О температурной зависимости статической электропроводности полупроводниковой квантовой проволоки в изоляторе

© Н.А. Поклонский¶, Е.Ф. Кисляков, С.А. Вырко

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

(Получена 14 ноября 2002 г. Принята к печати 18 ноября 2002 г.)

Рассматривается электрическое сопротивление на постоянном токе полупроводниковой квантовой проволоки в диэлектрической матрице, обусловленное взаимодействием носителей заряда с продольными акустическими фононами матрицы. Для случая невырожденного газа носителей в проволоке на основе приближения времени релаксации получены простые аналитические выражения для расчета электропроводности. При независящей от температуры концентрации носителей заряда сопротивление проволоки растет с температурой как $T^{5/2}$, т. е. более сильно, чем в объемном ковалентном полупроводнике.

1. Задача расчета температурной зависимости электрической проводимости квантовых проволок (с учетом квантово-размерных ограничений на поперечное движение электронов проводимости и дырок) возникает во многих областях физики конденсированных систем (см., например, [1–3]) и важна для приложений в наноэлектронике. При этом, как правило, квантовые проволоки находятся в трехмерной диэлектрической матрице, т. е. их электропроводность зависит в том числе и от взаимодействия электронов проводимости с акустическими фононами матрицы. Полезно иметь соотношения для оценки связанных с этим взаимодействием эффектов. Цель работы — получение аналитического выражения для электропроводности квантовой проволоки при рассеянии невырожденных электронов проводимости продольными акустическими (LA) фононами матрицы.

В основе нашего вывода формулы для электросопротивления, обусловленного взаимодействием электронов проводимости с LA-фононами матрицы, лежит кинетическое уравнение Больцмана в приближении времени релаксации. При этом мы намереваемся выяснить, как меняются известные [4–7] соотношения для температурной зависимости электропроводности трехмерных полупроводниковых материалов в случае квантово-размерного ограничения движения носителей заряда в двух поперечных к линии движения направлениях.

2. Рассмотрим предельно тонкую квантовую проволоку, когда можно ограничиться вкладом в электропроводность электронов только наинизшего квантово-размерного уровня энергии. Электрон проводимости в проволоке будем характеризовать продольным квазиимпульсом $p_z = \hbar k_z$ и волновой функцией: $|k_z\rangle = L^{-1/2}\exp(ik_z z)$ для $x, y = 0$, где L — длина прямолинейной проволоки вдоль оси OZ; $k_z = p_z/\hbar$ — квазиволновой вектор электрона, движущегося вдоль проволоки. При этом мы полностью пренебрегаем размытием волновой функции электрона в поперечном направлении, что справедливо тогда, когда длина волны фононов, эффективно взаимодействующих с электронами проводимости, больше диаметра квантовой проволоки. Приближение строгой поперечной локализации электронов в квантовой проволоке означает полную неопределенность их поперечного импульса, т. е. закон сохранения импульса для поперечных компонент не выполняется, что увеличивает по сравнению с трехмерным случаем фазовый объем, доступный в процессе электрон-фононного рассеяния, и соответственно вероятность рассеяния (см. также [7]).

Модуль матричного элемента гамильтониана взаимодействия электрона проводимости проволоки с продольным акустическим фононом диэлектрической матрицы в приближении потенциала деформации имеет вид [4]

$$\left|V^q_{k_z, k_z \pm q_z}\right| = \frac{Cq}{3}\sqrt{\frac{2\hbar}{V_1\omega_q\rho_l}\left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right)} \equiv w(q)\sqrt{N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}}, \tag{1}$$

где $k_z, k_z' = k_z \pm q_z$ — квазиволновые векторы электрона до и после взаимодействия с фононом (верхний знак соответствует поглощению, нижний — испусканию фонона с проекцией q_z волнового вектора на ось проволоки); q — модуль квазиволнового вектора фонона; ω_q — круговая частота, ρ_l — плотность материала матрицы, V_1 — нормировочный объем; C — константа деформационного потенциала; $N_q = [\exp(\hbar\omega_q/k_BT) - 1]^{-1}$ — среднее число LA-фононов с энергией $\hbar\omega_q$ при тепловой энергии $k_\mathrm{B}T$.

Электропроводность на постоянном токе прямолинейной квантовой проволоки, ориентированной вдоль оси OZ, можно по [4–7] привести к виду

$$\sigma_z = \frac{-2e^2}{\pi\hbar m^2 A}\int\limits_0^{+\infty} p_z^2\,\frac{\partial f}{\partial\varepsilon_z}\,\tau_z\,dp_z, \tag{2}$$

где A — площадь поперечного сечения проволоки; e — модуль заряда электрона; $\varepsilon_z \equiv \varepsilon_{k_z} = (\hbar k_z)^2/2m$ — кинетическая энергия движения электрона с эффективной массой m вдоль проволоки; $f = [\exp((\varepsilon_{k_z} - E_\mathrm{F})/k_\mathrm{B}T) + 1]^{-1}$ — функция Ферми–Дирака, E_F — уровень Ферми, отсчитанный от первого

¶ E-mail: poklonski@bsu.by

квантово-размерного уровня движения электрона поперек проволоки; $\tau_z \equiv \tau(k_z)$ — время релаксации квазиимпульса электрона проводимости вдоль проволоки.

Вероятность перехода электрона в единицу времени из состояния k_z в состояние k'_z вследствие взаимодействия с акустическими фононами матрицы в 1-м порядке теории возмущений дается соотношением [4,7]

$$W_{k_z,k'_z} = \frac{2\pi}{\hbar} w^2(q)\big[(1+N_q)\delta(\varepsilon_{k_z,k_z-q_z}+\hbar\omega_q) + N_q\delta(\varepsilon_{k_z,k_z+q_z}-\hbar\omega_q)\big], \tag{3}$$

где $w(q)$ определяется соотношением (1); $\delta(\varepsilon_{k_z,k_z\mp q_z} \pm \hbar\omega_q)$ — дельта-функция Дирака; $\varepsilon_{k_z,k'_z} = (p'^2_z - p^2_z)/2m$.

Продольное время релаксации τ_z получается [8] в результате суммирования (3) по всем конечным состояниям k'_z, допустимым законами сохранения энергии, которые учитываются δ-функциями Дирака, и усреднения по неучаствующим в рассеянии электрона LA-фононам с перпендикулярными к оси проволоки волновыми векторами $\mathbf{q}_\perp$. Это дает

$$\frac{1}{\tau_z} = \frac{V_1}{(2\pi)^3}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(1-\frac{k'_z}{k_z}\right)dk'_z\int W_{k_z,k'_z}\,d^2\mathbf{q}_\perp, \tag{4}$$

где $q_\perp = |\mathbf{q}_\perp|$ — модуль поперечной компоненты квазиволнового вектора $\mathbf{q}$ акустического фонона матрицы; $d^2\mathbf{q}_\perp = 2\pi q_\perp dq_\perp$.

В невырожденном электронном газе $q_z = |k_z - k'_z| \ll q$, так что $q \approx q_\perp$, и выражение (4) можно представить в виде

$$\frac{1}{\tau_z} \approx \frac{C^2}{9\pi\hbar\rho_l v_l}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dp'_z\left(1-\frac{p'_z}{p_z}\right)\int\limits_0^{\infty}dq\,q^2\big[(1+N_q) \times\delta(\varepsilon_{p_z,p'_z}+\hbar\omega_q) + N_q\delta(\varepsilon_{p_z,p'_z}-\hbar\omega_q)\big], \tag{5}$$

где $v_l = \omega_q/q$ — продольная скорость звука в матрице; дельта-функция $\delta(\varepsilon_{p_z,p'_z} \pm \hbar\omega_q) \equiv \delta(\varepsilon_{k_z,k_z\mp q_z} \pm \hbar\omega_q)$ выражает закон сохранения энергии при испускании (верхний знак) и поглощении (нижний знак) фонона соответственно.

С учетом соотношения $\delta(\varepsilon_{p_z,p'_z} \pm \hbar\omega_q) = (v_l\hbar)^{-1} \times \delta(\varepsilon_{p_z,p'_z}/v_l\hbar \pm q)$ из (5) получим

$$\frac{1}{\tau_z} \approx \frac{C^2}{9\pi\rho_l(v_l\hbar)^2}\Bigg[\int\limits_{-p_z}^{+p_z}dp'_z\left(1-\frac{p'_z}{p_z}\right)\left(\frac{p'^2_z-p^2_z}{2m\hbar v_l}\right)^2 \times\left(1-\exp\left(\frac{p'^2_z-p^2_z}{2mk_\mathrm{B}T}\right)\right)^{-1} + \int\limits_{|p'_z|>|p_z|}dp'_z\left(1-\frac{p'_z}{p_z}\right) \times\left(\frac{p'^2_z-p^2_z}{2m\hbar v_l}\right)^2\left(\exp\left(\frac{p'^2_z-p^2_z}{2mk_\mathrm{B}T}\right)-1\right)^{-1}\Bigg] = \frac{C^2p_z^5}{18\pi\rho_l m^2(v_l\hbar)^4}\,\Phi\left(\frac{p_z^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right), \tag{6}$$

где

$$\Phi(\beta) = \int\limits_0^1\frac{(\alpha^2-1)^2d\alpha}{1-\exp(\beta(\alpha^2-1))} + \int\limits_1^{\infty}\frac{(\alpha^2-1)^2d\alpha}{\exp(\beta(\alpha^2-1))-1};$$

$$\alpha = p'_z/p_z; \quad \beta = p_z^2/2mk_\mathrm{B}T.$$

В предельных случаях высоких и низких температур функция $\Phi(\beta)$ выражается через гамма-функцию Эйлера Γ и дзета-функцию Римана ξ (см., например, [9]):

$$\Phi\left(\frac{p_z^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right) = \Phi(\beta) \approx \begin{cases}\Gamma(5/2)\xi(5/2)\beta^{-5/2}/2 \approx 0.89\beta^{-5/2} & \text{при } \beta < 2,\\ 8/15 & \text{при } \beta > 5.\end{cases} \tag{7}$$

В невырожденной квантовой проволоке функция распределения электронов по кинетической энергии ε_z имеет вид $f \approx \exp\big((E_\mathrm{F}-\varepsilon_z)/k_\mathrm{B}T\big)$, так что из (2) с учетом (6) электропроводность проволоки есть

$$\sigma_z = \frac{e^2 36\rho_l(v_l\hbar)^4}{\hbar AC^2k_\mathrm{B}T}\exp\left(\frac{E_\mathrm{F}}{k_\mathrm{B}T}\right)\int\limits_0^{+\infty}\frac{\exp(-p_z^2/2mk_\mathrm{B}T)}{p_z^3\Phi(p_z^2/2mk_\mathrm{B}T)}\,dp_z. \tag{8}$$

Интегрирование в формуле (8), с учетом того что в невырожденном газе для одномерного электрона со средней тепловой энергией $k_\mathrm{B}T/2$ параметр $\beta \approx 0.5$ и, согласно (7), справедлива аппроксимация $\Phi(\beta) \approx 0.89\beta^{-5/2}$, дает

$$\sigma_z \approx 8.95\,\frac{\rho_l e^2\hbar^3 v_l^4}{mA(Ck_\mathrm{B}T)^2}\exp\left(\frac{E_\mathrm{F}}{k_\mathrm{B}T}\right). \tag{9}$$

Одномерная концентрация невырожденных электронов проводимости [1]

$$n = \frac{2}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}f\,dp_z \approx \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T}\exp\left(\frac{E_\mathrm{F}}{k_\mathrm{B}T}\right); \tag{10}$$

при температуре $T < \pi(\hbar n)^2/2k_\mathrm{B}m$ начинается вырождение электронного газа (уровень Ферми E_F сдвигается в зону разрешенных энергий).

Исключая из (9) и (10) уровень Ферми E_F, получаем, что ограниченная рассеянием на LA-фононах матрицы электропроводность невырожденного газа электронов проволоки

$$\sigma_z \approx 11.21\left(\frac{e}{C}\right)^2\frac{\rho_l(\hbar v_l)^4 n}{Am^{3/2}(k_\mathrm{B}T)^{5/2}}, \tag{11}$$

где n/A — трехмерная концентрация электронов проводимости.

3. Рассмотрим возможное приложение полученных соотношений. Перспективным материалом для формирования в нем квантовой полупроводниковой проволоки может служить нелегированный кристалл алмаза. Проволоку p-типа проводимости по [10,2] можно сформировать при имплантации ионов бора в алмаз сверхтонким пучком (диаметр — десятки нанометров). Важно, что при последующем термическом отжиге не происходит расплывания профиля легирования, так как атомы бора, замещая атомы углерода в решетке алмаза, практически в ней не диффундируют [11].

Пусть одномерная концентрация водородоподобных акцепторов в зарядовых состояниях (0) и (-1) равна $N = N_0 + N_{-1}$, а концентрация компенсирующих однократно положительно заряженных доноров — KN, так что концентрация делокализованных вдоль проволоки дырок $p = N_{-1} - KN$. Концентрация отрицательно заряженных акцепторов без учета их возбужденных состояний равна [5,6]

$$N_{-1} = N\left(1 + \gamma_a \exp\left(\frac{E_\mathrm{F} + E_a}{k_\mathrm{B}T}\right)\right)^{-1}, \qquad (12)$$

где γ_a — фактор вырождения водородоподобного акцептора с энергией ионизации E_a в квантовой проволоке; E_F и E_a отсчитываются от первого квантово-размерного уровня v-зоны.

При низких температурах, когда $p \ll K(1-K)N$, из уравнения электронейтральности $N_{-1} \approx KN$ с учетом (12) и (10) определяем уровень Ферми $E_\mathrm{F} = -E_a + k_\mathrm{B}T \ln[(1-K)/K\gamma_a]$, так что из (9) следует

$$\sigma_z \approx 8.95 \left(\frac{e}{C}\right)^2 \frac{\rho_l \hbar^3 v_l^4 (1-K)}{Am(k_\mathrm{B}T)^2 K\gamma_a} \exp\left(\frac{-E_a}{k_\mathrm{B}T}\right), \qquad (13)$$

т. е. измерение температурной зависимости $\sigma_z T^2$ позволяет определить энергию E_a отрыва дырки с эффективной массой m от акцептора в квантовой проволоке.

При высоких температурах, когда $p \approx (1-K)N$, электропроводность квантовой проволоки в условиях рассеяния дырок только на LA-фононах матрицы, согласно (11), уменьшается с ростом температуры: $\sigma_z \propto 1/T^{5/2}$. Для этих же условий в объемном невырожденном ковалентном полупроводнике [4–7]: $\sigma \propto 1/T^{3/2}$. Это различие в температурной зависимости σ_z и σ согласуется с приведенным выше качественным обсуждением проявления строгой локализации электронов проводимости поперек квантовой проволоки.

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований, грант Ф01-199.

Список литературы

[1] S. Kagoshima, H. Nagasawa, T. Sambongi. *One-dimensional conductors* (Berlin, Springer, 1988).
[2] *Nanotechnology*, ed. by G. Timp (N. Y., Springer, 1999).
[3] *Электронные свойства дислокаций в полупроводниках*, под ред. Ю.А. Осипьяна (М., Эдиториал УРСС, 2000).
[4] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978).
[5] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
[6] K. Seeger. *Semiconductor Physics: An introduction* (Berlin, Springer, 1999).
[7] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford, Clarendon Press, 1999) chap. 3, 10.
[8] Э.Л. Нагаев. ЖЭТФ, **100**, (4(10)), 1297 (1991).
[9] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Стиган (М., Наука, 1979).
[10] I.A. Dobrinets, A.M. Zaitsev, T. Etzel, J. Butler, A.D. Wieck. J. Wide Bandgap Mater., **9** (1/2), 7 (2001).
[11] В.С. Вавилов. УФН, **167**, 17 (1997).

Редактор Л.В. Беляков

On the DC electroconductivity temperature dependence of semiconductor quantum wire in insulator

N.A. Poklonski, E.F. Kislyakov, S.A. Vyrko

Belarusian State University,
220050 Minsk, Belarus

Abstract DC electrical resistivity of semiconducting quantum wire in insulating matrix due to scattering on LA matrix phonons is considered. For the case of nondegenerate carriers in wire on the basis of relaxation time approximation, simple analytical expressions for resistivity have been derived. For the constant charge carrier density the resistivity increases with temperature as $T^{5/2}$, i. e. stronger than in a bulk covalent semiconductor.