi đó, thời gian hồi phục xung lượng do cơ chế khuếch tán có thể viết dưới dạng:

$$\frac{1}{\tau_{PZ}} = \frac{P^2 k_B T}{\pi \hbar \alpha_B^*} \int_0^{\pi} \frac{1 - \cos \alpha}{S^2(q_{\perp})} G_2(q_{\perp}) d\alpha. \quad (2.10)$$

Số hạng cuối trong tích phân được cho bởi:

$$G_2(q_{\perp}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|I(q_z)|^2}{q_{\perp}^2 + q_z^2} dq_z. \quad (2.11)$$

S(q) là hệ số chấn tĩnh có mối liên hệ với thừa số dạng chấn  $F_s(q)$  là:

$$S(q) = 1 + \frac{2\pi e^2 F(q) \Pi(q)}{\epsilon_0 q}, \quad (2.12)$$

với  $\Pi(q)$  là hàm phân cực ở nhiệt độ hữu hạn.

$$\Pi(q, T, E_F) = \frac{1}{4k_B T} \int_0^{\infty} \frac{\Pi(q, 0, \xi)}{\cosh^2\left(\frac{E_F - \xi}{2k_B T}\right)} d\xi = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2} \left\{ 1 + \text{Tanh} \frac{E}{2k_B T} \right\},$$

Trong đó,  $\Pi(q, 0, \xi)$  là hàm phân cực ở nhiệt độ T=0 K, có dạng:

$$\Pi(q, 0, \xi) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - \theta(q - 2k_F) \left[ 1 - \left( \frac{2k_F}{q} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}.$$

2.2.2. Tán xạ do độ nhám bề mặt (SR)

Hàm tự tương quan do nhám bề mặt gây ra ảnh hưởng lên độ linh động của hạt tải được tính toán trong công trình [17] có dạng như sau:

$$U_{SR}(\mathbf{q}) = V_0 |\zeta_{\mp}|^2 \Delta_{\mathbf{q}} \tag{2.13}$$

2.2.3. Tạp chất bị ion hóa (RI).

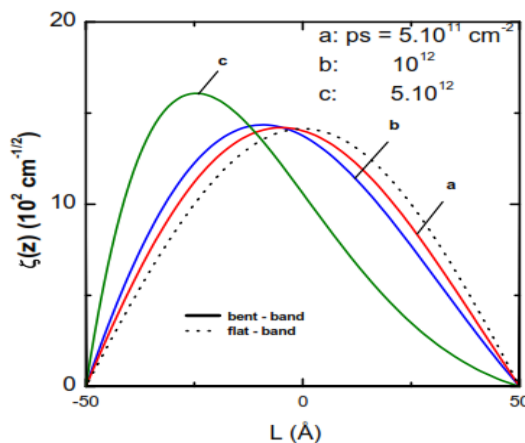
Hàm tự tương quan cho tán xạ từ sự phân bố ngẫu nhiên của tạp được xác định bởi [11,18]:

$$\langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle = \langle |U_{RI}(q)|^2 \rangle F_C(q) \tag{2.14}$$

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong phần này chúng tôi áp dụng lý thuyết tính toán để nghiên cứu hiện tượng vận chuyển của hạt tải trong kênh dẫn Ge pha tạp điều biến ở nhiệt độ cao. Đối tượng nghiên cứu là độ linh động của hạt tải trong kênh Ge được nuôi bởi lớp nền Si, Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Ge/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>. Như đã chỉ ra trong công trình [19], đối với kênh dẫn Ge nuôi trên lớp nền Si, lớp pha tạp có dạng Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> có hàm lượng pha tạp Ge là  $x=0.67$ . Vì vậy, cấu trúc nghiên cứu của bài toán sẽ là cấu trúc dị chất Si<sub>0.33</sub>Ge<sub>0.67</sub>/Ge/Si<sub>0.33</sub>Ge<sub>0.67</sub> [20,21] trong đó, lớp rào làm bằng vật liệu SiGe được pha tạp bởi B với  $L_d = 100 \text{ \AA}$ ,  $L_s = 200 \text{ \AA}$ . Vì độ cao của rào thế là lớn  $V_0 \geq 270 \text{ meV}$  nên ta có thể coi giếng thế là cao vô hạn.

Để tính số chúng ta cần các tham số đầu vào, ở đây chúng ta đã bỏ qua sự khác nhau của hằng số điện môi giữa lớp giếng và lớp rào, sử dụng giá trị trung bình của chúng. Đối với kênh dẫn Ge, khối lượng hiệu dụng trên phương z và mặt phẳng (x, y) là khác nhau, cụ thể  $m_z = 0.19m_e$ ,  $m^* \approx 0.1m_e$  [22,23]. Hằng số biến dạng cứng  $c_{11} = 12.85$ ,  $c_{12} = 4.83$ ,  $c_{44} = 6.80$  trong một đơn vị  $10^{10} \text{ Pa}$ , và hằng số biến dạng đàn hồi cho bởi  $b_s = 2.55$ ,  $d_s = 5.50$  [24].

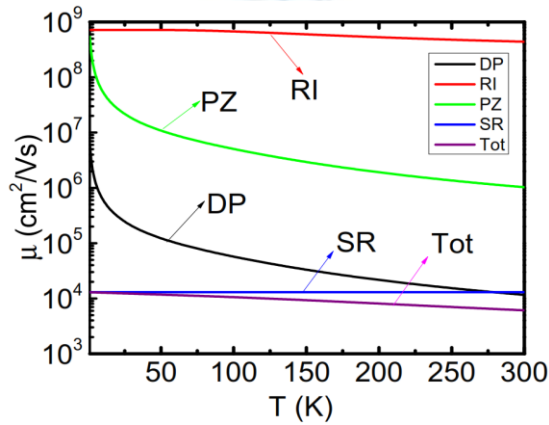


Hình 3. Cấu trúc kênh dẫn Ge pha tạp điều biến với các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải  $p_s$

Trên hình vẽ 3, các đường đứt nét là hàm sóng trong mô hình flat-band, các đường liền nét là hàm sóng trong mô hình kênh Ge pha tạp một phía với bề rộng kênh dẫn  $L = 150 \text{ \AA}$  và các giá trị khác nhau của nồng độ hạt tải  $p_s$  với  $p_s = 5.10^{11}, 10^{12}, 5.10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Quan sát hình vẽ ta nhận thấy: trong mô hình flat-band hàm sóng có dạng đối xứng và không phụ thuộc vào nồng độ hạt tải trong kênh dẫn. Tại nồng độ hạt tải nhỏ cỡ  $p_s = 5.10^{11} \text{ cm}^{-2}$  hàm sóng flat-band và bent-band gần như trùng nhau. Khi ta tăng nồng độ hạt tải  $p_s$ , hàm sóng trong kênh pha tạp điều biến một phía 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 phía có pha tạp nhiều hơn.

Hình 4 chúng tôi vẽ sự phụ thuộc của độ linh động gây ra bởi tất cả các cơ chế tán xạ và độ linh động tổng cộng vào nhiệt độ.



**Hình 4. Độ linh động phụ thuộc vào nhiệt độ  $T$  của tất cả các cơ chế tán xạ: Thế biến dạng khớp sai (DP), Thế điện tích áp điện (PZ), Tán xạ do tạp chất bị ion hóa (RI), tán xạ do độ nhám bề mặt (SR), và độ linh động tổng cộng  $\mu_{Tot}$**

Nhìn vào đồ thị hình 4 ta thấy, độ linh động tổng cộng  $\mu_{tot}$  càng giảm khi ta tăng nhiệt độ  $T$ . Độ linh động tổng cộng chịu ảnh hưởng nhiều nhất bởi tán xạ do độ nhám bề mặt gây ra, đây là cơ chế tán xạ chủ đạo ở nhiệt độ thấp đã được nghiên cứu nhiều ở các công trình [4,5,9]. Tuy nhiên khi nhiệt độ tăng lên, vai trò của các cơ chế tán xạ do phonon gây ra càng thể hiện vai trò quan trọng, chúng đã làm giới hạn độ linh động tổng cộng của hạt tải, dẫn tới độ linh động tổng cộng giảm dần khi nhiệt độ tăng lên. Đường cong của độ linh động tổng cộng phụ thuộc ngày càng nhiều vào độ dốc của các đường cong do tán xạ phonon âm gây ra. Ảnh hưởng của tán xạ gây bởi tạp chất bị ion hóa là ít nhất. Những kết quả này khá phù hợp với các tính toán trong [2,24]. Lý thuyết của chúng tôi đã giải thích định tính được sự phụ thuộc của độ linh động tổng cộng của hạt tải vào các cơ chế tán xạ gây bởi phonon.