

## Влияние спин-орбитального взаимодействия на подвижность электрона в нанопроволоке при рассеянии на полярных оптических фононах

(Представлено чл.-кор. НАН РА А. А. Киракосяном 13/III 2024)

**Ключевые слова:** *подвижность, полярные фононы, время релаксации, спин-орбитальное взаимодействие.*

**Введение.** В последние годы полупроводниковые нанопроволоки привлекают все большее внимание, поскольку они предлагают широкий спектр применений, таких как лазеры [1], светодиоды [2], фотодетекторы [3], солнечные элементы [4], полевые транзисторы [5] и др. Спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) является важным фактором управления оптоэлектронными явлениями в полупроводниковых наноструктурах и улучшения работы различных устройств на их основе. Следует отметить, что среди кристаллических твердых тел СОВ особенно сильно проявляется в некоторых полупроводниках [6] и, хотя энергия СОВ обычно мала по сравнению с другими характеристическими энергиями, тем не менее она вызывает расщепление вырожденных энергетических зон вблизи уровня Ферми, оказывая тем самым эффективное влияние на характеристики микро- и наноэлектронных устройств. Другим важным фактором, влияющим на оптоэлектронные характеристики наноструктур, является рассеяние носителей заряда (НЗ). Хорошо известно, что рассеяние НЗ на полярных оптических фононах является доминирующим механизмом снижения подвижности в MOSFET на основе полярного полупроводника в условиях эксплуатации при комнатной температуре [7].

В данной работе теоретически исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия на подвижность электрона, ограниченного рассеянием на полярных оптических фононах в полупроводниковых нанопроволоках, подтверждающее увеличение подвижности НЗ из-за уменьшения плотности электронных состояний.

**2. Теория.** Рассмотрим квазиодномерную цилиндрическую нанопроволоку радиуса  $r_0$ , погруженную в диэлектрическую среду в однородном электрическом поле  $\mathbf{F}$ , перпендикулярном оси нанопроволоки (ось  $x$ ).

Предполагается, что электроны могут свободно перемещаться вдоль оси проволоки, а их движение в плоскости, перпендикулярной оси проволоки, ограничено удерживающим – потенциалом  $V_0(r, \theta) = m^* \omega_0^2 r^2 / 2$  с характерной частотой  $\omega_0$ ,  $m^*$  – эффективная масса электрона. Из-за асимметрии, создаваемой электрическим полем  $F$ , электроны испытывают спин-орбитальное взаимодействие Рашбы. Будем также предполагать наличие спин-орбитального эффекта Дрессельхауса, который обычно присутствует в кристаллических системах, лишенных инверсионной симметрии. Интенсивность, а также взаимосвязь между СОВ Рашбы и линейным СОВ Дрессельхауса можно контролировать внешним напряжением на затворе и конструкцией структуры, соответственно [8]. Ограниченность движения электрона в направлении, перпендикулярном оси проволоки, а также симметрия системы позволяют представить спин-орбитальные взаимодействия Рашбы и Дрессельхауса в следующих формах [9]:  $H_R = (\alpha + \alpha_0) \sigma_z \hat{k}$ ,  $H_D = \beta \sigma_x \hat{k}$ , где  $\hat{k} = -i \partial / \partial x$ ,  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  – вектор матриц Паули,  $\alpha$  и  $\beta$  – параметры Рашбы и Дрессельхауса в отсутствие приложенного электрического поля, соответственно, а параметр  $\alpha_0$  учитывает вклад приложенного электрического поля  $F$  в СОВ Рашбы. В рамках такой модели проблема собственных функций и собственных значений электрона в нанопроволоке решается точно [10]:

$$\begin{aligned} \phi_{nmk\zeta}(x, \rho, \theta) = C_{nm} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right) \rho^{|m|} L_n^{|m|}(\rho^2) \exp[i(kx + \\ + m\theta)] \frac{\cos\varphi}{\sqrt{1 + \zeta \sin\varphi}} \begin{pmatrix} \sin\varphi + \zeta \\ \cos\varphi \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$E_{nmk\zeta} = E_{nm} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \zeta k \sqrt{(\alpha + \alpha_0)^2 + \beta^2}, \quad (2)$$

$$E_{nm} = \hbar\omega_0(2n + |m| + 1) - \frac{1}{2} eF r_F,$$

где  $C_{nm} = \sqrt{2n! / 2\pi r_0^2 L(n + |m|)!}$ ,  $r_0 = (\hbar / m^* \omega_0)^{1/2}$ ,  $r_F = eF / (m^* \omega_0^2)$ ,  $L$  – длина нанопроволоки,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  – квантовые числа,  $L_n^{|m|}(\rho)$  – обобщенные полиномы Лагерра,  $\tan\varphi = (\alpha + \alpha_0) / \beta$ ,  $\zeta = \pm 1$ . Следует отметить, что параболическое удержание позволяет представить параметр  $\alpha_0$  в виде  $\alpha_0 = 3\hbar^2 m^* \omega_0^2 r_F / 2(2m_0 c)^2 = 3\hbar^2 eF / 2(2m_0 c)^2$ , где  $m_0$  – масса электрона [10].

Для расчета подвижности электронов, ограниченной фононами в нанопроволоке, воспользуемся формулой Кубо – Гринвуда [11], моди-

фицированной для одномерного транспорта в однодолинном полупроводнике [12]:

$$\mu_x(n_L, T, \alpha, \beta, F) = \frac{2e}{k_B T m^* n_L} \times \sum_{nm\zeta} \int_{E_{nm}}^{\infty} dE g_{nm}(E) \left( E + \frac{\zeta \sqrt{m^* E}}{\hbar} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - E_{nm} \right) \tau_{nm\zeta}(E) f(E) [1 - f(E)] \quad (3)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $n_L$  – линейная концентрация электронов,  $g_{nm}(E) = 2[\pi^2(\alpha^2 + \beta^2 + 2\hbar^2(E - E_{nm})/m^*)]^{-1/2}$  – одномерная плотность состояний проволоочной подзоны ( $nm\zeta$ ),  $\tau_{nm\zeta}(E) = (\tau_{nmk\zeta})_{k=\sqrt{2m^*E}/\hbar}$  – время релаксации импульса электрона,  $f(E) = [\exp((E_{nm} + E + \zeta \hbar^{-1} \sqrt{m^* E} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \eta)/k_B T) + 1]^{-1}$  – функция распределения Ферми – Дирака и  $\eta$  – химический потенциал.

Для LO-фононов условие  $k_B T < \hbar \omega_L$  имеет место вплоть до комнатных температур, поэтому взаимодействие электрона с РО-фононами существенно неупруго. В этом случае применение приближения времени релаксации обосновывается следующим образом: при низких температурах переход электрона из состояния ( $nmk\zeta$ ) в состояние ( $n'm'k'\zeta'$ ) возможен только за счет поглощения фонона. Поглощая фонон, электрон мгновенно излучает фонон той же энергии, так как соотношение вероятностей испускания и поглощения фонона  $[N_0 + 1]/N_0 \approx \exp(\hbar \omega_L/k_B T) \gg 1$ , где  $N_0 = [\exp(\hbar \omega_L/k_B T) - 1]^{-1}$ . Благодаря такому процессу происходит релаксация импульса, а энергия электрона не изменяется. Поскольку процессы поглощения и испускания фононов происходят мгновенно, функция распределения электронов для состояния ( $nmk\zeta$ ) не успевает измениться. При таком подходе полученное выражение для времени релаксации при взаимодействии электрона с полярными оптическими фононами, модифицированное для одномерного транспорта, имеет вид

$$\frac{1}{\tau_{nm\zeta}(E)} = \gamma_F \omega_L \sqrt{\frac{\hbar \omega_L}{E_{nm\zeta} + E}} N_0 \ln \left| \frac{\sqrt{E_{nm\zeta} + E} + \sqrt{E_{nm\zeta} + E + \hbar \omega_L}}{\sqrt{E_{nm\zeta} + E} - \sqrt{E_{nm\zeta} + E + \hbar \omega_L}} \right|, \quad (4)$$

где  $\gamma_F$  – безразмерная константа связи полярона [13].

**3. Результаты и обсуждение.** Численные расчеты проведены для погруженной в полярную среду полупроводниковой квантовой проволоки CdSe n-типа, с значениями параметров  $m^* = 0.13 m_0$ ,  $\hbar \omega_L = 26.36$  мэВ,  $\gamma_F = 1.27$ . Для  $\gamma_D$  использовано стандартное значение  $\gamma_D/\hbar = 13.3$  пс<sup>-1</sup>нм<sup>3</sup> для гетероструктур II-VI [14], а параметр Дрессельхауза  $\beta = \gamma_D \pi^2 / r_0^2$  [15].

$$n_L = \sum_{nm} \int_{E_{nm}}^{\infty} g(E) f(E) dE = \frac{2}{\pi} \sum_{nm} \int_{E_{nm}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(\alpha^2 + \beta^2) + \frac{2\hbar^2}{m^*} (E - E_{nm})}} \frac{1}{1 + e^{\frac{E + E_{nm} - \eta}{k_B T}}} dE \quad (5)$$

Для численного расчета подвижности необходимо из условия нормировки рассчитать химический потенциал, зависящий от радиуса нанопроволоки, напряженности внешнего электрического поля, констант Рашбы и Дрессельхауза и температуры. Предполагается, что при рассмотренных температурах доноры ионизированы.

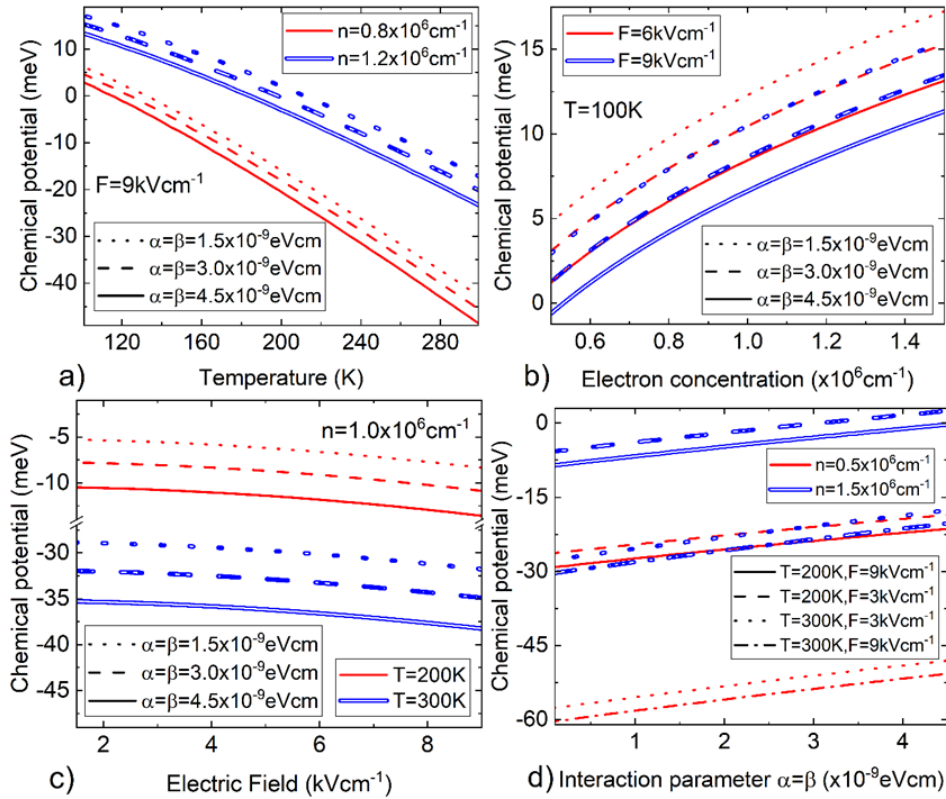


Рис. 1. Зависимость химического потенциала от температуры (а), концентрации электронов (б), напряженности электрического поля (с) и параметров спин-орбитального взаимодействия (д).

На рис.1 представлены зависимости химического потенциала нанопроволоки от температуры, концентрации электронов, напряженности внешнего электрического поля и параметров спин-орбитального взаимодействия при фиксированных значениях остальных параметров, представленных на графиках. Химпотенциал в случаях  $n_L = 0.8 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$  и  $n_L = 1.2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$  и в электрическом поле  $F = 9 \text{ кВ/см}$  при повышении

температуры (рис. 1,а) монотонно убывает, а при 100 К и при фиксированных значениях напряженности электрического поля вместе с увеличением концентрации электронов (рис. 1,б) монотонно возрастает, что естественно и ожидалось в обоих случаях. Во всех рассматриваемых случаях снижение химического потенциала электронного газа в нанопроволоке с увеличением напряженности электрического поля (рис. 1,с) объясняется тем, что при параболическом ограничивающем потенциале увеличение напряженности электрического поля, как следует из формулы (2), приводит к уменьшению размерно-квантованной энергии электрона, что, в свою очередь, при постоянной электронной концентрации требует уменьшения химического потенциала. Аналогичным образом объясняется увеличение химического потенциала электронного газа с увеличением параметров спин-орбитального взаимодействия (рис. 1(д)). Как следует из формулы (5), увеличение параметров СОВ привело бы к уменьшению концентрации электронов, поэтому условием сохранения последней является увеличение химического потенциала.

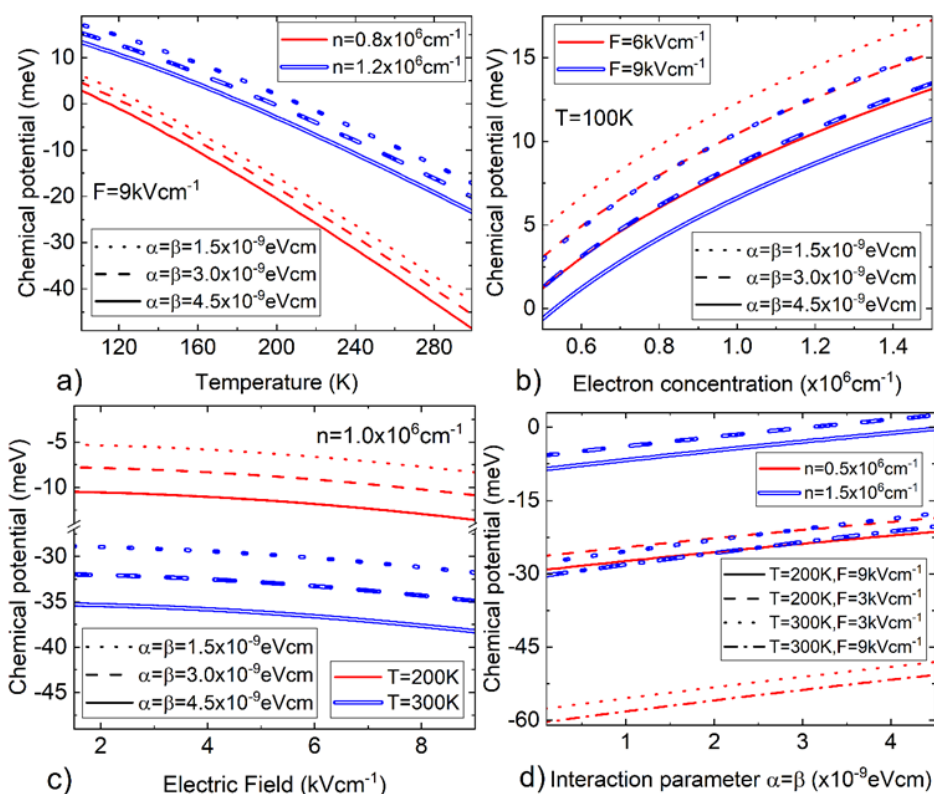


Рис. 2. Зависимость подвижности электрона от температуры (а), концентрации электронов (б), напряженности электрического поля (с) и параметров спин-орбитального взаимодействия (д).

Подвижность электрона при рассеянии на полярных оптических фононах в зависимости от температуры, концентрации электронов, напряженности внешнего электрического поля и параметров спин-орбитального взаимодействия исследована численно (рис. 2). С ростом температуры подвижность электронов уменьшается (рис. 2,a), поскольку увеличивается среднее число полярных оптических фононов, на которых рассеиваются электроны. Подвижность уменьшается также с ростом концентрации электронов (рис. 2,b), что, согласно формуле (3) является следствием более слабой зависимости подвижности от фактора  $f(E)[1 - f(E)]$ , чем ее зависимость от линейной концентрации ( $n_L^{-1}$ ). Подвижность почти не меняется в зависимости от увеличения напряженности электрического поля (рис. 2,c) и медленно снижается лишь при относительно высоких температурах. При увеличении параметров спин-орбитального взаимодействия (рис. 2,d) подвижность электронов существенно возрастает, при этом скорость роста относительно высока при низких температурах.

**4. Заключение.** Теоретически исследовано влияние внешнего электрического поля на подвижность электронов в полярной нанопроволоке с учетом спин-орбитального взаимодействия. Для нанопроволоки CdSe представлены численные результаты расчета зависимостей подвижности от температуры, напряженности электрического поля и концентрации электронов с учетом влияния СОВ. Показано, что подвижность электронов уменьшается как с увеличением температуры, так и с увеличением линейной концентрации электронов. Из полученных результатов следует, что учет СОВ приводит к значительному увеличению подвижности электронов, при этом скорость роста сравнительно велика при низких температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования, науки, культуры и спорта РА в рамках проекта № 21AG-1C048.

Ереванский государственный университет  
e-mail: ashot.movsisyan1@ysu.am

**А. А. Мовсисян**

**Влияние спин-орбитального взаимодействия на подвижность  
электрона в нанопроволоке при рассеянии на полярных  
оптических фононах**

Исследована подвижность электронов, рассеянных на полярных оптических фононах в цилиндрической полярной полупроводниковой нанопроволоке, погруженной в полярную среду во внешнем электрическом поле. С учетом спин-орбитального взаимодействия получены зависимости подвижности электронов от напряженности электрического поля, линейной концентрации электронов и температуры. Показано, что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к

значительному увеличению подвижности электронов, при этом скорость роста сравнительно велика при низких температурах.

## Ա. Հ. Մովսիսյան

### Սպին-ուղեծրային փոխազդեցության ներգործությունը նանուլարում էլեկտրոնի շարժունության վրա պայմանավորված բևեռային օպտիկական ֆոնոնների վրա ցրումներով

Ուսումնասիրվել է բևեռային միջավայրում տեղակայված գլանաձև բևեռային կիսահաղորդչային նանուլարում բևեռային օպտիկական ֆոնոնների վրա ցրված էլեկտրոնի շարժունությունը արտաքին էլեկտրական դաշտում: Սպին-ուղեծրային փոխազդեցության հաշվառմամբ ստացվել են էլեկտրոնի շարժունության կախումներն էլեկտրական դաշտի լարվածությունից, էլեկտրոնների զծային կոնցենտրացիայից և ջերմաստիճանից: Ցույց է տրված, որ սպին-ուղեծրային փոխազդեցության հաշվառումը հանգեցնում է էլեկտրոնի շարժունության զգալի աճի, ընդ որում աճի արագությունը համեմատաբար մեծ է ցածր ջերմաստիճաններում:

## A. H. Movsisyan

### Influence of Spin-Orbit Interaction on Electron Mobility in a Nanowire Due to Scattering by Polar Optical Phonons

The mobility of electrons scattered by polar optical phonons in a cylindrical polar semiconductor nanowire embedded in a polar environment has been studied in an external electric field. By taking into account the spin-orbit interaction, the dependences of electron mobility on the electric field strength, linear concentration of electrons, and temperature were obtained. It is shown that taking spin-orbit interaction into account leads to a significant increase in electron mobility, and the growth rate is relatively high at low temperatures.

## Լիտերատյւրա

1. Greytak A. B., Barrelet C. J., Li Y. et al. – Appl. Phys. Lett. 2005. V. 87. P. 151103.
2. Dai X., Messanvi A., Zhang H. et al. – Nano Lett. 2015. V. 15. P. 6958.
3. Dai X., Zhang S., Wang Z. et al. – Nano Lett. 2014. V. 14. 2688.
4. Krogstrup P., Jørgensen H. I., Heiss M. et al. – Nat. Photonics. 2013. V. 7, P. 306.
5. Xiang J., Lu W., Hu Y. et al. – Nature. 2006. V. 441. P. 489.
6. Winkler R., Papadakis S., De Poortere E. et al. – Springer, Berlin, Heidelberg. 2003. V. 41.
7. Davies J. H. *The physics of low-dimensional semiconductors*. Cambridge. University Press. 1998. 451 p.
8. Kohda M., Lechner V., Kunihashi Y. et al. – Phys. Rev. 2012. B 86. P. 081306.
9. Lee H. C., Yang S.-R. E. – Phys. Rev. 2005. B 72. P. 245338.

10. *Vartanian A. L., Ghukasyan T. K., Asatryan A. L. et al.* – Micro and Nanostructures. 2022. V. 168. P. 207287.
11. *Kubo R.* – J. Phys. Soc. Jpn. 1958. V. 12, P. 570; *Greenwood D. A.* – Proc. Phys. Soc. London. 1958. V. 71. P. 585.
12. *Kotlyar R., Obradovic B., Matagne P. et al.* – Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 5270.
13. *Gantmakher V. F., Levinson Y. B.* Carrier scattering in metals and semiconductors. North-Holland, Amsterdam. 1987. 473 p.
14. *Winkler R.* Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. Springer-Verlag, Berlin. 2003. 228 p.
15. *Schliemann J., Egues J. C., Loss D.* – Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 14681.