О влиянии флуктуаций толщины на статическую электропроводность квантовой полупроводниковой проволоки

© М.А. Рубинский[¶], Б.М. Рубинский

Прикарпатский университет им. В. Стефаника,
76000 Ивано-Франковск, Украина

(Получена 24 мая 2004 г. Принята к печати 24 мая 2004 г.)

Получены выражения для времени релаксации, подвижности электронов и статической электропроводности вдоль полупроводниковой квантовой проволоки, обусловленные случайным полем гауссовых флуктуаций толщины проволоки. Для невырожденной статистики носителей тока при достаточно низких температурах (T) подвижность электронов $u_n \propto T^{1/2}$. В предельном случае сильного магнитного поля H, направленного вдоль длины проволоки, в подвижности возникает множитель $H^{-1/2}$. Показано, что рассмотренный механизм релаксации носителей заряда является существенным для электропроводности достаточно тонкой и чистой проволоки при низких температурах.

1. В тонких полупроводниковых проволоках квантование электронного энергетического спектра существенно ограничивает поперечное движение электронов и дырок. Такие квантово-размерные ограничения проявляются и в электропроводности, которая определяется типом механизма рассеяния носителей тока в квазиодномерных системах, представляющих интерес для наноэлектроники. Современные технологии [1] не исключают возможности существования случайного поля, связанного с флуктуациями толщины квантовой полупроводниковой проволоки. Цель работы заключается в определении влияния таких флуктуаций на электропроводность и сравнении с влиянием других механизмов рассеяния, известных из литературных данных [2–7]. Кроме того, рассмотрено влияние квантующего магнитного поля, приводящего к дополнительному ограничению поперечного движения носителей тока.

2. Рассмотрим модель квантовой полупроводниковой проволоки с поперечными размерами, ограниченными по толщине d (в направлении координатной оси z) одномерной потенциальной ямой $V(z)$ с бесконечно высокими стенками и по ширине (в направлении y) параболическим потенциалом βy^2 ($\beta > 0$). Постоянное магнитное поле $\mathbf{H}$ направлено вдоль проволоки (вдоль оси x); составляющие векторного потенциала магнитного поля: $A_x = A_y = 0$, $A_z = Hy$.

В одноэлектронном приближении [6] гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\perp}\Delta_\perp + \frac{1}{2m_z}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c}A_z\right)^2 + V(z) + \beta y^2 + U(\mathbf{r}_\perp), \tag{1}$$

где $\Delta_\perp = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$, $m_\perp = m_x = m_y = m$ и m_z — эффективные массы электрона проводимости вдоль соответствующих направлений, e — абсолютная величина заряда электрона;

$$V(z) = \begin{cases} 0, & -d/2 \le z \le d/2, \\ \infty, & z < -d/2, \quad z > d/2; \end{cases} \tag{2}$$

$$U(\mathbf{r}_\perp) = \alpha[\xi_1(\mathbf{r}_\perp) - \xi_2(\mathbf{r}_\perp)] \tag{3}$$

— потенциальная энергия электрона в случайном поле, обусловленном флуктуациями толщины проволоки; $\alpha = \partial E_c/\partial d$, E_c — дно зоны проводимости, $\xi_{1,2}(\mathbf{r}_\perp)$ — случайные функции, определяющие амплитуды колебаний на разных поверхностях проволоки, перпендикулярных оси z. Взаимодействие (3) носителя тока со случайным полем считаем возмущением, вызывающим квантовые переходы в трансляционном движении вдоль проволоки (в направлении оси x). Ограничимся вкладом в электропроводность нижнего квантово-размерного уровня энергии поперечного движения электрона. В приближении учета состояний электрона с определенной четностью по оси z волновая функция невозмущенной задачи есть

$$\Psi_{k_x}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi^{1/2}Ldy_0}}\exp\left(ik_x x - \frac{y^2}{2y_0^2}\right)\cos\frac{\pi}{d}z, \tag{4}$$

где L — длина проволоки ($L \gg d$),

$$y_0 = \hbar^{1/2}\left[2m\left(\beta + \frac{e^2H^2}{2m_z c^2}\right)\right]^{-1/4}. \tag{5}$$

Энергия электрона в состоянии (4):

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_z d^2} + \hbar\left[\frac{1}{2m}\left(\beta + \frac{e^2H^2}{2m_z c^2}\right)\right]^{1/2}. \tag{6}$$

Обратное время релаксации электрона вдоль проволоки при рассеянии флуктуационным полем (3) имеет вид

$$\frac{1}{\tau_n(k_x)} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k'_x}\langle\langle|\langle k'_x|U|k_x\rangle|^2\rangle\rangle\left(1 - \frac{k'_x}{k_x}\right)\delta[E(k_x) - E(k'_x)], \tag{7}$$

где двойные скобки $\langle\langle\ldots\rangle\rangle$ означают усреднение по случайному полю. Флуктуации на различных поверхностях

[¶] E-mail: ruvinsky@il.if.ua

проволоки считаем статистически независимыми, а на одной поверхности — гауссовыми:

$$\langle\langle \xi_i(\mathbf{r}_{\perp 1})\xi_j(\mathbf{r}_{\perp 2})\rangle\rangle = \delta_{ij}\Delta_i^2 \exp\left[-\frac{(\mathbf{r}_{\perp 1}-\mathbf{r}_{\perp 2})^2}{2\Lambda_i^2}\right], \qquad (8)$$

$$\langle\langle \xi_i(\mathbf{r}_\perp)\rangle\rangle = 0, \qquad i, j = 1, 2.$$

После вычислений (7) с учетом (3) и (8) находим окончательный результат для времени релаксации:

$$\frac{1}{\tau_n(k_x)} = \frac{\alpha^2 m\sqrt{2\pi}}{\hbar^3|k_x|}\sum_{i=1}^{2}\frac{(\Delta_i\Lambda_i)^2}{\sqrt{y_0^2+\Lambda_i^2}}\exp\left(-2\Lambda_i^2k_x^2\right). \qquad (9)$$

3. Для электронной проводимости из кинетического уравнения Больцмана в приближении времени релаксации [6] имеем

$$\sigma_n = \frac{2\hbar^2e^2}{m^2}\int_0^\infty\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)k_x^2\tau_n(|k_x|)dk_x, \qquad (10)$$

где $f_0 = \left\{\exp[(\varepsilon_{k_x}-\mu)/k_BT]+1\right\}^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака, $\varepsilon_{k_x} = (\hbar k_x)^2/2m$ — кинетическая энергия движения электрона с эффективной массой m вдоль проволоки, μ — химический потенциал, отсчитанный от квантово-размерного уровня движения электрона поперек проволоки; $2\Sigma_{k_x} f_0(k_x) = N$ — полное число электронов проволоки.

Для невырожденного случая полупроводниковой проволоки после подстановки (9) в (10) и проведения расчета получим

$$\sigma_n = \frac{\pi e^2\hbar^3 n}{m^2k_BT(2\pi mk_BT)^{1/2}}\,\frac{\Phi\left(-x, 2, a(T)\right)}{4A_1(\Lambda_2^2-\Lambda_1^2)^2}, \qquad (11)$$

где

$$x = \frac{A_2}{A_1}, \quad A_i = \frac{\alpha^2m\sqrt{2\pi}}{\hbar^3}\,\frac{(\Delta_i\Lambda_i)^2}{\sqrt{y_0^2+\Lambda_i^2}}, \quad (i = 1, 2); \quad (12)$$

$$a(T) = \frac{\gamma(T)-2\Lambda_1^2}{2(\Lambda_2^2-\Lambda_1^2)}, \qquad \gamma(T) = \frac{\hbar^2}{2mk_BT}; \qquad (13)$$

$$\Phi(-x, 2, a) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^sx^s}{(s+a)^2}, \qquad (14)$$

причем $a > 0$, $x \le 1$ [8]; $n = N/L$ — число электронов на единице длины проволоки.

При $\Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda$ и произвольных x

$$\sigma_n = \frac{\pi e^2\hbar^3 n}{m^2k_BT(2\pi mk_BT)^{1/2}}\,\frac{(A_1+A_2)^{-1}}{[\gamma(T)-2\Lambda^2]^2}. \qquad (15)$$

Формулы (11)–(15) справедливы при $\gamma(T) > 2\Lambda_i^2$ и $[\gamma(T)-2\Lambda_i^2](\pi/l)^2 \gg 1$, где l — постоянная решетки вдоль оси проволоки. Первое условие связано с тем, что время релаксации (9) экспоненциально возрастает с энергией электрона, а максвелловское распределение экспоненциально убывает. Поэтому для эффективности рассеяния на гауссовых флуктуациях существенно, чтобы „тепловая“ длина волны де-Бройля носителя заряда превосходила величину корреляционного радиуса Λ_i. Второе условие связано с выбором бесконечного верхнего предела в интеграле (10) и обычно выполняется в реальной ситуации.

В случае низких температур, когда

$$\gamma(T) \gg 2\Lambda^2, \quad \text{или} \quad k_BT \ll (\hbar^2/4m\Lambda^2), \qquad (16)$$

подвижность электрона вдоль оси проволоки есть

$$u_n = \frac{2\sqrt{2\pi}e}{\hbar(A_1+A_2)\sqrt{m}}(k_BT)^{1/2}, \qquad (17)$$

и механизм рассеяния на флуктуациях толщины становится существенным для невырожденной полупроводниковой проволоки в низкотемпературной области ($u_n \propto T^{1/2}$). По температурной зависимости подвижности это напоминает дипольное рассеяние [7] для трехмерных полупроводниковых материалов.

При достаточно высоких температурах,

$$k_BT \ge \hbar^2/4m\Lambda^2, \qquad (18)$$

или достаточно больших радиусах флуктуаций Λ, величина подвижности сильно возрастает, и рассмотренный механизм является неэффективным по сравнению с рассеянием на продольных акустических (LA)-фононах [3].

Зависимости σ_n и u_n от продольного магнитного поля H связаны со сжатием волновой функции электрона поперек проволоки (по оси y) и определяются множителем

$$A_i(H) \propto \left[y_0^2(H)+\Lambda_i^2\right]^{-1/2} \qquad (19)$$

— см. (12) и (5). При $y_0^2(H) \gg \Lambda_i^2$ и предельно сильном магнитном поле, $e^2H^2/2m_zc^2 \gg \beta$, это приводит в σ_n и u_n к множителю $H^{-1/2}$.

В работе [3] исследовалась температурная зависимость статической электропроводности полупроводниковой квантовой проволоки в изоляторе, обусловленной взаимодействием невырожденных электронов с продольными акустическими фононами матрицы (в пренебрежении размытием волновой функции электрона в поперечном направлении и в отсутствие магнитного поля). При этом, в отличие от рассмотренного нами механизма релаксации, в [3] получена температурная зависимость подвижности электронов $u_n \propto T^{-5/2}$.

Невырожденный случай имеет место при температуре $T > \pi(\hbar n)^2/2k_Bm$. Для GaAs при одномерной концентрации электронов $n = 1.6\cdot10^5\,\text{см}^{-1}$ и эффективной массе $m = 0.067m_0$ [9] эта температура составляет $T > 5.3\,\text{K}$.

На рис. 1 приведены оценки подвижности электронов $u_n = \sigma_n/en$ (при $H = 0$) невырожденной относительно чистой полупроводниковой проволоки при рассеянии на

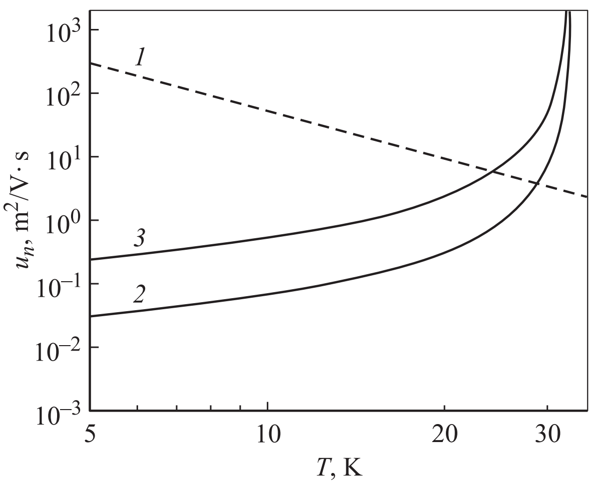

Рис. 1. Подвижность электронов вдоль невырожденной полупроводниковой проволоки GaAs ($H = 0$): *1* — рассеяние на *LA*-фононах; *2, 3* — рассеяние на флуктуациях квантовой проволоки толщиной $d = 5 \cdot 10^{-9}$ (*2*) и $7 \cdot 10^{-9}$ м (*3*).

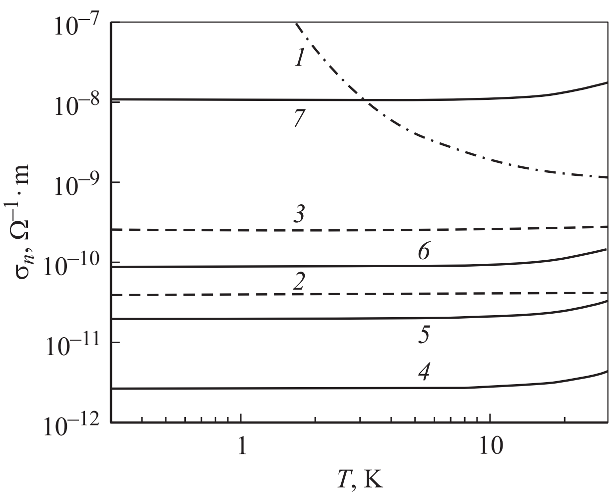

Рис. 2. Проводимость вдоль вырожденной полупроводниковой проволоки GaAs ($H = 0$): *1* — акусто-пьезоэлектрическое рассеяние; *2, 3* — примесное рассеяние при $\mu_{\rm imp} = 7.5$ (*2*) и $50\,\text{м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ (*3*); *4–7* — рассеяние на флуктуациях проволоки толщиной $d = 5 \cdot 10^{-9}$ (*4*), $7 \cdot 10^{-9}$ (*5*), $9 \cdot 10^{-9}$ (*6*) и $2 \cdot 10^{-8}$ м (*7*).

LA-фононах [3] (кривая *1*) и на флуктуациях толщины проволоки согласно (15) (кривые *2, 3*) для параметров GaAs [9]: плотность массы $\rho = 5.3 \cdot 10^3$ кг/м^3, продольная скорость звука $v = 5.2 \cdot 10^3$ м/с, константа деформационного потенциала $C = 2.2 \cdot 10^{-18}$ Дж [10]; толщина проволоки $d = 5 \cdot 10^{-9}$, $7 \cdot 10^{-9}$ м; $\alpha = -\pi^2\hbar^2/md^3$ [11], $\Delta_1 = \Delta_2 = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $y_0 = \Lambda = 1 \cdot 10^{-8}$ м.

Из рис. 1 следует, что механизм релаксации носителей заряда на случайных неровностях границ действительно может быть существенным в сравнении с рассеянием на акустических фононах при толщинах $d \lesssim 7 \cdot 10^{-9}$ м в области низких температур при $k_BT < \hbar^2/4m\Lambda^2$.

Для вырожденной системы и в граничном случае низких температур, $k_BT/\mu \ll 1$, электропроводность вдоль оси проволоки описывается выражением

$$\sigma_n \approx \frac{4e^2}{\hbar^2}\mu\left[A_1 \exp\left(-2k_F^2\Lambda_1^2\right) + A_2 \exp\left(-2k_F^2\Lambda_2^2\right)\right]^{-1}, \tag{20}$$

где $k_F^2 = (2m/\hbar^2)\mu$. Температурная зависимость σ_n определяется химическим потенциалом одномерного электронного газа

$$\mu(T) \approx \mu_0\left[1 + \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\mu_0}\right)^2\right], \tag{21}$$

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{8m}(\pi n)^2. \tag{22}$$

На рис. 2 приведены рассчитанные температурные зависимости электропроводности вдоль вырожденной проволоки на основе GaAs в предельном случае низких температур для механизмов акусто-пьезоэлектрического рассеяния [4] ($\sigma_{n,\rm ph}$ — кривая *1*), примесного рассеяния [4] ($\sigma_{\rm imp}$ — кривые *2, 3* для значений низкотемпературной подвижности двумерного движения в отсутствие магнитного поля и потенциала конфайнмента $\mu_{\rm imp} = 7.5$, $50\,\text{м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ соответственно) и рассмотренного механизма релаксации согласно (20)–(22) при толщинах $d = 5 \cdot 10^{-9}$, $7 \cdot 10^{-9}$, $9 \cdot 10^{-9}$, $2 \cdot 10^{-8}$ м (кривые *4–7*) при указанных выше значениях параметров GaAs, где константа пьезоэлектрического взаимодействия $P = 5.4 \cdot 10^{-20}\,\text{Дж}^2/\text{м}^2$ [9] и $k_{F0} = \sqrt{2m\mu_0}/\hbar = 1 \cdot 10^8\,\text{м}^{-1}$. При этом $\sigma_{n,\rm ph} \propto [k_F/(4k_F^2C^2 + P)]\exp(2\hbar k_F v/k_BT)$ и $\sigma_{\rm imp} \propto \mu_{\rm imp}k_F^2$ [4]. Оптические фононы дают вклад, сравнимый с акустическими фононами, при $T \gtrsim 50$ K [4]. Эффекты типа локализации [2], возникающие в квазиодномерных системах при сильном беспорядке (или очень большой концентрации примесей), которые нельзя объяснить в рамках теории слабого рассеяния, в нашей работе не рассматриваются. Приведенные в данной работе температурные зависимости проводимости существенно отличаются от следствий теории локализации [2] (в частности, для последней характерным является переход электропроводности при определенной температуре T_0 от степенной зависимости при $T > T_0$ к экспоненциальной при $T < T_0$).

Полученные результаты (рис. 1, 2) свидетельствуют о существенном вкладе в электропроводность механизма рассеяния носителей тока на гауссовых флуктуациях толщины полупроводниковой квантовой проволоки.

Список литературы

[1] *Nanotechnology*, ed. by G. Timp (N.Y., Springer, 1999).

[2] Y. Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford, University Press, 2002).

[3] Н.А. Поклонский, Е.Ф. Кисляков, С.А. Вырко. ФТП, **37** (6), 735 (2003).

[4] H. Bruus, K. Flensberg, H. Smith. Phys. Rev. B, **48** (15), 11 144 (1993).

[5] H. Smith, H. Højgaard. *Transport Phenomena* (Oxford, University Press, 1989).
[6] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978).
[7] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford, Clarendon Press, 1999).
[8] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. *Интегралы и ряды. Элементарные функции* (М., Наука, 1981).
[9] J.S. Blakemore. J. Appl. Phys., **53**, R 123 (1982).
[10] E.E. Mendez, P.J. Price, M. Heiblum. Appl. Phys. Lett., **45**, 294 (1984).
[11] P.K. Basu, P. Ray. Phys. Rev. B, **44** (4), 1844 (1991).

Редактор Л.В. Шаронова

On the influence of thickness fluctuations on the static electroconductivity of quantum semiconductor wire

M.A. Ruvinskii, B.M. Ruvinskii

Stefanyk's Precarpathian University,
76000 Ivano-Frankovsk, Ukraine

Abstract The expressions for a relaxation time, an electron mobility and static electroconductivity along a semiconductor quantum wire conditioned by a random field of Gaussian fluctuations of wire thickness are obtained. For nondegenerate statistics of carriers at sufficiently low temperatures the electron mobility $u_n \sim T^{1/2}$. In a limiting case of a strong magnetic field H, directional along length of a wire, in mobility there is a factor $H^{-1/2}$. It is shown that reviewed mechanism of charge carriers relaxation is essential for the electroconductivity of rather thin and pure wire at low temperatures.