

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ПУТЕМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

Е. Р. Бурмистров^{а,б}, В. А. Паришин^с, Д. О. Сенецкая^а, Н. В. Морозова^а,
Ю. В. Фомина^а, Д. Ю. Рязанов^а, С. Н. Гаврилин^д, Н. А. Парфентьева^д, Л. П. Авакянц^е*

^а Национальный исследовательский университет МЭИ, кафедра высшей математики
111250, Москва, Россия

^б Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^с Национальный исследовательский университет МЭИ, кафедра физики им. В. А. Фабриканта
111250, Москва, Россия

^д Национальный исследовательский университет МГСУ, кафедра общей и прикладной физики
129337, Москва, Россия

^е Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 мая 2026 г.,
после переработки 25 июня 2026 г.
Принята к публикации 29 июня 2026 г.

Проведен численный расчет высокочастотной проводимости двумерной электронной системы в полупроводниковых гетероструктурах в терагерцевом диапазоне частот. Модель учитывает рассеяния носителей в двумерной электронной системе на деформационном потенциале и продольных оптических фононах. В основе подхода лежит линеаризованное уравнение Больцмана, решение которого ищется методом разложения неравновесной функции распределения электронной плотности по угловым гармоникам. Получена бесконечная система зацепляющихся интегродифференциальных уравнений для угловых гармоник $\tilde{f}^l$, которая после дискретизации по энергии сводится к блочно-трехдиагональной системе линейных алгебраических уравнений. Предложенный подход позволил количественно разделить вклады рассматриваемых механизмов рассеяния в мнимую часть проводимости, определяющую положение плазменных резонансов, что дало возможность интерпретировать их температурный длинноволновый сдвиг.

Ключевые слова: двумерная электронная система, гетероструктуры, высокочастотная проводимость, терагерцевые частоты, уравнение Больцмана, угловые гармоники

DOI: 10.31857/S0044451026090055

1. ВВЕДЕНИЕ

Фундаментальные физические свойства коллективных колебаний носителей заряда в двумерных

электронных системах (2DES), известных как плазмоны, интенсивно исследуются на протяжении последних нескольких десятилетий [1–3]. Для возбуждения плазмонов в низкоразмерных структурах используются различные типы плазменных структур. Наибольшее распространение среди них получили решетчатые затворы (grating gates), обеспе-

* E-mail: burmistrover@my.msu.ru

чивающие эффективное взаимодействие локализованных под затвором носителей заряда с падающим переменным электромагнитным полем. В условиях, когда характерный размер области локализации носителей значительно меньше длины волны плазменных колебаний, дисперсия поверхностных двумерных (2D) плазмонов приобретает существенную зависимость от диэлектрического окружения 2DES, что принципиально отличает их от объемных плазмонов.

Эффективность возбуждения 2D-плазмонов определяется не только геометрией решетчатого затвора, диэлектрическим окружением или параметрами активной области [4, 5]. Наряду с этим существенную роль играет высокочастотная проводимость 2DES, зависящая от механизмов рассеяния носителей заряда. Действующие каналы релаксации в 2DES модифицируют как действительную, так и мнимую части проводимости, что непосредственно влияет на дисперсионные свойства 2D-плазмонов в терагерцевом (ТГц) диапазоне частот.

В рамках теории деформационного (DA) потенциала модификация электронного спектра связана с макроскопической деформацией кристаллической решетки [6, 7]. В полупроводниках на микроскопическом уровне такие деформации возникают в основном при рассеянии носителей на фононах. В отличие от многих других механизмов рассеяний неупругое электрон-фононное взаимодействие приобретает существенный характер, когда время релаксации носителей становится соизмеримым с периодом внешнего поля, что характерно для ТГц-диапазона, где частота излучения может совпадать с собственными частотами фононов.

Фундаментальные физические свойства существующих полупроводниковых материалов сильно ограничивают возможности их применения в ТГц-диапазоне. В этой связи особый интерес вызывают гетероструктуры на основе нитридов III группы (InGaN/GaN, AlGaIn/GaN). Широкая запрещенная зона (до 2.6 эВ), высокая подвижность носителей ($\sim 10^3 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$) и большое время релаксации носителей ($\sim 200 \text{ пс}$) обуславливают перспективность использования этих материалов в качестве основы для высокочастотных устройств [8].

Известно, что в гетероструктурах на основе GaN существенную роль играет пьезоэлектрическое рассеяние, обусловленное встроенным поляризационным полем. Несоответствие постоянных кристаллических решеток между InGaIn и GaN приводит к возникновению на гетерогранице InGaIn/GaN тангенциальных механических напряжений и форми-

рованию встроенных электрических полей напряженностью, большей $10^3 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$, вызванных пьезоэлектрической и спонтанной поляризациями. Пьезоэлектрическое рассеяние является дополнительным каналом взаимодействия носителей с фононами в нецентросимметричных кристаллах (GaN, AlN, InN). В низкочастотной области пьезоэлектрическое рассеяние вносит существенный вклад в транспортные свойства 2DES [9]. Однако в высокочастотном пределе ($\omega\tau \gg 1$) его вклад в мнимую часть проводимости 2DES стремится к нулю [10–12].

В рамках первого приближения теории деформационного потенциала эффективная масса определяется энергетическим спектром невозмущенной квантовой ямы (КЯ). Следовательно, любые возмущения в энергетическом спектре должны приводить к изменению эффективной массы. Учет электрон-фононного рассеяния особенно важен при теоретическом изучении высокочастотной проводимости полупроводниковой структуры в ТГц-диапазоне. Это связано с тем, что изменение эффективной массы в условиях электрон-фононного взаимодействия непосредственно влияет на величину плазменной частоты как $\omega_p \propto \sqrt{1/m^*}$, определяющей положение резонансных особенностей в частотных спектрах мощности и фазового сдвига ТГц-излучения [13].

В объемных полупроводниках с ростом температуры эффективная масса носителей, как правило, уменьшается [14]. Соответствующие измерения были проведены для объемных полупроводниковых соединений GaAs, InSb и InP [15, 16]. В диапазоне температур 80–300 К эффективная масса уменьшается на 10%. Однако в работе [3] при исследовании генерации 2D-плазмонов в гетероструктурах AlGaIn/GaN в диапазоне 90–200 К эффективная масса носителей увеличивалась на 20%. В частности, для легированного кремнием GaN эффективная масса возрастает примерно с $0.18 m_0$ при 38 К до $0.34 m_0$ при комнатной температуре [3].

Циклотронный резонанс является одним из немногих прямых методов определения эффективной массы основных носителей в твердых телах [17]. В гетероструктурах с множественными квантовыми ямами (МКЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ее значение зависит от мольной доли индия (x_{In}). Хотя x_{In} различается у разных производителей, именно она определяет ширину запрещенной зоны КЯ и эффективную массу носителей. При $x_{\text{In}}=10\%$ эффективная масса в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ составляет $0.22 m_0$ [18]. При облучении ближним ИК-излучением (800 нм) гетероструктур InGaIn/AlGaIn/GaN эффективная масса носителей при 90 К составляет $0.42 m_0$ [3].

В работах, использующих высокочастотные экспериментальные методики, выводы о температурной зависимости эффективной массы были получены в рамках модели Друде–Лоренца [3, 19, 20]. Однако в данной модели учитываются упругие механизмы рассеяния, что существенно ограничивает ее применимость для гетероструктур на основе GaN, где доминирующую роль играет неупругое рассеяние на продольных оптических (LO)-фононах. Кроме того, модель Друде–Лоренца не учитывает пространственную дисперсию, что делает ее некорректной для описания высокочастотных свойств проводимости. Для корректного описания взаимодействия ТГц-излучения с 2D-плазмонами в полупроводниковых гетероструктурах необходим учет пространственной дисперсии проводимости 2DES. Последняя становится существенной в гетероструктурах с решетчатыми затворами, в которых возбуждаются 2D-плазмоны с волновым вектором, сравнимым с обратной длиной свободного пробега носителей.

В работе представлены результаты численного исследования высокочастотной проводимости 2DES в гетероструктурах на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, учитывающего механизмы неупругого электрон-фононного рассеяния, а также эффекты пространственной дисперсии.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОБРАЗЦЫ ГЕТЕРОСТРУКТУР $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В настоящей работе используются результаты ранее проведенных экспериментальных исследований по взаимодействию импульсного ТГц-излучения с полупроводниковыми гетероструктурами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с решетчатыми затворами [13]. Объектами исследований являются светодиодные гетероструктуры с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области, выращенные с использованием метода газовой фазной эпитаксии. Общй внешний вид и слоевая структура образцов показаны на рис. 1.

На подложке Al_2O_3 (ориентация [001], площадь 0.4 мм^2 , толщина 430 мкм) выращивался затравочный слой LT-GaN толщиной 5 мкм. Для снижения плотности дислокаций сформирована буферная сверхрешетка $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (30 периодов $2/2 \text{ нм}$). Активная область содержит три периода $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с толщинами $3/20 \text{ нм}$ и $5/15 \text{ нм}$. Далее следуют слои AlGaIn (20 нм) и GaN (110 нм).

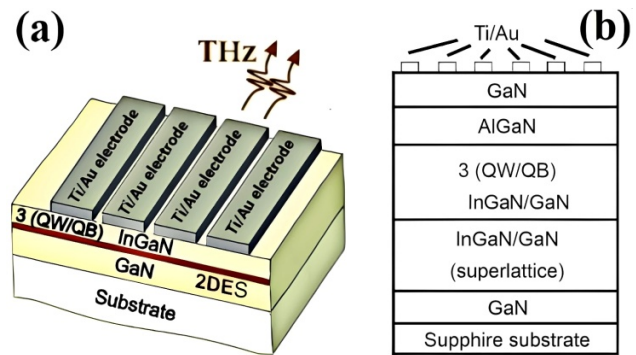


Рис. 1. Внешний вид (a) и слоевая схема (b) гетероструктур с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Методом электронно-лучевой литографии на поверхности структур размером $2.5 \times 2.5 \text{ мм}^2$ формировался решетчатый затвор из Ti/Au. Исследовались гетероструктуры HS1 и HS2, для которых ширина электродов A и расстояние между ними B составили $A/B = 0.90/0.70 \text{ мкм}$ (HS1) и $0.20/0.80 \text{ мкм}$ (HS2). Период затвора $P = A + B$ равен 1.60 мкм (HS1) и 1.00 мкм (HS2). Коэффициент заполнения $K = A/P$ составил 0.56 (56%) и 0.20 (20%) соответственно.

Образцы гетероструктур исследовались с использованием стандартной методики ТГц-спектроскопии с временным разрешением (THz-TDS) [21]. В схеме в качестве источника излучения использовался Ti:Sa-лазер (длительность импульсов 130 фс , $\lambda = 800 \text{ нм}$, средняя мощность 57 мВт , частота следования 60 МГц). Излучение с диаметром пучка 1.8 мм разделялось на импульс накачки и зондирующий импульс. Импульс накачки использовался для генерации ТГц-излучения, зондирующий — в схеме когерентного детектирования. Линия задержки обеспечила пространственное разрешение измерений, равное 17 фс .

3. ГЕОМЕТРИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Объектами настоящего исследования являются гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с МКЯ. В качестве плазменной структуры использовался решетчатый затвор, образованный системой параллельных металлических электродов с периодом P , протяженных вдоль оси y (рис. 2). Ширина каждого электрода и расстояние между ними равны A и B соответственно.

Поглощение гетероструктурами падающего электромагнитного излучения с S -поляризацией происходило под углом Брюстера ($\approx 65^\circ$), что

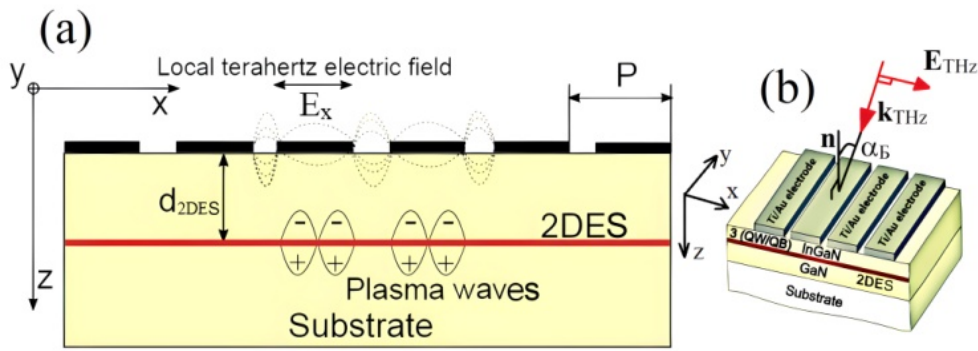


Рис. 2. Схема геометрии эксперимента, где k_{THz} — волновой вектор падающей ТГц-электромагнитной волны, $d_{2\text{DES}}$ — глубина залегания 2DES, E_{THz} — вектор напряженности электрического поля ТГц-излучения, P — период плазмонной структуры, α_B — угол Брюстера, n — нормаль к поверхности гетероструктуры

позволило минимизировать отражение от поверхности структуры и тем самым увеличить долю поглощенной энергии. Волновой вектор падающей электромагнитной волны ориентирован вдоль направления электродов решетки (т.е. параллельно оси y). Такая ориентация обеспечила эффективную передачу импульса между падающим излучением и поверхностными плазмонами в 2DES. Вектор напряженности электрического поля в падающей ТГц-волне, напротив, направлен перпендикулярно электродам затвора (вдоль оси x).

4. ГЕНЕРАЦИЯ ПОДЗАТВОРНЫХ 2D-ПЛАЗМОНОВ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Механизм генерации 2D-плазмонных волн заключается в следующем. Падающая ТГц-волна вызывает смещение носителей в 2DES. Вследствие субволнового размера электродов смещение происходит практически мгновенно по всей структуре. На краях электродов индуцируются переменные заряды противоположного знака, создающие осциллирующие диполи Герца. Период решетки P задает пространственную периодичность ансамбля диполей.

Индукцированные диполи расположены не в сплошной металлической пленке, а в периодической решетке с межэлектродным расстоянием B . Это позволяет компонентам их электромагнитного поля, экспоненциально затухающим с увеличением расстояния, проникать вглубь полупроводника. В результате под затвором возникает пространственно-периодическое электрическое поле с волновым вектором $q = 2\pi/P$.

Плазмон в полупроводниковых гетероструктурах представляет собой продольную волну колебаний плотности заряда, связанную с поперечным электромагнитным полем, локализованным на границах раздела соседних слоев. Возбуждение плазмонов происходит под действием продольной компоненты электрического поля, которую и обеспечивает пространственно-неоднородное поле решетчатого затвора. Поле проникает сквозь межэлектродный зазор и воздействует на носители, расположенные на глубине $d_{2\text{DES}}$, вызывая их смещение. Резонанс наступает, когда частота падающего излучения ω совпадает с собственной частотой плазмона ω_p для данного волнового вектора q , наведенного решеткой. При этом происходит эффективная передача энергии от ТГц-излучения плазмонным колебаниям.

Режим сильной связи реализуется благодаря тому, что система представляет собой систему, состоящую из резонансных мод решетки (диполи на затворе) и плазмонов в 2DES. Их взаимодействие приводит к образованию нормальных мод. Локализация продольного поля под затвором обусловлена экранированием электрического поля металлическими электродами.

5. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Для расчета высокочастотной проводимости 2DES с учетом пространственной дисперсии использовалось кинетическое уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m^*} \frac{\partial F}{\partial r} - eE(r, t) \frac{\partial F}{\partial p} = \hat{I}\{F\}, \quad (1)$$

где $\hat{I}\{F\}$ — интеграл столкновений, который описывает изменение функции распределения под дей-

ствием существующих механизмов рассеяния носителей зарядов, $F(p, r, t)$ — функция распределения электронной плотности, $v = p/m^*$ — скорость, $eE(r, t) \partial F / \partial p$ — дрейфовый член.

В гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ носители заряда испытывают рассеяние на LO-фононах и DA-потенциале. Поэтому интеграл столкновений в уравнении Больцмана состоит из суммы двух независимых вкладов:

$$\hat{I}\{F\} = \hat{I}_{DA}\{F\} + \hat{I}_{LO}\{F\}. \quad (2)$$

Общий вид интеграла столкновений [22]:

$$\hat{I}_{DA,LO}\{F\} = \frac{S}{(2\pi\hbar)^2} \int dp' [W_{DA,LO}(p', p) F'(1 - F) - W_{DA,LO}(p, p') F(1 - F')], \quad (3)$$

где S — площадь КЯ, $W_{DA,LO}(p, p')$ — вероятность рассеяния носителя заряда из состояния с импульсом p в состояние с импульсом p' . Слагаемое $W_{DA,LO}(p', p)$ характеризует «приход» электронов в состояние p (из p'), а $W_{DA,LO}(p, p')$ — их «уход» из состояния p (в p').

Вероятность рассеяния электронов на DA-потенциале описывается формулой [23]

$$W_{DA} \propto \frac{D_0^2 k_B T}{\rho s_l^2 d_{QW}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{p'}), \quad (4)$$

где D_0 — константа деформационного потенциала, s_l — скорость LO-фонона, d_{QW} — ширина КЯ, $\delta(\varepsilon - \varepsilon_{p'})$ — слагаемое, обеспечивающее сохранение энергии при упругом рассеянии на LO-фононах, что оправдано в силу малости энергии фонона по сравнению с энергией электрона, ρs_l^2 — модуль упругости решетки. Вероятность рассеяния носителей на DA-потенциале (4) получена из «золотого правила» Ферми

$$W_{p,p'} = (2\pi/\hbar) |M_{p,p'}|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p).$$

Для LO-фононов в приближении упругого рассеяния подстановка матричного элемента

$$|M_{p,p'}|^2 = D_0^2 k_B T / \rho s_l^2 d_{QW}$$

в правило Ферми и суммирование по конечным состояниям с учетом дельта-функции дает выражение (4).

Вероятность рассеяния на LO-фононах описывается формулой [23]

$$W_{LO} \propto \left(\frac{1}{k_\infty} - \frac{1}{k_0} \right) \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \frac{\Psi^2}{(p - p')^2 + q^2} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} \mp \varepsilon_0), \quad (5)$$

где знаки «+» и «−» соответствуют испусканию и поглощению фонона с энергией ε_0 ,

$$N_0 = \frac{1}{\exp(\varepsilon_0/k_B T) - 1}$$

— функция распределения Бозе–Эйнштейна, $q = \hbar v/d_{QW}$ — волновой вектор фонона, Ψ — форм-фактор перекрытия волновых функций электронов и фононов, k_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, k_0 — статическая диэлектрическая проницаемость. Вероятность рассеяния (5) также получена из «золотого правила» Ферми

$$W_{p,p'}^\pm = (2\pi/\hbar) |M_{p,p'}|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p \mp \hbar\omega_{LO}).$$

Подстановка в данное выражение матричного элемента электрон-фононного взаимодействия для LO-фононов в КЯ,

$$|M_{p,p'}|^2 \propto \left(\frac{1}{k_\infty} - \frac{1}{k_0} \right) \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\Psi^2}{(p - p')^2 + q^2},$$

и интегрирование по импульсам рассеяния приводит к выражению (5).

При линеаризации уравнения Больцмана исходят из того, что в состоянии термодинамического равновесия носители заряда в 2DES подчиняются равновесной статистике Ферми–Дирака. Воздействие слабого внешнего переменного электрического поля $E(r, t)$ приводит к перераспределению электронной плотности в КЯ. Функцию распределения представляют в виде суммы равновесной части $F(\varepsilon_p)$, зависящей только от энергии, и малой неравновесной добавки $\tilde{f}(p, r, t)$, которая соответствует перераспределению электронной плотности, индуцированному высокочастотным электрическим полем:

$$F(p, r, t) = F(\varepsilon_p) + \tilde{f}(p, r, t). \quad (6)$$

Для решения уравнения Больцмана в случае установившихся вынужденных колебаний предполагается, что внешнее поле является монохроматическим и имеет вид плоской волны $E \sim \exp(i(kx - \omega t))$. При этом отклик системы осциллирует с частотой и волновым вектором внешнего поля. В геометрии, показанной на рис. 2, ось y направлена вдоль ширины КЯ. Следовательно, неравновесная часть функции распределения не зависит от координаты y , поскольку внешнее поле и градиент концентрации направлены вдоль x и имеют ту же гармоническую зависимость, что и внешнее поле. Неравновесная добавка ищется в виде плоской волны

$$\tilde{f}(p, x, t) = \tilde{f}(p) e^{i(kx - \omega t)}. \quad (7)$$

При подстановке (6) с учетом (7) в кинетическое уравнение Больцмана третье слагаемое рассматривается отдельно. В линейном по полю E приближении поле само по себе является величиной первого порядка малости. Произведение поля ($\sim E$) на неравновесную добавку ($\sim \tilde{f} \sim E$) дает вклад второго порядка ($\sim E^2$). Следовательно, для получения членов первого порядка достаточно ограничиться при записи $eE(r, t) \partial F / \partial p$ равновесной частью функции распределения, т. е.

$$\frac{\partial F(p)}{\partial p} \approx \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial p}.$$

Поскольку $F(\varepsilon_p)$ зависит от импульса через энергию, получаем

$$\frac{\partial F}{\partial p} = \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_p} \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} = v \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_p}.$$

В правой части уравнения (1) содержится интеграл столкновений, который представляется в виде суммы равновесной части и линейного интегрального оператора:

$$\hat{I}\{F(p)\} = \hat{I}\{F(\varepsilon_p)\} + \hat{I}_L\{\tilde{f}\},$$

где $\hat{I}\{F(\varepsilon_p)\} = 0$. Явный вид оператора $\hat{I}_L\{\tilde{f}\}$, действующего на неравновесную добавку функции распределения, определяется подстановкой (6) в (2) с учетом (7) и включает в себе два линейных функционала:

$$\begin{aligned} -i\omega \tilde{f}(p, x, t) + ikv_x \tilde{f}(p, x, t) - eE(x, t)v_x \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} = \\ = \hat{I}_L^{DA}\{\tilde{f}\} + \hat{I}_L^{LO}\{\tilde{f}\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь линейные члены $\hat{I}_L^{DA}\{\tilde{f}\}$, $\hat{I}_L^{LO}\{\tilde{f}\}$ отвечают за электрон-фононное рассеяние.

В 2D-фазовом пространстве импульсов удобно перейти к полярным координатам. В данном случае энергия носителя становится зависимой только от p , а проекция скорости определяется выражением

$$v_x = p_x / m^* = v(\varepsilon_p) \cos \varphi.$$

Подстановка в уравнение (8) приводит к линеаризованному кинетическому уравнению Больцмана для фурье-компоненты неравновесной части функции распределения:

$$\begin{aligned} (-i\omega + ikv \cos \varphi) \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) - eE(x, t)v \cos \varphi \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} = \\ = \hat{I}_L^{DA}\{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\} + \hat{I}_L^{LO}\{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Вектор напряженности электрического поля во внешнем ТГц-поле ориентирован строго вдоль x . Поле является пространственно-однородным и не зависит от координат y и z . Вследствие этого 2DES сохраняет трансляционную инвариантность, однако наличие выделенного направления, обусловленного внешним полем, приводит к существенному изменению ее свойств. В отсутствие поля 2DES характеризуется вращательной симметрией, что проявляется в инвариантности тензора проводимости относительно любых поворотов вокруг оси z , перпендикулярной плоскости КЯ. Воздействие внешнего электрического поля разрывает эту симметрию и снимает вырождение по полярному углу φ , делая отклик 2DES анизотропным. Вследствие этого в неравновесных условиях функция распределения носителей должна явным образом зависеть не только от модуля импульса, но и от угла φ , что отражает выделенность направления поля.

Для теоретического описания угловой зависимости неравновесной функции распределения в работе используется разложение по угловым гармоникам l . Периодические по азимутальному углу φ функции с периодом 2π принадлежат пространству квадратично-интегрируемых функций на окружности $L^2(S^1)$, в котором вводится полный ортонормированный базис. Роль такого базиса выполняет система комплексных экспонент $e^{il\varphi}$, являющихся, как известно, собственными функциями оператора углового момента $\hat{l}$. Функции $e^{il\varphi}$ образуют полный ортонормированный базис в пространстве периодических функций на отрезке $[0, 2\pi]$. Благодаря свойству полноты этого базиса любую 2π -периодическую функцию угла φ можно разложить в ряд Фурье по угловым гармоникам:

$$\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) = \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi}, \quad (10)$$

где N — количество гармоник $\tilde{f}^l(\varepsilon_p)$, которые находятся через обратное преобразование Фурье

$$\tilde{f}^l(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) e^{-il\varphi} d\varphi. \quad (11)$$

Функции $\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)$ являются действительными, поэтому $\tilde{f}^{-l} = (\tilde{f}^l)^*$. Фурье-образ для четных по φ функций также является действительным. В случае четных функций, что имеет место в данной задаче, более удобным оказывается разложение по косинусам:

$$\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) = \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \cos(l\varphi). \quad (12)$$

В уравнении (11) угловые гармоники $\tilde{f}^l(\varepsilon_p)$ определяют момент углового распределения носителей в 2DES. Нулевая гармоника ($l = 0$) описывает изотропную часть функции распределения и характеризует изменение заселенности энергетических уровней в КЯ, не зависящее от направления импульса. Физически это отвечает изменению числа носителей с заданной энергией,

$$\tilde{f}^0(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) d\varphi. \quad (13)$$

Первые гармоники ($l = \pm 1$)

$$\tilde{f}^1(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) e^{-i\varphi} d\varphi \quad (14)$$

соответствуют дипольной анизотропии, пропорциональной $\cos \varphi$, и описывают сдвиг функции распределения в направлении внешнего поля. Именно эти гармоники вносят вклад в электрический ток. Действительно,

$$j_x \propto \int v_x \tilde{f} d^2 p \propto \int_0^{\infty} v(\varepsilon_p) d\varepsilon_p \int_0^{2\pi} \cos \varphi \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) d\varphi. \quad (15)$$

Высшие гармоники соответствуют более сложным угловым деформациям функции распределения электронной плотности в 2DES. В слабых полях и вдали от резонансов их вклад в проводимость пренебрежимо мал. Однако вблизи резонансных особенностей, не связанных с возбуждением плазмонов, эффективность рассеяния резко возрастает, что приводит к усилению связи между угловыми гармониками. В таких условиях высшие угловые гармоники могут давать вклад в проводимость 2DES.

В настоящей работе мы ограничиваемся линейным приближением. Поскольку расчет высокочастотной проводимости 2DES направлен на последующее описание плазменных резонансов в решетчатых затворах, влияние высших угловых гармоник функции распределения не учитывается.

Умножая обе части уравнения (9) на $\cos(l'\varphi)$, где l' — целое неотрицательное число (0, 1, 2,...), и интегрируя по φ от $-\pi$ до π , получаем

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) (-i\omega + ikv \cos \varphi) \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) d\varphi - \\ & - eE(x, t) v \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \cos \varphi d\varphi = \\ & = I_1 - eE(x, t) v \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} I_2 = \\ & = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \hat{I}_L^{DA, LO} \{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\} d\varphi, \quad (16) \end{aligned}$$

где

$$\hat{I}_L^{DA, LO} \{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\} = \hat{I}_L^{DA} \{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\} + \hat{I}_L^{LO} \{\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)\}.$$

Разложение (12) подставляется в первый интеграл I_1 уравнения (16):

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) (-i\omega + ikv \cos \varphi) \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \cos(l\varphi) d\varphi = \\ &= -i\omega \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l\varphi) \cos(l'\varphi) d\varphi + \\ &+ ikv \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l\varphi) \cos(l'\varphi) \cos \varphi d\varphi = \\ &= -i\omega \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) I_{ll'}^1 + ikv \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) I_{ll'}^2. \quad (17) \end{aligned}$$

Каждый из интегралов $I_{ll'}^1$, $I_{ll'}^2$ в (17) находится по отдельности. Сначала анализируется интеграл $I_{ll'}^1$,

$$\begin{aligned} I_{ll'}^1 &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l\varphi) \cos(l'\varphi) d\varphi = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} [\cos((l' - l)\varphi) + \cos((l' + l)\varphi)] d\varphi. \quad (18) \end{aligned}$$

Принимая во внимание, что

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \cos((l' - l)\varphi) d\varphi &= \begin{cases} 2\pi, & l = l', \\ 0, & l \neq l', \end{cases} \\ \int_{-\pi}^{\pi} \cos((l' + l)\varphi) d\varphi &= \begin{cases} 2\pi, & l = l' = 0, \\ 0, & l = l' \neq 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (19)$$

получим

$$I_{ll'}^1 = \frac{1}{2} (2\pi \delta_{l, l'} + 2\pi \delta_{l+l', 0}) = \pi (\delta_{l, l'} + \delta_{l+l', 0}). \quad (20)$$

Второе слагаемое в скобках в уравнении (20) отличается от нуля лишь при $l, l' \geq 0$. Поэтому окончательно

$$I_{ll'}^1 = \pi \delta_{l,l'} (1 + \delta_{l,0}). \quad (21)$$

Второй интеграл в левой части уравнения (16) вычисляется аналогичным образом, однако предварительно следует учесть, что $\delta_{l-1,0} = \delta_{l,1}$ и $\delta_{l+1,0} = \delta_{l,-1}$, причем из условия $l \geq 0$ следует, что $\delta_{l,-1} = 0$. В результате получается выражение

$$I_{ll'}^2 = \frac{\pi}{2} ((1 + \delta_{l,1}) \delta_{l',l-1} + \delta_{l',l+1}). \quad (22)$$

Подстановка (21) и (22) в интеграл (17) дает

$$\begin{aligned} I_1 &= -i\omega \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) I_{ll'}^1 + ikv \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) I_{ll'}^2 = \\ &= -i\omega \pi \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \delta_{l,l'} (1 + \delta_{l,0}) + \\ &+ ikv \frac{\pi}{2} \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) ((1 + \delta_{l,1}) \delta_{l',l-1} + \delta_{l',l+1}) = \\ &= -i\omega \pi (1 + \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p) + ikv \frac{\pi}{2} (1 + \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'+1} + \\ &+ ikv \frac{\pi}{2} (1 - \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'-1}. \quad (23) \end{aligned}$$

Второй интеграл I_2 , стоящий в левой части уравнения (16), имеет вид

$$I_2 = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \cos \varphi d\varphi = \pi (1 + \delta_{l',0}) \delta_{l',1}. \quad (24)$$

Учет $\delta_{l',1}$ приводит к тому, что данный интеграл отличен от нуля лишь при $l' = 1$. Так как $l' = 1$, то $1 + \delta_{1,0} = 1 + 0 = 1$. Поэтому

$$I_2 = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \cos \varphi d\varphi = \pi \delta_{l',1}. \quad (25)$$

После подстановки разложения правая часть уравнения (16) принимает вид

$$I_{coll} = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \hat{I}_L^{DA,LO} \{ \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) \} d\varphi. \quad (26)$$

В уравнении (9) оператор рассеяния $\hat{I}_L^{DA,LO}$ действует на угловую гармонику независимо от остальных. Для электрон-фононного рассеяния оператор

$\hat{I}_L^{DA,LO}$ диагонален по угловым гармоникам. Уравнение (26) приводится к виду

$$\begin{aligned} I_{coll} &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos(l'\varphi) \hat{I}_L^{DA,LO} \left\{ \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \cos(l\varphi) \right\} d\varphi = \\ &= \mathcal{I}_{l'} \{ \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p) \}, \quad (27) \end{aligned}$$

где $\mathcal{I}_{l'} \{ \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p) \}$ — интегральный оператор, который меняет энергию носителей, но не переводит их из состояния с симметрией l в состояние с другой симметрией. С учетом (23), (25) и (27) уравнение (16) после деления обеих его частей на π переписывается в виде

$$\begin{aligned} &-i\omega (1 + \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p) + ikv \frac{1}{2} (1 + \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'+1} + \\ &+ ikv \frac{1}{2} (1 - \delta_{l',0}) \tilde{f}^{l'-1} - eE(x, t) v \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \delta_{l',1} = \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{I}_{l'} \{ \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p) \}. \quad (28) \end{aligned}$$

Можно выписать уравнения для нескольких первых гармоник: для $l' = 0$

$$-2i\omega \tilde{f}^0(\varepsilon_p) + ikv \tilde{f}^1 = \frac{1}{\pi} \mathcal{I}_0 \{ \tilde{f}^0(\varepsilon_p) \}, \quad (29)$$

для $l' = 1$

$$\begin{aligned} &-i\omega \tilde{f}^1(\varepsilon_p) + \frac{ikv}{2} (\tilde{f}^0 + \tilde{f}^2) - eE(x, t) v \frac{\partial F(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} = \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{I}_1 \{ \tilde{f}^1(\varepsilon_p) \}. \quad (30) \end{aligned}$$

Уравнения (28) образуют систему зацепляющихся интегродифференциальных уравнений. Уравнение для гармоники $\tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p)$ содержит соседние гармоники $\tilde{f}^{l'-1}(\varepsilon_p)$ и $\tilde{f}^{l'+1}(\varepsilon_p)$. Внешнее поле дает вклад только в уравнение для первой гармоники, что обусловлено направлением поля вдоль x и создаваемой им дипольной асимметрией.

Линеаризованный интеграл столкновений для ЛО-фононов с учетом детального равновесия имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO} \{ \tilde{f} \} &= \frac{S}{(2\pi\hbar)^2} \int dp' (W(p', p) \tilde{f}(p') - \\ &- W(p, p') \tilde{f}(p)), \quad (31) \end{aligned}$$

где вероятность перехода электрона с поглощением/испусканием фонона определяется выражением (5), которое может быть представлено в виде [23]

$$W_{LO}^{\pm}(p, p') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{p,p'}|^2 \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \frac{\Psi^2}{(p - p')^2 + q^2} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} \mp \varepsilon_0). \quad (32)$$

Матричный элемент $|M_{p,p'}|^2$ входит в подынтегральное выражение в качестве множителя. Явный вид матричного элемента перехода представляется следующим образом [23]:

$$|M_{p,p'}|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar}{d_{QW}} \left(\frac{1}{k_{\infty}} - \frac{1}{k_0} \right) \frac{\Psi^2}{(p - p')^2 + q^2}. \quad (33)$$

Деление на S вводится для нормировки, поскольку сам интеграл содержит множитель S :

$$W_{LO}^{\pm}(p, p') = \frac{C}{S} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{k_{\infty}} - \frac{1}{k_0} \right) \times \frac{\Psi^2}{(p - p')^2 + q^2} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} \mp \varepsilon_0). \quad (34)$$

I. Сначала рассматривается поглощение, для которого

$$W_{LO}^{-}(p, p') = \frac{C}{S} N_0 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} \mp \varepsilon_0).$$

Подстановка данного выражения в уравнение (31) дает

$$\hat{I}_{LO}\{\tilde{f}\} = \frac{CN_0}{(2\pi\hbar)^2} \left(\int \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p + \varepsilon_0) \tilde{f}(p') dp' - \tilde{f}(p) \int \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} + \varepsilon_0) dp' \right). \quad (35)$$

В 2D-случае $dp' = m^* d\varepsilon' d\varphi'$. Интегрирование по углам и энергии выполняется с учетом четности дельта-функции:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}\{\tilde{f}\} &= \frac{CN_0}{(2\pi\hbar)^2} \left\{ \int_0^{\infty} m^* \delta(\varepsilon' - \varepsilon_p + \varepsilon_0) d\varepsilon' \times \right. \\ &\times \int_0^{2\pi} \tilde{f}(\varepsilon', \varphi') d\varphi' - \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) \times \\ &\times \left. \int_0^{\infty} m^* \delta(\varepsilon' - \varepsilon_p - \varepsilon_0) d\varepsilon' \int_0^{2\pi} d\varphi' \right\}, \quad (36) \end{aligned}$$

где $\varepsilon_{p'} = \varepsilon'$. После выполнения интегрирования по φ' выделяется вклад, приводящий при $\varepsilon' = \varepsilon_p + \varepsilon_0$ выражение (36) к виду

$$\hat{I}_{LO}^{-}\{\tilde{f}\} = \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{f}(\varepsilon_p + \varepsilon_0, \varphi') d\varphi' - 2\pi \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) \right\}. \quad (37)$$

II. Затем рассматривается рассеяние с испусканием фонона, для которого

$$W_{LO}^{+}(p, p') = \frac{C}{S} (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} - \varepsilon_0).$$

Повторяя аналогичные выкладки и учитывая, что δ -функция дает вклад при $\varepsilon' = \varepsilon_p - \varepsilon_0$, записываем

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{+}\{\tilde{f}\} &= \frac{C(N_0 + 1)m^*}{(2\pi\hbar)^2} \times \\ &\times \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{f}(\varepsilon_p - \varepsilon_0, \varphi') d\varphi' - 2\pi \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) \right\}. \quad (38) \end{aligned}$$

Объединяя (37) и (38), получаем

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{\pm}\{\tilde{f}\} &= \hat{I}_{LO}^{+}\{\tilde{f}\} + \hat{I}_{LO}^{-}\{\tilde{f}\} = \\ &= \frac{C(N_0 + 1)m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^{2\pi} [\tilde{f}(\varepsilon_p - \varepsilon_0, \varphi') - \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)] d\varphi' + \\ &+ \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^{2\pi} [\tilde{f}(\varepsilon_p + \varepsilon_0, \varphi') - \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)] d\varphi'. \quad (39) \end{aligned}$$

Рассматривается часть уравнения интеграла столкновений (9), обусловленная рассеянием на ДА-потенциале с вероятностью (4). Повторяя выкладки, проделанные при выводе линеаризованного интеграла столкновений $\hat{I}_{LO}^{\pm}\{F\}$, получаем

$$\hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} = \frac{S}{(2\pi\hbar)^2} \int W(p', p) (\tilde{f}(p') - \tilde{f}(p)) dp'. \quad (40)$$

Переход к интегрированию по энергии и импульсу в фазовом пространстве приводит (40) к выражению вида

$$\hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} = \frac{S}{(2\pi\hbar)^2} C^* m^* 2\pi (\langle \tilde{f} \rangle_{\varphi} - \tilde{f}(p)), \quad (41)$$

где

$$C^* = \frac{3\pi D_0^2 k_B T}{\rho s_l^2 \hbar S d_{QW}}.$$

Среднее по углам рассчитывается стандартно:

$$\langle \tilde{f} \rangle_{\varphi} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \tilde{f}(\varphi) d\varphi. \quad (42)$$

В релаксационном приближении интеграл столкновений принимает вид [24]

$$\hat{I} = -\frac{\tilde{f}(p) - \langle \tilde{f} \rangle_\varphi}{\tau} = \frac{\langle \tilde{f} \rangle_\varphi - \tilde{f}(p)}{\tau}. \quad (43)$$

Из сравнения с (41) следует, что

$$\tau = \left(\frac{3D_0^2 k_B T m^*}{2\rho s_l^2 \hbar^3 S d_{QW}} \right)^{-1}. \quad (44)$$

Таким образом, (41) можно переписать в виде

$$\hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} = -\frac{\tilde{f} - \langle \tilde{f} \rangle_\varphi}{\tau}. \quad (45)$$

Подстановка (10) в (45) приводит к выражению

$$\hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} = -\frac{1}{\tau} \left[\sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} - \left\langle \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} \right\rangle_\varphi \right]. \quad (46)$$

Выполняя усреднение

$$\begin{aligned} \langle \tilde{f} \rangle_\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \int_0^{2\pi} e^{il\varphi} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) 2\pi \delta_{l,0} = \tilde{f}^0(\varepsilon_p), \end{aligned} \quad (47)$$

получаем

$$\hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} = -\frac{1}{\tau} \left(\sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} - \tilde{f}^0(\varepsilon_p) \right). \quad (48)$$

Рассеяние на DA-потенциале не меняет вид изотропной компоненты функции распределения ($l = 0$), что является следствием сохранения общего числа частиц. Для анизотропных компонент ($l \neq 0$) рассеяние сопровождается экспоненциальной релаксацией возмущения с характерным временем τ .

Уравнение для $\tilde{f}^l(\varepsilon_p)$ получается умножением интеграла столкновений (48) на $\exp(-il\varphi)$ и усреднением по углу φ :

$$\begin{aligned} \hat{I}_{DA}^l &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \hat{I}_{DA}\{\tilde{f}\} e^{-il\varphi} d\varphi = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{l=0}^{N-1} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} e^{-il\varphi} d\varphi + \frac{\tilde{f}^0(\varepsilon_p)}{2\pi\tau} \int_0^{2\pi} e^{-il\varphi} d\varphi = \\ &= \frac{\tilde{f}^0(\varepsilon_p)}{\tau} \delta_{l,0} - \frac{1}{\tau} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) = \frac{1}{\tau} [\tilde{f}^0(\varepsilon_p) \delta_{l,0} - \tilde{f}^l(\varepsilon_p)]. \end{aligned} \quad (49)$$

Для изотропной части получается выражение, которое не релаксирует за счет рассеяния носителей на DA-потенциале, т. е. $\hat{I}_{DA}^0 = 0$. При $l \neq 0$ релаксация в 2DES происходит с характерным временем τ . При этом $\hat{I}_{DA}^l = -(1/\tau) \tilde{f}^l(\varepsilon_p)$.

Аналогичные преобразования выполнены для интеграла столкновений, характеризующего релаксацию носителей на LO-фононах. Выражение (39) приведено к виду, более удобному для вычислений:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^\pm\{\tilde{f}\} &= \hat{I}_{LO}^+\{\tilde{f}\} + \hat{I}_{LO}^-\{\tilde{f}\} = \\ &= \frac{C(N_0 + 1)m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|p - p_-|^2 + q_v^2} [\tilde{f}(p_-) - \tilde{f}(p)] d\theta + \\ &+ \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|p - p_+|^2 + q_v^2} [\tilde{f}(p_+) - \tilde{f}(p)] d\theta, \end{aligned} \quad (50)$$

где $p_\pm = \sqrt{2m^*(\varepsilon_p \pm \varepsilon_0)}$ — импульс до поглощения/испускания фонона, $\theta = \varphi - \varphi'$ — угол рассеяния.

Рассмотрим сначала интеграл столкновений, соответствующий поглощению фононов:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}\{\tilde{f}\} &= \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|p - p_+|^2 + q_v^2} \times \\ &\times \left(\sum_{l'} \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p + \varepsilon_0) e^{il'\varphi'} - \sum_{l'} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} \right) d\theta. \end{aligned} \quad (51)$$

Поскольку $\varphi' = \varphi - \theta$, имеем

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}\{\tilde{f}\} &= \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|p - p_+|^2 + q_v^2} \times \\ &\times \left(\sum_{l'} \tilde{f}^{l'}(\varepsilon_p + \varepsilon_0) e^{il'\varphi} e^{-il'\theta} - \sum_{l'} \tilde{f}^l(\varepsilon_p) e^{il\varphi} \right) d\theta. \end{aligned} \quad (52)$$

Для получения уравнения, содержащего только функцию $\tilde{f}^l(\varepsilon_p)$, проводится усреднение интеграла столкновений (52) по углу φ после умножения на $e^{-il\varphi}$:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^- &= \frac{CN_0 m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{|p - p_+|^2 + q_v^2} \times \\ &\times (e^{-il\theta} \tilde{f}^l(\varepsilon_p + \varepsilon_0) - \tilde{f}^l(\varepsilon_p)). \end{aligned} \quad (53)$$

Аналогичным образом находится интеграл столкновений, соответствующий процессу испускания фононов:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^+ &= \frac{C(N_0 + 1)m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{|p - p_-|^2 + q_v^2} \times \\ &\times (e^{-il\theta} \tilde{f}^l(\varepsilon_p - \varepsilon_0) - \tilde{f}^l(\varepsilon_p)). \end{aligned} \quad (54)$$

С введением новых обозначений

$$\begin{aligned} I_+^l &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{-il\theta}}{|p-p_+|^2 + q_v^2}, \\ I_-^l &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{-il\theta}}{|p-p_-|^2 + q_v^2}, \\ I_+ &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{|p-p_+|^2 + q_v^2}, \\ I_- &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{|p-p_-|^2 + q_v^2} \end{aligned} \quad (55)$$

уравнение (50) с учетом (53) и (54) принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{l\pm} &= \frac{Cm^*}{(2\pi\hbar)^2} \left\{ N_0 \left[I_+^l \tilde{f}^l(\varepsilon_p + \varepsilon_0) - I_+ \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \right] + \right. \\ &\quad \left. + (N_0 + 1) \left[I_-^l \tilde{f}^l(\varepsilon_p - \varepsilon_0) - I_- \tilde{f}^l(\varepsilon_p) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (56)$$

Вычисление контурных интегралов дает

$$\begin{aligned} I_+^l &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{-il\theta}}{|p-p_+|^2 + q_v^2} = \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{a_+^2 - b_+^2}} \left(\frac{a_+ - \sqrt{a_+^2 - b_+^2}}{b_+} \right)^{|l|}, \\ I_-^l &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{-il\theta}}{|p-p_-|^2 + q_v^2} = \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{a_-^2 - b_-^2}} \left(\frac{a_- - \sqrt{a_-^2 - b_-^2}}{b_-} \right)^{|l|}, \end{aligned} \quad (57)$$

где

$$\begin{aligned} a_+ &= p^2 + p_+^2 + q_v^2, & b_+ &= 2pp_+, \\ a_- &= p^2 + p_-^2 + q_v^2, & b_- &= 2pp_-. \end{aligned} \quad (58)$$

Из соображений удобства вводятся безразмерные параметры

$$x = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0}, \quad p_0 = \sqrt{2m^*\varepsilon_0}. \quad (59)$$

Тогда

$$p = p_0\sqrt{x}, \quad p_+ = p_0\sqrt{x+1}, \quad p_- = p_0\sqrt{x-1}. \quad (60)$$

Дополнительно вводится обозначение

$$\Xi_v = \frac{q_v^2}{2m^*\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2\pi^2v^2}{2m^*d_{QW}^2\varepsilon_0}, \quad (61)$$

с помощью которого получаются компактные выражения

$$\begin{aligned} n_+ &= p_0^2(2x+1+\Xi_v) = p_0^2k_v^+, \\ z_+ &= 2p_0^2\sqrt{x(x+1)} = p_0^2l^+, \\ n_- &= p_0^2(2x-1+\Xi_v) = p_0^2k_v^-, \\ z_- &= 2p_0^2\sqrt{x(x-1)} = p_0^2l^-. \end{aligned} \quad (62)$$

После подстановки соотношений (62) в (57) интеграл столкновений сводится к своему окончательному виду:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{l\pm}(x) &= \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2S\tau} \times \\ &\times \sum_v \Psi_v^2 \left[\frac{N_0}{\sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}} \left(\frac{k_v^+ - \sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}}{l^+} \right)^{|l|} \times \right. \\ &\quad \times (\tilde{f}^l(x+1) - \tilde{f}^l(x)) + \\ &\quad \left. + \frac{N_0+1}{\sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}} \left(\frac{k_v^- - \sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}}{l^-} \right)^{|l|} \times \right. \\ &\quad \left. \times (\tilde{f}^l(x-1) - \tilde{f}^l(x)) \right]. \end{aligned} \quad (63)$$

Вводя новый коэффициент

$$r_l^{\pm} = \sum_v \frac{1}{\sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}} \left(\frac{k_v^{\pm} - \sqrt{k_v^{\pm 2} - l^{\pm 2}}}{l^{\pm}} \right)^{|l|}, \quad (64)$$

интеграл (63) можно переписать в компактной форме:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{l\pm}(x) &= \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2S\tau} \Psi^2 \left\{ r_l^+ \left[\tilde{f}^l(x+1) - \tilde{f}^l(x) \right] + \right. \\ &\quad \left. + r_l^- \left[\tilde{f}^l(x-1) - \tilde{f}^l(x) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (65)$$

Функция распределения является гладкой по энергии, а шаг дискретизации $\Delta x = 1$ мал по сравнению с характерным масштабом ее изменения, поэтому функции $\tilde{f}^l(x+1)$ и $\tilde{f}^l(x-1)$ можно разложить в ряд Тейлора в окрестности точки x . Это позволит перейти от разностного вида уравнения (65) к дифференциальному:

$$\begin{aligned} \tilde{f}^l(x+1) &\approx \tilde{f}^l(x) + \frac{\partial \tilde{f}^l(x)}{\partial x} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^2} + \dots, \\ \tilde{f}^l(x-1) &\approx \tilde{f}^l(x) - \frac{\partial \tilde{f}^l(x)}{\partial x} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^2} - \dots \end{aligned} \quad (66)$$

После подстановки разложения (66) в (65), сокращения на общий множитель $\tilde{f}^l(x)$ и группировки слагаемых с одинаковыми производными интеграл столкновений приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{LO}^{l\pm}(x) = \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2 S\tau} \Psi^2 \left\{ [r_l^+(x) - r_l^-(x)] \frac{\partial \tilde{f}^l(x)}{\partial x} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} [r_l^+(x) + r_l^-(x)] \frac{\partial^2 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{6} [r_l^+(x) - r_l^-(x)] \frac{\partial^3 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^3} + \dots \right\}. \quad (67) \end{aligned}$$

Для численного решения линейаризованного кинетического уравнения Больцмана выполнен переход от непрерывного энергетического распределения к дискретному представлению. Для этого вводится равномерная сетка по безразмерной энергии $x = \varepsilon_p/\varepsilon_0$, где ε_0 — энергия оптического фонона. Такой переход возможен, поскольку в интеграле столкновений (67) содержатся функции распределения, в аргументе которых учтен сдвиг на конечную величину $\pm\varepsilon_0$. Введение энергетической сетки с дискретными состояниями позволило свести исходное интегродифференциальное уравнение к системе линейных алгебраических уравнений, записанных в узлах сетки.

Пусть безразмерная энергия дискретно меняется на отрезке $[x_{\min}, x_{\max}]$, где значение $x_{\max}$ выбирается достаточно большим, чтобы охватить всю энергетическую область. На этом интервале вводится равномерная сетка

$$x_j = x_{\min} + j\Delta x, \quad j = 1, 2, 3, \dots, \quad (68)$$

где Δx — шаг сетки, $x_{\min}$ — энергия дна зоны проводимости, $x_{\max}$ — максимальная энергия, при которой функция распределения становится пренебрежимо малой. В работе шаг сетки выбран равным $\Delta x = 0.05$, что обеспечило хорошую сходимость результатов.

Интеграл столкновений на ЛО-фононах (67) после разложения в ряд Тейлора содержит первую и вторую частные производные функции распределения. Для их аппроксимации предварительно требуется учесть физическую направленность процессов эмиссии и поглощения фононов. При рассеянии на ЛО-фононах возможен переход электрона в состояние с меньшей энергией, сопровождающийся эмиссией фонона. Однако при таком переходе энергия не может быть меньше энергии дна зоны проводимости. Должен учитываться принцип причинности по энергии, согласно которому значение функции $\tilde{f}^l(x_j)$ в узловой точке x_j определяется ее значением в x_{j-1} . Вследствие этого для аппроксимации первой

производной в энергетическом пространстве необходимо использовать «разность назад» (backward difference) [25]:

$$\left. \frac{\partial \tilde{f}^l(x)}{\partial x} \right|_{x=x_j} = \frac{\tilde{f}^l(x_j) - \tilde{f}^l(x_{j-1})}{\Delta x} + o(\Delta x). \quad (69)$$

Аппроксимация второй производной выполнена по схеме «центральной разности» (central difference), что гарантирует второй порядок точности [25]:

$$\left. \frac{\partial^2 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} = \frac{\tilde{f}^l(x_{j+1}) - 2\tilde{f}^l(x_j) + \tilde{f}^l(x_{j-1}))}{(\Delta x)^2} + o(\Delta x^2). \quad (70)$$

Конечно-разностные аппроксимации подставляются в выражение (67). После приведения подобных членов с сохранением величин второго порядка малости включительно линейаризованный интеграл столкновений приводится к трехдиагональной форме:

$$\hat{I}_{LO}^{l\pm}(x_j) = A_j^- \tilde{f}_{j-1}^l + A_j^0 \tilde{f}_j^l + A_j^+ \tilde{f}_{j+1}^l. \quad (71)$$

Здесь $\tilde{f}_{j-1}^l = \tilde{f}^l(x_{j-1})$, $\tilde{f}_{j+1}^l = \tilde{f}^l(x_{j+1})$, $\tilde{f}_j^l = \tilde{f}^l(x_j)$, а коэффициенты A_j^- , A_j^0 , A_j^+ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} A_j^- &= \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2 S\tau} \Psi^2 \left[-\frac{r_l^+(x_j) - r_l^-(x_j)}{\Delta x} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{r_l^+(x_j) + r_l^-(x_j)}{(\Delta x)^2} \right], \\ A_j^0 &= \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2 S\tau} \Psi^2 \left[\frac{r_l^+(x_j) - r_l^-(x_j)}{\Delta x} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{r_l^+(x_j) + r_l^-(x_j)}{(\Delta x)^2} \right], \\ A_j^+ &= \frac{m^*\varepsilon_0}{\hbar^2 S\tau} \Psi^2 \left[\frac{1}{2} \frac{r_l^+(x_j) + r_l^-(x_j)}{(\Delta x)^2} \right]. \end{aligned} \quad (72)$$

Линейаризованный интеграл столкновений, соответствующий рассеянию на ДА-потенциале, приводится к простой диагональной форме:

$$\hat{I}_{DA}^l(x_j) = -\frac{1}{\tau} \tilde{f}^l(x_j).$$

Заметим, что это выражение аддитивно входит в диагональный коэффициент A_j^0 .

В использованной конечно-разностной схеме должны выполняться граничные условия. В узловой точке $x = 0$ эмиссия фонона невозможна, поскольку носители заряда находятся в состоянии с минимальной энергией. Для аппроксимации

первой производной используется «разность вперед». Вторая производная аппроксимируется по четырехточечной схеме [25]:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tilde{f}^l(x)}{\partial x} \right|_{x=0} &= \frac{\tilde{f}^l(x_1) - \tilde{f}^l(x_0)}{\Delta x}, \\ \left. \frac{\partial^2 \tilde{f}^l(x)}{\partial x^2} \right|_{x=0} &= \frac{2\tilde{f}^l(x_0) - 5\tilde{f}^l(x_1) + 4\tilde{f}^l(x_2) - \tilde{f}^l(x_3)}{(\Delta x)^2}. \end{aligned} \quad (73)$$

При достаточно больших энергиях неравновесная функция распределения экспоненциально убывает, $\tilde{f}^l(x_j)|_{j \rightarrow \infty} = 0$, что обусловлено малой заселенностью высокоэнергетических состояний. С учетом этого обстоятельства, после подстановки интегралов столкновений и перехода к безразмерным переменным

$$\begin{aligned} \Omega &= \omega\tau, \quad Q = k \frac{p_0}{m^*} \tau, \quad \tilde{F} = \frac{e\tilde{E}\tau}{p_0}, \\ \eta_0 &= \frac{\varepsilon_0}{k_B T}, \quad S_j = -\frac{\sqrt{x_j}}{p_0} eE \frac{\partial F}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (74)$$

получается дискретный аналог линеаризованного уравнения Больцмана (28) для угловых гармоник $\tilde{f}^l(x_j)$ в энергетических точках x_j :

$$\begin{aligned} -i\Omega \tilde{f}^l(x_j) + iQ \frac{\sqrt{x_j}}{2} [\tilde{f}^{l-1}(x_j) + \tilde{f}^{l+1}(x_j)] + \\ + \left[-\frac{1}{\tau} (1 - \delta_{l,0}) + A_j^0 \right] \tilde{f}^l(x_j) + \\ + A_j^- \tilde{f}^l(x_{j-1}) + A_j^+ \tilde{f}^l(x_{j+1}) = S_j \delta_{l,1}. \end{aligned} \quad (75)$$

После введения обозначений

$$\begin{aligned} B_j^l &= -i\Omega - \frac{1}{\tau} (1 - \delta_{l,0}) + A_j^0, \\ C_j &= A_j^+, \quad A_j = A_j^-, \\ D_j &= \frac{iQ\sqrt{x_j}}{2}, \quad S_j = -\frac{\sqrt{x_j}}{p_0} eE \frac{\partial F}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (76)$$

дискретное уравнение Больцмана (75) принимает вид

$$B_j^l \tilde{f}_j^l + A_j \tilde{f}_{j-1}^l + C_j \tilde{f}_{j+1}^l + D_j (\tilde{f}_j^{l-1} + \tilde{f}_j^{l+1}) = S_j \delta_{l,1}. \quad (77)$$

При $l = 0$

$$B_j^0 \tilde{f}_j^0 + A_j \tilde{f}_{j-1}^0 + C_j \tilde{f}_{j+1}^0 + D_j (\tilde{f}_j^{-1} + \tilde{f}_j^1) = 0, \quad (78)$$

при $l = 1$

$$B_j^1 \tilde{f}_j^1 + A_j \tilde{f}_{j-1}^1 + C_j \tilde{f}_{j+1}^1 + D_j (\tilde{f}_j^0 + \tilde{f}_j^2) = S_j. \quad (79)$$

Для угловых гармоник система уравнений приобретает трехдиагональную структуру:

$$\begin{pmatrix} B_0^l & C_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_1 & B_1^l & C_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_2 & B_2^l & C_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1}^l & C_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N^l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_0^l \\ \tilde{f}_1^l \\ \tilde{f}_2^l \\ \dots \\ \tilde{f}_{N-1}^l \\ \tilde{f}_N^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_0^l \\ R_1^l \\ R_2^l \\ \dots \\ R_{N-1}^l \\ R_N^l \end{pmatrix}, \quad (80)$$

где $R_j^l = -D_j(\tilde{f}_j^{l-1} + \tilde{f}_j^{l+1})$. Диагональные элементы описывают эволюцию угловых гармоник и включают три основных вклада. Первый вклад связан с осцилляциями поля и пространственной дисперсией. Второй вклад обусловлен рассеянием на ДА-потенциале. В линеаризованном приближении этот механизм приводит к экспоненциальной релаксации анизотропных частей функции распределения с характерным временем τ . Третий вклад определяется рассеянием на ЛО-фононах. После дискретизации по энергии этот вклад принимает трехдиагональную форму. В диагональные элементы входит коэффициент $A_j(0)$, который описывает изменение заселенности энергетических уровней в энергетической точке x_j за счет ухода электронов в соседние состояния с энергиями $x_j \pm 1$.

Выражение для проводимости σ может быть получено следующим образом. Плотность электрического тока в 2D-случае определяется соотношением [26]

$$j = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int v_x \tilde{f}(p) d^2p, \quad (81)$$

где множитель 2 в правой части обусловлен спинным вырождением. Поскольку внешнее электрическое поле имеет выделенное направление вдоль оси x , вклад в ток дают только те носители, движение которых происходит вдоль направления поля. В полярных координатах $d^2p = m^* d\varepsilon_p d\varphi$. Поэтому

$$j = -\frac{2e\sqrt{2m^*}}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon_p} d\varepsilon_p \int_0^{2\pi} \cos \varphi \tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi) d\varphi. \quad (82)$$

Разложение $\tilde{f}(\varepsilon_p, \varphi)$ в ряд Фурье по угловым гармоникам (10) подставляется в проводимость (82). Интегрирование по угловой переменной выполняется с учетом ортогональности функций $e^{il\varphi}$. Как известно, ненулевой вклад дает гармоника с $l = 1$

$$j = -\frac{e\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon_p} \tilde{f}^1(\varepsilon_p) d\varepsilon_p. \quad (83)$$

Выражение (83) удобно переписать в безразмерных переменных:

$$j = -\frac{e\varepsilon_0^{3/2}\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \sqrt{x} \tilde{f}^1(x) dx. \quad (84)$$

Окончательно выражение для проводимости может быть представлено в виде

$$\sigma = \frac{e^2\tau}{m^*} \frac{p_0^2}{4\pi\hbar^2} \int_0^\infty \sqrt{x} \tilde{f}^1(x) dx. \quad (85)$$

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Численное решение рекуррентной системы (77) позволило определить энергетическое распределение угловых гармоник $\tilde{f}^l$, включая $\tilde{f}^1(x_j)$, с помощью которой вычислялась плотность тока (84) и высокочастотная проводимость (85). Для каждого энергетического узла x_j сформирована рекуррентная система линейных уравнений, связывающая угловые гармоники в узле с гармониками в соседних энергетических узлах. Система уравнений решалась численно методом прогонки, что позволило восстановить функцию распределения электронной плотности в пространстве дискретных значений энергий. Интеграл в выражении (85) рассчитывался методом Симпсона на равномерной энергетической сетке с шагом 0.1 мэВ.

Итерационные алгоритмы были реализованы на языке программирования Python в интегрированной среде разработки PyCharm 3.12. Выбор языка программирования Python обусловлен наличием библиотек для линейной алгебры (NumPy, SciPy) и визуализации (Matplotlib), а также удобством реализации итерационных алгоритмов. Все вычисления выполнены на стандартном персональном компьютере. Расчет для одной частоты при 200 узлах энергетической сетки и 20 угловых гармоник занял около 0.5 с. Для расчета всего частотного спектра из 50 точек потребовалось примерно 25 с. Основное время

затрачивалось на прогонку трехдиагональных систем для энергетических точек.

В процессе численного решения уравнения (79) возник вопрос о фактическом количестве угловых гармоник N , ограничивающих сверху сумму (10). В линейном по полю приближении внешнее электрическое поле, направленное вдоль x , взаимодействует с носителями заряда и непосредственно возбуждает только первую угловую гармонику $\tilde{f}^1(x_j)$ неравновесной функции распределения. Высшие гармоники ($l \geq 2$) возникают исключительно за счет механизмов рассеяния, действующих в 2DES. При низких температурах ($T \sim 100$ К) рассеяние носителей является слабым, вследствие чего высшие гармоники затухают медленно и вносят заметный вклад в формирование функции распределения. В данном случае потребовалось учесть $N = 9$ гармоник. С ростом температуры до комнатной частота рассеяния значительно возрастает за счет рассеяния на ЛО-фононах. Это приводит к быстрому затуханию высших угловых гармоник, и их вклад в проводимость становится пренебрежимо малым. В таких условиях оказалось достаточным ограничиться учетом всего двух гармоник ($N = 2$), что обеспечило хорошую сходимость результатов.

На рис. 3 представлены рассчитанные температурные зависимости подвижности носителей $\mu(T) = \sigma/en_0$ при концентрации 2DES, равной $n_0 = 2.2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Кривая 1 рассчитана в рамках разработанной модели, учитывающей вырождение 2DES, квазиупругое рассеяние на DA-потенциале и сильно неупругое рассеяние на ЛО-фононах. Вид кривой хорошо согласуется с экспериментальными данными для гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (кружки), полученными в работе [13]. В области низких температур ($T < 100$ К), где доминирует квазиупругое рассеяние на DA-потенциале, полученное значение подвижности составляет $\sim 8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}\cdot\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$. С ростом температуры усиливается рассеяние на ЛО-фононах, и зависимость $\mu(T)$ начинает отклоняться от результатов, полученных в рамках квазиупругого приближения (кривая 3). Для $T = 200$ К подвижность составляет $\sim 2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}\cdot\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$, тогда как в рамках квазиупругого подхода $\sim 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}\cdot\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$, что не согласуется с экспериментальными данными работы [13].

Кривая 2 демонстрирует результаты расчетов подвижности, полученные в приближении классической статистики Максвелла – Больцмана без учета вырождения 2DES. Как следует из вида кривой, в

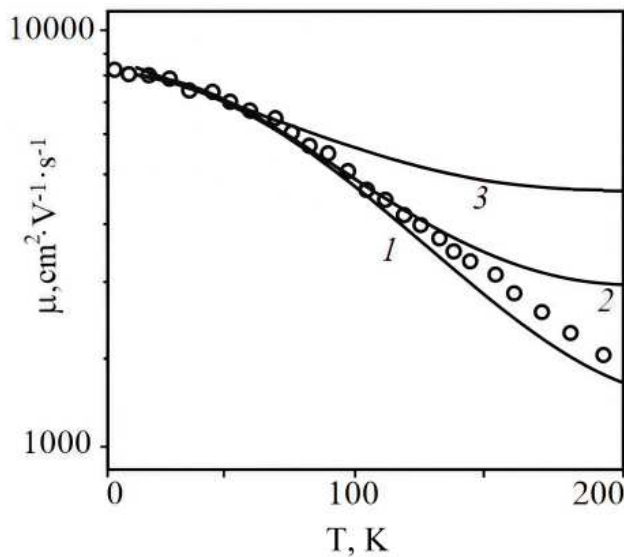


Рис. 3. Температурные зависимости подвижности носителей в гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, рассчитанные в рамках трех приближений: 1 — с использованием разработанной численной модели (учет вырождения и неупругого рассеяния на фононах), 2 — без учета вырождения, 3 — в приближении только квазиупругого электрон-фононного рассеяния. Кружки соответствуют экспериментальным результатам [13]

области низких температур значения подвижности, полученные с учетом (кривая 1) и без учета (кривая 2) вырождения, практически совпадают. С ростом температуры расхождение между ними увеличивается, что обусловлено систематической погрешностью, которая имеет тенденцию накапливаться. Как видно из рис. 3, пренебрежение вырождением приводит к существенному расхождению значений подвижности по сравнению с результатами, полученными с использованием распределения Ферми – Дирака (кривая 1).

На рис. 4 представлены рассчитанные частотные зависимости действительной и мнимой частей подвижности $\mu(\omega, k)$ носителей в гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

При температуре 200 К частотные зависимости $\text{Re}[\mu]$ и $\text{Im}[\mu]$ ведут себя как монотонные функции. С ростом частоты величина $\text{Re}[\mu]$ монотонно убывает, что связано с увеличением частоты электрон-фононного рассеяния (рис. 4 а).

Сравнение кривых, рассчитанных для $k = 0$ (однородное внешнее поле) и $k = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ (неоднородное внешнее поле), подтверждает роль пространственной дисперсии. При температуре 200 К для

$k = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ кривая $\text{Re}[\mu(\omega/2\pi)]$ достигает максимума, а $\text{Im}[\mu(\omega/2\pi)]$ меняет знак вблизи характерной частоты $\omega_h \sim V_F k$, где V_F — тепловая скорость электронов. Как известно, $\text{Re}[\mu]$ определяет способность носителей поглощать энергию внешнего поля. При низких частотах, когда длина волны велика по сравнению с характерным пространственным масштабом неоднородности поля, движение носителей в 2DES носит преимущественно инерционный характер, при этом $\text{Re}[\mu(\omega/2\pi)]$ монотонно убывает с увеличением частоты. Однако вблизи характерной частоты ω_h эффективность передачи энергии от поля к носителям резко возрастает, что проявляется в виде максимума $\text{Re}[\mu]$.

Вид кривой $\text{Im}[\mu(\omega/2\pi)]$ определяет инерционность тока в 2DES. На рис. 4 б видно, что в области низких частот ($\omega < \omega_h$) в случае неоднородного внешнего поля отклик 2DES запаздывает относительно внешнего поля, что соответствует отрицательным значениям $\text{Im}[\mu]$ в данной области частот. При дальнейшем увеличении частоты значения $\text{Im}[\mu]$ становятся положительными, что указывает на изменение фазового соотношения между током и полем. Такое поведение $\text{Im}[\mu]$ свидетельствует о наличии резонансной особенности в отклике 2DES, обусловленной учетом пространственной дисперсии и неупругого рассеяния. Окончательный вывод о возбуждении 2D-плазменных мод может быть сделан только на основании решения дисперсионного уравнения, получаемого при совместном решении линеаризованного уравнения Больцмана и уравнения Пуассона, что требует дальнейших исследований.

На рис. 4 б видно, что при температуре 200 К значение $\text{Im}[\mu]$ по абсолютной величине меньше, чем при 90 К. Поскольку в дисперсионное уравнение для 2D-плазмонов в решетчатых затворах входит подвижность, ее изменение влияет на положение резонансной частоты. Следовательно, уменьшение $\text{Im}[\mu]$ с ростом температуры приводит к смещению резонансной частоты в область меньших значений, что экспериментально наблюдалось в работе [13] как красный сдвиг плазмонного резонанса.

Важно подчеркнуть, что это смещение не является следствием изменения знака $\text{Im}[\mu(\omega/2\pi)]$, а обусловлено температурной зависимостью $\text{Im}[\mu]$. С ростом температуры возрастает частота рассеяния носителей на LO-фононах, что, в свою очередь, приводит к изменению фазового сдвига между током и полем и, как следствие, меняет резонансные условия для возбуждения фундаментальных плазменных мод. Таким образом, наблюдаемый красный

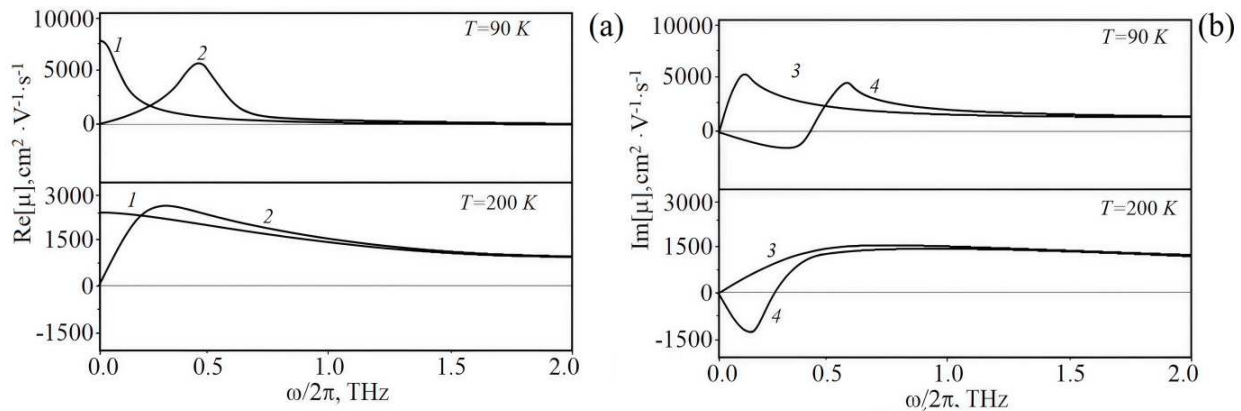


Рис. 4. Частотные зависимости действительной (а) и мнимой (б) частей подвижности носителей в гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, рассчитанные в рамках разработанной численной модели. Кривые 1, 3 получены для однородного электромагнитного поля с волновым вектором $k = 0$. Кривые 2, 4 рассчитаны для случая пространственно-неоднородного поля с $k = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$

сдвиг в работе [13] является проявлением изменения динамики рассеяния, а не самостоятельным признаком возбуждения 2D-плазмонов.

На рис. 3 видно, что при $T < 90 \text{ K}$ различия между кривыми незначительны, что свидетельствует о слабом влиянии пространственной дисперсии в данном температурном диапазоне. Однако при $T > 100 \text{ K}$ пространственная дисперсия вносит заметный вклад. Игнорирование этого фактора, как и пренебрежение неупругостью рассеяния, может привести к ошибочной интерпретации температурных сдвигов плазменных резонансов в работе [13].

Полученные частотные зависимости проводимости позволили уточнить вопрос о температурной зависимости эффективной массы электрона m^* в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. В работах [2, 3, 13] красный сдвиг плазменных резонансных частот с ростом температуры объяснялся существенным (до 45%) увеличением m^* . Однако в настоящей работе предполагается, что данный эффект связан не с перенормировкой эффективной массы, а с изменением динамики рассеяния. Активация неупругого рассеяния носителей на LO-фононах с ростом температуры меняет величину мнимой части высокочастотной проводимости, что и проявляется в виде смещения резонансов. Высокотемпературное поведение 2DES в нитридных гетероструктурах определяется в первую очередь переключением механизмов рассеяния.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведен численный расчет высокочастотной проводимости 2DES в полупровод-

никовых гетероструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, учитывая эффекты пространственной дисперсии, а также сильно неупругое электрон-фононное рассеяние. В основе подхода лежит линейаризованное кинетическое уравнение Больцмана, решение которого ищется методом разложения неравновесной функции распределения по угловым гармоникам с последующей дискретизацией энергетического спектра. Интеграл столкновений для LO-фононов, учитывающий неупругий характер рассеяния, сведен к трехдиагональной форме, что позволило получить численно устойчивое решение.

Проведенный анализ температурной зависимости подвижности носителей заряда показал, что при низких температурах ($T < 100 \text{ K}$), когда доминирует квазиупругое рассеяние на DA-потенциале, разработанная модель дает значения подвижности, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными для гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. С ростом температуры выше 150 K активация рассеяния на LO-фононах приводит к существенному (более чем в два раза) подавлению подвижности по сравнению с квазиупругим приближением. Показано также, что пренебрежение вырождением 2DES приводит к систематическому завышению подвижности, особенно заметному при температурах, близких к комнатным.

Исследование частотных зависимостей $\text{Re}[\mu]$ и $\text{Im}[\mu]$ носителей в 2DES выявило различие между случаями однородного ($k = 0$) и пространственно-неоднородного ($k = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$) внешнего поля. При температуре 90 K кривые $\text{Re}[\mu(\omega/2\pi)]$ и $\text{Im}[\mu(\omega/2\pi)]$ ведут себя как монотонные функции

частоты. При повышении температуры до 200 К для случая $k = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ наблюдается максимум на $\text{Re}[\mu(\omega/2\pi)]$ и смена знака $\text{Im}[\mu(\omega/2\pi)]$ вблизи характеристической частоты ω_h , что свидетельствует о возбуждении фундаментальных плазменных мод в 2DES.

Результаты работы позволили предположить, что основная причина длинноволнового смещения 2D-плазменных резонансов связана с активацией неупругого рассеяния на LO-фононах с ростом температуры, что проявляется в характерном поведении частотной зависимости $\text{Im}[\mu]$.

Разработанный численный метод может быть применен для обработки экспериментальных данных по импульсной ТГц-спектроскопии полупроводниковых гетероструктур на основе полярных полупроводниковых соединений.

Финансирование. Данная работа была поддержана грантом 2026 года на проведение фундаментальных научных исследований (НИР/НИОКР) научными коллективами НИУ МГСУ, проект № 03-482/130.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. V. Popov, J. Infrared Millim. Terahertz Waves **32**, 1178 (2011).
2. F. Schuster, D. Coquillat, H. Videlier et al., Opt. Express **19**, 7827 (2011).
3. D. Pashnev, T. Kaplas, V. V. Korotyeyev et al., Appl. Phys. Lett. **117**, 051105 (2020).
4. C. D. Ager, R. J. Wilkinson, and H. P. Hughes, J. Appl. Phys. **71**, 1322 (1992).
5. T. Otsuji, Y. M. Meziani, T. Nishimura et al., J. Phys. Condens. Matter **20**, 384206 (2008).
6. A. Qteish, P. Rinke, M. Scheffler, and J. Neugebauer, Phys. Rev. B **74**, 245208 (2006).
7. C. Herring and E. Vogt, Phys. Rev. **101**, 944 (1956).
8. A. Trampert, O. Brandt, and K. H. Ploog, in *Semiconductors and Semimetals*, ed. by J. I. Pankove and T. D. Moustakas, Acad. Press, San Diego (1998), Vol. 50.
9. S. Zhang, E. Xie, T. Yan et al., J. Appl. Phys. **118**, 125709 (2015).
10. P.-A. Mante, Yu-Ru Huang, Szu-Chi Yang et al., Ultrasonics **56**, 52 (2015).
11. M. Bialek, A. M. Witowski, M. Orlita et al., J. Appl. Phys. **115**, 214503 (2014).
12. J. Lusakowski, Semicond. Sci. Technol. **32**, 013004 (2017).
13. E. R. Burmistrov and L. P. Avakyants, JETP **167** (2025) [Е. Р. Бурмистров, Л. П. Авакянц, ЖЭТФ **167**, 15 (2025)].
14. R. Redko, V. Kaliuzhnyi, O. Kolomys, and O. Belyaev, Mater. Res. Express **13**, 085001 (2026).
15. M. Oszwaldowski and M. Zimpel, J. Phys. Chem. Solids **49**, 1179 (1988).
16. A. T. Hatke, M. A. Zudov, J. D. Watson et al., Phys. Rev. B **87**, 161307 (2013).
17. S. Syed, J. B. Heroux, Y. J. Wang et al., Appl. Phys. Lett. **83**, 4553 (2003).
18. M. Pristovsek, Appl. Phys. Lett. **102**, 242105 (2013).
19. S. J. Allen, D. C. Tsui, and R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. **38**, 980 (1977).
20. A. V. Chaplik, Surf. Sci. Rep. **5**, 289 (1985).
21. J. Neu and C. A. Schmittenmaer, J. Appl. Phys. **124**, 231101 (2018).
22. I. A. Kvasnikov, *Thermodynamics and Statistical Physics. Theory of Equilibrium Systems*, Vol. 1, Editorial URSS, Moscow (2002) [И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем*, т. 1, Эдиториал УРСС, Москва (2002)].
23. J. Požela, K. Požela, and V. Jucienė, Semiconductors **34**, 1011 (2000) [Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене, ФТП **34**, 1053 (2000)].
24. W. Florkowski and R. Ryblewski, Phys. Rev. C **93**, 064903 (2016).
25. T. Matsuno, J. Meteorol. Soc. Jpn. **44**, 76 (1966).
26. L. Ella, A. Rozen, J. Birkbeck et al., Nat. Nanotechnol. **14**, 480 (2019).

Determination of the High-Frequency Conductivity of a 2DEG in Semiconductor Heterostructures by Numerical Solution of the Boltzmann Kinetic Equation

E. R. Burmistrov^{a,b}, V. A. Parshin^c, D. A. Senetskaya^a, N. V. Morozova^a, Yu. V. Fomina^a,
D. Yu. Ryazanov^a, S. N. Gavrilin^d, N. A. Parfentieva^d, L. P. Avakyants^e*

^a *National Research University MPEI (Moscow Power Engineering Institute), Department of Higher Mathematics
111250, Moscow, Russia*

^b *P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences
119991, Moscow, Russia*

^c *National Research University MPEI, V. A. Fabrikant Department of Physics
111250, Moscow, Russia*

^d *National Research University MGSU (Moscow State University of Civil Engineering),
Department of General and Applied Physics
129337, Moscow, Russia*

^e *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics
119991, Moscow, Russia*

*E-mail: burmistrover@my.msu.ru

Received May 26, 2026

Revised June 25, 2026

Accepted June 29, 2026

Abstract

The high-frequency conductivity of a two-dimensional electron system in semiconductor heterostructures is computed numerically in the terahertz frequency range. The model accounts for carrier scattering in the two-dimensional electron system by the deformation potential and by longitudinal optical phonons. The approach is based on the linearized Boltzmann equation, whose solution is sought by expanding the non-equilibrium electron-density distribution function in angular harmonics. An infinite system of coupled integro-differential equations for the angular harmonics $\tilde{f}^l$ is obtained, which upon discretization in energy reduces to a block-tridiagonal system of linear algebraic equations. The proposed approach makes it possible to separate quantitatively the contributions of the scattering mechanisms to the imaginary part of the conductivity, which determines the position of the plasmon resonances, and thereby to interpret their temperature long-wavelength shift.

Keywords: two-dimensional electron system, heterostructures, high-frequency conductivity, terahertz frequencies, Boltzmann equation, angular harmonics

Funding. This work was supported by a 2026 grant for fundamental scientific research conducted by research teams of National Research Moscow State University of Civil Engineering, project No. 03-482/130.

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflicts of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.