

УДК 621.315.592

## Совместное решение дифференциальных уравнений Шредингера, Пуассона и Больцмана в полупроводниковой гетероструктуре

А.С. Сафошкин<sup>1</sup>, А.Б. Дюбуа<sup>1</sup>, К.В. Бухенский<sup>1</sup>, С.И. Кучерявый<sup>2</sup>,  
Г.С. Лукьянова<sup>1</sup>, Д.А. Зенков<sup>1</sup>, Д.С. Крючков<sup>1</sup>

Рязанский государственный радиотехнический университет<sup>1</sup>, Обнинский институт  
атомной энергетики НИЯУ МИФИ<sup>2</sup>

*Аннотация:* В статье рассмотрено совместное решение уравнений Шредингера и Пуассона для двумерного полупроводникового гетероперехода. Обосновано применение треугольной аппроксимации потенциальной ямы для расчета времени электрон-электронного взаимодействия. Получены аналитические температурные зависимости времени электрон-электронного взаимодействия в умеренно и сильнолегированном гетеропереходе.

*Ключевые слова:* электрон-электронное взаимодействие, метод хаотических фаз, гетеропереходы

### 1. Введение

В ряде экспериментальных работ по исследованию особенностей осцилляций поперечного магнитосопротивления Шубникова – де Гааза (ШдГ) в широком диапазоне температур и магнитных полей для объемных 3D и двумерных 2D электронов обнаружены некоторые аномалии, имевшие определенную общность в качественном сходстве, но и существенные различия [1]. Например, была обнаружена осциллирующая зависимость температуры Дингла  $T_D$  от температуры  $T$ , а, следовательно, и времени малоугловой релаксации  $\tau_q$  от  $T$ . Эти осцилляции  $T_D(T)$  и  $\tau_q(T)$  были обнаружены для сильнолегированных гетеропереходов ( $n_s > 8.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ), в которых заполнена основная и вторая возбужденная подзона размерного квантования [2,3]. Была установлена однозначная связь этих аномалий с сильным (для вырожденных 3D и 2D электронов) электрон - электронным взаимодействием. Попытка количественного описания экспериментальных зависимостей  $\tau_q(T)$  в рамках существующих теоретических представлений не привела к успеху [4,5]. Для качественного объяснения наблюдаемых эффектов необходимо рассмотрение каналов электрон - электронных («e-e») взаимодействий в сложной системе 2D вырожденных электронов. Методом самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера [6], были найдены вид энергетической структуры для зоны проводимости  $E_c(z)$  наноструктуры и пространственное распределение электронной плотности  $|\psi(z)|^2$  на уровнях (подзонах) размерного квантования.

### 2. Расчет зонной структуры гетероперехода

В работе [6] получено решение системы дифференциальных уравнений Шредингера и Пуассона:

$$\begin{cases} E_F \left( -\frac{1}{k_F^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{V(z)}{E_F} \right) \psi_j(z) = \varepsilon_j \psi_j(z) \\ -\frac{d^2 V}{dz^2} = \frac{4\pi\rho(z)}{\chi} \end{cases} \quad (1)$$

где  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$  - энергия Ферми,  $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$  - волновой вектор,  $n_s$  - поверхностная плотность электронов при распределении плотности заряда

$$\begin{cases} \rho(z) = eN_0^{3/2} \left(1 - \frac{z}{D}\right), z < D, \\ \rho(z) = -A(z - D) \exp\left(-\frac{z-D}{a}\right), z > D, \end{cases} \quad (2)$$

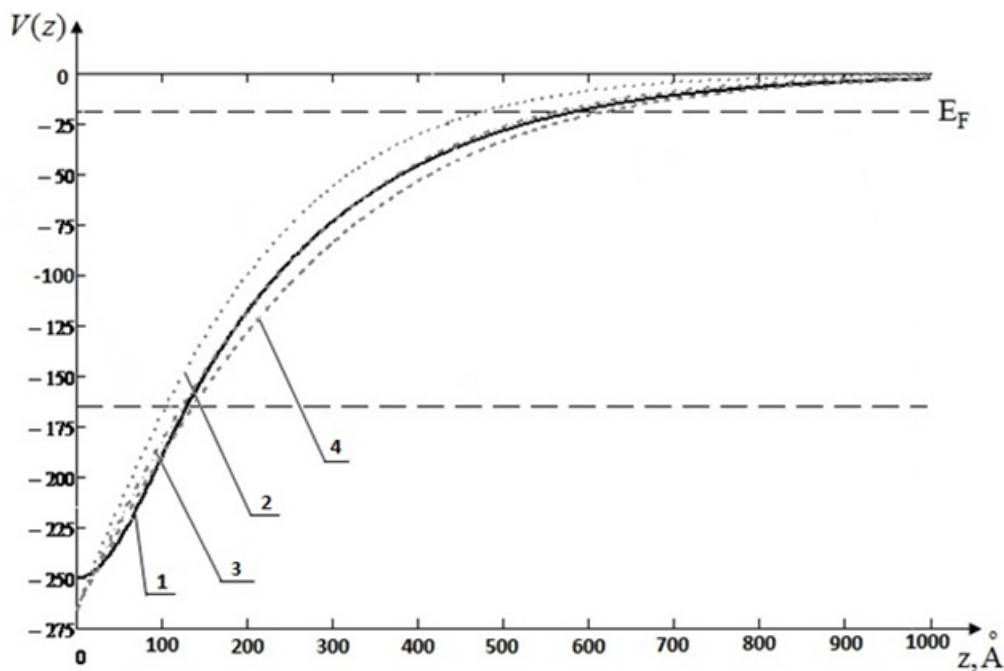
где  $D \cong \frac{2}{k_F}$ ,  $A = \frac{eN_0^{3/2}D}{2a}$  - нормировочная постоянная,  $N_0$ - уровень легирования,  $a$  - длина потенциала экранирования Томаса-Ферми [2].

Решение системы (1) находилось в функции подгоночных параметров  $\lambda$  и  $\beta$ :

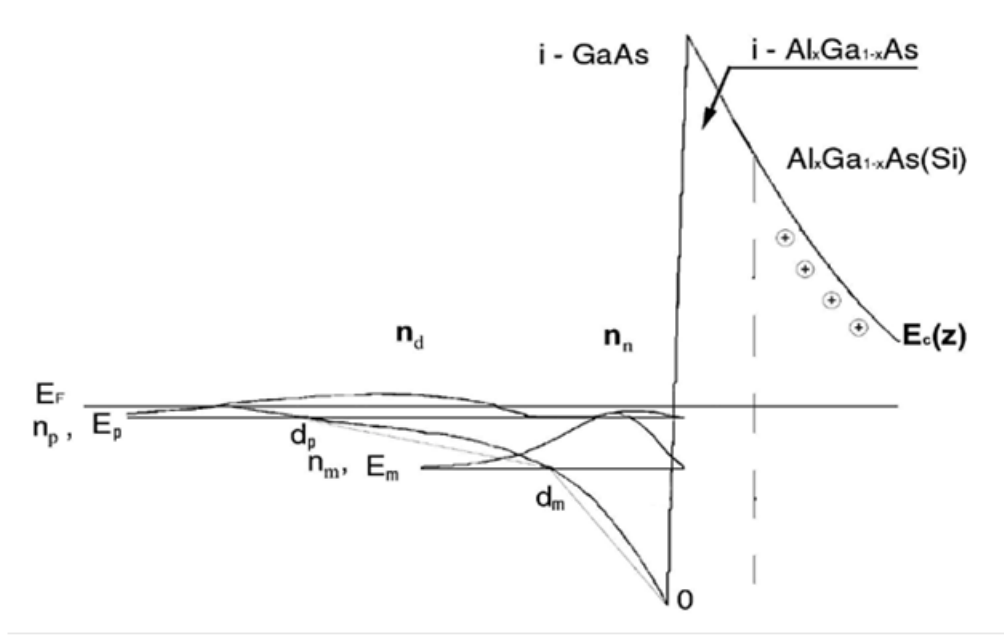
$$\psi_k^+(z) = \exp(iz) \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k) \exp(-j\lambda z) \quad (3)$$

На рис. 1 построены кривые  $V(z)$  как функции от подгоночных параметров  $\lambda$  и  $\beta$ .

На рис. 2 приведена типичная схема наноструктуры для одного из образцов с заполнением двух подзон размерного квантования и обозначением параметров, необходимых в дальнейшем.



**Рис. 1.** Зависимость профиля потенциальной ямы от значения параметра  $\lambda$ . Кривая (1) – профиль потенциальной ямы, рассчитанный по формуле (2), кривые (2)-(4) – вычисленные по формуле (3) профили потенциальной ямы для значений параметра  $\lambda = 0.65 \cdot 10^6$ ,  $\lambda = 0.55 \cdot 10^6$  и  $\lambda = 0.5 \cdot 10^6$  соответственно.



**Рис. 2.** Энергетическая диаграмма зоны проводимости  $E_c(z)$  гетероперехода с двумя заполненными подзонами размерного квантования  $E_m$  и  $E_p$ ;  $n_m$  и  $n_n$ ,  $d$  — поверхностные концентрации 2D электронов,  $E_F$  — энергия Ферми

### 3. Электрон-электронные взаимодействия

Запишем гамильтониан электрон-электронного взаимодействия в сильно легированном гетеропереходе:

$$H_{\text{int}}^{ijkl}(t) = \sum_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}) V_{\text{tot}}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega) a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{p}}(t) + \sum_{\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j, \mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j} V_{\text{tot}}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega) \delta(\mathbf{p}_i + \mathbf{q}_i - \mathbf{p}_j - \mathbf{q}_j) a_{\mathbf{p}}(t) a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+(t) \quad (4)$$

где  $V_{\text{tot}}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega)$  — Матричный элемент изображения Фурье полного потенциала кулоновского экранирования с полевыми операторами рождения и уничтожения:

$$a_{\mathbf{p}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(\mathbf{p})t} a_{\mathbf{p}}, \quad a_{\mathbf{p}}^+(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(\mathbf{p})t} a_{\mathbf{p}}^+$$

С точностью до второго члена разложения внешнего возмущающего потенциала теории возмущений выражение для времени "e-e" взаимодействия может быть представлено в виде

$$\frac{1}{\tau_{ij}^{ee}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{k,m} \sum_{\mathbf{q}} \left| V_{\text{tot}}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega) \right|^2 * \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta(E_j(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_l(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - E_i(\mathbf{k}) - E_k(\mathbf{p})) f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) (1 - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) \quad (5)$$

Таким образом, решение задачи о нахождении аналитических выражений для времен релаксации сводится к нахождению матричных элементов экранирования для следующих типов взаимодействий:

1) Внутриподзонаное взаимодействие, ведущее к переходам внутри подзоны (матричные элементы  $V_{\text{tot}}^{mmmm}$ ,  $V_{\text{tot}}^{pppp}$ , времена релаксации  $\tau_{mm}^{\text{intra}}$ ,  $\tau_{pp}^{\text{intra}}$ ).

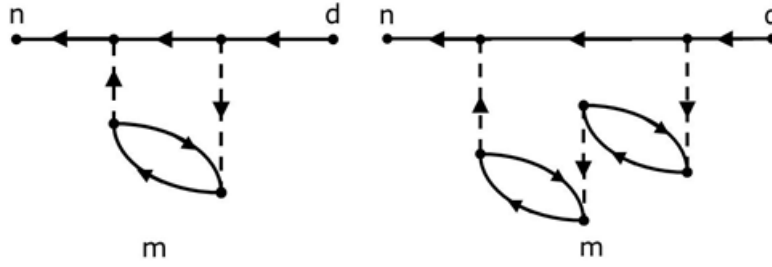
2) Внутриподзонаное взаимодействие, ведущее к переходам между подзонами (матричные элементы  $V_{\text{tot}}^{mpmp}$ ,  $V_{\text{tot}}^{pmpp}$ , времена релаксации  $\tau_{mm}^{\text{intra}}$ ,  $\tau_{pp}^{\text{intra}}$ ).

3) Межподзонное взаимодействие, ведущее к переходам внутри подзоны (матричные элементы  $V_{tot}^{mmp}$ ,  $V_{tot}^{ppmm}$ , времена релаксации  $\tau_{mm}^{inter} = \tau_{pp}^{inter}$ ).

4) Межподзонное взаимодействие, ведущее к переходам между подзонами (матричные элементы  $V_{tot}^{mppm} = V_{tot}^{pmmp}$ , времена релаксации  $\tau_{mp}^{inter} = \tau_{pm}^{inter}$ ).

Верхний индекс для времен релаксации обозначает характер взаимодействия (intra — для внутривозонного, inter — для межвозонного), нижний — при  $i = j$  переходы внутри подзоны,  $i \neq j$  — переходы между подзонами.

На рисунке 3 показаны фейнмановские диаграммы различных видов электрон-электронного взаимодействия.



**Рис. 3.** Фейнмановские диаграммы различных видов электрон-электронного взаимодействия. Слева – межподзонное взаимодействия с межподзонными переходами, справа – межподзонное взаимодействие с внутривозонными переходами.

Используя тождественные преобразования, (6) запишется в виде

$$\frac{1}{\tau_{ij}^{ee}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{ch^2 (\beta\hbar\omega/2)} \sum_{k,l} \sum_{\mathbf{q}} \left| V_{tot}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega) \right|^2 \chi_{ik}(\mathbf{q}, \omega) \chi_{jl}^*(\mathbf{q}, \omega) \quad (6)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  - постоянная Больцмана, а диэлектрическая функция описывается выражением

$$\chi_{mn}(\mathbf{q}, \omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{m, \mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{n, \mathbf{k}}}{E_{m, \mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} - \hbar\omega - i\delta} \quad (7)$$

Матричные элементы потенциала полной экранировки с учетом параметров энергетической диаграммы для первого и второго типов переходов приводятся к виду

$$V_{tot}^{mmpm}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_{ext}^{mm}(\mathbf{q})}{\varepsilon_{mm}(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{E_m}{2d_m S (q^3 + 2\pi e^2 q^4 \chi_{mm}(\mathbf{q}, \omega))} \quad (8)$$

а для третьего и четвертого типов

$$V_{tot}^{mmp}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{E_p (1 - qd_m) - E_m (1 + qd_p)}{2S(d_p - d_m) (q^3 + 2\pi e^2 q^4 \chi_{mp}(\mathbf{q}, \omega))} \quad (9)$$

Времена релаксации в виде, удобном для вычислений первого и второго типов переходов, имеют вид функций

$$\frac{1}{\tau^{intra}} = \frac{E_m^2 m^{*2} S}{16\pi^5 d_m^2 \hbar^4 n_s^2} P_{-n}(T) \zeta(T, n_s) \quad (10)$$

а для третьего и четвертого типов

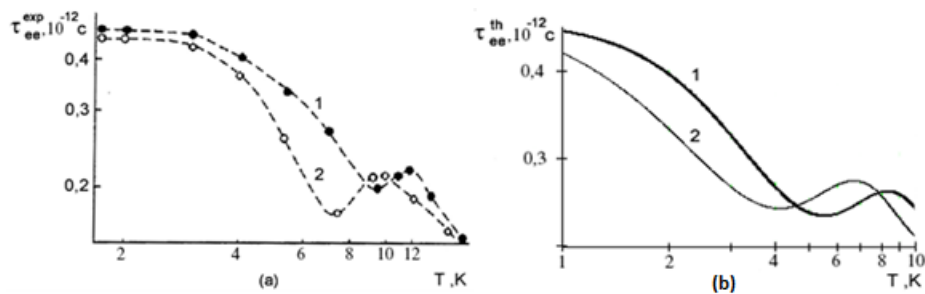
$$\frac{1}{\tau^{inter}} = \frac{m^{*2} S}{16\pi^6 (d_n - d_p)^2 \hbar^4} \left\{ \frac{(E_n - E_m)^2}{8\pi} Q_{-n}(T) \zeta(T, n_s) - \frac{(E_n - E_m)^{3/2}}{\sqrt{8\pi}} W_{-n}(T) \zeta(T, n_s) \right\} \quad (11)$$

где  $Q_{-n}(T)$ ,  $P_{-n}(T)$  и  $W_{-n}(T)$ - полиномы в (10) и (11), которые рассчитываются как  $P_{-n}(T) = \frac{B_1}{T} + \frac{B_2}{T^2} + \frac{B_3}{T^3} + \dots$   $Q_{-n}(T) = \frac{B_1}{T} + \frac{B_2}{T^2} + \frac{B_3}{T^3} + \dots$   $W_{-n}(T) = \frac{B_2}{T^2} + \frac{B_4}{T^4} + \dots$  с коэффициентами  $B_n$ , определяемыми зета-функцией Римана  $\zeta(T, n_m, n_i, d_m, d_i)$ .

## 4. Заключение

Вычисления для  $\tau_{ee}^{th}$  выполняются в соответствии с моделью квантования Ландау [7,8]. В то же время, учитывая «траектории» каналов (1) - (4), включающие внутри- и межподзонные переходы, вычисление  $\tau_{ee}^{th}$  показано формулами (6) и (11) в соответствии с правилом Матиссена  $\tau_{ee}^{-1} = \sum_i (\tau_{ee}^{-1})_i$ , в котором учитываются все компоненты модели. Рис. 4а и 4б показывают сравнение экспериментальных [3] и рассчитанных кривых затухания квантования Ландау для гетероструктур с двумя заполненными подзонами размерного квантования. Следует обратить внимание на количественное «попадание»  $\tau$  в интервал при температурах  $2 \leq T \leq 12K$  и для реальных плотностей  $n_m \approx 10^{12}cm^{-2}$ ,  $n_d = 0.1n_m$ ,  $n_n = 0.01n_m$ .

Кроме того, следует отметить, что при низких температурах ( $T < 5K$ ) затухание квантования Ландау определяется  $n_s$ -электронами, а численный анализ разложения диэлектрической функции (7) показывает возникновение немонотонностей  $\tau_{ee}^{th}(T, n_s)$  с  $n_m > 8 \cdot 10^{11}cm^{-2}$  и при  $T > 5K$ . Это свидетельствует о том, что характерные колебания возникают только после заполнения второй подзоны электронами и отклика на тепловые эффекты с  $T > 5K$ .



**Рис. 4.** Сравнение экспериментальных  $\tau_q^{exp}$  (а) и теоретических  $\tau_q^{th}$  (б) кривых для различных значений плотности m-подзоны: 1 - 9.1, 2 - 10.0

## Литература

1. Coleridge P. T. Small-angle scattering in two-dimensional electron gases // Phys.Rev. B. 1991. 44. p. 3793.
2. Kadushkin V. I. and Dubois A. B. The Role of Electron – Electron Relaxation in Landau Quantization Damping // Phys. Low-Dim. Struct. 2002. 11/12. p. 27-37.
3. Ambartsumyan V. A., Andryushchenko E. A., Bukhensky K. V., Dubois A. B., Dvoretzkova E. A., Gordova T. V., Kucheryavyy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Channels of electron-electron interactions in highly doped heterojunction // Nanosystems: phys., chem., math. 2014. 5(3). p. 343-353.
4. Slutzky M., Entin-Wohlman O., Berk Y. and Palevsky A. Electron-electron scattering in coupled quantum wells // Phys. Rev. B. 1996. 53(7). p. 4065-72.
5. Goh K. E. J., Simmons M. Y. and Hamilton A. R. Electron-electron interactions in highly disordered two-dimensional systems // Phys. Rev. B. 2007. 77. p. 235410.
6. Dubois A. B., Zilotova M. A., Kucheryavyy S. I. and Safoshkin A. S. Kinetic processes in moderately doped heterojunction // Vestnik of RSREU. 2013. 3(45). p. 88-92.

7. Bukhensky K. V., Dubois A. B., Gordova T. V., Kucheryavyy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Electron-electron Interactions in Highly Doped Heterojunction // Phys. Procedia. 2015. 71. p. 359-363.
8. Baskakova A. V., Bukhensky K. V., Dubois A. B., Kucheryavyy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Kinetic processes in heavily doped semiconductor heterojunctions // Journal of Physics: Conference Series. 2016. 747. p. 012026.

MSC 82D37

## Joint solution of the Schrödinger, Poisson and Boltzmann differential equations in a semiconductor heterostructure

A.S. Safoshkin<sup>1</sup>, A.B. Dubois<sup>1</sup>, K.V. Bukhensky<sup>1</sup>, S.I. Kucheryavy<sup>2</sup>, G.S. Lukyanova<sup>1</sup>,  
D.A. Zenkov<sup>1</sup>, D.S. Kryuchkov<sup>1</sup>

Ryazan State Radioengineering University<sup>1</sup>, Atomic Energy of National Research  
Nuclear University of Moscow Engineer-Physics University<sup>2</sup>

*Abstract:* The article discusses the joint solution of the Schrödinger and Poisson equations for two-dimensional semiconductor heterojunction. The application of a triangular potential of well approximation for the calculation of the electron-electron interaction is offered in the paper. The influence of the parameters of the selected approximation was analyzed.

*Keywords:* Electron-electron interaction, chaotic phase method, heterojunctions

### References

1. Coleridge P. T. Small-angle scattering in two-dimensional electron gases // Phys. Rev. B. 1991. 44. p. 3793.
2. Kadushkin V. I. and Dubois A. B. The Role of Electron – Electron Relaxation in Landau Quantization Damping // Phys. Low-Dim. Struct. 2002. 11/12. p. 27-37.
3. Ambartsumyan V. A., Andryushchenko E. A., Bukhensky K. V., Dubois A. B., Dvoretzkova E. A., Gordova T. V., Kucheryavy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Channels of electron-electron interactions in highly doped heterojunction // Nanosystems: phys., chem., math. 2014. 5(3). p. 343-353.
4. Slutzky M., Entin-Wohlman O., Berk Y. and Palevsky A. Electron-electron scattering in coupled quantum wells // Phys. Rev. B. 1996. 53(7). p. 4065-72.
5. Goh K. E. J., Simmons M. Y. and Hamilton A. R. Electron-electron interactions in highly disordered two-dimensional systems // Phys. Rev. B. 2007. 77. p. 235410.
6. Dubois A. B., Zilotova M. A., Kucheryavy S. I. and Safoshkin A. S. Kinetic processes in moderately doped heterojunction // Vestnik of RSREU. 2013. 3(45). p. 88-92.
7. Bukhensky K. V., Dubois A. B., Gordova T. V., Kucheryavy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Electron-electron Interactions in Highly Doped Heterojunction // Phys. Procedia. 2015. 71. p. 359-363.
8. Baskakova A. V., Bukhensky K. V., Dubois A. B., Kucheryavy S. I., Mashnina S. N. and Safoshkin A. S. Kinetic processes in heavily doped semiconductor heterojunctions // Journal of Physics: Conference Series. 2016. 747. p. 012026.