

Баллистическая проводимость квантовой проволоки при конечных температурах

© Н.Т. Баграев, В.К. Иванов*, Л.Е. Клячкин, А.М. Малярченко, И.А. Шельх*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

*Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 30 декабря 1999 г. Принята к печати 30 декабря 1999 г.)

Температурная зависимость баллистической проводимости квантовой проволоки рассчитывается в пренебрежении процессами рассеяния носителей. Вклад в проводимость (G) подзон, для которых $E_j - \mu \gg kT$, описывается формулой Ландауэра–Буттикера $G = 2e^2/h$ (e — заряд электрона, h — постоянная Планка, $\mu(T)$ — химический потенциал, E_j — дно j -й подзоны размерного квантования, T — температура, k — постоянная Больцмана). Проводимость остальных подзон падает, и для высоколежащих подзон она экспоненциально мала. Показано исчезновение квантовой лестницы, когда kT приближается к величине энергетического зазора между уровнями размерного квантования. Подобное температурное тушение квантовой лестницы вблизи значений потенциала на затворе, соответствующих скачкообразному изменению баллистической проводимости, наблюдается при исследовании квантованной проводимости кремниевой квантовой проволоки.

Баллистическая проводимость одиночной квантовой проволоки при нулевой температуре в приближении малых продольных напряжений выражается хорошо известной формулой Ландауэра–Буттикера [1,2]

$$G = 2 \frac{e^2}{h} N(\mu_0), \quad (1)$$

где μ_0 — химический потенциал носителей тока при нулевой температуре, равный фермиевской энергии E_F , $N(\mu_0)$ — число заполненных подзон размерного квантования, зависящее от положения уровня Ферми относительно их дна. N может изменяться в условиях приложенного к проволоке перпендикулярного напряжения V_g , изменяющего концентрацию носителей в проволоке, а следовательно, и величину $\mu_0 \equiv E_F$.

Как следует из (1), проводимость при $T = 0$ не зависит от продольного напряжения V , т.е. вольт-амперная характеристика (ВАХ) является линейной. В то же время зависимость проводимости от перпендикулярного напряжения на затворе V_g носит разрывный ступенчатый характер [3,4]. Отклонения от формулы (1) могут наблюдаться вследствие переброса носителей внешним продольным полем из одной подзоны размерного квантования в другую [5]. Такой переброс будет наиболее вероятен при значениях V_g , соответствующих скачку в проводимости, что прогнозирует гладкий характер зависимости $G(V_g)$ и нелинейность ВАХ.

Представляет интерес вопрос о баллистической проводимости квантовой проволоки при конечной температуре, когда число заполненных подзон размерного квантования, строго говоря, не определено, поскольку существует конечная зависящая от температуры вероятность нахождения электрона внутри любой из них. Заполненность подзон определяется распределением Ферми:

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} + 1}, \quad (2)$$

где $\varepsilon = E_j + p^2/2m$ (E_j — дно j -й подзоны размерного квантования), μ — зависящий от температуры химиче-

ский потенциал, определяемый из уравнения

$$\begin{aligned} n &= \frac{2}{2\pi\hbar} \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 + \exp\left(\frac{E_j + p^2/2m - \mu}{kT}\right) \right]^{-1} dp \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{j=0}^{\infty} I_j. \end{aligned} \quad (3)$$

При произвольной температуре вычисление интегралов, входящих в (3), возможно только численно. Интерес, однако, представляет случай, когда kT достаточно мало по сравнению с $|E_j - \mu|$. В этом случае интегралы в (3) могут быть разбиты на два класса:

$$\begin{aligned} 1) & \frac{E_j - \mu}{kT} \gg 0, \\ 2) & \frac{E_j - \mu}{kT} < 0. \end{aligned} \quad (4)$$

При вычислении интегралов 1-го класса можно пренебречь единицей. При этом распределение Ферми заменяется на распределение Больцмана:

$$\begin{aligned} I_j^{(1)} &= \exp\left(\frac{\mu - E_j}{kT}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) dp \\ &= \sqrt{2\pi mkT} \exp\left(\frac{\mu - E_j}{kT}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Интегралы 2-го класса вычисляются согласно стандартной процедуре [6]:

$$\begin{aligned} I_j^{(2)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 + \exp\left(\frac{E_j + p^2/2m - \mu}{kT}\right) \right]^{-1} dp \\ &= \sqrt{2m} \int_0^{+\infty} \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \zeta_j}{kT}\right) \right]^{-1} \varepsilon^{-1/2} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (6)$$

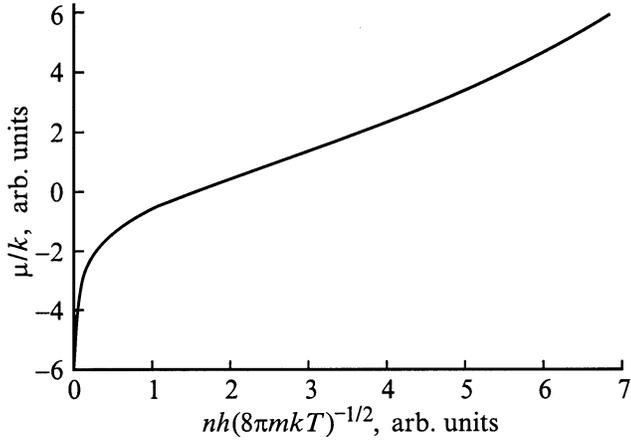


Рис. 1. Расчетная зависимость химического потенциала μ от концентрации носителей в квантовой проволоке с одной подзоной размерного квантования ($E_0 = 0$) при $T = 1$ К.

Используя замену переменной $\eta = (\varepsilon - \zeta_j)/kT$ и разложение функции $(\zeta_j + \eta kT)^{1/2}$ по степеням η с точностью до членов 2-го порядка, получаем

$$I_j^{(2)} = \sqrt{8m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\zeta_j^{1/2} + \frac{kT}{2\zeta_j^{1/2}} \eta - \frac{(kT)^2}{8\zeta_j^{3/2}} \eta^2 \right] \frac{e^{-\eta}}{(1 + e^{-\eta})^2} d\eta$$

$$= \sqrt{8m} (\mu - E_j)^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2 (kT)^2}{24(\mu - E_j)^2} \right]. \quad (7)$$

Таким образом,

$$n = \frac{\sqrt{8m}}{\pi \hbar} \sum_{E_j < E_F} (\mu - E_j)^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2 (kT)^2}{24(\mu - E_j)^2} \right]$$

$$+ \frac{\sqrt{2\pi m kT}}{\pi \hbar} \sum_{E_j > E_F} \exp \left[\frac{\mu - E_j}{kT} \right]. \quad (8)$$

Зависимость $\mu(n, T)$ определяется из решения этого уравнения относительно μ , что возможно только при знании спектра размерного квантования проволоки $\{E_j\}_{j=0}^{\infty}$.

Если рассмотреть только одну подзону с дном $E_0 = 0$, то при достаточно низкой температуре и высокой концентрации носителей приближенно имеем

$$\mu(n, T) = \frac{(\pi \hbar n)^2}{8m} \left[1 - \frac{\pi^2 (kT)^2}{24\mu_0^2} \right]^{-2}. \quad (9)$$

Точный вид зависимости $\mu(n)$ для этого случая изображен на рис. 1.

Рассмотрим теперь проводимость баллистической квантовой проволоки при заданных температуре, химическом потенциале, определяемом концентрацией носителей, и спектре размерного квантования $\{E_j\}_{j=0}^{\infty}$. Вычислим вклад в проводимость от подзоны размерного квантования с некоторым номером j в пренебрежении

переходом носителей между подзонами. Рассмотрим сначала кратко подобный вывод для $T = 0$. В этом случае пустые подзоны, для которых $E_j < \mu_0$, не дают вклада в проводимость вообще. Для вычисления проводимости заполненной подзоны рассматриваются два бесконечных одномерных резервуара электронов, разделенных точечным контактом, заменяющим квантовую проволоку. Разность химических потенциалов слева и справа от контакта равна произведению заряда электрона на величину приложенного к проволоке продольного напряжения: $\mu_1 - \mu_2 = eV$. Вклад в ток дают только состояния, энергия которых E лежит в интервале $\mu_2 < E < \mu_1$. Таким образом, проводимость равна

$$G = I/V = \frac{2e}{V} \sum_{\mu_2 < E < \mu_1} v_x = \frac{2e}{m} \sum_{\mu_2 < E < \mu_1} p_x$$

$$= \frac{e}{\pi m \hbar} \int_{\sqrt{2m(\varepsilon - eV)}}^{\sqrt{2m\varepsilon}} p dp = 2 \frac{e^2}{h}. \quad (10)$$

В случае конечной температуры надо учесть, что распределение электронов по энергиям "размыто", и вклад в ток с некоторой вероятностью могут давать электроны с любой энергией. Вычисляя ток через контакт как разность токов, текущих слева направо и справа налево, имеем

$$G_j = \frac{e}{\pi m \hbar V} \int_0^{\infty} p \{ f(p, \mu_1, T) [1 - f(p, \mu_1, T)]$$

$$- f(p, \mu_2, T) [1 - f(p, \mu_2, T)] \} dp$$

$$= \frac{e}{\pi m \hbar V} \int_0^{\infty} p [f(p, \mu_1, T) - f(p, \mu_2, T)] dp$$

$$= \frac{e}{\pi m \hbar V} \int_0^{\infty} p [f(p, \mu_1, T) - f(p, \mu_1 - eV, T)] dp, \quad (11)$$

где $f(p, \mu, T)$ обозначает фермиевское распределение. Таким образом,

$$G_j = \frac{e}{\pi m \hbar V} \int_0^{\infty} p \left[\frac{1}{1 + e^{(E_j - \mu_1)/kT} e^{p^2/2mkT}} \right.$$

$$\left. - \frac{1}{1 + e^{(E_j - \mu_1 + eV)/kT} e^{p^2/2mkT}} \right] dp$$

$$= \frac{2ekT}{hV} \ln \left[\frac{1 + e^{(\mu_1 - E_j)/kT} e^{eV/kT}}{1 + e^{(\mu_1 - E_j)/kT}} \right]. \quad (12)$$

Как видно, при конечной температуре проводимость зависит как от концентрации носителей, так и от приложенного продольного напряжения. В пределе малых

продольных напряжений имеем

$$G_j = \frac{2e^2}{h} \frac{e^{(\mu_1 - E_j)/kT}}{1 + e^{(\mu_1 - E_j)/kT}}. \quad (13)$$

Рассмотрим несколько предельных случаев.

А) Заполненные подзоны с низко расположенным дном: $(\mu_1 - E_j)/kT \gg 1$. В этом случае можно в формуле (13) пренебречь единицей в знаменателе, и проводимость, таким образом, не отличается от своего значения при нулевой температуре:

$$G_j = \frac{2e^2}{h}. \quad (14)$$

Б) $(\mu_1 - E_j)/kT \sim 0$. Такая ситуация имеет место вблизи областей скачкообразного изменения проводимости. Раскладывая экспоненты в ряд, имеем

$$G = \frac{e^2}{h} \left(1 + \frac{\mu_1 - E_j}{kT} \right). \quad (15)$$

Отсюда видно, что, если химический потенциал совпадает с дном подзоны, ее вклад в проводимость вдвое меньше, чем от заполненной подзоны при $T = 0$.

В) Высоколежащие подзоны, свободные при нулевой температуре. Для них $(\mu_1 - E_j)/kT \ll 0$ и

$$G_j = \frac{2e^2}{h} e^{(\mu_1 - E_j)/kT} \ll 1. \quad (16)$$

Вклад таких подзон в проводимость, таким образом, экспоненциально мал. Если концентрация носителей достаточно мала, условие $(\mu_1 - E_j)/kT < 0$ выполняется для всех подзон, в том числе и для наинизшей по энергии. Зависимость концентрации от химического потенциала в этом случае может быть выражена в виде некоторого ряда. Будем рассматривать только наинизшую подзону. Имеем

$$\begin{aligned} \pi \hbar n &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + e^{(\mu_1 - E_0)/kT} e^{p^2/2mkT}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{p^2/2mkT} dp}{e^{p^2/2mkT} + e^{(\mu_1 - E_0)/kT}} \\ &= \sqrt{2\pi mkT} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1}}{\sqrt{j}} e^{(\mu_1 - E_0)/kT}. \end{aligned} \quad (17)$$

Если концентрация настолько мала, что $e^{(\mu_1 - E_0)/kT} \ll 1$, то можно сохранить только первый член разложения. Тогда

$$\begin{aligned} e^{(\mu_1 - E_0)/kT} &\approx \hbar \sqrt{\frac{\pi}{2mkT}} n = \beta n \ll 1, \\ \beta &= \hbar \sqrt{\frac{\pi}{2mkT}}. \end{aligned} \quad (18)$$

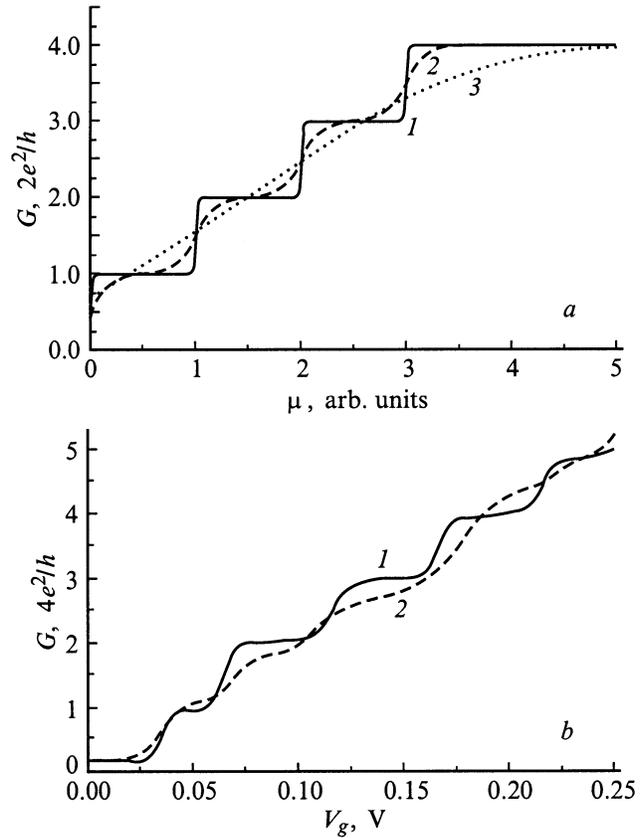


Рис. 2. Квантованная проводимость при различных значениях температуры. *a* — расчетные зависимости от химического потенциала μ при $T = 0$ (1), $0.1\Delta E/k$ (2), $0.6\Delta E/k$ (3). *b* — экспериментальные зависимости от напряжения на затворе V_g при $T = 77$ (1) и 300 К (2).

Это условие поясняет, что имеется в виду под малостью концентрации. Проводимость, таким образом, равна

$$G \approx \frac{e^2}{h} \beta n = e^2 \pi \sqrt{\frac{2\pi}{mkT}} n. \quad (19)$$

Как видно, в отличие от случая $T = 0$ баллистическая проводимость спадает до нуля при уменьшении концентрации носителей внутри квантовой проволоки. Учитывая в разложении два первых члена, нетрудно получить поправку к проводимости, зависящую от квадрата концентрации,

$$G \approx \frac{e^2}{h} (\beta n + \beta^2 n^2/2). \quad (20)$$

В результате проведенного выше рассмотрения зависимости проводимости от химического потенциала для различных значений температуры ((13), рис. 2, *a*) видно, что квантовая лестница, наблюдаемая при $T = 0$, "размывается" с повышением температуры и исчезает, когда kT становится по порядку величины равным расстоянию между уровнями размерного квантования ΔE .

Подобное температурное тушение баллистической проводимости при частичном заполнении подзон размерного квантования впервые получено при регистрации квантованной проводимости в зависимости от напряжения, приложенного к кремниевой квантовой проволоке, длина которой меньше длины свободного пробега. Перенос носителей заряда в такой квантовой проволоке не сопровождается джоулевыми потерями вследствие подавления процессов неупругого рассеяния. Поэтому электроны и дырки в условиях одномерного транспорта будут проявлять баллистические свойства [1–4].

Получение кремниевых квантовых проволок с баллистическими свойствами стало возможным благодаря совместному использованию методов диффузионной нанотехнологии и формирования самоупорядоченных примесных квантовых ям. Квантовые ямы этого типа формируются внутри сверхмелких p^+ -профилей в процессе неравновесной диффузии бора на кремниевой поверхности (100) [7–9].

Глубина сверхрезкого диффузионного профиля и концентрация бора в нем, измеренные методом вторичной ионной масс-спектрометрии, составили 10 нм и 10^{21} см^{-3} соответственно. Наличие одиночной квантовой ямы, локализованной между сильно легированными примесными барьерами внутри диффузионного p^+ -профиля, было идентифицировано с помощью угловых зависимостей циклотронного резонанса [7,10]. Благодаря пирозлектрическим свойствам двумерных барьеров, электрическое поле, приложенное вдоль плоскости квантовой ямы, с одной стороны, создает поперечные ограничения для движения носителей тока, а с другой — осуществляет их перенос [8,9]. В зависимости от однородности распределения бора внутри пирозлектрических барьеров внешнее электрическое поле формирует как гладкие, так и модулированные квантовые проволоки [8,9].

Одним из наиболее важных следствий получения квантовых проволок с баллистическими свойствами является квантованная проводимость, возникающая при изменении напряжения на затворе, которое управляет положением уровня Ферми относительно подзон размерного квантования и тем самым способно изменять число носителей тока в квантовой проволоке [2,3]. При этом зависимость $G(V_g)$, где V_g — напряжение на затворе, имеет ступенчатый характер, поскольку проводимость квантовой проволоки изменяется скачком каждый раз, когда уровень Ферми совпадает с одной из подзон размерного квантования (см. рис. 2, а). Такая ступенчатая зависимость проводимости от V_g была обнаружена при исследовании вышеописанной гладкой кремниевой квантовой проволоки ($2 \times 2 \text{ нм}^2$), электростатически формируемой в самоупорядоченной кремниевой квантовой яме p -типа (рис. 2, б). Положение уровня Ферми, определяемое сечением проволоки, концентрацией двумерных дырок ($\sim 2.5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$) и эффективной длиной одномерного канала ($\sim 4 \text{ мкм}$), соответствовало заполнению одномерных подзон как тяжелых,

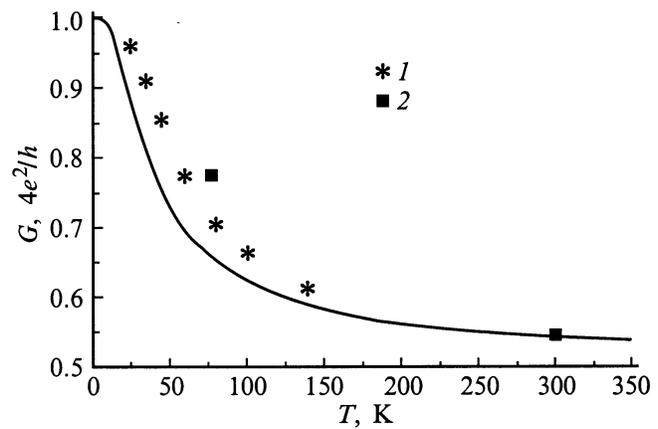


Рис. 3. Температурная зависимость квантованной проводимости: сплошная линия — расчет по формуле (13); 1 — из экспериментальных данных работы [12]; 2 — из экспериментальных данных рис. 2, б.

так и легких дырок, которое проявляется в величине квантовых ступенек (рис. 2, б). Следует отметить, что величина квантовой ступеньки, соответствующей заполнению первой подзоны размерного квантования (рис. 2, б), несколько меньше предсказанного теорией значения ($\sim 4e^2/h$), что обусловлено, по-видимому, спиновой поляризацией носителей в нулевом магнитном поле [11].

Наблюдаемое температурное тушение проводимости вблизи квантовых ступенек (рис. 2, б) хорошо согласуется с расчетной зависимостью (13) (рис. 2, а), если принять во внимание величину энергетического зазора между одномерными подзонами для исследуемой квантовой проволоки ($\sim 96 \text{ мэВ}$ [9]). Универсальность применения (13) для расчета температурной зависимости проводимости квантовой проволоки подтверждается также подобием температурного тушения квантовых ступенек, которое было обнаружено при изучении двух квантовых проволок с различными параметрами (рис. 3).

Таким образом, полученное выражение для баллистической проводимости квантовой проволоки при конечных температурах позволяет описать температурное тушение квантовых ступенек, возникающих в проводимости при прохождении уровня Ферми через подзоны размерного квантования. В отличие от случая $T = 0$ предсказывается, что при конечных температурах баллистическая проводимость спадает до нуля при уменьшении концентрации носителей в квантовой проволоке. Подобное температурное тушение квантовых ступенек в зависимости проводимости от напряжения на затворе было обнаружено при исследовании кремниевой квантовой проволоки. Показано, что в пределе малых продольных напряжений вклад заполненных подзон в баллистическую проводимость описывается формулой Ландауэра–Буттикера, тогда как при частичном их заполнении проводимость падает вдвое. Это приводит к темпера-

турному тушению квантовых ступенек в зависимости проводимости от положения уровня Ферми, когда kT приближается к величине энергетического зазора между уровнями размерного квантования.

Данная работа выполнена при поддержке ФТНС (проект 97-1040), ПТУМНЕ (проект 02.04.301.89.5.2) и Федеральной программы "Интеграция" (проект 75:2.1).

Список литературы

- [1] R. Landauer. *J. Res. Dev.*, **1**, 233 (1957).
- [2] M. Büttiker. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1761 (1986).
- [3] D.A. Wharam, T.J. Thornton, R. Newbury et al. *J. Phys. C*, **21**, L209 (1988).
- [4] B.J. van Wees, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, J.G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C.T. Foxon. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 848 (1988).
- [5] L.P. Kouwenhoven, B.J. van Wees, C.J.P.M. Harmans, J.G. Williamson, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, C.T. Foxon, J.J. Harris. *Phys. Rev. B*, **39**, 8040 (1989).
- [6] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978).
- [7] N.T. Bagraev, E.I. Chaikina, L.E. Klyachkin, I.I. Markov, W. Gehlhoff. *Superlatt. Microstr.*, **23**, 337 (1998).
- [8] N.T. Bagraev, L.E. Klyachkin, A.M. Malyarenko, W. Gehlhoff. *Superlatt. Microstr.*, **23**, 1333 (1998).
- [9] Н.Т. Баграев, В. Гельхофф, В.К. Иванов, Л.Е. Клячкин, А.М. Маляренко, И.А. Шельх. *ФТП*, **34**, 97 (2000).
- [10] W. Gehlhoff, N.T. Bagraev, L.E. Klyachkin. *Sol. St. Phenomena*, **47–48**, 389 (1996).
- [11] C.-T. Liang, M.Y. Simmons, C.G. Smith, G.H. Kim, D.A. Ritchie, M. Pepper. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 3507 (1998).
- [12] Y. Nakajima, Y. Takahashi, S. Horiguchi et al. *Extend. Abstr. IC SSDM* (Yokohama, Japan, 1994) p. 538.

Редактор Л.В. Шаронова

Conductance of ballistic quantum wires at non-zero temperatures

N.T. Bagraev, V.K. Ivanov*, L.E. Klyachkin,
A.M. Malyarenko, I.A. Shelykh*

loffe Physicotechnical Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

*St. Petersburg State Technical University,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract Temperature dependent conductance of ballistic quantum wire has been calculated for $kT \ll E_j - \mu$, the filling of quantum subbands being taken into account; here $\mu(T)$ is the chemical potential, and E_j corresponds to the top of the quantum subband. The contribution of the filled in subbands to the ballistic conductance is described by the Landauer–Buttiker formula, whereas the conductance decreases when the subband is partly filled in, which results in disappearance of the quantum steps in case kT coincides with the quantum subband gap. This temperature quenching of the quantum steps under the gate voltage is demonstrated when studying quantum wires prepared inside the ultra-shallow boron diffusion profile in a Si (100) wafer.