

ĐỘ RỘNG VẠCH PHỔ HẤP THỤ TẠO BỞI CẤU TRÚC GIẾNG LƯỢNG TỬ AlGaAs/GaAs/AlGaAs PHA TẠP ĐIỀU BIẾN DO TÁN XẠ NHÁM BỀ MẶT

Nguyễn Thành Tiên¹, Đặng Minh Thứ¹ và Lê Thị Thu Vân¹

¹ Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

Thông tin chung:

Ngày nhận: 08/03/2013

Ngày chấp nhận: 19/08/2013

Title:

Absorption linewidth in the modulation-doped AlGaAs/GaAs/AlGaAs quantum wells due to interface roughness scattering

Từ khóa:

Cấu trúc nano, giếng lượng tử, khí điện tử hai chiều, độ mở rộng vạch phổ, cấu trúc dị chất, cấu hình tạp

Keywords:

Nano structure, quantum well, two-dimensional electron gas, absorption linewidth, heterostructure, doping profile

ABSTRACT

We calculate and investigate the influence of characteristic parameters of the modulation doping real quantum well (AlGaAs/GaAs/AlGaAs) to the distribution of the two-dimensional electron gas in the quantum well by the variational method. The studying results recorded that there is significantly change the distribution of electron gas in the well in the ground state and the excited state by the doping profile of the modulation-doped system. Thence, we evaluate the effects of the doping profile and the roughness profile parameters to the absorption linewidth. We believe that the changes of the distributions causes changes surface roughness scattering intensity, thus changing the absorption linewidth by the optical transition phenomenon between the two lowest subbands but this effect was little mentioned before.

TÓM TẮT

Chúng tôi tính toán và khảo sát ảnh hưởng của các tham số đặc trưng của hệ giếng lượng tử thực AlGaAs/GaAs/AlGaAs pha tạp điều biến đến sự phân bố khí điện tử hai chiều trong giếng lượng tử bằng phương pháp biến phân. Kết quả tính ghi nhận được rằng có sự thay đổi đáng kể sự phân bố điện tử trong giếng ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích theo cấu hình tạp của hệ pha tạp điều biến. Từ đó, chúng tôi đánh giá ảnh hưởng của các tham số đặc trưng cho cấu hình tạp và cấu hình nhám lên độ rộng vạch phổ hấp thụ. Chúng tôi cho rằng sự thay đổi phân bố là nguyên nhân làm thay đổi cường độ tán xạ nhám bề mặt, vì thế làm thay đổi độ mở rộng vạch phổ hấp thụ bởi hiện tượng chuyển dời quang giữa hai vùng con thấp nhất nhưng hiệu ứng này ít được đề cập trước đây.

1 GIỚI THIỆU

Các cấu trúc lượng tử bán dẫn, chẳng hạn như giếng lượng tử (quantum well), dây lượng tử (quantum wire), chấm lượng tử (quantum dot) hay siêu mạng (superlattices)... là những chủ đề nghiên cứu quan trọng trong vật lý bán dẫn trong những thập kỷ gần đây [1]. Nó biểu hiện nhiều hiệu ứng cơ học lượng tử và được áp dụng cho việc phát triển các linh kiện điện tử và quang điện tử. Trong đó, có một lớp các linh kiện bán dẫn dựa trên hiện tượng hấp thụ quang bởi sự chuyển

dời giữa các trạng thái lượng tử trong vùng dẫn hay vùng hóa trị của các hệ thấp chiều. Sự chuyển dời này cho nhiều đặc tính vật lý quan trọng trong việc phát triển linh kiện như khả năng điều chỉnh bước sóng hay điều chỉnh thời gian hồi phục (relaxation time) nhờ kỹ thuật vùng, sự xuất hiện thời gian sống hạt tải siêu nhanh và các hiệu ứng quang phi tuyến. Những linh kiện quan trọng đã được hiện thực hóa như máy thu bức xạ hồng ngoại dựa trên giếng lượng tử (quantum well infrared photodetector-QWIP) hay laser nhiều

tầng lượng tử (quantum cascade laser – QC) với các hệ vật liệu InGaAs/InAlAs hay GaAs/AlGaAs bằng phương pháp nuôi epitaxy [2].

Sự giam cầm lượng tử (quantum confinement) lên các hạt tải điện bởi thể một chiều (làm cho các hạt tải điện có đặc tính giả hai chiều) hình thành trong các lớp bán dẫn mỏng (cỡ nano met - cấu trúc nano) là đối tượng vật lý được gọi là giếng lượng tử vừa được đề cập. Do sự giam cầm lượng tử lên các hạt tải điện tồn tại trong giếng làm các mức năng lượng bị lượng tử hóa dọc theo hướng nuôi tinh thể trong các mẫu nuôi dẫn đến sự chuyển dời quang (optical transitions) giữa các mức năng lượng này là có thể. Ta biết rằng, sự chuyển dời từ các mức năng lượng trong vùng hóa trị đến các mức năng lượng trong vùng dẫn được gọi là sự chuyển dời ngoài vùng (interband transitions), trái lại sự chuyển dời giữa các mức năng lượng bị tách ra do hiệu ứng lượng tử vừa đề cập trong cùng một vùng được gọi là chuyển dời giữa các vùng con (intersubband transitions). Sự tách các mức năng lượng trong giếng lượng tử phụ thuộc cơ bản vào độ rộng và độ sâu của giếng, nó ảnh hưởng cơ bản vào hiệu ứng chuyển dời. Tuy nhiên, nó còn phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác, tùy từng hệ vật liệu nghiên cứu.

Dingle và cộng sự [3] lần đầu tiên vào năm 1974 đã quan sát được các trạng thái lượng tử trong giếng lượng tử bán dẫn. Giếng lượng tử của Dingle nghiên cứu là một lớp GaAs (cấu trúc giả kềm) mỏng kẹp giữa hai lớp $Al_xGa_{1-x}As$ có vai trò như rào (cấu trúc cụ thể là $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$). Cấu trúc này còn gọi là giếng lượng tử hình thành bởi bộ tiếp giáp dị chất (double heterostructure). Tiếp theo, lần đầu tiên vào năm 1985, West và Eglash [4] đã thực hiện thí nghiệm quan sát được sự chuyển dời giữa các vùng con trong vùng dẫn của giếng lượng tử $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (giếng này gọi là giếng lượng tử cấu trúc dị chất đơn (single heterostructure) hình thành bởi một tiếp giáp dị chất) với bước sóng thu được ở khoảng $10\ \mu m$, và độ rộng vạch phổ hẹp khoảng 10 meV. Kết quả này đã khẳng định và xác nhận cho một số lý thuyết đã tiên đoán trước đây về khả năng có thể dò được bức xạ hồng ngoại trên cơ sở chuyển dời giữa các vùng con trong giếng lượng tử [5]. Sau đó có nhiều kết quả thí nghiệm lần lý thuyết khảo sát sự chuyển dời giữa các vùng con trên các hệ vật liệu khác nhau, chẳng hạn như InGaAs/AlGaAs hay AlGaIn/GaN (cấu

trúc III-nitrite) và các giếng lượng tử dựa trên các nguyên tố nhóm IV như Si, SiGe (cấu trúc lập phương). Nhiều ứng dụng linh kiện dựa trên sự hấp thụ quang giữa các vùng con (intersubband optical absorption) trong các vật liệu bán dẫn đã được đánh giá và đã được hiện thực hóa [6].

Tuy nhiên, để tối ưu các linh kiện quang điện tử dựa trên sự hấp thụ quang giữa các vùng con trong các cấu trúc nano bán dẫn hai chiều này vẫn còn nhiều vấn đề cần phải làm rõ. Vì đây là cấu trúc rất tinh tế nên một sự biến đổi nhỏ của các tham số cấu trúc chẳng hạn như có tồn tại các thể giam cầm bổ sung hay các thể tán xạ bổ sung cũng có ảnh hưởng lớn đến hoạt động linh kiện hay cụ thể hơn là ảnh hưởng đến phổ hấp thụ do sự chuyển dời quang học giữa các vùng con tồn tại trong hệ. Chúng ta thấy rằng, có hai nhân tố chính ảnh hưởng đến hiện tượng hấp thụ quang giữa các vùng con trong các cấu trúc nano bán dẫn hai chiều đó là:

- Các nguồn thế gây ra giam cầm lượng tử
- Các nguồn gây ra sự tán xạ hạt tải điện

Vì thế, việc làm rõ vai trò của hai nhân tố này ảnh hưởng như thế nào đến hiện tượng hấp thụ quang giữa các vùng con cần được nghiên cứu có hệ thống. Chúng ta cũng biết rằng, phổ hấp thụ bởi sự chuyển dời giữa các vùng con trong các giếng lượng tử là một đặc trưng vật lý quan trọng, ba đặc trưng để xác định phổ là: vị trí đỉnh phổ (bước sóng xảy ra sự hấp thụ cực đại), cường độ và độ rộng vạch phổ (linewidth). Việc nghiên cứu hiện tượng hấp thụ quang giữa các vùng con là nghiên cứu xác định các nhân tố ảnh hưởng đến ba đặc trưng này. Hai nhân tố đầu là vị trí đỉnh phổ và cường độ nói chung ít bị ảnh hưởng bởi các yếu tố vật lý bổ sung mà chủ yếu ảnh hưởng nhiều bởi các yếu tố vật lý cơ bản và nhân tố kỹ thuật, mà kỹ thuật nuôi epitaxy là kỹ thuật nuôi chủ yếu để thực hóa các hệ này ngày nay là tương đối thuần thực. Nhân tố thứ ba là độ rộng vạch phổ là nhân tố bị ảnh hưởng nhiều bởi các yếu tố vật lý cơ bản và bổ sung, nó quyết định đến chất lượng và độ ổn định của linh kiện, cần phải được nghiên cứu có hệ thống và nghiên cứu định lượng. Cũng cần nhấn mạnh thêm rằng, phần nhiều các nghiên cứu trước đây quan tâm đến ảnh hưởng của các nguồn gây ra tán xạ hạt tải lên phổ hấp thụ bởi sự chuyển dời giữa các vùng con [7, 8] mà chưa quan tâm nhiều đến vai trò ảnh hưởng của các nguồn giam cầm hạt tải điện. Các nghiên cứu

này đã xác nhận rằng, đóng góp chính ảnh hưởng đến độ rộng vạch phổ là tán xạ nhám bề mặt. Trong nghiên cứu trước đây [9], chúng tôi cũng đã đưa ra được phương pháp hiệu quả để đánh giá các tham số nhám từ dữ liệu độ rộng vạch phổ. Tuy nhiên, các nghiên cứu này khi tính đóng góp của tán xạ nhám bề mặt vào bề rộng vạch phổ thì chưa xét vai trò của uốn cong vùng hay sự thay đổi dạng của hàm sóng ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích bởi tạp pha điều biến. Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của cấu hình tạp pha điều biến vào hàm sóng ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích. Từ đó, khảo sát ảnh hưởng của cấu hình tạp pha điều biến vào bề rộng vạch phổ tương ứng bởi tán xạ nhám.

Bài báo gồm ba phần chính, phần thứ nhất là phát biểu mô hình vật lý của hệ nghiên cứu, phần hai trình bày các biểu thức toán học tính được liên quan đến phân bố khí điện tử trong giếng và các biểu thức toán học xác định độ mở rộng vạch phổ

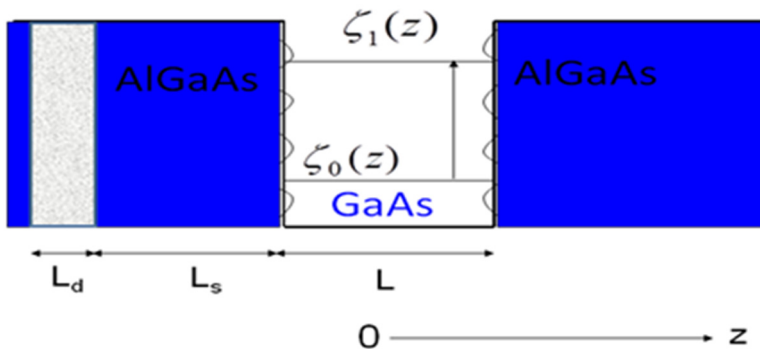
bởi tán xạ nhám, phần thứ ba là các kết quả tính số và thảo luận. Cuối cùng là phần kết luận.

2 MÔ HÌNH VẬT LÝ CỦA HỆ NGHIÊN CỨU

Mô hình vật lý của hệ nghiên cứu là giếng lượng tử hình thành trên mẫu vật liệu thực là AlGaAs/GaAs/AlGaAs. Trong thực nghiệm, mẫu này được nuôi bằng phương pháp epitaxi chùm phân tử [8, 10]. Với phương pháp nuôi epitaxi chùm phân tử, người ta có thể pha tạp với nồng độ theo ý muốn và tạp được pha vào vùng mong muốn, thường gọi là pha tạp điều biến, tạp được pha nằm cách biệt với hệ điện tử hình thành trong giếng một khoảng cách là L_s . Giếng có độ rộng là L và kích thước phân bố tạp là L_d . Để hạn chế vai trò của tán xạ phonon, trong các nghiên cứu người ta thường thực hiện ở nhiệt độ thấp để thu được kết quả tối ưu. Nghiên cứu này cũng xem xét hệ tồn tại ở nhiệt độ thấp. Mô hình hệ nghiên cứu được minh họa ở Hình 1.

Hình 1: Mô hình giếng lượng tử tạo bởi cấu trúc dị chất bội

Trong đó L là độ rộng giếng, L_s là khoảng cách từ vùng phân bố tạp tới rào, L_d là độ rộng của phân bố tạp



3 CÁC BIỂU THỨC TOÁN HỌC

Độ rộng vạch phổ hấp thụ bị chi phối bởi hai nhân tố chính là phân bố của khí điện tử trong giếng và các cơ chế tán xạ. Sau đây là các biểu thức toán học đặc tả các phân bố và các thừa số dạng đặc trưng cho cơ chế tán xạ nhám bề mặt chiếm ưu thế mà chúng tôi tính được cho hệ nghiên cứu này.

3.1 Các thế giam giữ

Hệ nghiên cứu là hệ pha tạp điều biến (tạp không nằm trong giếng). Rào thế cơ bản $V_b(z)$ đặt ở mặt phẳng $z = -L/2$ và $z = L/2$ do có sự chênh lệch đáy vùng dẫn giữa hai lớp vật liệu AlGaAs và GaAs khi ghép chúng lại với nhau.

$$V_b(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ V_0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (1)$$

với V_0 là độ cao rào thế.

Với rào thế cơ bản có dạng chữ nhật như vừa đề cập thì hệ khí điện tử hai chiều ở vùng con thấp nhất có thể được mô tả bởi hàm sóng

$$\zeta_0(z) = \begin{cases} B_0 \sqrt{\frac{\pi}{L}} \cos \frac{\pi z}{L} e^{-C_0 z/L}, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ 0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (2)$$

với B_0 là hệ số chuẩn hóa, C_0 là tham số không thứ nguyên đặc trưng cho mức độ uốn cong của hàm bao cơ bản. Hàm sóng ở trạng thái kích thích thứ nhất có thể được mô tả bởi

$$\zeta_1(z) = \begin{cases} B_1 \sqrt{\frac{\pi}{L}} \sin 2 \frac{\pi z}{L} e^{-C_1 z/L}, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ 0, & |z| \geq \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (3)$$

với B_1 là hệ số chuẩn hóa, C_1 là tham số không thứ nguyên đặc trưng cho mức độ uốn cong của hàm bao kích thích.

Hai hàm sóng trên sẽ được xác định khi cực tiểu hóa năng lượng ứng với một hạt để xác định các tham số (B_0, C_0, B_1, C_1) và được xác định bởi Hamilton

$$H = T + V_{tot}(z). \quad (4)$$

Ở đây T là động năng và $V_{tot}(z)$ là thế năng giam giữ hiệu dụng theo phương z . Thế năng hiệu dụng này bao gồm thế rào ($V_b(z)$), thế Hartree ($V_H(z)$) tạo bởi các ion donor, và tạo bởi các hạt tải điện:

$$V_{tot}(z) = V_b(z) + V_H(z). \quad (5)$$

Trong vùng điện tích không gian, thế Hartree được xác định theo phương trình Poisson:

$$\frac{d^2}{dz^2} V_H(z) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_a} [N_I(z) - N_s(z)], \quad (6)$$

trong đó, $N_I(z)$ là nồng độ ion tạp ba chiều hay là phân bố của các ion tạp theo phương nuôi mẫu, $N_s(z)$ là nồng độ điện tử ba chiều, cũng là phân bố của các điện tử theo phương nuôi mẫu và ϵ_a là hằng số điện môi trung bình của hệ vật liệu nghiên cứu.

Nồng độ điện tử phân bố trong giếng GaAs được xác định theo hàm sóng (2) và (3) bởi phương trình sau:

$$N_s(z) = n_s |\zeta(z)|^2, \quad (7)$$

trong đó, n_s là mật độ điện tử mặt. Ta giải phương trình Poisson (6) với các điều kiện biên phù hợp ta được $V_H(z)$.

3.2 Cực tiểu hóa năng lượng theo phương pháp biến phân

Theo phương pháp biến phân, để xác định hàm sóng, chúng ta cần xác định các tham số biến phân bởi cực tiểu hóa năng lượng.

Năng lượng ứng với một điện tử ở trạng thái cơ bản sẽ là tổng các trung bình cơ học lượng tử ứng với trạng thái cơ bản đó như sau:

$$E_0(B_0, C_0) = \langle T \rangle_0 + \langle V_b \rangle_0 + \langle V_H \rangle_0. \quad (8)$$

Chúng tôi tính được chúng với các kết quả sau :

$$\langle T \rangle_0 = -\frac{\pi \hbar^2 B_0^2}{2m_z L^2} \left[\frac{C_0^2 - \pi^2}{\pi B_0^2} + \pi C_0 \psi_2(C_0) \right], \quad (9)$$

$$\text{với } \psi_2(C_0) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right) e^{-2C_0 z/L} dz.$$

$$\langle V_b \rangle_0 = 0 \quad (10)$$

$$\langle V_H \rangle_0 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_a} \left[-\frac{n_I L \pi B_0^2}{4} \left(\frac{\partial \varphi_0(C_0)}{\partial C_0} + \frac{\partial \varphi_2(C_0)}{\partial C_0} \right) \frac{N_I L_s^2}{2} \right], \quad (11)$$

$$\text{với } \varphi_0(C) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-2Cz/L} dz \quad \text{và}$$

$$\varphi_2(C) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right) e^{-2Cz/L} dz.$$

Tương tự, năng lượng ứng với một điện tử ở trạng thái kích thích thứ nhất sẽ là

$$E_1(B_1, C_1) = \langle T \rangle_1 + \langle V_b \rangle_1 + \langle V_H \rangle_1. \quad (12)$$

Chúng tôi tính được các số hạng này với các kết quả như sau

$$\langle T \rangle_1 = -\frac{\pi \hbar^2 B_1^2}{2m_z L^2} \left[\frac{4\pi^2 - C_1^2}{\pi B_1^2} + 2\pi C_1 \psi_4(C_1) \right], \quad (13)$$

$$\text{với } \psi_4(C_1) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sin\left(\frac{4\pi z}{L}\right) e^{-2C_1 z/L} dz.$$

$$\langle V_b \rangle_1 = 0. \quad (14)$$

$$\langle V_H \rangle_1 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_a} \left[-\frac{n_I L \pi B_1^2}{4} \left(\frac{\partial \varphi_0(C_1)}{\partial C_1} + \frac{\partial \varphi_4(C_1)}{\partial C_1} \right) \frac{N_I L_s^2}{2} \right], \quad (15)$$

$$\text{với } \varphi_4(C) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{4\pi z}{L}\right) e^{-2Cz/L} dz.$$

3.3 Độ mở rộng vạch phổ bởi tán xạ nhám bề mặt

Lý thuyết tổng quát về độ mở rộng vạch phổ hấp thụ bởi chuyển dời giữa các vùng con do tán xạ đàn hồi trong hệ hai chiều được xác định bởi Ando [11]. Theo lý thuyết Ando, phổ hấp thụ kích thích đơn hạt giữa hai vùng con thấp nhất được xác định bởi

$$\text{Re } \sigma_{zz}(\omega) = \frac{e^2 f_{10}}{2m^*} \int dE \frac{m^*}{\pi \hbar^2} f(E) \frac{\hbar \Gamma_{op}(E)}{(\hbar\omega - E_{10})^2 + \Gamma_{op}(E)^2}, \quad (16)$$

với tất cả các điện tử ban đầu ở trạng thái cơ bản. Trong đó, e là điện tích của điện tử, m^* là khối lượng hiệu dụng điện tử, f_{10} là cường độ dao động, $E_{10} = E_1 - E_0$ là độ tách mức năng lượng giữa hai vùng con, $f(E)$ là hàm phân bố Fermi ở nhiệt độ T , $\Gamma_{op}(E)$ là độ rộng phổ được xác định bởi

$$\Gamma_{op}(E) = \frac{1}{2} [\Gamma_{intra}(E) + \Gamma_{inter}(E)] \quad (17)$$

Với việc xem xét tán xạ nhám bề mặt và sử dụng cấu hình bề mặt nhám dạng Gauss [8], biểu thức $\Gamma_{inter}(E) = \Gamma_{inter}^-(E) + \Gamma_{inter}^+(E)$ đặc trưng cho tán xạ giữa các vùng con và $\Gamma_{intra}(E) = \Gamma_{intra}^-(E) + \Gamma_{intra}^+(E)$ đặc trưng cho tán xạ nội vùng con có dạng như sau:

$$\Gamma_{intra}^\mp(E) = \frac{m^* \Delta^2 \Lambda^2 \pi}{\hbar^2} \int_0^\pi d\theta \left[\frac{F_{00}^\mp}{S(q,T)} - F_{11}^\mp \right]^2 e^{-q^2 \Lambda^2 / 4}, \quad (18)$$

$$\text{với } q^2 = \frac{4m^*}{\hbar^2} E(1 - \cos\theta).$$

$$\Gamma_{inter}^\mp(E) = \frac{m^* \Delta^2 \Lambda^2}{\hbar^2} (F_{01}^\mp)^2 \int_0^\pi d\theta e^{-\tilde{q}^2 \Lambda^2 / 4}, \quad (19)$$

$$\text{với } \tilde{q}^2 = \frac{4m^*}{\hbar^2} \left[E + \frac{E_{10}}{2} - \sqrt{E(E + E_{10})} \cos\theta \right].$$

Trong đó, θ là góc tán xạ trong mặt phẳng. Trong các nghiên cứu trước [9, 10], các thừa số dạng F_{mn}^\mp được xác định bởi

$$F_{mn}^\mp = V_0 \xi_m(\mp L/2) \xi_n(\mp L/2). \quad (20)$$

Thừa số dạng tính bởi biểu thức này mang tính địa phương, chúng tôi đề xuất một thừa số dạng mang tính toàn cục hơn [12] có dạng sau:

$$F_{mn}^\mp = [E_m - V_H(z_i)] \xi_m(z_i) \xi_n(z_i) + \frac{\hbar^2}{2m_z} \xi_m'(z_i) \xi_n'(z_i) + E_{nm} \int_{-\infty}^{z_i} dz \xi_n(z) \xi_m'(z) + \int_{z_i}^{\infty} dz \xi_m(z) \xi_n'(z) V_H'(z), \quad (21)$$

với z_i là tọa độ của một vị trí bất kỳ được chọn bên trong giếng.

Cuối cùng, chúng ta cần xác định giá trị hiệu dụng của độ mở rộng vạch phổ là

$$\gamma = 2\bar{\Gamma}_{op} = \frac{1}{E_F} \int_0^{E_F} \Gamma_{op}(E) dE. \quad (22)$$

4 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Với các kết quả giải tích ở trên, chúng tôi viết chương trình máy tính để mô phỏng phân bố điện tử trong giếng ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thứ nhất. Sau đó khảo sát sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo các tham số đặc trưng cho hệ nghiên cứu. Chúng tôi sử dụng các tham số nhập vào cơ bản như sau:

Bảng 1 : Các thông số nhập vào [13]

Khối lượng hiệu dụng (m^*)	0.067 m_e
Hằng số điện môi trung bình (ϵ_a)	12.4
Độ cao rào thế (V_b)	0.31 eV
Sử dụng điều kiện trung hòa điện tích	$n_l = n_s$

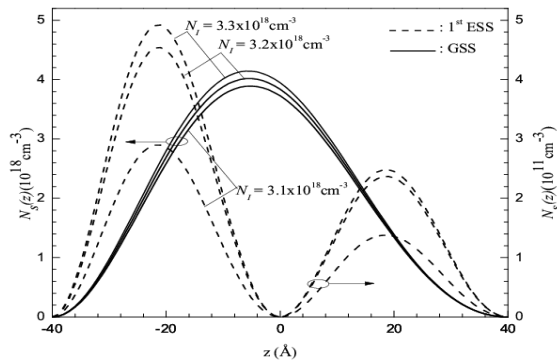
m_e là khối lượng điện tử tự do

4.1 Đồ thị biểu diễn phân bố điện tử trong giếng

Dựa vào các mẫu thực nghiệm với một số tham số vật lý đã được xác định, chúng tôi khảo sát sự phân bố khí điện tử trong giếng và bề rộng vạch phổ theo sự thay đổi của một tham số và cố định các tham số kia ứng với các khoảng giá trị thực nghiệm đã đo được của các mẫu có các cấu hình tạp pha điều biến [6, 8, 13].

Phân bố điện tử trong giếng được xác định theo biểu thức (7), với việc cực tiểu hóa năng lượng để xác định các tham số biến phân, tôi lần lượt vẽ các phân bố điện tử ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thứ nhất.

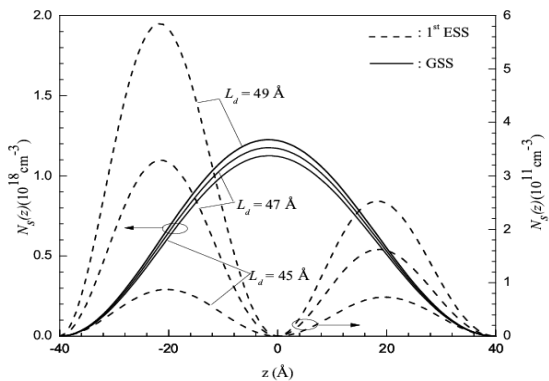
Đầu tiên, chúng tôi vẽ phân bố trong trường hợp cố định các tham số: chiều rộng giếng $L = 80 \text{ \AA}$, bề rộng vùng tạp $L_d = 50 \text{ \AA}$ và khoảng cách từ vùng tạp đến rào thế là $L_s = 60 \text{ \AA}$ nhưng thay đổi nồng độ tạp N_I như trên Hình 2.



Hình 2: Phân bố điện tử trong giếng ở hai trạng thái cơ bản (GSS) và trạng thái kích thích thứ nhất (1^{st} ESS) với các tham số: L , L_d , L_s cố định nhưng thay đổi N_I

Từ đồ thị Hình 2, ta thấy rằng phân bố điện tử bị dịch chuyển về phía tạp. Với nồng độ tạp càng lớn thì sự dịch chuyển phân bố càng mạnh. Hiệu ứng này thể hiện giống nhau ở cả trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích.

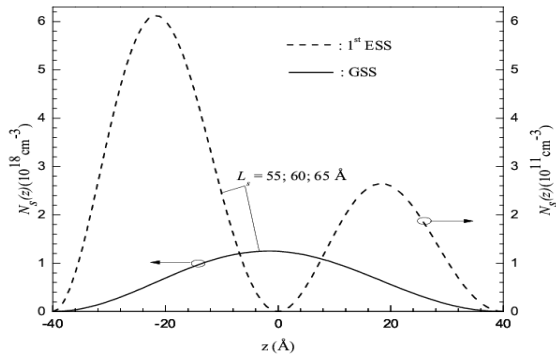
Tiếp theo, chúng tôi cũng vẽ phân bố điện tử với việc cố định các tham số: nồng độ tạp $N_I = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, chiều rộng giếng $L = 80 \text{ \AA}$, và khoảng cách từ vùng tạp đến rào thế là $L_s = 60 \text{ \AA}$ nhưng thay đổi bề rộng vùng tạp L_d (như Hình 3).



Hình 3: Phân bố điện tử trong giếng ở hai trạng thái cơ bản (GSS) và trạng thái kích thích thứ nhất (1^{st} ESS) với các tham số: N_I , L , L_s cố định nhưng thay đổi L_d

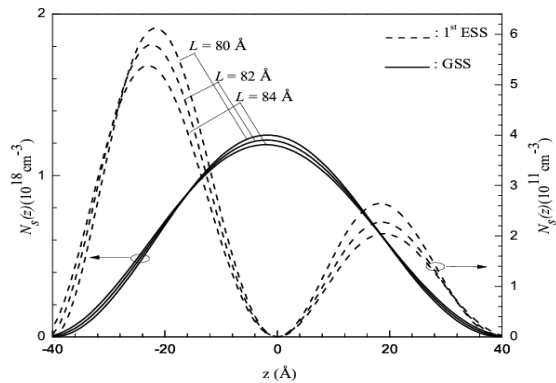
Từ đồ thị ta cũng ghi nhận được rằng, L_d càng tăng tức vùng phân bố tạp càng rộng thì khí điện tử cũng có sự dịch chuyển về phía tạp. Trong Hình 4, chúng tôi cũng vẽ phân bố điện tử với

việc cố định các tham số: nồng độ tạp $N_I = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, chiều rộng giếng $L = 80 \text{ \AA}$, và bề rộng vùng tạp $L_d = 50 \text{ \AA}$ nhưng thay đổi khoảng cách từ biên vùng tạp đến rào L_s (các tham số L_s như trên hình). Chúng tôi ghi nhận rằng không có sự thay đổi phân bố đáng kể khi thay đổi L_s .



Hình 4: Phân bố điện tử trong giếng ở hai trạng thái cơ bản (GSS) và trạng thái kích thích thứ nhất (1^{st} ESS) với các tham số: L , N_I , L_d cố định nhưng thay đổi L_s

Cuối cùng, chúng tôi vẽ phân bố khí điện tử trong giếng với cấu hình tạp không đổi: nồng độ tạp $N_I = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, bề rộng vùng tạp $L_d = 50 \text{ \AA}$ và khoảng cách từ vùng tạp đến rào thế là $L_s = 80 \text{ \AA}$ nhưng thay đổi độ rộng giếng L (như Hình 5). Với cấu hình tạp không đổi nên phân bố ít bị thay đổi về phía vùng tạp, nó chỉ thay đổi theo hướng tăng lên hay giảm xuống theo các hiệu ứng thuần túy lượng tử.

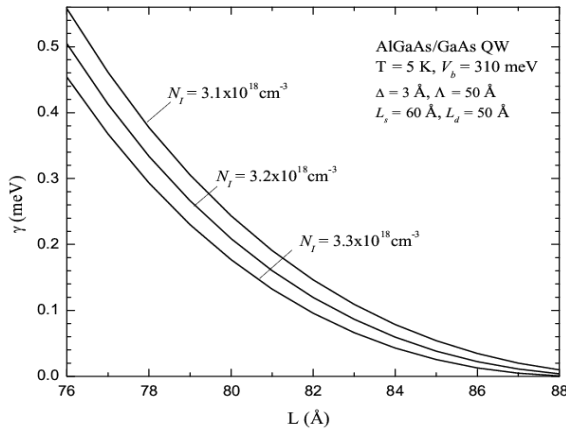


Hình 5: Phân bố điện tử trong giếng ở hai trạng thái cơ bản (GSS) và trạng thái kích thích thứ nhất (1^{st} ESS) với các tham số: N_I , L_d , L_s cố định nhưng thay đổi L

4.2 Đồ thị biểu diễn độ rộng vạch phổ hấp thụ

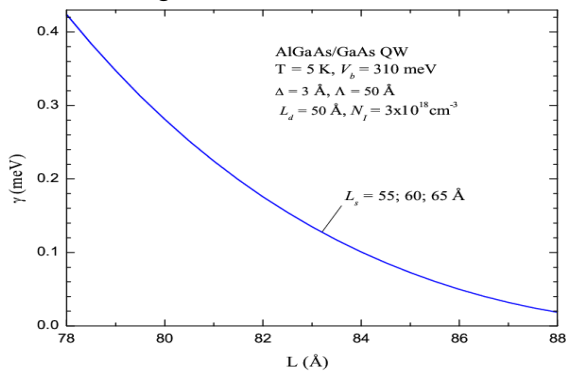
Như đã đề cập ở trên, chúng tôi khảo sát hệ ở nhiệt độ thấp, trong các tính toán sau, chúng tôi chọn $T = 5 \text{ K}$.

Trước tiên, chúng tôi khảo sát sự thay đổi của độ rộng vạch phổ theo chiều rộng giếng L với việc thay đổi nồng độ tạp nhưng cố định các tham số khác (như trên Hình 6).



Hình 6: Sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo chiều rộng giếng L với việc thay đổi nồng độ tạp nhưng cố định các tham số khác

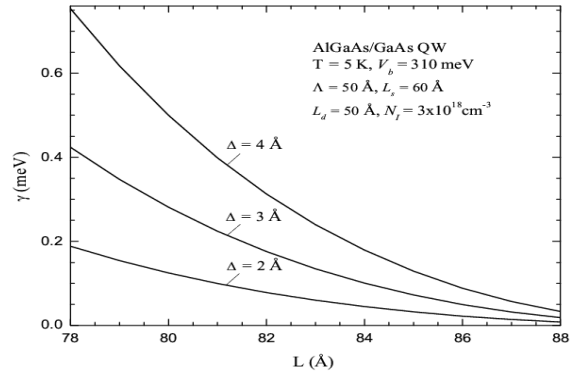
Rõ ràng, từ Hình 6, ta thấy rằng độ rộng vạch phổ giảm khi tăng L , điều này phù hợp với các kết quả nghiên cứu trước đây [6, 8]. Một điều mới được ghi nhận là độ rộng vạch phổ thay đổi đáng kể khi thay đổi nồng độ tạp. Điều này được chúng tôi giải thích rằng có sự thay đổi đáng kể phân bố khi thay đổi nồng độ tạp dẫn đến sự thay đổi tán xạ bởi nhám và sẽ làm thay đổi độ rộng vạch phổ hấp thụ. Để làm rõ hơn điều này, chúng tôi cũng khảo sát độ rộng vạch phổ thay đổi theo độ dài tương quan nhám Λ với việc thay đổi khoảng cách từ vùng tạp đến rào thế nhưng cố định các tham số khác như trong Hình 7.



Hình 7: Sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo độ dài tương quan nhám Λ với việc thay đổi L_s nhưng cố định các tham số khác

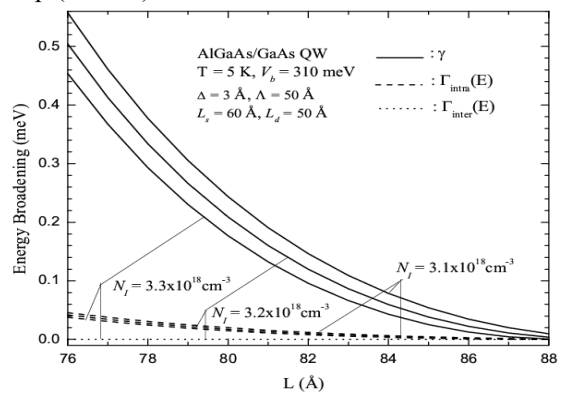
Chúng tôi, cũng ghi nhận được rằng độ rộng vạch phổ càng tăng khi tăng chiều dài tương quan

nhám Λ , vậy nó cũng phù hợp với các kết quả của các nghiên cứu trước [6, 8], tuy nhiên chúng tôi cũng ghi nhận được rằng độ rộng vạch phổ hấp thụ không thay đổi khi thay đổi L_s (nó phù hợp với cơ sở giải thích của chúng tôi từ Hình 3 rằng phân bố khí điện tử không thay đổi khi thay đổi L_s). Để kiểm tra lại kết quả tính, chúng tôi cũng khảo sát độ rộng vạch phổ bởi thay đổi biên độ nhám Δ (như Hình 8). Rõ ràng Δ càng lớn, tán xạ bởi nhám càng mạnh làm tăng độ rộng vạch phổ.



Hình 8: Sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo độ rộng giếng L với việc thay đổi biên độ nhám Δ nhưng cố định các tham số khác

Từ các kết quả trên ta có thể kết luận rằng, vai trò của tán xạ nhám làm thay đổi quan trọng độ rộng vạch phổ, để minh họa thêm, chúng tôi cũng vẽ đồ thị để so sánh hai vai trò của tán xạ làm chuyển trạng thái giữa hai vùng con (inter) và tán xạ nội vùng con (intra), chúng tôi ghi nhận rằng vai trò của tán xạ nội vùng con là đóng góp đáng kể cho sự mở rộng vạch phổ hấp thụ ở nhiệt độ thấp (Hình 9).



Hình 9: Sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo độ rộng giếng L với việc thay đổi N_1 nhưng cố định các tham số còn lại và chọn $E=0.5$ eV, có minh họa kèm vai trò của tán xạ nội vùng con và tán xạ giữa các vùng con

5 KẾT LUẬN

Chúng tôi đã thiết lập được mô hình giam giữ lượng tử cho hệ điện tử trong giếng lượng tử tạo bởi cấu trúc dị chất bộ AlGaAs/GaAs/AlGaAs theo phương pháp biến phân. Từ đó, chúng tôi khảo sát, so sánh ảnh hưởng của các tham số đặc trưng cho cấu hình tạp pha điều biến và cấu hình nhám lên độ mở rộng vạch phổ. Độ mở rộng vạch phổ bị ảnh hưởng đáng kể bởi cấu hình tạp do cấu hình tạp làm thay đổi phân bố. Những kết quả này sẽ có ý nghĩa quan trọng trong việc giải thích sự thay đổi độ rộng vạch phổ theo các tham số của cấu hình tạp pha điều biến của các mẫu vật liệu. Từ đó, chúng ta xác định được phẩm chất của cấu trúc để tối ưu cho việc phát triển các linh kiện quang điện tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Alferov Z. I., The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology, *Review Modern Physics*, 73, 767, (2001).
2. Roberto P., Intersubband transitions in quantum structures, McGraw-Hill Press, (2006).
3. Dingle R., Weigmann W., and Henry C., Quantum States of Confined Carriers in Very Thin $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Heterostructures, *Physical Review Letters*, 33, 827 (1974).
4. West L. C., and Eglash S. J., First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well, *Applied Physics Letters*, 46, 1156 (1985).
5. Smith J. S., Chiu L. C., Margalit S., Yariv A., and Cho A. Y., *A new infrared detector using electron emission from multiple quantum wells*, *Journal Vacuum Science and Technology*, B1, 376 (1983).
6. Liu H. C., and Capasso F., Intersubband transitions in Quantumwell: Physics and device application I, Academic Press, San Diego, (2000).
7. Takeya U., Teruyuki T., Takeshi N., Masahiro Y., Hiroyuki S., Motoyoshi B., and Hidefumi A., Effects of interface roughness and phonon scattering on intersubband absorption linewidth in a GaAs quantum well, *Applied Physics Letters*, 78, 3448 (2001).
8. Takeya U., Masahiro Y., Takeshi N., Hiroyuki S. and Hidefumi A., Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities, *Journal of Applied Physics*, 93, 1586 (2003).
9. Quang D. N., Dat N. N., Tien N. T, and Thao D. N., Single-valued estimation of the interface profile from intersubband absorption linewidth data, *Applied Physics Letters*, 100, 113103 (2012).
10. Campman K. L., Schmidt H., Imamoglu A., and Gossard A. C., Interface roughness and alloy-disorder scattering contributions to intersubband transition linewidths, *Applied Physics Letters*, 69, 2554 (1996).
11. Ando T., Line width intersubband absorption in Inversion layers: Scattering from charged ions, *Journal of the Physical Society of Japan*, 54, 2671 (1985).
12. Quang D. N., Tuan L., Tien N. T, Electron mobility in Gaussian heavily doped ZnO surface quantum wells, *Physical Review B*, 77, 125326 (2008).
13. Sadao Adachi, Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductor, Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications (2005).