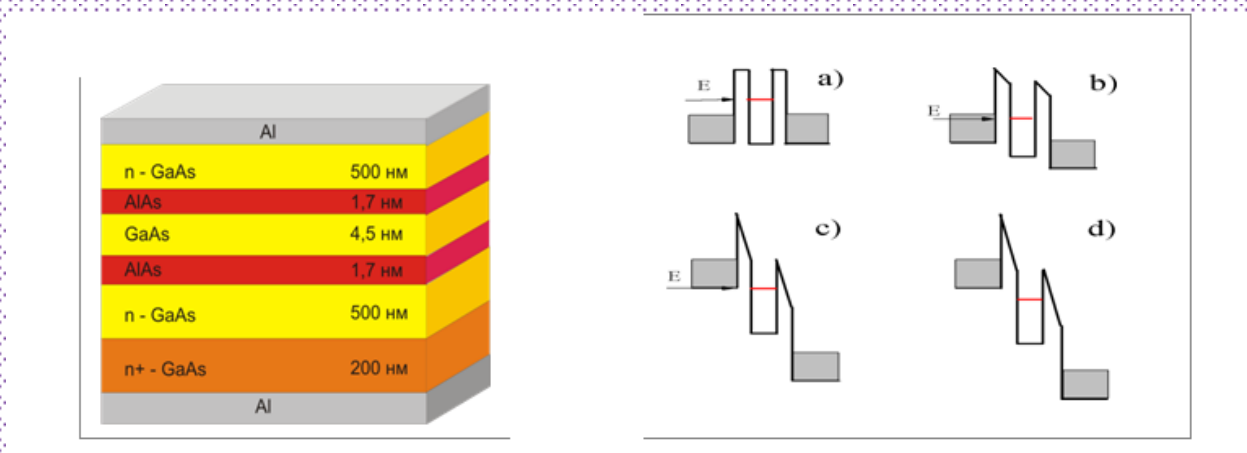


**В.Т. Долгополов**

# **Физика полупроводниковых систем**



**Черноголовка**

**2024**

В378

Д64

Долгополов, В.Т. Физика полупроводниковых систем: лекции. – Черногловка: ИФТТ РАН, 2024. –52 с.

Утверждено Ученым советом Института физики твердого тела РАН. Рекомендовано студентам высших учебных заведений, аспирантам, обучающимся по направлениям: «Физика конденсированного состояния». Может быть полезным пособием при подготовке студентов и аспирантов других специальностей с частично совпадающей программой обучения.

Данная книга является дополненным и переработанным вариантом лекций, читавшихся студентам МФТИ в течение ряда лет, на кафедре физики твердого тела в ИФТТ РАН, и может быть использована в качестве учебного пособия для студентов, магистрантов, аспирантов, а также инженерно-технических работников.

В книге содержатся вопросы и задачи по изложенному курсу.

© Долгополов, В.Т.,2024

© ИФТТРАН, 2024

## Оглавление

<b>I.</b>	<b>Введение</b>	3
<b>II.</b>	<b>Базовые идеи и материалы для построения структур пониженной размерности</b>	4
	2.1. Элементарные сведения из физики кристаллических систем	4
	2.2. Кремниевые полевые структуры	7
	2.3. Одиночные гетеропереходы	10
	2.4. Квантовые ямы	12
	2.5. Одномерные и нуль-мерные структуры	14
<b>III.</b>	<b>Электронный спектр низкоразмерных структур</b>	15
	3.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками	15
	3.2. Двойная квантовая яма	17
	3.3. Треугольная потенциальная яма	18
	3.4. Одномерный канал и квантовое сужение	19
	3.5. Плотность состояний и термодинамическая плотность состояний	20
	3.6. Двумерный электронный газ в магнитном поле	22
<b>IV.</b>	<b>Транспорт в двумерных и одномерных системах</b>	27
	4.1. Общее представление о рассеянии	27
	4.2. Проводимость двумерного электронного газа при низких температурах	29
	4.3. Точечный контакт. Формула Шарвина	30
	4.4. Одномерные каналы. Подход Ландауэра	32
	4.5. Локализация электронов в неидеальных одномерных системах. Роль интерференции электронов	33
	4.6. Скейлинговая гипотеза и слабая локализация	35
<b>V.</b>	<b>Туннелирование</b>	38
	5.1. Надбарьерное отражение и подбарьерное прохождение (туннелирование)	38
	5.2. Матричная техника при расчете туннельных эффектов	39
	5.3. Резонансный туннельный диод	41
	5.4. Сверхрешетки	45
<b>VI.</b>	<b>Кулоновская блокада</b>	47
	6.1. Постановка задачи	47
	6.2. Одноэлектронный транзистор. Принцип работы	48
	6.3. Одноэлектронный транзистор. Диаграмма стабильности	49

## I. Введение

В последние годы появилось много разговоров о перспективности нанотехнологий и необходимости внедрения технологий такого рода в российскую промышленность. При этом само собой утвердилось мнение, что всякая деятельность с объектами, имеющими размер масштаба нанометра, относится к нанотехнологической. Мнение это, к сожалению, ошибочно. Перспективна и способна привести к технологическим прорывам только деятельность, в которой ведется работа с отдельным объектом, обладающим нанометровыми размерами, или же коллективом таких объектов, в котором каждый отдельный нанообъект важен индивидуально (hightech).

Вот как, например, определяет понятие нанотехнологии электронная энциклопедия: «Нанотехнология (от греческого *nanos* (nanos) – карлик *τεχνεξ* (technic) – мастерство, искусство, *λογος* (logos) – понятие учение) – междисциплинарная область фундаментальной, а в большей степени, прикладной, науки, имеющая дело с анализом и синтезом продуктов с заданной атомарной структурой путем контролируемого манипулирования атомами и молекулами. При этом характерные «рабочие» размеры системы составляют менее 100 нанометров».

В противном случае мы имеем дело с классической химией (неорганической или органической), классическим материаловедением и т.д. Безусловно, эти области исследований вполне важны и значимы, но они не имеют отношения к части науки и техники, обозначаемой словом “nanoscience”.

Из сказанного ясно, что нанотехнологии имеют дело с отдельными объектами, размеры которых существенно (на десятках или сотнях атомных масштабов) ограничены, и электроны в которых имеют достаточно пространства, чтобы почувствовать кристаллический (или молекулярный) потенциал, а с другой стороны, способны проявить квантовую дискретность, связанную с ограниченностью доступного им пространства. Управляемые объекты такого рода впервые были созданы на базе полупроводниковых структур для исследовательских целей и нужд полупроводниковой промышленности. Позже разработанные методы и приемы были адаптированы в других областях науки и техники. В предлагаемом курсе мы сосредоточимся на физических принципах формирования полупроводниковых структур пониженной размерности, свойствах наиболее популярных систем, а также на основных и наиболее ярких физических явлениях, обусловленных уменьшением размерности.

Прежде чем приступать к изложению предмета по существу, следует обсудить вопрос о том, при каких условиях пространственное ограничение размеров означает уменьшение размерности системы для электронов. Дело в том, что все образцы, с которыми мы имеем дело, ограничены пространственно. Тем не менее, нам прекрасно известно, что все свойства макроскопических систем хорошо описываются в терминах трехмерной пространственной системы. Вопрос, в сущности, ставится так: «До какого пространственного масштаба следует уменьшить один или несколько пространственных размеров для того, чтобы размерность пространства для электрона понизилась?»

Рассмотрим в качестве примера двумерную электронную систему, например, металлическую пленку. Размеры ее в плоскости считаем огромными и постепенно уменьшаем толщину  $d$ . Есть несколько различных характерных пространственных масштабов, которые будет пересекать  $d$  по мере уменьшения. Наиболее крупным из них является длина сбоя фазы. Волновую функцию, свободно движущегося в пленке электрона, можно представлять себе (с ограничениями, обсуждаемыми ниже) как волну де Бройля с определенной энергией и импульсом. Рассеяние электрона на примесях с хорошей точностью упругое и, сохраняя модуль упомянутых величин, изменяет направление импульса. Однако любой акт неупругого рассеяния приведет к сбою фазы волновой функции. Поэтому движение электрона качественно можно себе представлять как диффузию с сохранением фазы между актами сбоя фазы волновой функции. Таким образом, пока расстояние, на которое диффундирует электрон (длина сбоя фазы), меньше чем толщина пленки, система трехмерна. В обратном

предельном случае система будет себя вести как двумерная для эффектов, в которых существенна интерференция между электронами (слабая локализация, например). Обратим внимание на то, что граничное значение толщины зависит в этом случае от температуры.

Следующим пространственным масштабом является длина свободного пробега  $l$  (расстояние, проходимое электроном между двумя актами рассеяния). Если  $l > d$  и пленка идеально плоскопараллельная, то при движении в  $z$ - направлении электрон будет чувствовать обе границы. Как при движении во всяком ящике, электронный спектр станет дискретным и во всех эффектах, в которых дискретность спектра существенна, электронная система должна рассматриваться как двумерная.

Наконец, при дальнейшем уменьшении размера, все электроны пленки окажутся на одном энергетическом уровне по отношению к движению в  $z$ -направлении. Электронный спектр представится в виде

$$\varepsilon(p) = E_0 + p^2/2m, \quad (1.1)$$

где  $E_0$  – энергия нижней размерно квантованной подзоны, а  $m$  – электронная эффективная масса в плоскости. Казалось бы, теперь движение в направлении, нормальном плоскости пленки, полностью выпало из рассмотрения, и система стала двумерной во всех смыслах. Однако даже такие системы часто характеризуют как квазидвумерные, и на это есть основания. Дело в том, что волновая функция электрона имеет конечную протяженность в направлении, нормальном плоскости пленки. Этот размер следует сравнить с характерным расстоянием между электронами в плоскости. Пока расстояние между электронами сильно превышает характерный размер волновой функции в  $z$ - направлении, взаимодействие между электронами соответствует взаимодействию между частицами в плоскости, в обратном предельном случае необходимо учитывать вероятность обнаружить электроны на разной глубине. То есть третье измерение выпадет не из всех эффектов.

Как мы видим, не существует единого критерия двумерности, также как и одномерности или нуль-мерности. Критерий, во-первых, зависит от изучаемого эффекта и, вообще говоря, от температуры. В дальнейшем мы сосредоточимся на электронных системах, удовлетворяющих условию типа (1.1) в случае двумерных и одномерных системы демонстрирующих дискретный спектр в нуль-мерном случае.

## II. Базовые идеи и материалы для построения структур пониженной размерности

### 2.1. Элементарные сведения из физики кристаллических систем.

Как хорошо известно, свойства электрона в кристаллической решетке обусловлены его волновой природой. Рассмотрим движение пробного электрона в периодическом потенциале, созданном ионными остовами атомов решетки. Периодичное расположение ионных остовов приводит к модификации волновой функции электронов. Действительно, эффективный потенциал, в котором движется пробный электрон, удовлетворяет условию

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{a})=V(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

где  $\mathbf{a} = s_1\mathbf{a}_1+s_2\mathbf{a}_2+s_3\mathbf{a}_3$ . Здесь  $\mathbf{a}_i$  – три базисных вектора, определяющих положение атомов решетки (векторы элементарных трансляций, позволяющих совместить кристаллическую решетку саму с собой), а  $s_i$  целые числа. Уравнение Шредингера, определяющее координатную часть волновой функции, имеет вид:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

Его решение, удовлетворяющее условию Блоха (2.1), обязано выглядеть следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

где  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  – периодическая функция  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{a})=u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . (Легко догадаться, почему мы выбрали такой вид решения: два последовательных переноса решетки на векторы  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  эквивалентны одному переносу на вектор  $\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2$ . Условие Блоха должно выполняться для каждого смещения в отдельности и для их суммы.)

Как видно из уравнения (2.3), все, что происходит с волновой функцией при трансляции на произвольный вектор  $\mathbf{a}$  – это умножение на некоторый фазовый множитель. Самый общий вид волновой функции, удовлетворяющей (2.3), записывается как:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Выражение (2.4) похоже на привычную нам волну де Бройля, соответствующую свободному движению электрона.

Как следует из выражения (2.4), нам удалось квалифицировать все возможные волновые функции по поведению при трансляциях. Разберемся подробно с введенным волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Для этого, прежде всего, определим набор векторов, так называемой обратной решетки  $\mathbf{b}$ , условием  $\mathbf{a}\mathbf{b} = 2\pi\mathbf{n}$ , где  $\mathbf{n}$  – произвольное целое число. Легко видеть, что обратная решетка может быть построена на трех векторах элементарных трансляций:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi [a_2a_3] / (a_1[a_2a_3]), \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi [a_3a_1] / (a_1[a_2a_3]), \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi [a_1a_2] / (a_1[a_2a_3]), \quad (2.5)$$

а векторы  $\mathbf{k}$ , отличающиеся на  $2\pi\mathbf{b}$  эквивалентны, поскольку приводят к одной и той же волновой функции. Изменение вектора  $\mathbf{k}$  на произвольную сумму векторов обратной решетки не изменяет волновую функцию электрона, поэтому введенный нами волновой вектор, несмотря на очевидное сходство выражения (2.4) с координатной частью волны де Бройля, не может соответствовать импульсу. Величину  $\hbar\mathbf{k}$  часто называют квазиимпульсом. Все его физически различные значения лежат в пределах первой зоны Бриллюэна, форма и объем которой определяются исходной кристаллической решеткой (см., например, Рис. 1). Первая зона Бриллюэна строится следующим образом. Выбираем произвольный узел обратной решетки, принимаемый за начало координат. Соединяем его отрезками прямых со всеми прочими узлами обратной решетки. Через середину каждого отрезка строим плоскость, перпендикулярную отрезку. Объем прилежащий к узлу и ограниченный кусками ближайших к узлу плоскостей и будет первой зоной Бриллюэна.

**Задача:** построить первую зону Бриллюэна для одномерной цепочки ионных остовов с расстоянием между ними  $a$ .

Энергия пробного электрона может быть представлена как многозначная функция квазиимпульса в пределах первой зоны Бриллюэна. На границе зоны ( $\mathbf{Vz}\mathbf{b}$ ) групповая скорость электронная обращается в нуль

$$\text{grad } \varepsilon(\mathbf{k})|_{\mathbf{Vz}\mathbf{b}} = 0, \quad (2.6)$$

а энергия терпит разрыв на некоторую величину.

В пределах первой зоны Бриллюэна векторы  $\mathbf{k}$  принимают дискретные значения, число которых в простейшем случае совпадает с числом атомов кристалла.

**Задача:** проверить это утверждение на примере одномерной цепочки ионных остовов. (Указание: в качестве граничных условий принять периодические, т.е. считать, что цепочка замкнута в кольцо.)

Теперь вспомним, что электроны являются ферми-частицами и в каждом квантовом состоянии может находиться только один электрон. Квантовое состояние электрона в решетке задается величиной квазиимпульса, проекцией спина на некоторое направление

и индексом, определяющим в какой полосе энергий находится энергия пробного электрона. Поэтому, опять же в простейшем случае, электроны с учетом двукратного вырождения по спину в кристалле, составленном из атомов с четным числом электронов, займут целое число ветвей спектра (энергетических зон) и при нулевой температуре кристалл окажется диэлектриком. Кристаллы, составленные из атомов с нечетным количеством электронов, будут металлами. Если же в диэлектрике энергетическая щель, разделяющая при нулевой температуре заполненные и пустые состояния, окажется небольшой, сравнимой по энергии с  $kT$  при комнатной температуре, то такие материалы отнесем к полупроводникам.

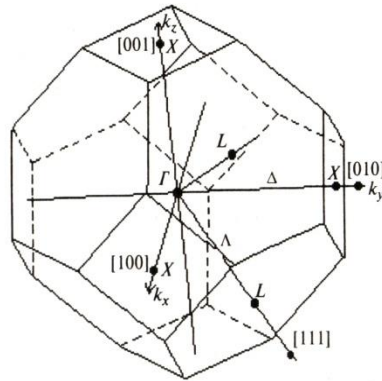


Рис. 1.

В качестве примера на Рис. 1 приведена первая зона Бриллюэна для кубической гранецентрированной решетки. На этом же рисунке показано стандартное обозначение кристаллических осей и некоторые, существенные для дальнейшего изложения точки зоны Бриллюэна. Электронный спектр оказывается достаточно сложным. В качестве примера мы приводим часть спектра в GaAs на Рис.2. Показаны зависимости энергии от  $k$  вдоль направлений  $[111]$  и  $[100]$ .

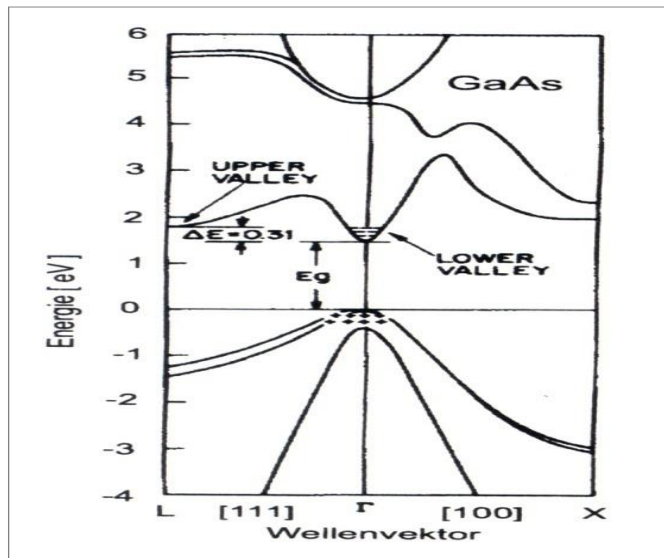


Рис.2.

Этот материал представляет собой прямозонный полупроводник, у которого потолок полностью заполненной при нулевой температуре зоны (валентной зоны) и дно пустой зоны (зоны проводимости) находятся в одной и той же точке  $k$  пространства. В рассматриваемом случае – это точка  $\Gamma$ . Вблизи точек максимума или минимума энергия может быть разложена в ряд по отклонению  $k-k_{ext}$ . Параболический вид первого члена разложения позволяет ввести эффективную массу для электронов [тензор обратных

эффективных масс определяется как  $(m^*)^{-1} = \partial^2 \varepsilon / \partial^i k \partial^k k$ ], а пустые места в валентной зоне заменить новыми квазичастицами – дырками с положительными зарядом и массой.

## 2.2. Кремниевые полевые структуры.

Кремниевые транзисторы вообще и кремниевые полевые структуры, в частности, составляют основу современной электроники. Для многих практических применений существенно снижение их размеров (соответственно повышение плотности расположения элементов электроники) и работа в этом направлении проводится вот уже 40 лет. Результат получил название закона Моора (открыт в 1966 году) и гласит, что плотность элементов удваивается примерно каждые два года. Зависимость, соответствующая закону Моора показана на Рис.2а.

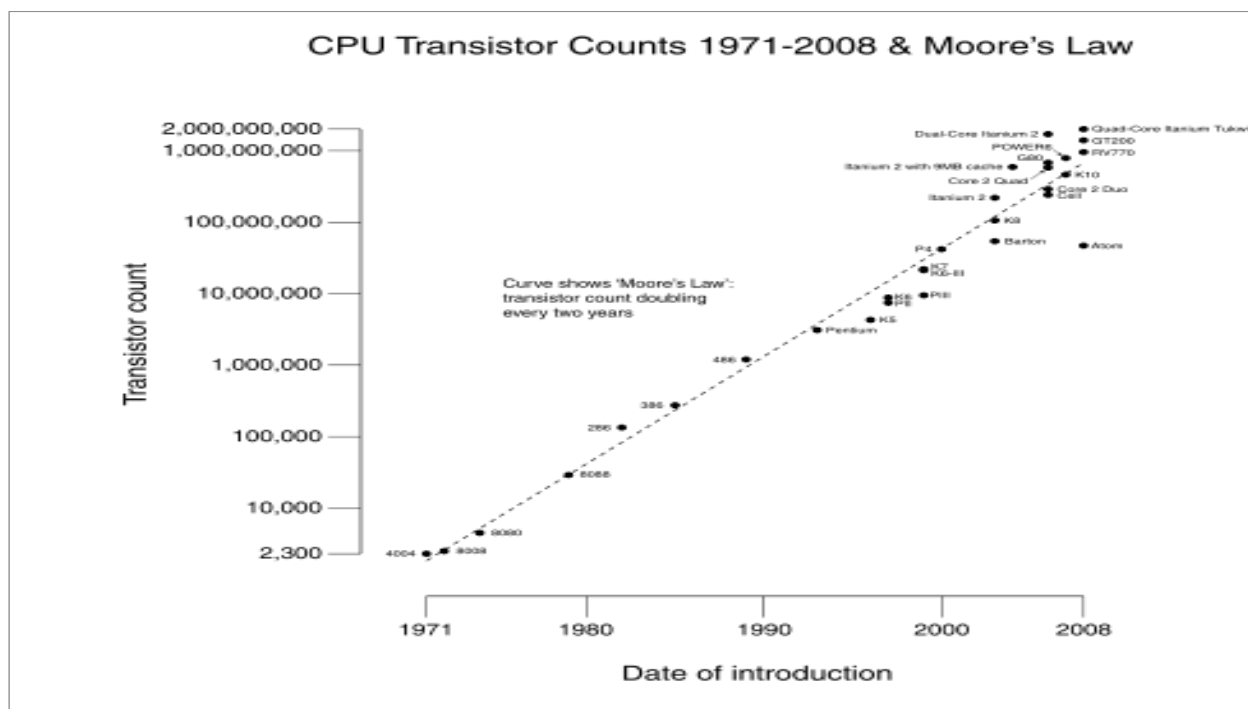


Рис.2а.

Совершенно очевидно, что такая экспоненциальная зависимость имеет естественный предел в виде размера атома и не может долго продолжаться.

Прежде чем обсуждать саму полевую структуру, обратимся к электронному спектру кремния. Спектральные кривые для объемного кремния изображены на Рис.3. Сравнив этот рисунок с Рис.2., сразу же обнаруживаем разницу между двумя обсуждавшимися полупроводниками: кремний, отличие от арсенида галлия прямозонным материалом не является. Зона проводимости имеет шесть минимумов, расположенных на расстоянии от центра зоны Бриллюэна примерно в 85% от расстояния до точки X. На Рис.4 показаны изоэнергетические поверхности вблизи минимумов энергии. Как видно из рисунка, изоэнергетические поверхности имеют вид эллипсоидов вращения, вытянутых вдоль направления  $[100]$ . Эффективная масса электронов максимальна вдоль длинной оси эллипсоида и составляет  $0.916m_0$ , где  $m_0$  масса свободного электрона. Соответствующая масса вдоль короткой оси эллипсоида равна  $0.19m_0$ .



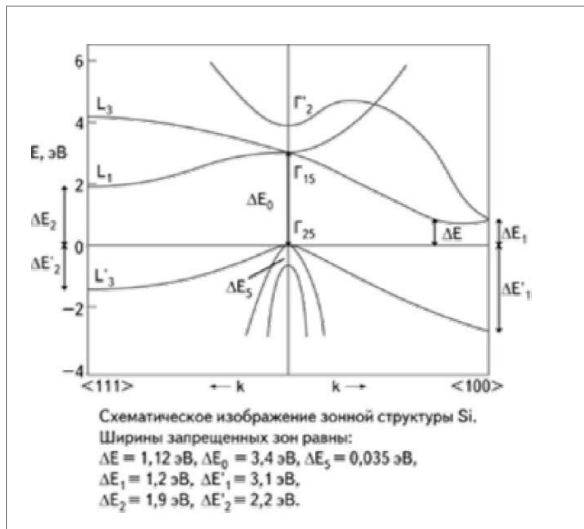


Рис.3.

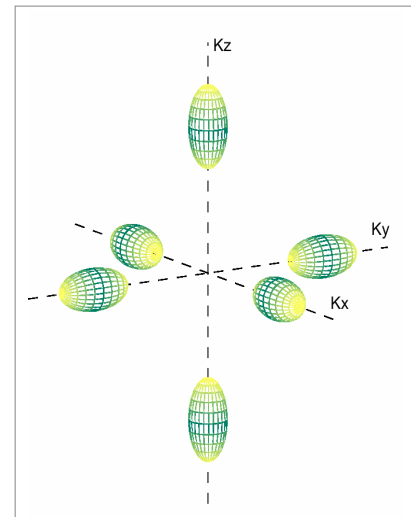


Рис.4.

Потолок валентной зоны, также как и на Рис.2, находится в точке Г. Структура спектра в окрестности этой точки достаточно сложна и сильно отличается от параболической.

Для создания двумерного электронного газа используются структуры, схематически изображенные на Рис. 5. Поверхность монокристаллического кремния окисляется, в результате чего на ней образуется слой аморфной двуокиси кремния (диэлектрика) толщиной от сотен до нескольких тысяч ангстрем. В этом слое открываются окна через которые с помощью ионной имплантации (бомбардировкой ионами) создаются области с металлической электронной проводимостью. За счет диффузии ионов эти области слегка заходят за пределы открытых окон. Наконец, поверх диэлектрика напыляется металлический затвор так, как это показано на рисунке. Осталось напылить контакты к областям

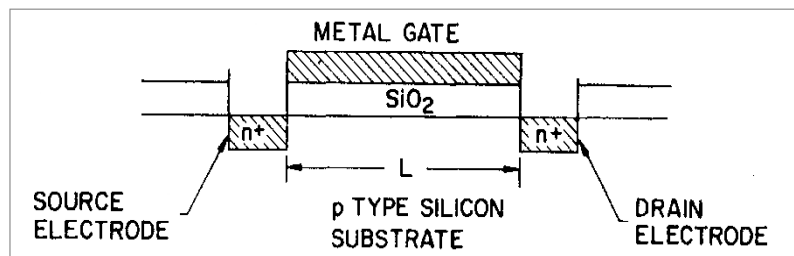


Рис.5.

повышенной электронной концентрации в окнах, называемых на русском языке истоком и стоком.

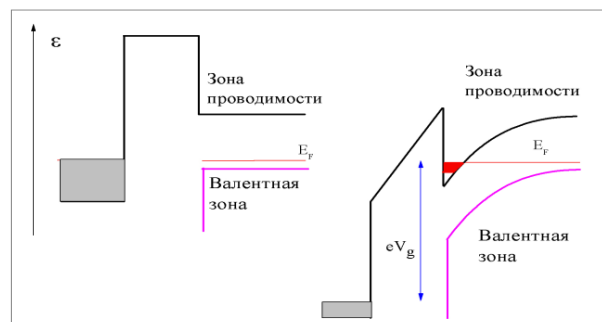


Рис.6.

На Рис.6 показана схема зависимости дна зоны проводимости и потолка валентной зоны от координаты, направленной вглубь структуры. Слева изображена ситуация так

называемых плоских зон. Положение уровня Ферми в полупроводнике соответствует полупроводнику р-типа, т.е. полупроводнику, имеющему слабое легирование акцепторной примесью (способной при конечной температуре создавать пустые места в валентной зоне). Уровень Ферми в объеме располагается несколько выше или совпадает с положением примесного уровня акцепторной примеси. Обратим внимание на то, что на границе между полупроводником и диэлектриком имеется скачок дна зоны проводимости. Какова величина этого скачка и чем она определяется? Легко догадаться, что минимальная величина скачка могла бы быть равна нулю, а максимальная – разнице в ширине запрещенной зоны у изолятора и полупроводника. Реализуемая величина скачка определяется правилом Андерсона, гласящим, что разность в положении дна зоны проводимости в контактирующих материалах равна разности энергий электронного средства. Напомним, что последняя определяется как разность энергии электрона в вакууме и энергии дна зоны проводимости в соответствующем материале.

Теперь приложим положительный потенциал (притягивающий электроны) к затвору относительно объема полупроводника. Электрическое поле, будет на первом этапе заэкранировано тем, что акцепторная примесь на некотором расстоянии от интерфейса (от границы полупроводник-изолятор) окажется отрицательно заряженной и зоны загнутся вниз по энергии. У интерфейса возникнет треугольная потенциальная яма, обладающая, вообще говоря, дискретным набором квантовых уровней. Как только нижний из этих уровней пересечет уровень Ферми, область отрицательного объемного заряда перестанет расширяться, а электроны, экранирующие электрическое поле затвора, все будут помещаться на квантовый уровень формируя свободно двигающийся вдоль поверхности двумерный электронный газ. Типичная глубина области обеднения составляет 1 мкм.

Рассмотренный случай называется случаем электронной инверсии. Возможны еще три других случая – электронной аккумуляции (если акцепторную примесь заменить на донорную), дырочной инверсии и дырочной аккумуляции.

**Задача:** Изобразить схему дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в случае электронной аккумуляции, дырочной инверсии и аккумуляции.

В предыдущих абзацах мы избегали слова «кремний», поскольку никак не учитывали реальный электронный спектр (Рис. 3,4) этого полупроводника. Рассмотрим теперь ситуацию более подробно. В качестве примера обратимся к случаю ориентации поверхности (100). В этом случае, как видно из Рис.4, в двух из шести эквивалентных минимумов зоны проводимости (долин) электроны будут иметь тяжелую массу при движении нормально интерфейсу, а в оставшихся четырех долинах – легкую. Из самых общих соображений ясно, что при движении в квантовой яме наинизший квантовый уровень будет соответствовать электронам с максимальной массой. Убедимся в справедливости последнего утверждения на примере треугольной потенциальной ямы:

$$\begin{aligned} V &= \alpha z & z > 0; \\ V &= \infty & z < 0. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Гамильтониан системы имеет вид

$$H = p^2/2m + V(z). \tag{2.8}$$

Воспользуемся соотношением неопределенности  $\Delta p \Delta z \sim \hbar$ . Поскольку  $0 < \Delta p < p, 0 < \Delta z < z$ , перепишем его в виде  $p z \sim \hbar$  и используем для оценки гамильтониана:

$$H \sim p^2/2m + \alpha \hbar/p \tag{2.9}$$

Теперь оценим величину  $p$ , соответствующую минимуму гамильтониана. Продифференцировав, приравняв  $dH/dp$  нулю и подставив полученное значение в гамильтониан, приходим к оценке:

$$E_{\min} \sim (\alpha m \hbar)^{2/3} / m. \quad (2.10)$$

Как видно из выражения (2.10), минимальную энергию по отношению к движению нормально интерфейсу будут иметь электроны двух долин с более тяжелой массой.

**Задача:** Найти выражение, аналогичное (2.10), для случая прямоугольной потенциальной ямы.

При ориентации поверхности (110) ожидается, что нижний квантовый уровень будет заполнен электронами четырех долин, а при ориентации (111) – электронами всех шести долин.

### 2.3. Одиночные гетеропереходы.

Очевидным недостатком рассмотренных выше полевых структур является наличие несовершенной границы между полупроводником и диэлектриком. В случае кремниевых полевых структур это граница между кристаллическим кремнием и аморфной двуокисью кремния. Во-первых, граница всегда шероховата, что при приложении электрического поля ведет к флуктуациям потенциального рельефа в яме для электронов и, следовательно, к дополнительному рассеянию электронов. Кроме того, на несовершенном интерфейсе собираются примеси, что в свою очередь увеличивает рассеяние электронов.

Преодолеть проблему несовершенства границы можно подобрав материалы для полупроводника и для диэлектрика таким образом, чтобы расположение атомов на интерфейсе было идентичным (одинаковый тип двумерной решетки и, по возможности, идентичные периоды). Выращивать структуру следует так, чтобы слой вырастал за слоем. Подобная техника называется техникой эпитаксиального роста.

Наиболее эффективной оказалась техника молекулярно лучевой эпитаксии. На Рис.7 показана фотография части установки для молекулярно лучевой эпитаксии. В установке осуществляется контролируемое осаждение испаренного в молекулярном источнике вещества на кристаллическую подложку. В рабочей камере (самая большая камера на фотографии) создается сверхвысокий вакуум ( $10^{-10}$  мм. рт. ст.). В таком вакууме из источников на кристаллическую подложку направляются атомные лучи в необходимом атомном соотношении. Чистота испаряемых материалов достигает 99,999999%. Источники должны быть способны испарять тугоплавкие материалы с регулированием плотности потока испаряемого материала. Типичные скорости роста не превышают 1000 нм/мин. Обычно установка содержит несколько камер. Кроме рабочей камеры имеется загрузочная (промежуточная между рабочей и атмосферой), а также исследовательская. Все камеры соединены единой транспортной системой.

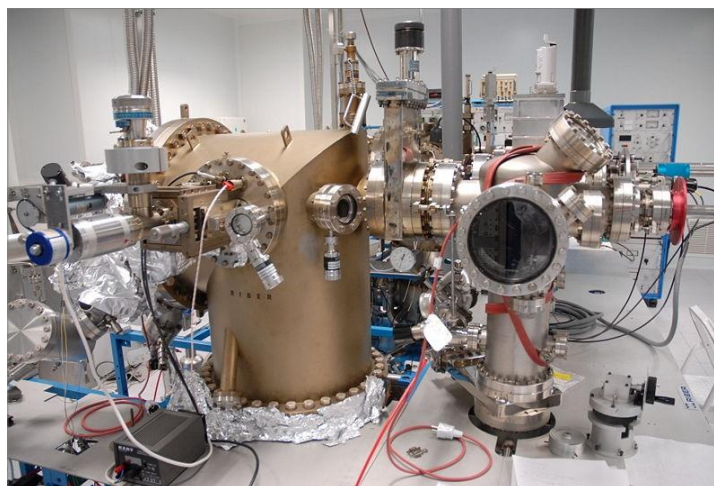


Рис. 7.

Удобнее всего для реализации предложенной идеи использовать полупроводники с различной шириной запрещенной зоны. Тот, у которого запрещенная зона шире, будет играть роль диэлектрика. Подходящие пары удобно искать на плоскости, показанной на Рис.8, где изображена величина запрещенной зоны по вертикальной оси и постоянная

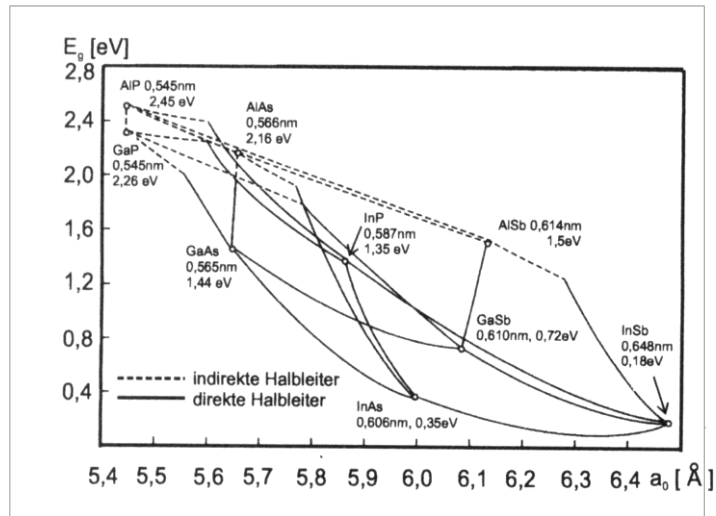


Рис.8.

кристаллической структуры по горизонтальной для полупроводников, составленных из элементов третьего и пятого столбцов таблицы Менделеева. Из рисунка сразу видно, что оптимальным может быть сочетание арсенида галлия и арсенида алюминия, имеющих исключительно близкие решеточные константы и большую разницу в ширине запрещенной зоны.

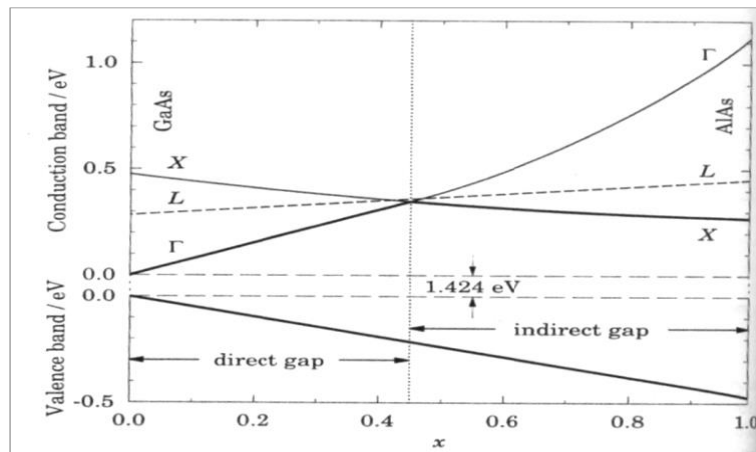


Рис.8а.

Еще более удачной парой является арсенид галлия в сочетании с твердым раствором  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с величиной  $0.15 < x < 0.35$ , для которой периоды решеток отличаются на величину, не превышающую 0.1%. Как видно из рис. 8а, твердый раствор в рассматриваемом интервале  $x$  остается прямозонным полупроводником.

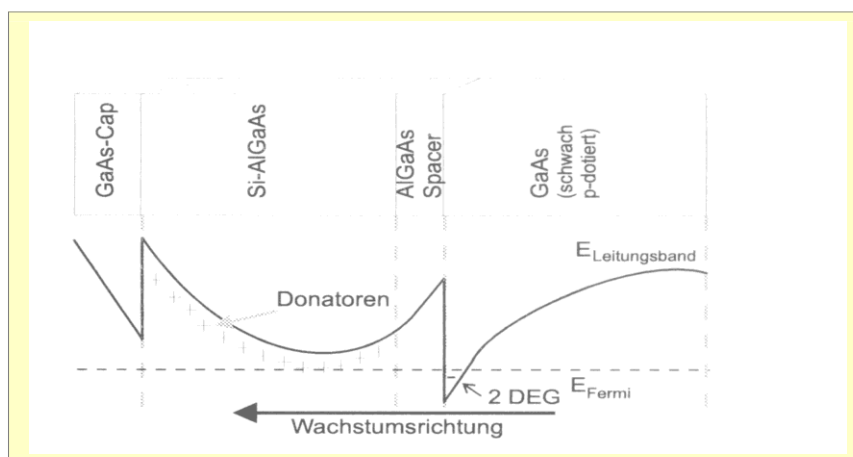


Рис. 9.

В качестве примера на Рис.9. показано поведение дна зоны проводимости в классическом одиночном гетеропереходе GaAs/AlGaAs. Рост структуры осуществлялся справа налево. На подложку из монокристаллического арсенида галлия была нанесена сверхрешетка, состоящая из узких слоев AlAs перемежающихся слоями GaAs. (Эта часть структуры на рисунке не показана). Затем был выращен слой GaAs, имевший естественное слабое легирование акцепторами. Поверх него был нанесен слой чистого, без легирования AlGaAs (так называемый спейсер), шириной менее 300 ангстрем, покрытый широким слоем (порядка 1000 ангстрем) AlGaAs, легированного донорной примесью (Si). Вся структура сверху закрыта тонким слоем арсенида галлия. Оба разрыва зоны проводимости составляют около 0.4 эВ.

На рисунке имеется несколько особенностей, не очень ясных с первого взгляда. Во-первых, бросается в глаза существование электрического поля в левой части рисунка, где причин для появления поля не видно. Оно обусловлено тем обстоятельством, что на поверхности арсенида галлия уровень Ферми прикалывается примерно к середине запрещенной зоны, что и приводит к ионизации доноров и загибает зону проводимости в левой части рисунка вверх. В правой части возникает приблизительно треугольная потенциальная яма для электронов. Именно в ней скапливаются электроны из AlGaAs. Наконец, в самой правой части рисунка в GaAs возникает слой обеднения аналогично тому, как это было в кремниевой полевой структуре. При однородном легировании потенциал в AlGaAs имеет вид параболы. Типичная электронная концентрация, получаемая в структурах такого типа, составляет  $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ .

Важную роль в рассматриваемой структуре имеет спейсер. Благодаря его наличию электрические поля отдельных примесей в месте расположения электронов складываются в среднее поле, не имеющее короткопериодных компонент. В результате, электроны в двумерных системах такого типа могут обладать большой длиной свободного пробега при гелиевых температурах (до 10 мкм).

Ясно, что слой легированного AlGaAs не может быть слишком широким, поскольку увеличение его ширины привело бы к появлению электронов на части доноров в середине слоя (а при типичных плотностях легирования - к появлению параллельного проводящего канала в структуре).

**Задача:** По приведенным выше данным оценить плотность легирующей примеси в AlGaAs.

#### 2.4. Квантовые ямы.

С простейшими треугольными квантовыми ямами мы уже сталкивались выше при рассмотрении полевых структур и одиночных гетеропереходов. Основным признаком квантовой ямы является ограниченность в одном из пространственных направлений и, как следствие, наличие дискретных квантовых уровней. Однако, на практике термин «квантовая

яма» закрепился только за прямоугольными (или почти прямоугольными) ямами.

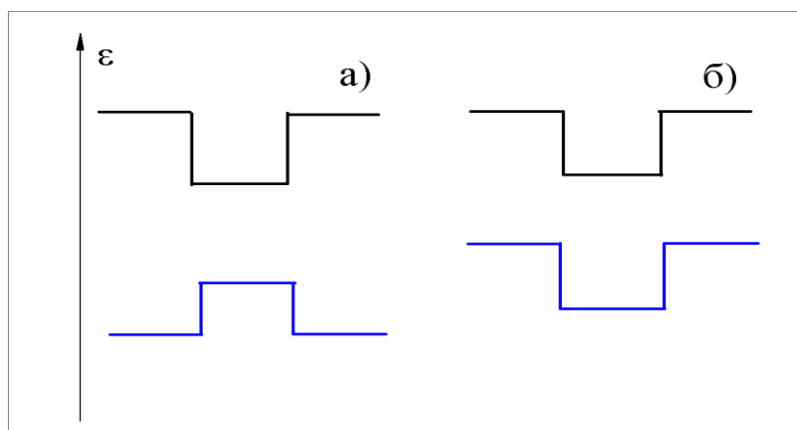


Рис.10.

На Рис. 10 показаны два возможных типа квантовых ям, возникающих при комбинировании гетеропереходов с различными ширинами запрещенной зоны и разной энергией сродства электронов. На Рис.10а показана квантовая яма на основе гетеропереходов первого типа. В этом случае образуются квантовые ямы как для электронов, так и для дырок. На основе гетеропереходов второго типа (Рис.10б) может быть создана квантовая яма для носителей только одного типа. Гетеропереходы первого типа реализуются на множестве структур: GaAs/AlGaAs, InGaAs/GaAs, InGaAs/InP и т.д. Гетеропереходы второго типа получают, например, на полупроводниковых системах InGaAs/GaSbAs, GaAs/GaP.

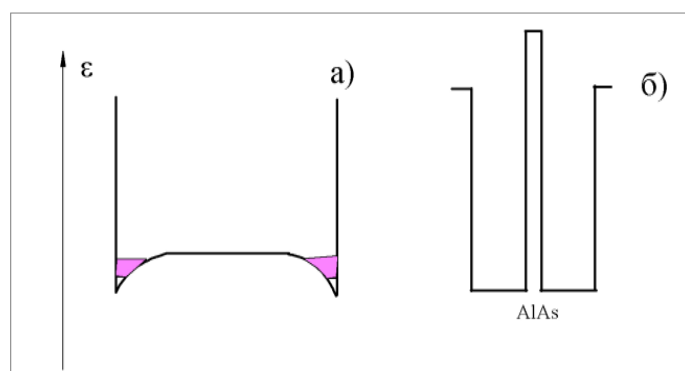


Рис 10.а.

Рис.10.б.

В дизайне квантовых ям имеются и реально используются довольно экзотические ухищрения. Самым простым из них (по крайней мере, в идейном отношении) является создание широких квантовых ям, в которых для формирования потенциального профиля для пробного электрона существенным является наличие конечной электронной плотности. Из-за отталкивания между электронами профиль ямы искажается, становясь подобным изображенному на Рис.10 а.

Другой часто используемой возможностью является встраивание тонкого, туннельно прозрачного (в два-три моноатомных слоя) барьера в квантовую яму. Возникает так называемая, двойная квантовая яма (Рис.10б). Наконец в квантовых ямах на основе GaAs/AlGaAs возможно создать квантовую яму для электронов с параболически изогнутым дном. Идея состоит в том, что ширина запрещенной зоны в AlGaAs зависит от содержания алюминия:

$$E_g(x) = 1.512 + 1.455x \text{ (eV)} \quad \text{при } 2\text{K и } x < 0.3 \quad (2.11)$$

При этом изменение ширины запрещенной зоны делится между изменением дна зоны проводимости и потолка валентной зоны: 65% изменения служит подъему дна зоны проводимости, а 35% - опусканию потолка валентной зоны. Как уже упоминалось, замена части атомов галлия на атомы алюминия не приводит к значительным изменениям постоянной решетки. Осталось рассчитать концентрацию алюминия как функцию координаты роста таким образом, чтобы реализовать параболический потенциальный профиль и провести рост с рассчитанными параметрами.

## 2.5. Одномерные и нуль-мерные структуры.

Одномерные и нуль-мерные электронные системы могут быть получены в результате «естественного» роста или с помощью методов полупроводниковой технологии из рассмотренных выше двумерных структур.

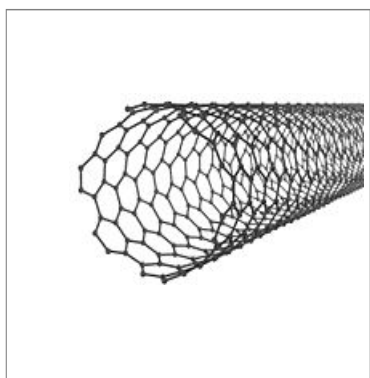


Рис.11.

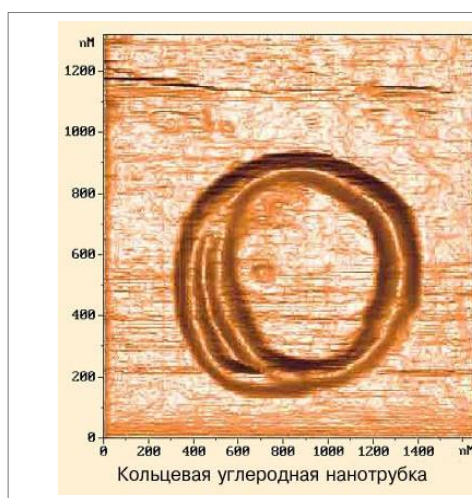


Рис.12.

Схематически структура однослойной углеродной нанотрубки показана на Рис.11. Нанотрубки имеют диаметр от 1 до 100 нанометров, могут обладать как диэлектрической, полупроводниковой, так и металлической проводимостью и демонстрируют большое разнообразие структурных свойств (однослойные и многослойные, с различной спиральностью). Они практически никогда не бывают строго прямолинейными. На Рис.12. показан скан атомно-силовым микроскопом кольцевой углеродной нанотрубки.

Нуль-мерные структуры возникают, например, при молекулярно лучевой эпитаксии материала, смачивающего подложку, имеющего идентичную кристаллическую структуру, но с сильно отличающейся постоянной решетки (рост по Странскому- Крастанову). В качестве примера рассмотрим самоорганизующийся рост квантовых точек InAs на подложке из GaAs (см. Рис.8). Первая пара слоев InAs ложится на буферный слой GaAs совершенно однородно в результате хорошего смачивания, однако, в последующих слоях возникает разрывный рост, приводящий к образованию точек в результате минимизации упругой энергии. Результат роста показан на Рис.13. Номинальная толщина наносимого InAs составляет 5 монослоев (высота слоя арсенида индия, если бы он был распределен однородно). Квантовые точки имеют пирамидальную форму с плотностью  $10^{10}$  см<sup>-2</sup>. Часто квантовые точки зарастают сверху материалом буферного слоя (в нашем случае GaAs).

**Задача:** Оценить характерную высоту квантовых точек.

Альтернативу естественно выросшим квантовым нитям и точкам составляют искусственно созданные (с помощью затворов или литографии) объекты. Идея использования затворов очень проста: следует удалить электроны со всей плоскости двумерного электронного газа за исключением нити (или квантовой точки) и подводящих проводов.

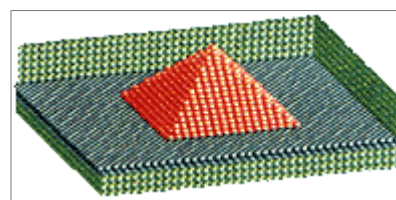
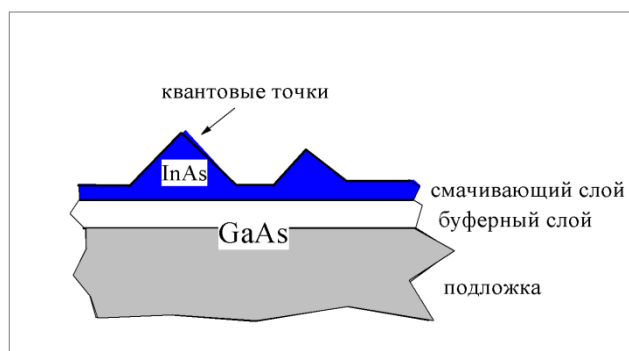


Рис.13

Пример структуры с множеством затворов приведен на Рис.14, где показан скан атомно-силового микроскопа на площади  $1 \times 1 \text{ мкм}^2$  поверхности одиночного гетероперехода на базе

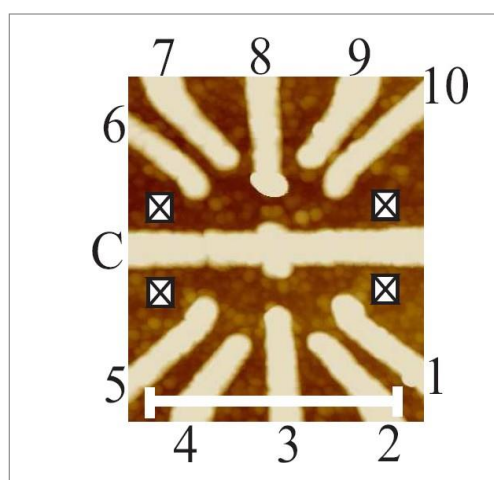


Рис.14.

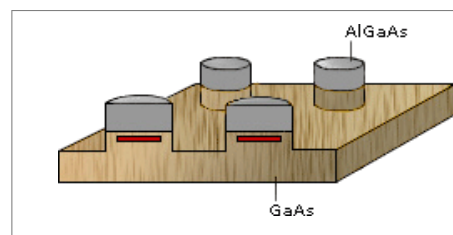


Рис.15.

AlGaAs/GaAs с нанесенными 11 затворами. Подобная система позволяет формировать квантовые сужения, Прилагая отрицательное напряжение к затвору С и к одному из затворов 1,3,5, 6,8 или 10, либо четыре симметрично расположенных квантовых точки при использовании всех затворов. Контакты к точкам осуществляются через туннелирование из областей, помеченных на рисунке крестиками.

Система квантовых точек может быть создана и травлением после электронно-лучевой или оптической (в зависимости от размера точек) литографии. Схематически результат таких операций показан на Рис.15. Преимуществом этого метода является возможность создать строго периодическую систему идентичных точек, состоящую из большого числа объектов.

### III. Электронный спектр низкоразмерных структур.

#### 3.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками.

Прежде чем решать конкретные задачи сделаем одно очень важное замечание. Как уже упоминалось, волновая функция электрона в периодическом потенциале факторизуется в виде (2.4). С помощью такой факторизации можно найти электронный спектр. В случае полупроводников нас будет интересовать только малая окрестность у экстремума, в которой спектр с хорошей точностью параболический и зависимость энергии электрона от импульса представима в виде  $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ . Более сложной задачей является задача о поведении электрона, находящегося в кристаллической решетке и внешнем аperiodическом поле. Эта задача, в принципе, может быть решена только



приближенно. Мы начнем с обоснования утверждения, что приближенно при решении подобной задачи можно забыть о периодическом потенциале и решать уравнение Шредингера для частицы с измененным законом дисперсии, помещенной только во внешний потенциал. Это утверждение справедливо не только для полупроводниковых, но и для металлических систем.

Мы не будем его строго обосновывать, только упомянем основные идеи, используемые в обосновании, и требования к внешнему полю. Прежде всего, предполагается, что внешнее поле является гладким и слабым. Первое условие означает, что характерный масштаб изменения внешнего поля существенно больше постоянной решетки кристалла. Второе - соответствует требованию, что электрическое внешнее поле значительно меньше, чем атомные поля, т.е. значительно меньше, чем  $10^8$  В/см.

Доказательство же строится следующим образом. Прежде всего осуществляется переход от блоховских волн к другим волновым функциям (функциям Ванье). Это возможно, поскольку для описания пригоден любой полный набор ортонормированных волновых функций. Функции Ванье определяются как линейная комбинация блоховских волн:

$$v_s(\mathbf{r}-\mathbf{a}) = (N)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{a}) \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.1)$$

Здесь  $N$  – число атомов в кристалле,  $\mathbf{a}$  - произвольный вектор решетки, индекс  $s$  нумерует энергетические зоны, а суммирование проводится по всем  $\mathbf{k}$  в пределах первой зоны Бриллюэна. Очевидно, что эти функции не являются собственными функциями гамильтониана и не отвечают какому-либо значению энергии, зато они описывают состояние электрона, локализованного внутри одной из ячеек кристаллической решетки.

Решение уравнения Шредингера в периодическом потенциале кристаллической решетки и аperiodическом внешнем поле ищут в виде разложения по полному набору функций Ванье:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{a}, s} f_s(\mathbf{a}, t) v_s(\mathbf{r}-\mathbf{a}) \quad (3.2)$$

Осталось проделать два последних шага – подставить  $\phi(\mathbf{r}, t)$  в уравнение Шредингера, получить уравнение для огибающей  $f_s(\mathbf{a}, t)$ , и интерполировать ее, введя функцию  $f_s(\mathbf{r}, t)$ , такую что

$$f_s(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r}=\mathbf{a}} = f_s(\mathbf{a}, t). \quad (3.3)$$

При сделанных ранее предположениях результирующее уравнение сводится к уравнению Шредингера для частицы со спектром, определяемым законом дисперсии  $\epsilon(\mathbf{k})$ , помещенной во внешнее поле. Таким образом, в гладком атомном потенциале спектр формируется на расстояниях порядка межатомного, на которых внешнее поле можно считать постоянным, а квазичастица обладающая уже сформированным спектром, проходя относительно большие расстояния, чувствует внешнее аperiodическое поле.

Теперь обратимся к задаче о движении электрона в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Вернемся к привычному обозначению волновой функции, введенной условием (3.3).

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z). \quad (3.4)$$

В приближении эффективной массы переменные, соответствующие движению в разных пространственных направлениях, разделяются и нам предстоит найти решение одномерного уравнения с потенциалом:

$$U(z) = 0 \quad \text{при } |z| < L/2,$$

$$U(z) = \infty \quad \text{при } |z| > L/2. \quad (3.5)$$

Поскольку уравнение в области нулевого потенциала имеет вид:

$$(-\hbar^2/2m^*)(d^2 \psi/dz^2) = E \psi, \quad (3.6)$$

а на границе из-за бесконечного потенциала волновая функция обязана обратиться в нуль, его решением будет:

$$\begin{aligned} \psi_n &= \cos(k_n z), & k_n &= \pi(2n+1)/L, \quad n=0,1,2,3,\dots \\ \psi_m &= \sin(k_m z), & k_m &= \pi(2m)/L, \quad m=1,2,3,\dots \end{aligned} \quad (3.7)$$

Все решения разделяются на симметричные относительно точки  $x = 0$  и антисимметричные. Низший энергетический уровень соответствует симметричному решению с отсутствием нулей волновой функции в интервале  $(-L/2, L/2)$ . Далее симметричные и антисимметричные решения чередуются при возрастании энергии. Эти свойства остаются справедливыми и для прямоугольной потенциальной ямы с конечной высотой стенок.

### 3.2. Двойная квантовая яма.

Теперь рассмотрим прямоугольную потенциальную яму с бесконечно высокими стенками, в центр которой встроен туннельно прозрачный барьер (Рис. 16). Будем искать стационарные решения с энергиями ниже высоты барьера.

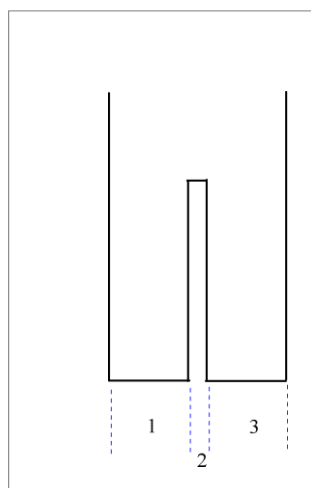


Рис.16.

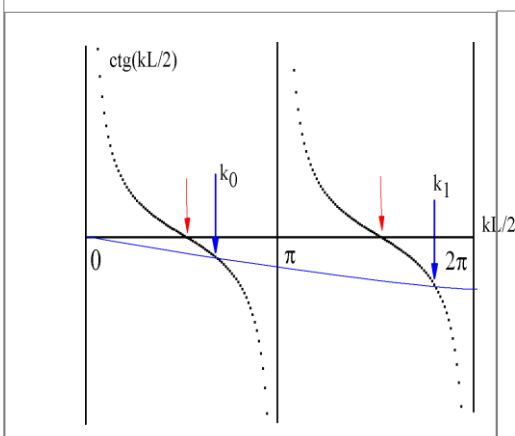


Рис. 17.

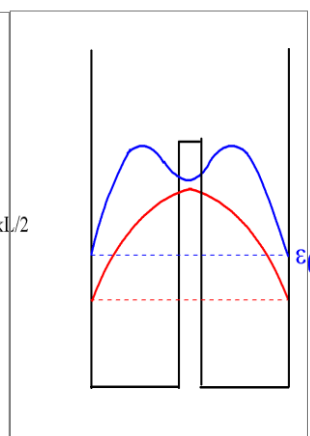


Рис. 18.

Из симметричных соображений эти решения будут либо симметричными, либо антисимметричными. Представим себе вначале, что барьер в центре ямы абсолютно непроницаем. Тогда задача сводится к рассмотренной выше, для каждой из половинок ямы. Соответственно, уровни в каждой из половинок будут определяться выражением (3.7) с шириной ямы, равной половине ширины исходной ямы за вычетом половины ширины потенциального барьера. В каждой из половинок будет собственная волновая функция и из этих функций можно составить симметричную и антисимметричную комбинации, с равными значениями энергии электрона. Теперь начнем увеличивать прозрачность барьера. Поскольку при антисимметричной волновой функции в центре ямы волновая функция обратится в нуль, то соответствующая ей энергия изменится незначительно (в меру ширины барьера). Для симметричной комбинации понижение энергии будет гораздо более значительным: в пределе полностью прозрачного барьера эффективная ширина ямы увеличится вдвое. Возникнет симметрично-антисимметричное расщепление уровней. При прочих равных условиях чем оно больше, тем выше прозрачность барьера.

Проделаем вычисления для простейшего случая почти прозрачного барьера. В областях 1 и 3:  $\psi_{1,3} = A_{1,3} \exp(ikz) + B_{1,3} \exp(-ikz)$ . В области 2, соответственно,  $\psi_2 = C \exp(k_2z) + D \exp(-k_2z)$ . Граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} U(z) &= 0 \quad \text{при } a < |z| < L/2, \\ U(z) &= \infty \quad \text{при } |z| > L/2 \\ U(z) &= U_0 \quad \text{при } |z| < a. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Таким образом, на внутренних границах волновая функция и ее производная должны быть непрерывны, а на внешних границах ямы – обращаться в нуль. Для симметричной и антисимметричной волновых функций, соответственно:  $C = \pm D$ ,  $A_1 = \pm B_3$ ,  $B_1 = \pm A_3$ . Почти полная прозрачность барьера означает, что  $k_2a \ll 1$ . Будем также полагать барьер достаточно узким  $ka \ll 1$  и рассматривать пробный электрон с энергией меньшей  $U_0$ .

Рассмотрим в качестве примера случай симметричной волновой функции.

Волновую функцию в этом случае удобно переписать в виде

$$\begin{aligned} \psi_3 &= \alpha \cos(kz) + \beta \sin(kz), \\ \psi_2 &= \gamma \operatorname{Ch}(k_2z); \quad \hbar k_2 = (2m^*[U_0 - \hbar^2 k^2/2m^*])^{1/2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Из граничных условий на внутренней границе с точностью до членов второго порядка по  $(k_2a)$  и  $(ka)$  получим:

$$\alpha = \gamma, \quad \beta = \alpha (1 + [k_2/k]^2) ka. \quad (3.10)$$

Сам коэффициент  $\alpha$  найдется из условия нормировки волновой функции. Набор собственных значений волнового вектора  $k$  определяется трансцендентным уравнением, следующим из граничного условия на внешней границе:

$$\operatorname{Ctg}(k_n L/2) = - (1 + [k_2/k_n]^2) k_n a. \quad (3.11)$$

Схематически графическое решение этого уравнения показано на Рис.17. Видно, что введение барьера повышает энергию квантовых состояний (синие стрелки) по отношению к их энергии в отсутствие барьера (красные стрелки). На Рис. 18 изображена трансформация волновой функции нижнего энергетического уровня при введении барьера. Основной причиной повышения энергии уровня является увеличение кинетической энергии при введении барьера за счет уменьшения области, доступной электрону. (Вспомним опять соотношение неопределенности.)

### 3.3. Треугольная потенциальная яма.

Как видно из рисунков 6 и 9, треугольная потенциальная яма может служить хорошим модельным потенциалом для кремниевых полевых структур и одиночных гетеропереходов. Рассмотрим соответствующую задачу более подробно, чем это было сделано в разделе 2.2. Будем считать, что с одной стороны движение электрона ограничено бесконечно высокой потенциальной стенкой:

$$U(z) = \infty \quad \text{при } z < 0, \quad (3.12)$$

А с другой стороны потенциальная энергия линейно возрастает, т.е. имеется постоянное, притягивающее электрон к поверхности, электрическое поле:

$$U(z) = eEz \quad \text{при } z > 0. \quad (3.13)$$

В таком потенциале стационарные решения уравнения Шредингера могут быть найдены точно, но мы поступим иначе, имея в виду, что, во-первых, нас будет интересовать только нижний из энергетических уровней, а во-вторых, что не всегда нам придется иметь дело с таким удобным для точного решения потенциалом и полезно освоить приближенный, но более универсальный способ вычислений. Волновая функция нижнего энергетического уровня должна удовлетворять уравнению Шредингера с потенциалом (3.8), (3.9):

$$(-\hbar^2/2m^*)(d^2 \psi_0/dz^2 + U(x) \psi_0 = E_0 \psi_0, \quad (3.14)$$

Кроме того она обязана обращаться в нуль при  $x = 0$ , не пересекать нуль при положительных  $x$  (нижний уровень!) и плавно затухать с ростом  $x$ . Попробуем искать ее в виде, предложенном Фангом и Ховардом:

$$\psi_0 = [b^3/2]^{1/2} z \exp[-bz/2]. \quad (3.15)$$

Здесь  $b$  – характеризует обратную ширину волновой функции и является подгоночным параметром, а первый множитель введен для нормировки волновой функции на единицу. В качестве примера укажем, что среднее расстояние электрона до интерфейса составляет  $z_0 = 3/b$ .

Параметр  $b$  найдем следующим образом. Умножим уравнение (3.14) на  $\psi_0^*$  слева и проинтегрируем по  $z$  от нуля до бесконечности. Справа мы получим величину  $E_0$ , а слева – сумму двух членов, каждый из которых зависит от  $b$ :

$$\langle T \rangle = \hbar^2 b^2/8m^* \text{ и } \langle U \rangle = eE z_0 = 3eE/b. \quad (3.16)$$

Теперь найдем минимум  $E_0$  как функции  $b$ . Соответствующее выражение имеет вид

$$b = (24m^*e E / \hbar^2)^{1/3}, \quad E_0 = 3 \{ \hbar^2 e^2 E^2 / m^* \}^{1/3}. \quad (3.17)$$

Как и следовало ожидать, последнее выражение с точностью до численного множителя совпадает с (2.10). Подчеркнем еще раз, что масса  $m^*$ , вошедшая в выписанные выше соотношения отвечает эффективной массе по отношению к движению электрона нормально интерфейсу.

Указанный путь приближенного вычисления энергии основного состояния удобен тем, что при его использовании легко провести самосогласование и учесть влияние конечной плотности электронов на положение квантового уровня. Действительно, зная вид волновой функции не составляет труда вычислить электронную плотность в зависимости от координаты  $z$ , а следовательно и изменение потенциального рельефа для пробного электрона из-за конечной плотности. Введя дополнительный член, соответствующий этому потенциалу в гамильтониан и в (3.16), и минимизируя полученную сумму, получим величину с учетом конечной электронной концентрации.

### 3.4. Одномерный канал и квантовое сужение.

В этом разделе мы будем предполагать, что электроны находятся на нижнем энергетическом уровне по отношению к движению в  $z$ -направлении, а в плоскости  $(x,y)$  их движение пространственно ограничено. Сначала рассмотрим случай одномерного канала с бесконечно высокими стенками:

$$\begin{aligned} U(x) &= 0 \text{ при } a < |x| < L/2, \\ U(x) &= \infty \text{ при } |x| > L/2 \end{aligned} \quad (3.18)$$

В простейшем случае изотропной массы переменные по отношению к движению в различных пространственных направлениях разделяются и, в соответствии с (3.7), спектр будет иметь вид:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + \hbar^2 \{ k_n^2 + (k_y)_n^2 \} / 2m^* . \quad (3.19)$$

Здесь  $k_n$  – набор дискретных переменных, а  $(k_y)_n$  – набор непрерывных переменных, а  $m^*$  – теперь масса, отвечающая движению в плоскости. Полученный спектр изображен на Рис.19. Он представляет собой совокупность одномерных подзон с квадратичным одномерным законом дисперсии в каждой из подзон.

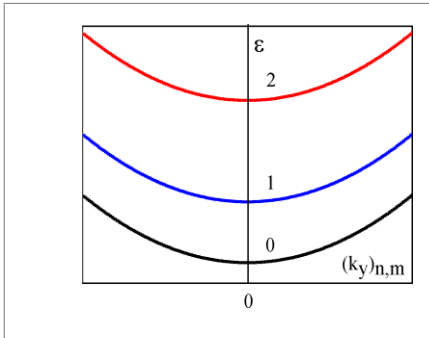


Рис.19.

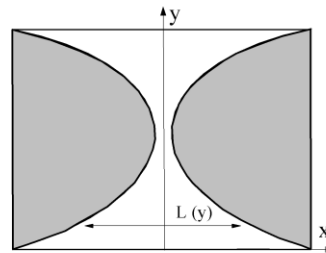


Рис.20.

Гораздо больший интерес представляет не идеализированный одномерный канал, а квантовое сужение схематически представленное на Рис.20. Будем предполагать, что ширина канала изменяется крайне медленно, так что при каждом  $y$  можно решить одномерную задачу, приведенную выше. Спектр по-прежнему имеет вид, подобный изображенному на Рис.19, однако, в выражении (3.19) величины  $k_{n,m}$  становятся функциями координаты  $y$ :

$$\begin{aligned} k_n &= \pi (2n + 1) / L(y), \quad n=0,1,2,3,\dots \\ k_m &= \pi (2m) / L(y), \quad m=1,2,3,\dots \end{aligned} \quad (3.20)$$

Осталось вспомнить, что  $L(y)$  имеет минимум. Обозначим его через  $L_0$ . Тогда из (3.19) мы получим минимальную энергию, которой должен обладать электрон на определенном подуровне для того, чтобы пройти сужение:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\min}(n) &= \varepsilon_0 + \hbar^2 \{ \pi / L_0 \}^2 (2n+1)^2 / 2m^*, \\ \varepsilon_{\min}(m) &= \varepsilon_0 + \hbar^2 \{ \pi / L_0 \}^2 (2m)^2 / 2m^*. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Таким образом, в квантовом сужении существует дискретный набор значений энергии электрона, причем при прохождении каждой из этих энергий к числу свободно распространяющихся через сужение подзон добавляется (или вычитается) одна подзона.

### 3.5. Плотность состояний и термодинамическая плотность состояний.

Прежде всего определим плотность состояний как число состояний, приходящихся на единичный интервал энергий в единице объема (трехмерный случай), единице площади (двумерный случай) и единице длины (одномерный случай). Стартуем с трехмерного случая. Нам нужно понять, сколько квантовых состояний имеется в единице объема реального пространства в интервале волновых векторов  $dk_x dk_y dk_z$ . Ясно, что *число состояний* не может

зависеть от граничных условий, поэтому выберем периодические условия для функции (2.4)

$$\psi(x,y,z)=\psi(x+L_x,y,z); \quad \psi(x,y,z)=\psi(x,y+L_y,z); \quad \psi(x,y,z)=\psi(x,y,z+L_z); \quad (3.22)$$

Откуда разрешенные значения волновых векторов определяются из условий

$$k_x = (2\pi/L_x)n_x; \quad k_y = (2\pi/L_y)n_y, \quad k_z = (2\pi/L_z)n_z \quad (3.23)$$

где  $n_x$ ;  $n_y$  и  $n_z$  – целые числа. На интервал  $dk_x dk_y dk_z$  придется  $2(L_x L_y L_z) dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3$  состояний. Здесь двойка в числителе введена, чтобы учесть два возможных спиновых состояния при каждом значении квазиимпульса (напомним, что электроны подчиняются принципу Паули, согласно которому в каждом квантовом состоянии способен находиться только один электрон).

В трехмерной изотропной системе в сферическом слое, отвечающем интервалу  $d\varepsilon$ , может находиться

$$dn = 8\pi k^2 dk / (2\pi)^3 = (2m\varepsilon)^{1/2} \pi^{-2} \hbar^{-3} d\varepsilon \quad (3.24)$$

электронов в единице объема. В результате, плотность состояний трехмерной системы равна

$$D(\varepsilon) = (dn / d\varepsilon) = (2m\varepsilon)^{1/2} \pi^{-2} \hbar^{-3} . \quad (3.25)$$

В случае двумерной электронной системы, находящейся на нижнем квантовом уровне по отношению к движению в  $z$  направлении, аналог (3.24) запишется как

$$dn = 4\pi k dk / (2\pi)^2 = m / (\pi \hbar^2) d\varepsilon , \quad (3.26)$$

а плотность состояний

$$D(\varepsilon) = (dn / d\varepsilon) = m / (\pi \hbar^2). \quad (3.27)$$

Плотность состояний будет такой в каждой из двумерных подзон. Естественно, что при заполнении большого числа подзон (очень широкая яма в  $z$  направлении), плотность состояний должна оказаться близкой к трехмерному случаю. График, иллюстрирующий соответствующий переход, изображен на Рис.21.

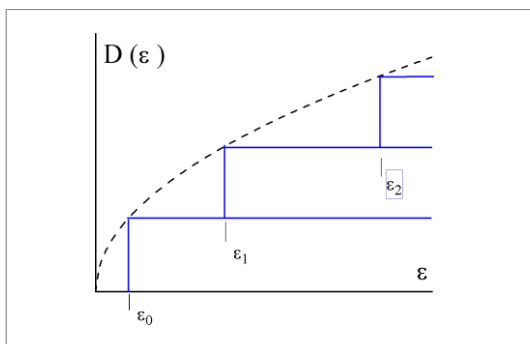


Рис. 21.

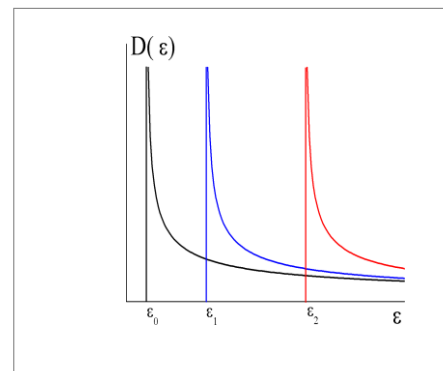


Рис. 22.

Как следует из выражения (3.27) и изображено на Рис.21, в двумерном случае плотность состояний в одной квантовой подзоне не зависит от энергии. Однако, это утверждение не универсально: оно справедливо только для квадратичного закона дисперсии по отношению к движению в плоскости (x,y) и с той точностью, с которой закон дисперсии можно считать параболическим.

Вычисление, аналогичное (3.26), (3.27), в одномерном случае приводит к результату:

$$D(\varepsilon) = (dn/d\varepsilon) = (2m / [\varepsilon - \varepsilon_n])^{1/2} / \hbar\pi. \quad (3.28)$$

График плотности состояний одномерной системы показан на Рис.22. Заполнение очень большого количества одномерных подзон приведет к плотности состояний близкой по виду к двумерной. Наконец, плотность состояний нуль-мерной системы представляет собой набор  $\delta$ -функций.

Как уже упоминалось, электроны подчиняются статистике Ферми-Дирака и их распределение по энергии описывается выражением:

$$f(\varepsilon) = [\exp(\varepsilon - \mu)/kT + 1]^{-1}, \quad (3.29)$$

где  $\varepsilon$  энергия электрона, а  $\mu$  - химический потенциал системы. При низких температурах  $kT \ll \mu$  все состояния вплоть до уровня химического потенциала заняты, а выше - все состояния пустые. При нулевой температуре имеется строгая граница  $\mu(T=0) = \varepsilon_F$ , разделяющая пустые и занятые состояния, называемая энергией Ферми. До сих пор мы предполагали, что электроны, с которыми мы имеем дело, не взаимодействуют между собой, т.е. мы рассматривали случай ферми-газа электронов. Только для этого случая можно ввести плотность состояний как функцию энергии (выражения (3.25), (3.27), (3.28)). Если же учесть взаимодействие между электронами, то квантовые состояния оказываются затухающими тем быстрее, чем дальше соответствующее состояние удалено от ферми уровня. Описание в терминах квазичастиц, использованное выше, пригодно только в окрестности ферми энергии и все физические характеристики квазичастиц, такие как скорость или плотность состояний могут быть строго введены только на ферми-уровне:

$$D(\varepsilon_F) = (dn/d\varepsilon)|_{\varepsilon = \varepsilon_F} \quad (3.30)$$

Для описания электронной системы может быть введена другая величина, имеющая размерность плотности состояний, - термодинамическая плотность состояний. Она определяется как

$$D_{th}(\varepsilon_F) = (dn_s/d\varepsilon_F). \quad (3.31)$$

Эта величина, во-первых, может радикально отличаться от плотности состояний (3.30), а во-вторых, она определяет многие свойства электронной системы, экранирование внешнего поля, например. Поскольку в системах пониженной размерности плотность электронов может контролироваться экспериментатором (за счет затворного напряжения), термодинамическая плотность состояний оказывается хорошо измеримой величиной.

### 3.6. Двумерный электронный газ в магнитном поле.

Электрон, как всякая заряженная частица, обладающая собственным моментом количества движения (спином), обладает и магнитным моментом. Поэтому наложение внешнего магнитного поля на электронную систему будет приводить к частичной спиновой поляризации и появлению у электронной системы ненулевого магнитного момента. Кроме того, магнитное поле будет влиять на орбитальное движение электрона. В классическом рассмотрении это влияние сводится к появлению силы Лоренца:

$$F = (e/c) [vH]. \quad (3.32)$$

Здесь  $v$  – скорость электрона, а  $H$  – напряженность магнитного поля. Пусть для простоты  $v \perp H$ . Тогда сила Лоренца нормальна скорости и, следовательно, не производит работы над электроном. Энергия электрона остается постоянной, электрон движется по окружности в плоскости нормальной магнитному полю, а силу Лоренца можно рассматривать как центростремительную. Приравняв ее произведению массы на центростремительное ускорение, получим для радиуса орбиты электрона и частоты вращения, соответственно:

$$R_c = |v|/\omega_c; \quad \omega_c = eH/m^*c. \quad (3.33)$$

Таким образом, движение двумерного электрона в нормальном однородном магнитном поле оказывается пространственно ограниченным, следовательно, при квантовомеханическом рассмотрении должен получиться дискретный энергетический спектр.

Рассмотрим эту задачу более подробно. Оператор кинетической энергии частицы с зарядом  $e$ , помещенной в статическое однородное магнитное поле имеет вид:

$$\hat{H} = \{p - e/c A\}, \quad (3.34)$$

где  $A$  – векторный потенциал  $H = \text{rot } A$ . Выберем для  $A$  калибровку Ландау:

$$A = (0, Hx, 0). \quad (3.35)$$

Уравнение Шредингера при отсутствии внешних электрических полей запишется в виде:

$$\{p_x^2 + (p_y - xeH/c)^2\} \psi(x,y) = 2m^*E\psi(x,y). \quad (3.36)$$

Его решение имеет вид плоской волны вдоль  $y$ -оси  $\exp(iky)$ , умноженной на некоторую функцию только от  $x$ . После подстановки решения такого вида в исходное уравнение, сведем задачу к одномерной:

$$-(\hbar^2/2m^*)(\partial^2/\partial x^2) \psi(x) + (m^* \omega_c^2/2)(x-x_0)^2 \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.37)$$

где  $x_0 = (c\hbar k/eH)$  называется координатой ведущего центра. Выражение (3.37) соответствует уравнению Шредингера для гармонического осциллятора с частотой  $\omega_c$ . Соответствующие собственные значения энергии заданы выражением

$$E_n = \hbar \omega_c (n+1/2), \quad n = 0,1,2,\dots \quad (3.38)$$

Решения уравнения (3.37) хорошо известны и выражаются через полиномы Эрмита  $H_n$ .

$$\psi_n(x) = A_n \exp\{-(x-x_0)^2/l^2\} H_n \{(x-x_0)/l\}, \quad (3.39)$$

где  $l = (c \hbar/eH)^{1/2}$  – магнитная длина, а  $A = \{2^n n! (\pi l)^{-1/2}\}^{-1/2}$  нормировочная константа. Полиномы Эрмита могут быть вычислены с помощью следующего рекуррентного соотношения:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \quad (3.40)$$

Найдем теперь число состояний  $n_0$ , приходящихся на один квантовый уровень (т.е. состояний с фиксированной проекцией спина на магнитное поле и фиксированным  $n$ ) на единице площади. Выделим прямоугольник со сторонами  $L_x$  и  $L_y$ . Координата ведущего



центра лежит в интервале  $0 < x_0 < L_x$ . Следовательно,  $0 < k < L_x/l^2$ . Одновременно необходимо удовлетворить циклические граничные условия по оси  $y$ :  $k_s = 2\pi s/L_y$  где  $s$  – целое число. Отсюда,  $\Delta k = 2\pi/L_y$  и для искомой величины получаем

$$n_0 = 1/2\pi l^2. \quad (3.41)$$

Как мы видим, число состояний на квантовом уровне не зависит от устройства и характеристик двумерной системы и пропорционально магнитному полю.

Вернемся вновь к уравнению (3.37). В него можно добавить произвольную функцию координаты  $x$ , например, бесконечно высокую потенциальную стенку при  $x = 0$ . Систематика квантовых состояний при этом не изменится: состояние по-прежнему будет характеризоваться величиной координаты ведущего центра и номером квантового уровня. Однако,  $E_n$  теперь будет функцией  $x_0$ . Например, если мы введем постоянное электрическое поле вдоль оси  $x$ , то есть линейно изменяющуюся потенциальную энергию, то характерная частота  $\omega_c$  не изменится (сумма параболы и линейной функции является сдвинутой параболой), а  $E_n$  станет линейной функцией координаты ведущего центра. Другой предельный случай – бесконечно высокая потенциальная стенка. В этом случае, по мере приближения ведущего центра к стенке потенциальная яма для электронов становится уже и энергия квантового уровня повышается. Специально обратим внимание на то, что ведущий центр может располагаться вне пределов, доступных электрону (вне образца). Электрон при этом заперт в пространстве, ограниченном стенкой и ветвью параболы внутри образца.

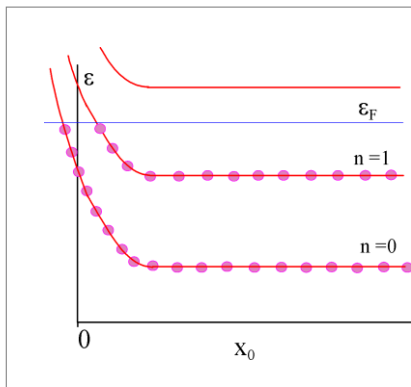


Рис.23.

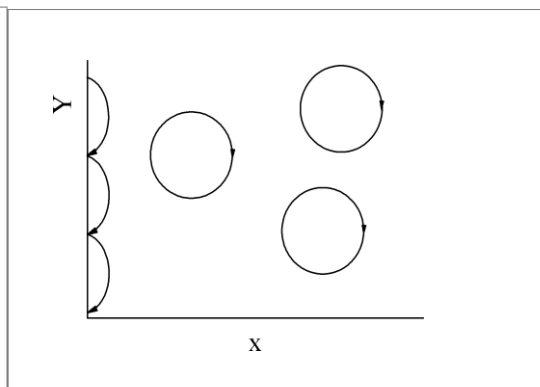


Рис. 24.

Схематически картина квантовых уровней для случая двумерной системы, ограниченной бесконечно высокой стенкой при  $x=0$ , показана на Рис.23. Точками отмечены квантовые состояния, занятые электронами. В квазиклассическом случае, когда электрон находится на уровне  $n \gg 1$ , и можно из электронных волновых функций составить волновой пакет, движение электрона в объеме образца можно представлять в виде траектории, имеющей форму окружности (см. (3.33)), а у границы в виде скачущей орбиты (Рис.24). Очевидно, что частота скачков выше, чем при вращении по окружности, поэтому, согласно (3.38) энергия скачущего электрона выше энергии электрона, удаленного от края. Другое важное обстоятельство, бросающееся в глаза на Рис.24, состоит в том, что на скачущей орбите электрон имеет ненулевую среднюю скорость, направленную вдоль оси  $y$ .

Обратим внимание еще на два важных обстоятельства. Во-первых, движение вдоль края является одномерным, во-вторых, в макроскопических образцах с размерами, значительно превышающими магнитную длину  $l$  у электронов, движущихся вдоль края, полностью отсутствует рассеяние назад.

Групповая скорость движения электронов вдоль края равна:

$$v_y = \hbar^{-1} \partial E_n / \partial k = (l^2 / \hbar) (\partial E_n / \partial x_0) \quad (3.42)$$

Поэтому ток, переносимый электронами полуплоскости в  $y$  направлении определяется величиной химического потенциала на краю:

$$I = (e/2\pi) \sum_n \int_0^{k_n} v_y(k) dk . \quad (3.43)$$

Здесь  $k_n$  – характеризует последнее заполненное состояние на квантовом уровне с номером  $n$ . Перейдем теперь от интегрирования по волновому вектору к интегрированию по энергии.

$$I = (e/2\pi) \sum_n \int_0^{k_n} \hbar^{-1} \partial \epsilon_n / \partial k dk = (e/2\pi) \sum_n \int_{E_n}^{\mu} \hbar^{-1} \partial \epsilon_n = (e/h) \sum_n (\mu - E_n). \quad (3.44)$$

Рассмотрим теперь более реалистичный случай полоски с бесконечно высокими стенками, на краях которой химические потенциалы различны (Рис. 25). Ток,

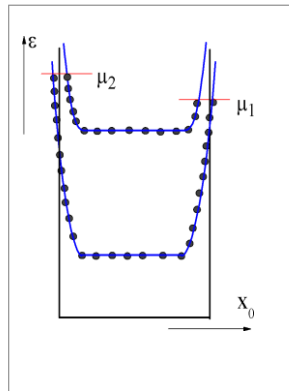


Рис. 25.

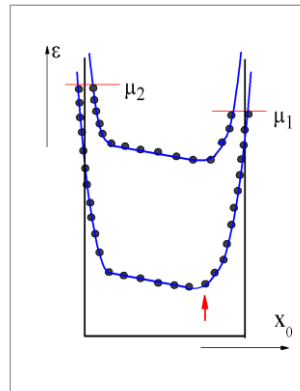


Рис. 26.

протекающий по полоске, легко вычислить, суммируя противоположно направленные токи у левой и правой границ:

$$I = (e/h) \sum_n (\mu_2 - \mu_1) = (n e / h) (\mu_2 - \mu_1) . \quad (3.45)$$

В последнем выражении  $n$  соответствует числу полностью заполненных квантовых уровней в объеме образца.

Поскольку электроны – частицы заряженные, для появления разности химических потенциалов к краям образца необходимо приложить напряжение  $V = e^{-1} (\mu_2 - \mu_1)$ , в результате чего внутри образца появится электрическое поле (см. Рис.26). Если интегрирования тока по правому и левому краю вести от точки минимума (красная вертикальная стрелка на Рис. 26), то все выше приведенные вычисления останутся справедливыми и (3.45) преобразуется в

$$I = (n e^2 / h) V . \quad (3.46)$$

Появление такой связи между током, протекающим по полоске и напряжением в перпендикулярном току направлении, типичное для двумерных электронных систем, помещенных в сильное квантующее магнитное поле, называется целочисленным квантовым эффектом Холла. Холловское сопротивление  $R_H = h / n e^2$  ( $n=1,2,3..$ ) не зависит от типа структуры с двумерным газом и определяется мировыми константами.

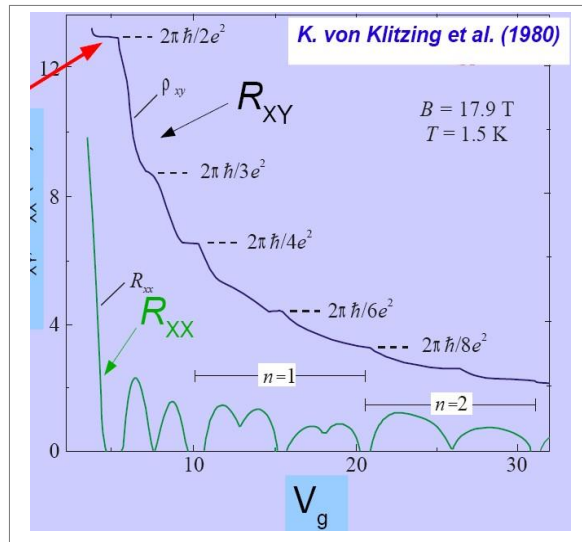


Рис.26 а.

Пример экспериментальной записи кривой квантового эффекта Холла показан на Рис. 26 а. Видны плато холловского сопротивления, сопровождающиеся минимумами в  $R_{xx}$ . Кривая, приведенная на Рис. 26 а, получена на двумерном электронном газе в кремниевой полевой структуре в первом наблюдении целочисленного квантового эффекта Холла.

**Задача:** Пользуясь Рис. 26 а убедитесь в том, что в полевой структуре на основе кремния (100) действительно двумерный газ составлен из электронов двух долин.

Вспомним о наличии у электрона собственного магнитного момента. Если забыть о взаимодействии электронов между собой, то в гамильтониан (3.36) нужно добавить член

$$-\mu_N = -\mu_B g N s_z, \quad (3.47)$$

где магнетон Бора  $\mu_B = e \hbar / 2m_0 c$  ( $m_0$  - масса свободного электрона),  $g$  – численный множитель, характерный для данной системы, способный принимать как положительные, так и отрицательные значения, называемый фактором Ланде; а  $s_z$  - проекция спина, т.е. собственного момента количества движения электрона, (в единицах  $\hbar$ ) на магнитное поле, принимающая значения  $\pm 1/2$ . Учет дополнительного члена в гамильтониане расщепит каждый из квантовых уровней (3.38) на два спиновых подуровня.

На самом деле электроны нельзя считать полностью невзаимодействующими между собой. Из рисунков 5 и 9 очевидно, что положительный заряд на затворе или же за спейсером гетероструктуры только в среднем компенсируют поле электронной системы. Многочастичная электронная волновая функция в соответствии с принципом Паули должна обладать тем свойством, что при перестановке двух электронов она изменяет знак. Рассмотрим модельный случай двух электронов. Тогда либо проекции их спинов сонаправлены и волновая функция должна быть антисимметрична по координатам, либо проекции имеют разные знаки и волновая функция обязана быть симметричной. Очевидно, что в последнем случае вероятность найти электроны близко друг к другу выше, следовательно переворот спина у отдельного электрона должен чувствовать не только внешнее магнитное поле, но и спиновое состояние соседей. Масштаб соответствующей энергии определяется энергией кулоновского взаимодействия на межэлектронном расстоянии и, как правило, сильно превосходит энергию взаимодействия электрона с внешним магнитным полем. Соответствующая энергия называется обменной. Мы приходим к выводу, что при переворотах одного из электронных спинов (3.47) следует заменить на  $-\mu_B g^* N s_z$ , где, вообще говоря, эффективный фактор Ланде  $g^*$  может зависеть как от магнитного поля, так и от числа заполненных квантовых уровней.

## IV. Транспорт в двумерных и одномерных системах.

### 4.1. Общее представление о рассеянии.

В идеальной бездефектной кристаллической решетке при нулевой температуре электронные волновые функции, введенные условием (3.3), могут быть представлены в виде плоских волн. Однако, наличие заряженных примесей, колебаний решетки, а в двумерных системах - дефектов поверхности или интерфейса разрушит такое состояние. Ниже мы ограничимся случаем нулевой температуры. Тогда в любом примесном потенциале, по крайней мере в принципе, можно решить уравнение Шредингера и найти новые волновые функции, отвечающие стационарным состояниям в этом потенциале. Этот путь неудобен из-за того, что решения не только сложно найти, не только сложно использовать для вычисления кинетических параметров, но и в силу их не универсальности. Гораздо удобнее (во всяком случае, пока примесей и дефектов мало) стартовать с плоских волн, а влияние примесей учитывать как вызывающее переходы между различными состояниями, отвечающими плоским волнам.

Пусть электрон при  $t < 0$  находится в состоянии, описываемом волновой функцией:

$$\psi_i(r,t) = \phi_i(r) \exp(-i\varepsilon_i t / \hbar), \quad (4.1)$$

а в момент времени  $t=0$  включается возмущение  $V(t)$ . Для решения уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(t) = \{\hat{H}_0 + V(t)\} \psi(t) = i \hbar (\partial\psi/\partial t) \quad (4.2)$$

воспользуемся теорией возмущений, зависящих от времени. С этой целью разложим искомую волновую функцию по полному набору волновых функций  $\psi_j(r,t)$ :

$$\psi(t) = \sum_j a_j(t) \psi_j(r,t). \quad (4.3)$$

Причем  $a_j(t=0) = \delta_{ij}$ . Подставив (4.3) в (4.2) и вспомнив, что функции  $\psi_j(r,t)$  удовлетворяют тому же уравнению Шредингера без возмущения, получим:

$$i \hbar \sum_j (\partial a_j / \partial t) \phi_j \exp(-i\varepsilon_j t / \hbar) = \sum_j a_j(t) V(t) \phi_j \exp(-i\varepsilon_j t / \hbar) \quad (4.4)$$

Осталось умножить слева обе части уравнения (4.4) на  $\phi_j^*$  и проинтегрировать по координате. Учитывая ортонормированность функций  $\phi_j$ , получим:

$$(\partial a_f / \partial t) = (i \hbar)^{-1} \sum_j a_j(t) V_{fj}(t) \exp(-i\varepsilon_j t / \hbar), \quad (4.5)$$

где  $V_{fj}$  – матричный элемент потенциала возмущения, а  $\varepsilon_{fj} = \varepsilon_f - \varepsilon_j$ . В нулевом приближении все состояния кроме одного были пустыми, поэтому

$$a_f(t) = (i \hbar)^{-1} \int^t V_{fi}(t') \exp(-i\varepsilon_{fi} t' / \hbar) dt'. \quad (4.6)$$

Предположим теперь, что после включения возмущающий потенциал от времени не зависит. Тогда в (4.6) его можно вынести из-под интеграла и вычислить оставшийся интеграл:

$$a_f(t) = -i \exp(i\varepsilon_{fi} t / 2 \hbar) V_{fi} \{ \sin(\varepsilon_{fi} t / 2 \hbar) / (\varepsilon_{fi} / 2 \hbar) \}. \quad (4.7)$$

Соответственно, вероятность обнаружить электрон в каком либо состоянии, отличающемся от начального, выглядит как

$$|a_f(t)|^2 = |V_{fi}|^2 \left\{ \frac{\sin(\varepsilon_{fi}t/2\hbar)}{(\varepsilon_{fi}/2)} \right\}^2. \quad (4.8)$$

Выражение (4.8) обладает тем свойством, что на малых временах распределение вероятности по энергиям конечных состояний является широким, а по мере возрастания времени стремится к  $\delta$ -функции. Процесс эволюции выражения (4.8) во времени показан на Рис.26.б, на котором приведены графики для четырех различных времен.

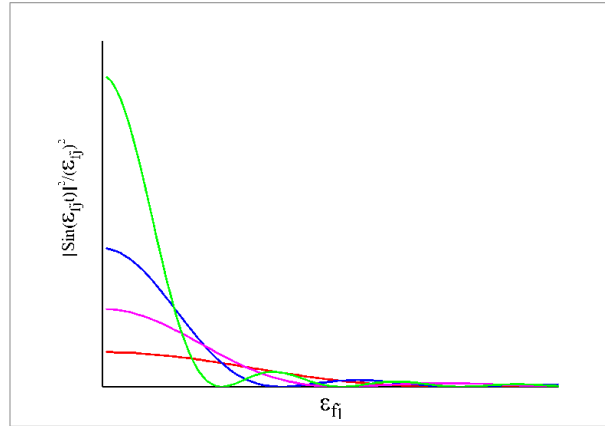


Рис.26 б.

Действительно,  $\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\sin(\varepsilon_{fi}t/2\hbar)}{(\varepsilon_{fi}/2)} \right\}^2 d\varepsilon_{fi} = 2\pi t/\hbar$ , т.е.  $\left\{ \frac{\sin(\varepsilon_{fi}t/2\hbar)}{(\varepsilon_{fi}/2)} \right\}^2 = 2\pi t/\hbar \delta(\varepsilon_{fi})$  при  $t \rightarrow \infty$ . Для вероятности перехода в единицу времени на больших временах имеем:

$$W_{fi} = (2\pi/\hbar) |V_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (4.9)$$

что составляет содержание т.н. золотого правила Ферми.

До сих пор мы предполагали, что рассеивающий потенциал, раз возникнув, большево времени не меняется. Результатом стало отсутствие передачи энергии рассеивателю.

Легко догадаться, что оба требования сводятся к тому, чтобы рассеиватель имел большую(в пределе – бесконечную) массу. Поскольку масса примеси на три порядка больше массы электронов, развитые представления с хорошей точностью будут описывать рассеяние на примесях.

Вспомним, что матричный элемент вычисляется на плоских волнах:

$$\phi_i = A^{-1/2} \exp(ikr); \quad \phi_f = A^{-1/2} \exp\{i(k+q)r\} \quad (4.10)$$

где  $A$  – площадь образца. Если ввести Фурье компоненту потенциала  $V(q)$ , то (4.9) может быть переписано как

$$W_{k+q,k} = (2\pi/\hbar) A^{-2} |V_q|^2 \delta \varepsilon(k+q) - \varepsilon(k). \quad (4.11)$$

Теперь поставим вопрос следующим образом: Какова вероятность того, что электрон за единицу времени покинет в результате рассеяния на примесях заданное состояние? Для ответа на этот вопрос необходимо (4.11) просуммировать по всем возможным конечным состояниям (лежащим на изоэнергетической поверхности). Для простоты будем считать электронный спектр изотропным и перейдем от суммирования по всем возможным  $q$  к интегрированию. Заменяем  $\Sigma_q$  на  $\{A/(2\pi)^2\} \int 2\pi q dq$ . Будем считать, что число примесей на единице площади равно  $n_i$  и Фурье компоненты примесей складываются как независимые. Для искомой вероятности тогда получим:

$$1/\tau_s = (n_i / 2\pi\hbar) \int |V_q|^2 \delta(\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k)) d^2q \quad (4.12)$$

Здесь  $\tau_s$  – одночастичное время релаксации,  $V_q$  – экранированный потенциал примеси, а благодаря  $\delta$  - функции интегрирование ведется по изоэнергетической поверхности. Перейдя в интеграле к интегрированию по углу и  $q=|q|$  окончательно получим:

$$1/\tau_s = (2n_i m / \pi\hbar^3 k) \int^{2k} |V_q|^2 \{1 - q^2/2k^2\}^{-1/2} dq \quad (4.13)$$

#### 4.2. Проводимость двумерного электронного газа при низких температурах.

Теперь рассмотрим отклик двумерной электронной системы на статическое и однородное электрическое поле. Прежде всего напомним, что в отсутствие внешних полей в каждом из состояний, определяемых условием (3.23) может находиться не более двух электронов (один со спином «вверх» и один с проекцией спина «вниз»). При нулевой температуре все состояния с наименьшими возможными энергиями заняты вплоть до некоторой граничной энергии, называемой энергией Ферми. В импульсном пространстве все занятые состояния располагаются (при изотропном законе дисперсии) внутри круга радиуса  $\hbar k_F = (2m^*E_F)^{1/2}$ . При конечной температуре функция распределения определяется выражением (3.29). Задача сводится к вопросу: как изменится функция распределения электронов в постоянном однородном электрическом поле? В общем случае функция распределения зависит явно от времени, а также от координаты и от импульса электрона  $f(t, r, k)$ . Ее полное изменение во времени определяется суммой трех частных производных:

$$df/dt = \partial f / \partial t + \partial f / \partial r * v + \hbar^{-1} \partial f / \partial k (\hbar \partial k / \partial t). \quad (4.14)$$

В рассматриваемом нами случае явная зависимость от времени отсутствует и первый член в правой части равен нулю. Во внешнем однородном поле нет также зависимости от координаты, стало быть и второй член обращается в нуль. В третьем слагаемом выражение в скобках равно действующей силе  $(\hbar \partial k / \partial t) = eE$ . Представив функцию распределения в виде

$$f = f_0 + f_1 \quad (4.15)$$

где  $f_1$  поправка первого порядка малости и в линейном приближении приравняв  $df/dt$  к члену, описывающему торможение электронной системы за счет рассеяния -  $f_1/\tau_{tr}$ , получим

$$(-\partial f_0 / \partial \varepsilon) v eE = f_1 / \tau_{tr}. \quad (4.16)$$

Здесь  $\tau_{tr}$  транспортное время релаксации, отличающееся от (4.13) весовым множителем под интегралом (равным  $(q/2k)^2$ ), учитывающим разную эффективность рассеяния на разные углы. Обозначим произведение  $|v| \tau_{tr} = l$ , где  $l$  – длина свободного пробега электронов. Тогда решение уравнения (4.16) запишется в виде:

$$f_1 = e (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) l E \cos \Theta, \quad (4.17)$$

в котором  $\Theta$  - угол между направлением скорости электрона и электрическим полем. Схематически функция  $f_0(k_x)$  показана на Рис.27. Под влиянием статического однородного магнитного поля электронное распределение сдвигается в  $k$ -пространстве как целое (Рис. 28).

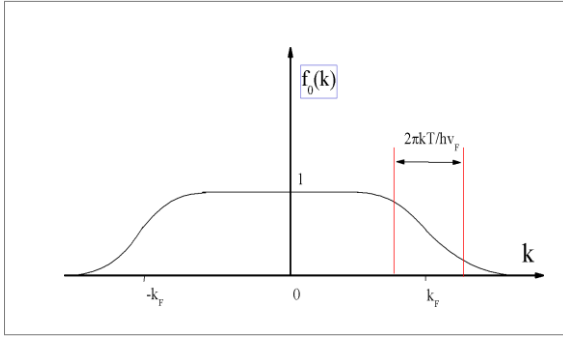


Рис. 27.

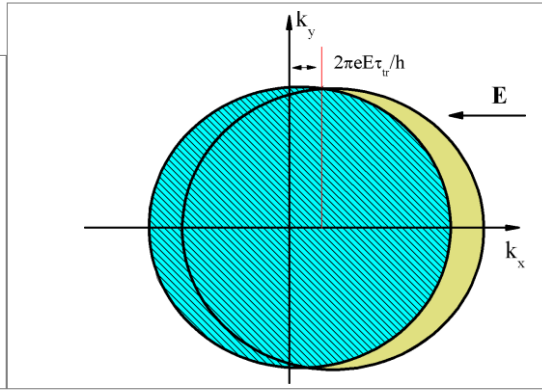


Рис.28.

Полный ток, переносимый электронной системой, вычислим как

$$I = 2(2\pi)^{-2} \int e v(k) f_1(k) d^2k = E (n_s e^2 l) / (\hbar k_F) = \sigma E = n_s e \mu \quad (4.18)$$

Здесь введено несколько новых величин: концентрация двумерных электронов  $n_s$ , проводимость  $\sigma$  и электронная подвижность  $\mu$ .

**Задача:** провести вычисления, приводящие к выражению (4.18).

Обсудим вопрос о влиянии на длину свободного пробега различных рассеивающих центров. В первую очередь это заряженные примеси, находящиеся в той же плоскости, что и двумерный электронный газ. По мере увеличения электронной плотности их вклад в ограничение длины свободного пробега падает за счет улучшения экранирования двумерными электронами. В гетероструктурах, как мы видели, принципиально необходим легированный слой для формирования самого двумерного электронного газа. Однако этот слой может находиться достаточно далеко от электронной плоскости (за счет спейсера). В таких условиях короткопериодные пространственные Фурье-гармоники рассеивающего потенциала усреднятся и электроны будут чувствовать только сравнительно длиннопериодные гармоники. Рассеяние на потенциале примесей окажется значительно ослабленным. Именно так получают наиболее высокоподвижный электронный газ. Еще одним источником для рассеяния электронов являются шероховатости интерфейса. По мере увеличения электронной плотности этот механизм рассеяния увеличивает свой вклад, поскольку электроны ближе прижимаются к границе. В кремниевых полевых структурах даже не очень высокого качества рассеяние на шероховатостях превалирует уже при электронной плотности  $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ .

### 4.3. Точечный контакт. Формула Шарвина.

Рассмотрим сначала задачу о классическом точечном контакте на двумерной плоскости. Будем предполагать, что длина свободного пробега электронов значительно превышает характерные размеры контакта, что схематически изображено на Рис. 29.

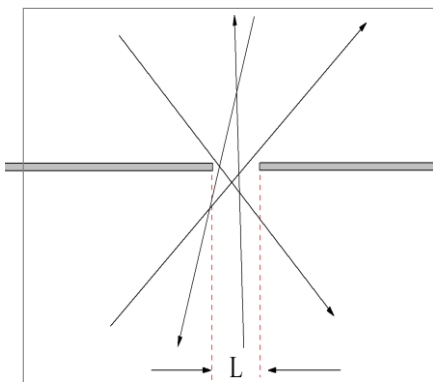


Рис. 29.

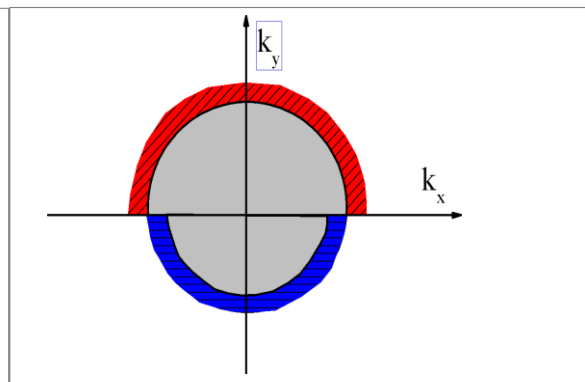


Рис. 30.

Между нижней и верхней полуплоскостью приложена разность потенциалов  $V$ , половина из которой падает на нижней полуплоскости на масштабе  $L$ , а половина совершенно симметрично на верхней полуплоскости. Функция распределения электронов в щели показана на Рис.30. Каждый из электронов, движущихся вверх, приобрел энергию  $eV/2$ , а всякий электрон, пришедший сверху, потерял такую же энергию. Поэтому функция распределения в верхней полуплоскости  $k$ -пространства увеличила диаметр круга на  $eV/2\hbar v_F$ , а в нижней – уменьшила на ту же величину. В первом приближении плотность электронов не изменилась. Плотность тока через отверстие вычисляется следующим образом:

$$I = 2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot \int_0^{\pi/2} e v_y (eV/2\hbar v_F) L k_F / (2\pi)^2 d\Theta = (2e^2/h) (k_F L / \pi) V. \quad (4.19)$$

Здесь первая двойка обусловлена двукратным вырождением по спину, вторая – вкладом от верхней и нижней полуплоскости  $k$  пространства, а третья – пределом интегрирования. Выражение (4.19) известно как формула Шарвина. Оно описывает кондактанс классического баллистического контакта, т.е. достаточно широкого контакта, в котором квантование движения электрона в самом узком месте не существенно.

Перейдем теперь к рассмотрению квантового сужения, изображенного на Рис.20. Согласно (3.19), спектр имеет вид:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + \hbar^2 \{k_n^2 + (k_y)_n^2\} / 2m^*.$$

Причем  $\varepsilon_{\min}(n) = \varepsilon_0 + \hbar^2 \{ \pi/L_0 \}^2 n^2 / 2m^*$ . Если зафиксировать значение Ферми энергии на берегах контакта, то в берегах будут иметься электроны со всеми возможными значениями  $n$ , а в самом узком месте контакта только с  $n < n_{\max} = \{ 2m^* \varepsilon_F \}^{1/2} \{ \pi \hbar / L_0 \}^{-1}$ . Только электроны с этими значениями  $n$  способны переносить транспортный ток. Часто их характеризуют как принадлежащие к одномерным транспортным каналам. Вычисление величины транспортного тока полностью повторяет рассуждения п.3.1 и приводит к выражению, формально повторяющему (3.46)

$$I = (n_{\max} e^2 / h) V, \quad (4.20)$$

с той лишь разницей, что здесь  $V$ - падение потенциала между контактами к квантовому сужению. В (4.3.2) мы не учитывали наличие спина у электрона. Если вспомнить о том, что в каждом канале могут быть электроны двух спиновых ориентаций, то ток в (4.20) удвоится.

**Задача: Прямым вычислением получить выражение (4.20).**

Если изменять ширину самой узкой части квантового сужения, то величина  $n_{\max}$  будет изменяться, а сопротивление (или обратная ему величина – кондактанс) будет демонстрировать набор квантовых плато (см. Рис. 31).

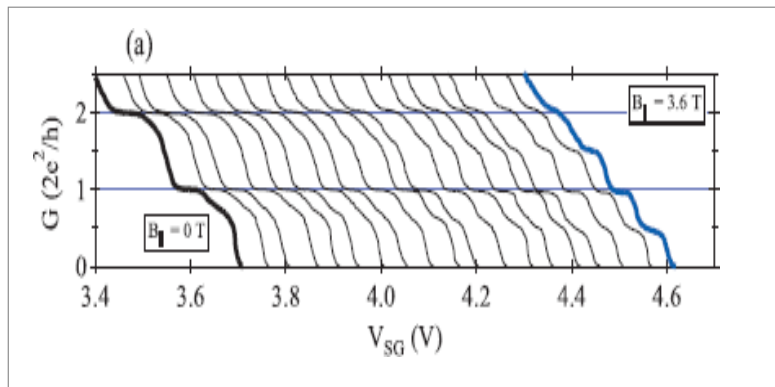


Рис.31.

*Зависимость кондактанса квантового сужения от напряжения, контролирующего*



ширину узкой части дырочного канала (ширина уменьшается по мере роста приложенного напряжения). Различные кривые соответствуют разным значениям параллельной компоненты магнитного поля. Видно, как снимается спиновое вырождение.

Задача: Выражение (4.20) позволяет получить формулу Шарвина при большой ширине канала. Прodelать соответствующие вычисления.

#### 4.4. Одномерные каналы. Подход Ландауэра.

Теперь перейдем к рассмотрению одномерных каналов, содержащих внутри центры упругого рассеяния. Поставим задачу следующим образом: Одномерная область, содержащая хаотический потенциал (на Рис. 32 заштрихована), подключена к резервуарам с близкими, но различными значениями химических потенциалов с помощью участков идеального одномерного проводника.

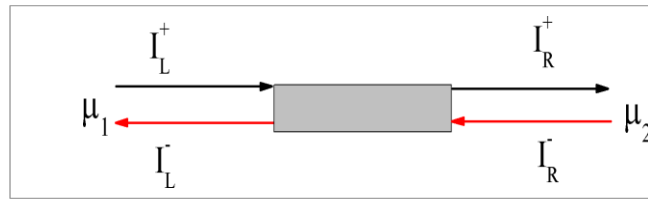


Рис. 32 .

Поскольку ответ для тока в идеальном одномерном канале не зависит от положения дна одномерной подзоны (до тех пор, естественно, пока дно расположено ниже уровня химического потенциала), можно без ограничения общности положить  $\epsilon_n = 0$ . Ток, переносимый электронами, падающими на заштрихованную, рассеивающую область с учетом вырождения по спину, равен:

$$I_L^+ = (2e/h) N \mu_1, \quad (4.21)$$

где  $N$  – число заполненных каналов. В левой части рисунка ток уходящих влево каналов равен

$$I_L^- = I_L^+ (1-D) + D I_R. \quad (4.22)$$

$D$  – коэффициент прохождения заштрихованной области. Соответственно, полный ток

$$I = I_L^+ - I_L^- = (2e/h) N \{ \mu_1 - \mu_1(1-D) - \mu_2 D \} = D (\mu_1 - \mu_2) (2e/h) N \quad (4.23)$$

Разность химических потенциалов пропорциональна приложенной разности электрических потенциалов  $(\mu_1 - \mu_2) = eV$ . Поэтому окончательно получаем:

$$I = (2e^2/h) D N V, \quad (4.24)$$

что составляет содержание известной формулы Ландауэра. Специально обратим внимание на то обстоятельство, что нам не потребовалось никакой информации об устройстве области рассеивателей. Даже предположение о ее одномерности не потребовалось. Для вывода оказалось достаточно знать, что ввод и вывод электронов осуществляются с помощью кусочков идеальной одномерной системы.

Выражение (4.24) может быть переписано следующим образом:

$$R = V/I = (h/2e^2) N^{-1} \{ 1 + (1-D)/D \} = R_{id} + R_{sc}, \quad (4.25)$$

то есть сопротивление рассматриваемой системы может быть представлено в виде суммы сопротивлений идеальных подводов и рассеивающей области.

#### 4.5. Локализация электронов в неидеальных одномерных системах. Роль интерференции электронов.

Рассмотрим задачу о прохождении двух последовательно соединенных «грязных» областей в одномерном канале (Рис. 33). Коэффициенты прохождения и отражения на этих областях обозначим  $D_{1,2}$  и  $R_{1,2}$ , соответственно. В качестве первого шага проведем вычисления в предположении об отсутствии интерференции электронных волн.

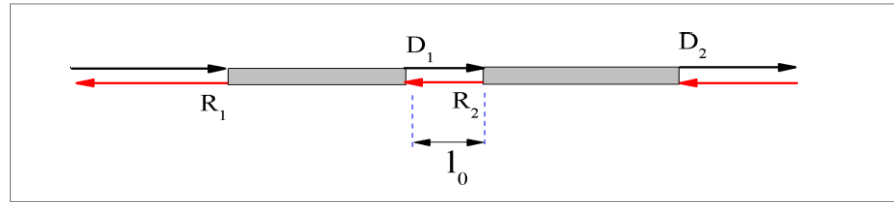


Рис. 33.

Коэффициент прохождения выразится через локальные коэффициенты прохождения и отражения как

$$D = D_1 D_2 + D_1 R_2 R_1 D_2 + D_1 R_2 R_1 R_2 R_1 D_2 + \dots = D_1 D_2 / (1 - R_2 R_1). \quad (4.26)$$

Элементарное арифметическое вычисление с учетом соотношения  $D_i = (1 - R_i)$  приводит к выражению

$$(1-D)/D = R/D = R_1/D_1 + R_2/D_2, \quad (4.27)$$

которое легко обобщается на случай произвольного числа последовательно расположенных «грязных» областей. Например, для  $M$  таких одинаковых областей

$$(1-D(M))/D(M) = M(R_1/D_1). \quad (4.28)$$

Если длина нашего одномерного канала равна  $L$ , то коэффициент его прохождения может быть записан как

$$D(L) = D_1 / (M R_1 + D_1) = l / (l + L), \quad (4.29)$$

где введена эффективная длина свободного пробега  $l = D_1 / \{ (M/L)(1 - D_1) \}$ . Подставив (4.29) в выражение (4.25), получим для  $R_{sc}$

$$R_{sc} = (h/2e^2) N^{-1} (L/l). \quad (4.30)$$

Это очень интересный результат. Во-первых, из него следует, что сопротивление растет пропорционально длине образца. Во-вторых, видно, что сопротивление каждого одномерного канала возрастает в среднем на квант на масштабе в длину свободного пробега.

Включим теперь в наше рассмотрение эффекты электронной интерференции. В выражении, подобном (4.26) нам предстоит теперь складывать не вероятности отражений и прохождений через барьера, а соответствующие амплитуды, причем с правильной фазой. Обратим внимание на то, что теперь

у нас в задаче появилось несколько длин, имеющих важное значение. Прежде всего - это длина  $l_0$ , определяющая фазу вернувшегося обратно, отраженного электрона. Есть еще характерная длина - длина когерентности  $l_p$  - определенная как длина, на которой электрон теряет свою фазовую память. Мы будем предполагать, что эта длина порядка размеров каждой из областей высокой дефектности. При выполнении последнего условия мы рассмотрим систему из многих последовательно включенных дефектных областей, показанную на Рис. 33а.

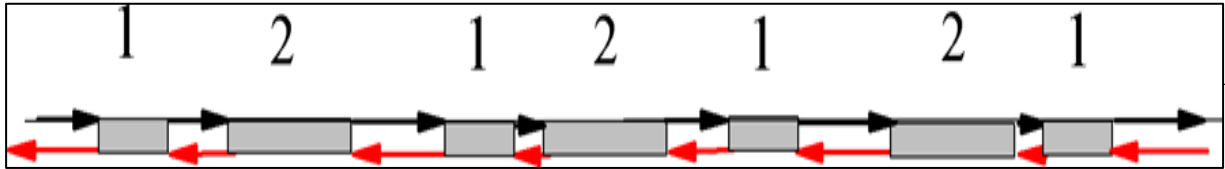


Рис.33а.

Области эти составляют пары в среднем одинаковых объектов, помеченных цифрами 1 и 2, разделенные бездефектными интервалами с хаотически меняющейся длиной  $l_0$ . В такой усложненной системе можно ввести еще один параметр размерности длины - длину  $l$ , которая вводится как расстояние, на котором модуль амплитуды прошедшего электрона падает в  $e$  раз. Будем считать, что  $l \gg l_p, l_0$ . Поскольку в процессе прохождения отдельной грязной области память о фазе полностью теряется, то мы можем рассматривать процессы интерференции в каждом отдельном интервале независимо.

Рассмотрим влияние интерференции на сопротивление отдельной пары грязных областей. С этой целью вновь вернемся к Рис.33.

Для простоты будем считать, что фаза набирается только при пробегах длины  $l_0$  и за один пробег туда и обратно равна  $\Theta = 2kl_0$ . Амплитуда прошедшего канала определится выражением:

$$D^{1/2} = (D_1 D_2)^{1/2} + (D_1 D_2)^{1/2} e^{i\Theta} (R_1 R_2)^{1/2} + (D_1 D_2)^{1/2} e^{i2\Theta} (R_1 R_2) + \dots = (D_1 D_2)^{1/2} / \{1 - e^{i\Theta} (R_1 R_2)^{1/2}\}, \quad (4.31)$$

что дает для вероятности прохождения

$$D = D_1 D_2 / \{1 - 2(R_2 R_1)^{1/2} \cos\Theta + R_2 R_1\}. \quad (4.32)$$

Специально отметим, что (4.32) не сводится к (4.26), поскольку ранее мы считали каждый акт рассеяния на «грязном» участке образца приводящим к полной потере фазовой когерентности.

Из выражения (4.32) следует, что вероятность прохождения зависит от расстояния между «грязными областями».

$$\begin{aligned} R_{sc} &= (h/2e^2) \langle (1-D)/D \rangle = (h/2e^2) (D_1 D_2)^{-1} \{1 + R_1 R_2 - D_1 D_2 - 2(R_2 R_1)^{1/2} \cos\Theta\} \\ &= (h/2e^2) \{R_1/D_1 + R_2/D_2 + 2 R_1 R_2 / D_1 D_2 - 2(R_2 R_1)^{1/2} \cos\Theta / D_1 D_2\} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Сравнив (4.33) с (4.27) мы приходим к выводу, что сопротивление пары грязных областей с учетом интерференции распадается на сумму сопротивлений каждой из этих областей и эффективного сопротивления интерференционного промежутка, состоящего из двух слагаемых. В длинной цепочке Рис.33а, составленной из  $M$  грязных областей каждого типа, полное сопротивление составит

$$R_{sc}(M) = (h/2e^2) M \{R_1/D_1 + R_2/D_2 + 4R_1 R_2 / D_1 D_2 - 2(R_2 R_1)^{1/2} \langle \cos\Theta \rangle / D_1 D_2\}. \quad (4.34)$$

Здесь учтено, что интерференция в каждой из чистых областей

осуществляется независимо, а число таких областей равно  $M$ . Величина  $\langle \cos\Theta \rangle$  при равновероятной реализации угла  $\Theta$  равна

$$\langle \cos\Theta \rangle = \int_0^{2\pi} \cos\Theta \, d\Theta / 2\pi = 0 \quad (4.35)$$

В итоге получаем:

$$R_{sc} (M) = (h/2e^2) M \{ R_1/D_1 + R_2/D_2 + 2R_1 R_2 / D_1 D_2 \} \quad (4.36)$$

Последнее выражение не сложно переписать через значения сопротивления  $R_1$  и  $R_2$  «грязных» участков проводника:

$$R_{sc} = M \{ R_1 + R_2 + 2(2e^2/h) R_1 R_2 \} ,$$

или в безразмерных переменных (например  $R_{sc} = (2e^2/h) R_{sc}$ )

$$R_{sc} (M) = M \{ R_1 + R_2 + 2R_1 R_2 \} \quad (4.37)$$

Положим теперь  $R_1 \approx R/M$ ,  $R_2 = dR/M$ . На масштабе  $R_2$  никакие интерференционные явления не существенны и реализуется линейная связь сопротивления с размером.

$$dR = \alpha dL , \quad (4.38)$$

где  $\alpha$  может быть выражена через величину сопротивления  $\rho_0$  на максимальном масштабе  $L_0$ , где еще сохраняется линейная связь между длиной проводника и сопротивлением.

Решением дифференциального уравнения, возникающего после подстановки (4.38) в (4.37) является

$$\ln \{ (1+2R)/(1+2\rho_0) \} = 2\rho_0 (L/L_0 - 1). \quad (4.39)$$

$$R(L) = \{ \exp(2\alpha L) - 1 \} / 2. \quad (4.40)$$

Такой ответ был впервые получен Ландауэром. Из него следует, что одномерная система малой длины может иметь малое сопротивление, но при увеличении длины образца до огромных размеров электроны окажутся локализованными при сколь угодно малом беспорядке.

Оценим введенную выше длину  $l$ . Из (4.5.15) следует, что  $2l\rho_0/L_0 \sim 1$ , или  $l \sim L_0/2\rho_0$ .

#### 4.6. Скейлинговая гипотеза и слабая локализация.

Уравнение (4.38) может быть переписано в следующем виде:

$$\partial(\ln G) / \partial(\ln L) = \beta(G), \quad (4.41)$$

Где  $\beta$  - функция Геллмана-Лоу, а безразмерный кондактанс  $G = 1/R$ . Для одномерного случая выражение для  $\beta(G)$  легко находится дифференцированием:

$$\beta(G) = -(G) [1 + (2/G)] \{ 1/2 \ln \{ (2/G + 1)/(1 + 2\rho_0) - 2\rho_0 \} \} \approx - (G/2) [1 + (2/G)] \{ \ln \{ (2/G + 1) \} \} \quad (4.42)$$

Как мы видим, в одномерном случае  $\beta$  - функция оказалась универсальной, не включающей в себя никаких параметров реальной системы. Ее график показан на Рис.34.

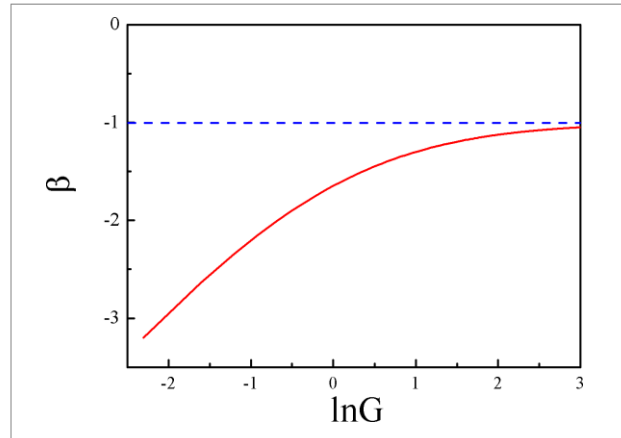


Рис.34.

В классической работе, известной как работа «банды четырех», было предложено описывать состояние произвольной электронной системы с помощью ее кондактанса. Мы не будем здесь обсуждать степень обоснованности такого предложения, отметим только степень нетривиальности сделанного шага: состояние предложено описывать не термодинамической, как обычно, а кинетической величиной. Состояние системы после изменения ее размера должно быть в этом случае функцией начального, т.е. кондактанса системы измененного размера должен быть функцией исходного кондактанса. В такой схеме уравнение (4.41) должно работать и для двумерных и для трехмерных систем с  $\beta$  - функциями, зависящими от размерности системы. Развитый подход получил название скейлинговой гипотезы.

В одномерном случае при кондактансе стремящемся в бесконечность,  $\beta$  функция выходит на асимптотическое значение  $\beta = -1$ , а в противоположном пределе  $\beta \rightarrow \ln G - \ln 2$ . Найдем соответствующие асимптотики для двумерного случая. В области совсем малых кондактансов мы ожидаем локализации:

$$G \propto \exp(-L/l) . \quad (4.43)$$

Следовательно,  $\beta(G) \rightarrow \ln G$  при  $G \rightarrow 0$ . Более интересен обратный предельный случай  $G \rightarrow \infty$ . В нулевом приближении в металлической области кондактанс квадрата не зависит от размера его стороны и  $\beta(G) \rightarrow 0$ . В следующем приближении нужно ожидать линейного члена в разложении  $\beta(G)$  по малому параметру  $1/G$ :

$$\beta(G) = \pm \alpha/G . \quad (4.44)$$

Знак перед коэффициентом  $\alpha$  *a priori* остается неопределенным. Подставив (4.44) в (4.41) и проинтегрировав, получим:

$$G = \pm \alpha^{-1} \ln(L) + \text{const} . \quad (4.45)$$

Оказывается, что при больших кондактансах возможна логарифмическая поправка к независящему от размера значению кондактанса. В эксперименте наблюдаются оба знака: в системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием «+», в системах без спин-орбитального взаимодействия «-». Последний случай получил название «слабой» локализации. В таких системах ожидается, что по мере увеличения размера при нулевой температуре кондактанс будет логарифмически уменьшаться до тех пор, пока поправка не сравняется по масштабу с константой, а затем реализуется обычная локализация. График функции Геллмана-Лоу показан для этого случая на Рис. 35.

Оценим характерный размер  $\xi$  (радиус локализации) при котором логарифмическое

уменьшение кондактанса перейдет в экспоненциальное. С этой целью перепишем (4.45) в виде

$$G = - \ln(L/l) + G_0, \quad (4.46)$$

где учтено, что при характерном размере двумерной электронной системы, сравнимом с длиной свободного пробега  $l$ , кондактанс равен  $G_0$ . При достижении системой радиуса локализации.

$$(G_0 - G)/G_0 \sim 1 = (1/G_0) \ln(\xi/l). \quad (4.47)$$

Откуда получаем:

$$\xi = l \exp(G/G_0) = l \exp(k_F l) \quad (4.48)$$

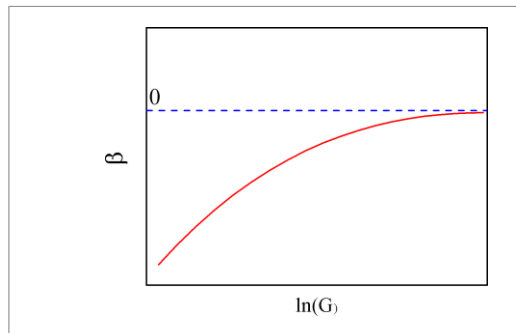


Рис.35.

Напомним еще раз, что все приведенные выше рассуждения базировались на учете интерференционных эффектов. Поэтому при конечной температуре роль размера образца будет играть некоторый размер, на котором фаза у интерферирующих электронов сохраняется (длина сбоя фазы). По мере повышения температуры длина сбоя фазы ( а вместе с ней и эффективный размер образца) будет уменьшаться, приводя к логарифмической поправке к кондактансу образца по температуре. В принципе, интерференционные эффекты в двумерном случае могут быть подавлены введением нормальной к поверхности двумерной электронной системы компоненты магнитного поля. Поэтому можно ожидать в случае слабой локализации появления отрицательного магнетосопротивления. Все вышеперечисленные эффекты наблюдались экспериментально. В качестве примера на Рис. 36 мы приводим логарифмическую температурную зависимость сопротивления двумерного газа в GaAs/AlGaAs (D.J. Bishop, D.C. Tsui, R.C. Dynes, PRL 44,1153 (1980)).

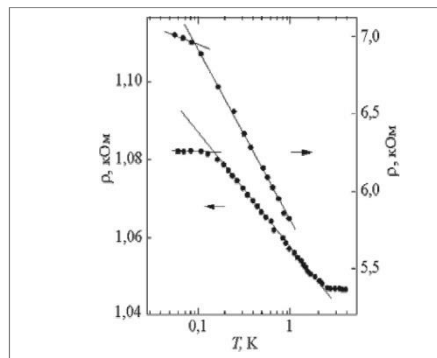


Рис.36.

Отметим в заключение существенное ограничение для всех наших рассуждений и выводов: мы предполагали электроны невзаимодействующими.

Задача: Построить график функции Геллмана-Лоу для трехмерной электронной системы. Какие выводы можно сделать из вида этой функции?

## V. Туннелирование.

### 5.1. Надбарьерное отражение и подбарьерное прохождение (туннелирование).

Классическая частица, налетающая на препятствие (вообще говоря, обладающее бесконечной массой), либо отразится от препятствия со стопроцентной вероятностью (если кинетическая энергия частицы меньше максимума потенциала на препятствии), либо пройдет препятствие со стопроцентной вероятностью (в противоположном случае). Иначе ведет себя квантовомеханическая частица: у нее может быть конечная вероятность прохождения в первом случае и отражения во втором.

Рассмотрим в качестве простейшего примера хрестоматийный случай потенциальной ступеньки (Рис. 37).

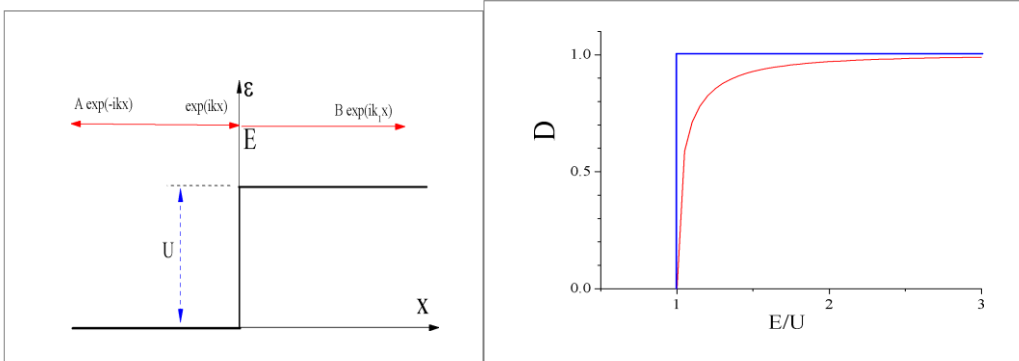


Рис. 37.

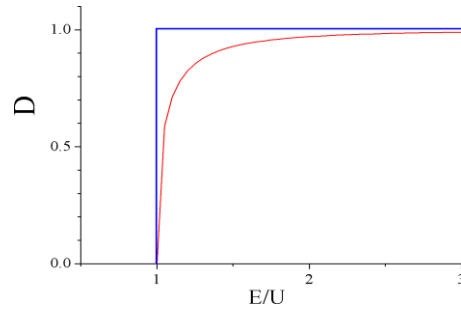


Рис. 38.

В левой части рисунка имеются две волны (падающая и отраженная), в правой - только одна (прошедшая). Координатные части соответствующих волновых функций имеют вид  $\psi_1 = \exp(ikx)$ ,  $\psi_2 = A \exp(-ikx)$ ,  $\psi_3 = \exp(ik_1x)$ , где  $\hbar k = (2mE)^{1/2}$ ,  $\hbar k_1 = (2m[E - U])^{1/2}$ . На границе волновая функция электрона и ее первая производная должны быть непрерывны. Используя эти два условия, найдем для коэффициента прохождения

$$D = 1 - |A|^2 = 1 - (1 - [1 - U/E]^{1/2})^2 / (1 + [1 - U/E]^{1/2})^2 \quad (5.1)$$

Отметим, что для вычисления коэффициента прохождения необходимо сосчитать отношение потоков частиц в падающей и в прошедшей волнах. Мы воспользовались тем, что групповая скорость в левой части рисунка не зависит от направления движения и свели отношение потоков при вычислении коэффициента отражения к отношению квадратов модулей амплитуд. Результат показан на Рис. 38. красной кривой. Для сравнения синей линией показан коэффициент прохождения для классической частицы. Видно, что у квантовой частицы коэффициент прохождения меньше единицы и приближается к единице асимптотически по мере увеличения кинетической энергии налетающего электрона.

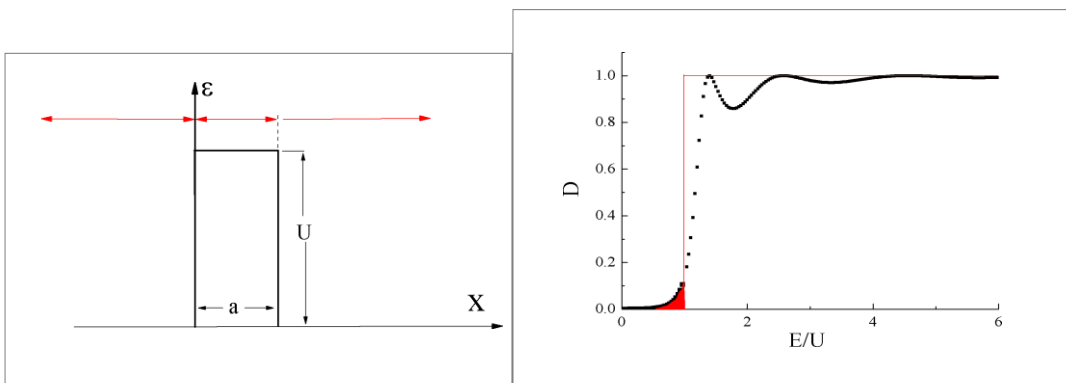


Рис. 39.

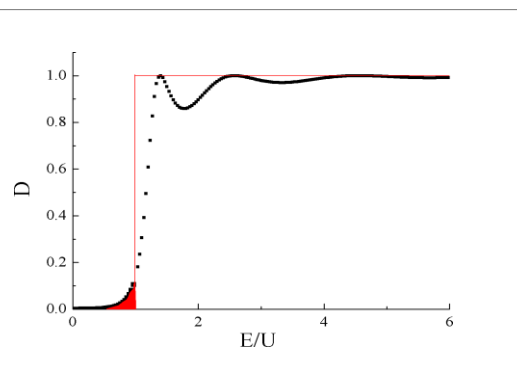


Рис. 40.

Вторым, столь же хрестоматийным примером является прохождение частицы через прямоугольный барьер (Рис. 39). Снова в левой части рисунка имеются налетающая и отраженная волны  $\psi_1 = \exp(ik_1x)$ ,  $\psi_2 = A \exp(-ik_1x)$ , в области барьера тоже две волны  $\psi_3 = B \exp(ik_1x)$ ,  $\psi_4 = N \exp(-ik_1x)$ , а справа – только прошедшая волна  $\psi_5 = C \exp(ik_2x)$ . Систему уравнений для вычисления коэффициентов получим из граничных условий на двух границах барьера:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) + \psi_2(0) &= \psi_3(0) + \psi_4(0); & (d\psi_1/dx + d\psi_2/dx &= d\psi_3/dx + d\psi_4/dx)|_{x=0} \\ \psi_3(a) + \psi_4(a) &= \psi_5(a); & (d\psi_3/dx + d\psi_4/dx &= d\psi_5/dx)|_{x=a}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Здесь величина  $k_1$  может быть как действительной при  $E > U$ , так и мнимой в обратном предельном случае. Если учесть равенство групповых скоростей слева и справа от барьера, то коэффициент прохождения будет равен  $D = |C|^2$ . Решение алгебраических уравнений (5.2) для случая  $E > U$ , например, приводит к ответу:

$$D = 4k^2 k_1^2 \{ 4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_1 a \}^{-1} = \{ 1 + U^2 / 4E(E-U) \sin^2 k_1 a \}^{-1}. \quad (5.3)$$

Графически результат вычисления коэффициента прохождения показан на Рис.40. Его интересно сравнить с Рис. 38. Общий ход зависимости коэффициента прохождения от энергии налетающей частицы примерно одинаков. Однако, при барьере конечной толщины имеется конечная вероятность проскочить барьер, даже, если энергия частицы меньше высоты барьера (залитая красным область на Рис.40), т.е. протуннелировать сквозь барьер. Другой особенностью Рис. 40 является наличие осцилляций коэффициента прохождения при  $E > U$ . Этот эффект обусловлен надбарьерным отражением на границах барьера и интерференцией электронных волн. Барьер работает аналогично интерферометру Фабри-Перо в оптике.

## 5.2. Матричная техника при расчете туннельных эффектов.

Вернемся вновь к рассмотрению барьера, на который справа из области 1 падает электронная волна с амплитудой  $A$ , а слева, из области 2 – с амплитудой  $D$  (Рис. 41).

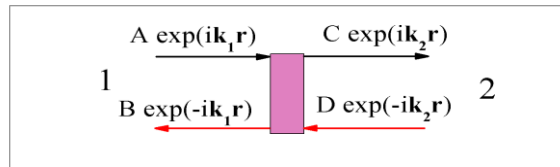


Рис.41.

Амплитуды отраженных волн равны, соответственно,  $B$  и  $C$ . Из граничных условий типа (5.1.2) следует, что амплитуды должны быть связаны линейным соотношением, которое записывается с помощью так называемой  $T$  матрицы:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T_{21} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Например, для надбарьерного прохождения ступеньки на Рис. 37  $T$ - матрица имеет вид:

$$T_{21} = \frac{1}{2k_2} \begin{pmatrix} k_1 + k_2 & k_2 - k_1 \\ k_2 - k_1 & k_1 + k_2 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Если на барьер Рис.41 падает волна единичной амплитуды с одной стороны и частично отражается (с амплитудой  $r$ ), а с другой – имеется только прошедшая волна амплитуды  $t$ , то



$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

и, соответственно:

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}}; \quad t = \frac{T_{11}T_{22} - T_{21}T_{12}}{T_{22}}. \quad (5.7)$$

Специально отметим, что выражение (5.5) выведено для случая расположения ступеньки при  $x=0$ . Рассмотрим случай расположения ступеньки при  $x=d$ . Чтобы свести задачу к предыдущей сделаем преобразование координат  $x' = x-d$ . Тогда  $A$  заменится на  $A \exp(ik_1d)$ , а  $B$  на  $B \exp(-ik_1d)$  что эквивалентно умножению исходного вектора на диагональную матрицу преобразования. К преобразованному вектору применим исходную матрицу, а затем вновь вернемся к исходной системе координат. Вся цепочка проделанных преобразований эквивалентна матричному равенству:

$$T_{21}(d) = \begin{pmatrix} e^{ik_1d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11}(0) & T_{12}(0) \\ T_{21}(0) & T_{22}(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1d} \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

В общем случае элементы  $T$  матрицы комплексны, поэтому создается впечатление, то для ее задания необходимы восемь чисел. Два физических требования ограничивают число независимых переменных в  $T$  матрице: инвариантность по отношению к обращению времени и сохранение потока частиц.

Рассмотрим сначала ограничения, накладываемые инвариантностью по отношению к инверсии времени. Будем предполагать гамильтониан системы независимым от времени и действительным (последнее условие выполняется далеко не всегда, например, в магнитном поле оно не выполняется). Уравнение Шредингера может быть записано в двух эквивалентных видах, соответствующих обращению времени:

$$\hat{H}\psi(t) = i \hbar (\partial\psi/\partial t); \quad \hat{H}\psi(-t) = -i \hbar (\partial\psi(-t)/\partial t). \quad (5.9)$$

Применив комплексное сопряжение к правой части (5.8), получим

$$\hat{H}\psi^*(-t) = i \hbar (\partial\psi^*(-t)/\partial t). \quad (5.10)$$

Другими словами, если какая-то пространственно-временная функция является решением уравнения Шредингера, то комплексно сопряженная функция с обращенным временем является решением того же самого уравнения. Например, если  $A \exp(ikx - i\omega t)$  есть решение нашего уравнения, то и  $A^* \exp(-ikx - i\omega t)$  является решением того же уравнения. Обратим внимание на то, что в волне комплексно сопряженным коэффициентом падающая и отраженная волна поменялись местами. Отсюда возникают равенства:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T_{21} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = T_{21} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = T_{21}^* \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Сравнение первого и последнего равенств в (5.11) приводит к выводу, что

$$T_{11} = T_{22}^*; \quad T_{12} = T_{21}^*. \quad (5.12)$$

В  $T$  матрице осталось всего четыре независимых компоненты!

Теперь учтем сохранение потока частиц. Напомним, что поток частиц в квантовой

механике задается выражением:

$$I = (i \hbar / 2m) \{ \psi \text{ grad } \psi - \psi^* \text{ grad } \psi \}. \quad (5.13)$$

Стартовав с этого определения, ничего не стоит убедиться в том, что поток частиц в левой части рис 41. пропорционален  $k_1(A^2 - B^2)$ , а равенство потоков справа и слева от барьера сводится к условию

$$k_1(A^2 - B^2) = k_2(C^2 - D^2). \quad (5.14)$$

Наличие дополнительного уравнения (5.14) сводит число независимых компонент в T матрице к трем. Если барьер устроен таким образом, что  $k_1 = k_2$ , то условие (5.14) сводится к требованию

$$\det(T) = 1, \quad (5.15)$$

а элементы T матрицы могут быть выражены через введенные ранее амплитуды r и t (см.5.7)

$$T = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r^*/t^* & 1/t \end{pmatrix};$$

$$(5.16)$$

при условии  $|r|^2 + |t|^2 = 1$ .

**Задача:** Получить выражение (5.3) с помощью матричной техники, используя (5.5) и (5.8).

### 5.3. Резонансный туннельный диод.

Рассмотрим эффект резонансного туннелирования, используемый для построения базовых электротехнических элементов – резонансных туннельных диодов. Нам будет удобно начать с рассмотрения квантовой ямы, изображенной на Рис.47. Предполагается, что области высокого потенциала простираются направо и налево до бесконечности. В отличие от ямы с бесконечно высокими стенками (3.1.5) электронная волновая функция не обращается в нуль на границах ямы, а экспоненциально затухающими хвостами протягивается в обе стороны под барьер при  $E < U$ . Граничные условия сводятся к непрерывности волновой функции и ее первой производной

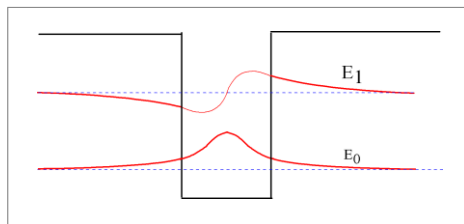


Рис. 47.

Количество дискретных квантовых уровней в яме конечно. Ясно, что при достаточно широкой яме нижние уровни будут близки к положению соответствующих уровней в яме с бесконечно высокими стенками. Из-за проникновения волновой функции подбарьер, уровни с соответствующими номерами в яме с конечной высотой потенциальных стенок будут, вообще говоря, расположены ниже по энергии, чем в яме с бесконечно высокими стенками.

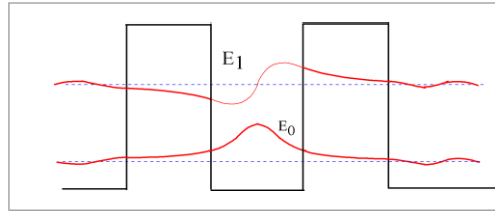


Рис. 48.

В случае если области высокой потенциальной энергии имеют конечную ширину (Рис. 48), то волновая функция с энергией  $E_0$  или  $E_1$  простирается вдоль всей оси абсцисс. Соответствующие электронные состояния являются делокализованными, как это схематически показано на рисунке. Более того, при всякой энергии электрона существует конечная вероятность протуннелировать сквозь оба барьера, следовательно, электрон произвольной энергии является делокализованным. В общем случае вероятность протуннелировать сквозь оба барьера близка к произведению вероятностей протуннелировать сквозь отдельный барьер, которую мы будем предполагать малой. Внутри ямы, строго говоря, нет связанных состояний, но есть квазисвязанные, электроны которых проводят в яме длительное время  $\tau$ . Ширина соответствующих уровней имеет порядок величины  $\hbar/\tau$ . Электрон, налетающий на двойной барьер с энергией одного из квазисвязанных состояний имеет вероятность пройти барьер близкую к единице. Этот эффект, называемый резонансным туннелированием мы и рассмотрим ниже.

Для определенности будем считать центр барьера на Рис. 48 расположенным в точке  $x=0$ . Расстояния от центра до точек, в которых волновая функция экспоненциально мала, примем равным  $\pm a/2$  (с хорошей точностью  $a$  - ширина внутренней части барьера). Будем считать ширину каждой из частей барьера пренебрежимо малой по сравнению с  $a$ . Введем две  $T$  матрицы для правой и левой частей барьера по формуле (5.16),  $T_R$  и  $T_L$ , соответственно. Причем определим, например,  $T_R$  как  $T$  матрицу для одиночного барьера, точно эквивалентного правой части двойного барьера и расположенного при  $x=0$ . Тогда матрица, описывающая двойной барьер, запишется в виде следующего матричного произведения:

$$\begin{aligned}
 T &= \begin{pmatrix} e^{-ika/2} & 0 \\ 0 & e^{ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/t_R^* & -r_R^*/t_R^* \\ -r_R/t_R & 1/t_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika/2} & 0 \\ 0 & e^{-ika/2} \end{pmatrix} \times \\
 &\times \begin{pmatrix} e^{ika/2} & 0 \\ 0 & e^{-ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/t_L^* & -r_L^*/t_L^* \\ -r_L/t_L & 1/t_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ika/2} & 0 \\ 0 & e^{ika/2} \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} (1-r_L^* r_R^* e^{-2ika})/t_L^* t_R^* & (r_L e^{ika} - r_R^* e^{-ika})/t_L t_R^* \\ (r_L^* e^{-ika} - r_R e^{ika})/t_L^* t_R & (1-r_L r_R e^{2ika})/t_L t_R \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Последняя строчка в (5.17) означает, что

$$t = t_L t_R / (1 - r_L r_R e^{2ika}). \tag{5.18}$$

Полученное выражение описывает двухбарьерную систему в самом общем виде. Для иллюстративных целей ниже мы упростим задачу. Будем считать правый и левый барьеры совершенно идентичными с коэффициентами прохождения и отражения по амплитуде, соответственно:

$$t = \tau \exp(i\phi), \quad r = \rho \exp(i\theta), \tag{5.19}$$

Подставив (5.19) в (5.18) вычислим вероятность прохождения двойного барьера:

$$|t|^2 = \tau^4 / \{(1 - \rho^2)^2 + 4\rho^2 \sin^2(ka + \theta)\} \tag{5.20}$$

При  $(ka+\theta) = n\pi$ , где  $n$  – целое число, вероятность прохождения двухбарьерной структуры обращается в единицу! Ситуация вполне идентична известному из оптики интерферометру Фабри-Перо.

Рассмотрим малую окрестность вблизи одного из резонансов. В этой окрестности  $\sin\delta\phi = \delta\phi$  и

$$|t|^2 = 1 - 4(\delta\phi)^2 \rho^4 / \tau^4. \quad (5.21)$$

Мы видим, что каждый из пиков в вероятности прохождения имеет вид Лоренциана. Полная зависимость вероятности прохождения некоторого модельного двойного барьера от энергии налетающего электрона показана на Рис. 49. Там же для сравнения пунктиром показана вероятность прохождения без учета интерференционных эффектов.

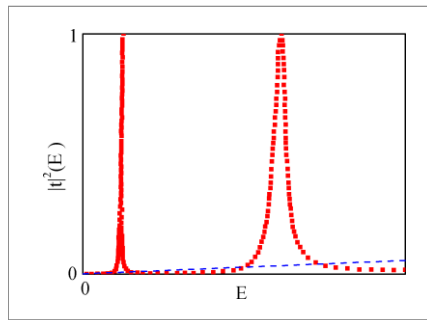


Рис.49.

В реальности нас конечно же интересует не вероятность прохождения в зависимости от энергии, а величина тока при различных приложенных напряжениях. Рассмотрим для

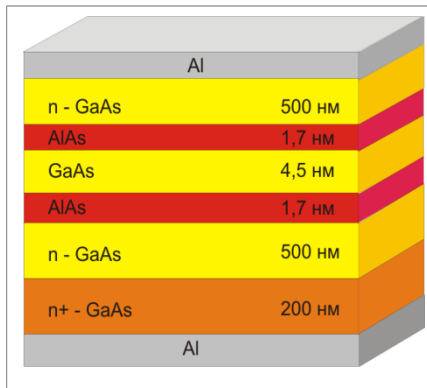


Рис. 50.

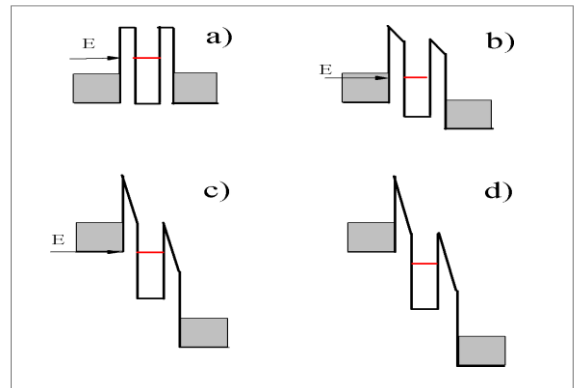


Рис.51.

определенности туннельную структуру, изображенную на рис 50. Будем считать, что области n-GaAs сверху и снизу двойного барьера можно рассматривать как трехмерные. Будем также для простоты предполагать, что имеется всего один резонансный уровень. Тогда может быть реализована одна из ситуаций, качественно изображенных на Рис.51. Если реализуется ситуация плоских зон (Рис.51а), а уровень Ферми находится ниже резонансного состояния, то резонансный туннельный эффект отсутствует и ток через структуру с экспоненциальной точностью равен нулю. Ток возникнет после того, как положение уровня Ферми и резонансного уровня совпадут (Рис.51b). Примем соответствующее напряжение на структуре за начало отсчета по напряжению. При дальнейшем понижении резонансного уровня ток возрастает, достигая максимума в ситуации Рис. 51с. После чего резко обрывается, поскольку как видно из Рис. 51d, при больших приложенных напряжениях нет электронов, способных туннелировать. Качественный вид описанной I-V характеристики

изображен на Рис. 52. С практической точки зрения наибольший интерес представляет падающий участок характеристики, позволяющий, например, построить генератор высокочастотных колебаний.

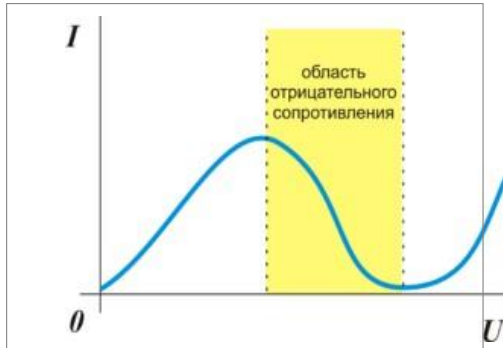


Рис. 52.

Вычислим начальный участок вольт-амперной характеристики аналитически. Ток, протекающий сквозь барьер, равен просуммированному по всем допустимым энергиям: произведению налетающего на барьер потока (с фиксированной энергией движения в z направлении) на вероятность прохождения барьера:

$$I = 2e \int_0^{\infty} k_{\perp} \pi (k_{\perp})^2 dk_{\perp} / (2\pi)^3 v_z |t(k_z)|^2, |t(k_z)|^2 = [1 + 4(\Delta k_z a)^2 / \Gamma^2]^{-1}. \quad (5.22)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk_z [1 + 4(\Delta k_z a)^2 / \Gamma^2]^{-1} = (\pi/2) \Gamma(k_z a) / a; \quad v_{z0} \hbar \Gamma(k_z a) / a = \Gamma(\epsilon_0)$$

$$I = (e/h) m(\epsilon_F - \epsilon_0) \pi \Gamma(\epsilon_0) / (\hbar^2)$$

Здесь  $\epsilon_0 =$  положение резонансного уровня  $|\epsilon_F - \epsilon_0| = eU$ , откуда следует

$$I = (e^2/h) \Gamma(\epsilon_0) \pi m / (\hbar^2) U. \quad (5.23)$$

Начальный участок в пределах точности наших вычислений оказался линейной функцией приложенного напряжения. Сравнение экспериментальных результатов с экспериментом на одной из резонансно-туннельных структур показано на Рис.53.

Идея использования резонансного туннелирования для построения интерференционных элементов электронной техники была, по-видимому, впервые выдвинута Л. Иогансон (Иогансон Л.В., ЖЭТФ 456 207 (1963)). Первые рабочие структуры демонстрировали типичные для резонансного туннелирования характеристики только при низких температурах ( $T < 77K$ ), однако в последние годы область рабочих температур удалось довести до комнатной температуры (Tsuchiya M., Sakaki H., Yoshino J. < Jap. Journ. Appl. Phys., 24, L466 (1985).

#### 5.4. Сверхрешетки.

Матричная техника позволила нам с легкостью рассчитать как одиночный барьер, так и двухбарьерную структуру. Ниже мы применим ту же технику для расчета спектра так называемых сверхрешеток. Сверхрешетка это периодическая структура, состоящая из тонких чередующихся в одном направлении слоев различных полупроводников. обладает, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, дополнительным потенциалом, обусловленным чередующимися слоями полупроводников. Толщина каждого из слоев велика по сравнению с межатомным расстоянием, но мала по сравнению с характерной длиной свободного пробега носителей тока. Наличие дополнительной модуляции потенциала в сверхрешетке существенно меняет зонную энергетическую структуру исходных

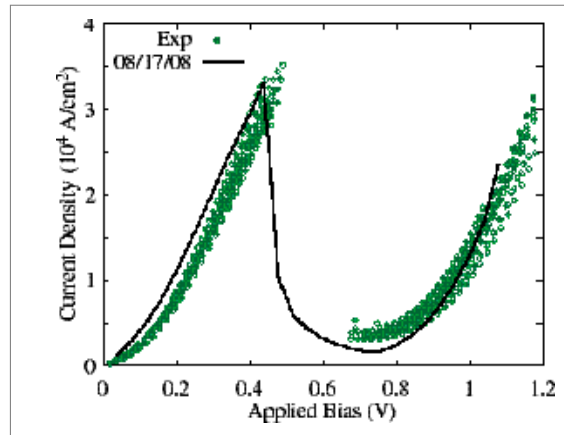


Рис. 53.

полупроводников. По способу создания периодического потенциала сверхрешетки делятся на несколько типов. Наиболее распространенными являются композиционные и легированные сверхрешетки. Композиционные сверхрешетки представляют собой эпитаксиально выращенные чередующиеся слои различных по составу полупроводников с близкими постоянными решетками. В легированных сверхрешетках периодический потенциал образован чередованием слоев n и p-типов одного и того же полупроводника. Эти слои могут быть отделены друг от друга нелегированными слоями (nipi-кристаллы).

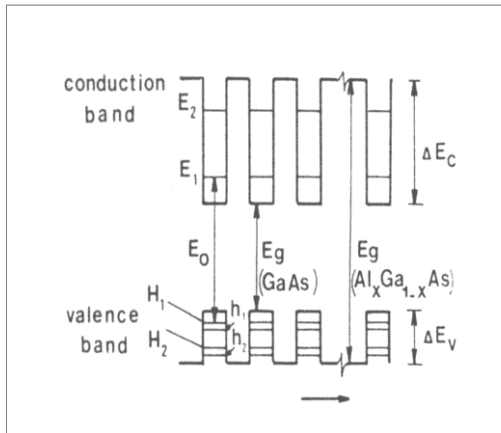


Рис. 54.

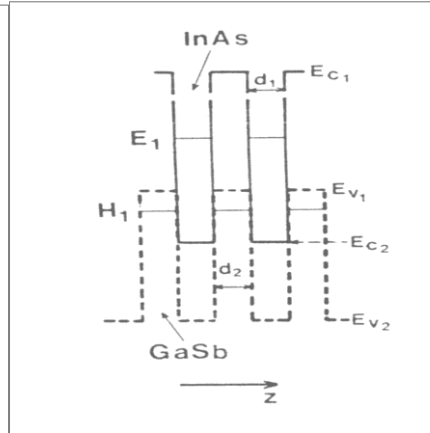


Рис. 55.

На рисунках 54 и 55 представлены диаграммы валентной зоны и зоны проводимости для двух различных композиционных сверхрешеток. На Рис.54 представлена сверхрешетка из чередующихся слоев GaAs и AlGaAs. В этом случае в сверхрешетке на соответствующих квантовых уровнях могут быть размещены как электроны, так и дырки, причем оба типа носителей тока пространственно расположены в при одном значении z –координаты. Поэтому следует ожидать активную оптическую рекомбинацию носителей тока. На Рис. 55 показана сверхрешетка, в которой электроны и дырки пространственно разделены. Поэтому, если в такой сверхрешетке каким-либо образом создать носители разных знаков, то они окажутся долгоживущими.

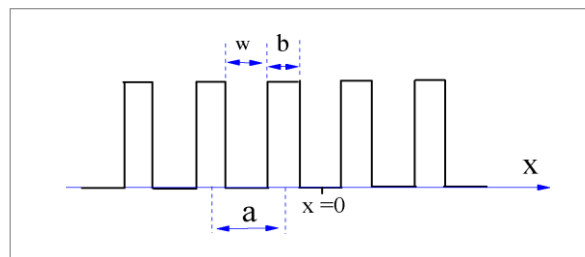


Рис. 56.

Рассмотрим спектр электронов на модели сверхрешетки, изображенной на Рис. 56. Соответствующая модель известна как модель Кронига-Пенни. Высоту потенциальных барьеров обозначим буквой V. Для нахождения электронного спектра вновь воспользуемся матричным методом. Пусть T матрица для барьера, расположенного при x=0 равна T<sub>0</sub>. Тогда T матрица для прохождения следующего барьера T<sub>1</sub> определяется выражением (5.2.5), в котором в показателях экспоненты стоит ±ik<sub>1</sub>a. Специально напомним, что k<sub>1</sub> – это вектор распространяющейся между двумя барьерами волны в «микроскопическом» рассмотрении.

$$T_1 = A^{-1}T_0A. \quad (5.24)$$

Умножая матрицы, описывающие прохождение набора барьеров, расположенных справа и слева от нуля, получим:

$$T = \dots (A^{-3}T_0A^3)(A^{-2}T_0A^2)(A^{-1}T_0A)T_0(AT_0A^{-1})(A^2T_0A^{-2})(A^3T_0A^{-3})\dots = AT_0AT_0AT_0AT_0AT_0AT_0\dots \quad (5.25)$$

Добавление очередного барьера соответствует добавлению в произведение множителя  $AT_0$ . Будем описывать волновую функцию электрона за барьером с номером  $n$  в виде вектора:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

Сравнив соотношение (5.25) с теоремой Блоха (2.3), получим следующее соотношение:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = AT_0 \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} = e^{ika} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

Из равенства (5.26) следует, что  $e^{ika}$  является одним из собственных значений матрицы  $AT_0$ :

$$AT_0 = \begin{pmatrix} e^{ik_1 a}/t^* & -e^{ik_1 a} r^*/t^* \\ -e^{-ik_1 a} r/t & e^{-ik_1 a}/t \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Собственные значения определяются уравнением  $\det\{AT_0 - \lambda \delta_{nm}\} = 0$ , где  $\delta_{nm}$  единичная матрица. Их произведение равно детерминанту исходной матрицы (5.27)

$$\lambda_1 \lambda_2 = \det\{AT_0\} = 1, \text{ следовательно, } \lambda_{1,2} = e^{\pm ika}.$$

С другой стороны, сумма собственных значений равна следу матрицы:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 2\text{Cos}(ka) = 2\text{Re}\{t e^{ik_1 a}/|t|^2\} = 2|t|^{-1} \text{Cos}(k_1 a + \phi), \quad (5.28)$$

где  $\phi$  - фаза  $t$ . Условие (5.28) определяет допустимый набор векторов  $k$ . Выражение (5.28) показывает, что спектр электрона в сверхрешетке определяется тремя параметрами: ее периодом, модулем амплитуды коэффициента прохождения для отдельного барьера и его фазой. Чтобы проиллюстрировать это утверждение рассмотрим модельный пример.

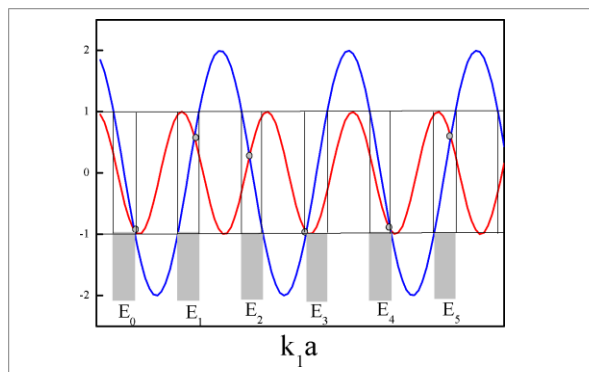


Рис. 57.

Пусть для простоты ни  $|t| < 1$ , ни  $\phi$  не зависят от  $k$ . Зафиксируем  $k_1 = (2mE)^{1/2}$ . где  $m$  – масса, а  $E$  – энергия рассматриваемого электрона. Уравнение (5.28) используем для поиска волнового вектора  $k$  ( $\hbar k$  - квазиимпульс бегущего по сверхрешетке электрона).

Связь между  $k$  и  $k_1$  найдем по графику рисунка 57. На этом рисунке синей линией

показан график правой части соотношения (5.28). Красная кривая служит для отыскания параметра  $ka$ . Поскольку  $|\cos(ka)| \leq 1$ , каждая из точек пересечения может быть сдвинута по оси абсцисс только в конечном интервале векторов  $k_1(a, \text{ следовательно, энергий!})$ . Таким образом возникает набор энергетических подзон  $E_0, E_1, E_2$ . На рисунке 57 ширина подзон по параметру  $k_1a$  одинакова, следовательно, их ширина по энергии возрастает по мере увеличения номера подзоны. В реальном потенциале этот эффект усиливается тем, что прозрачность барьера растет по мере увеличения энергии электрона.

Сделаем еще два важных замечания. Из Рис.57 очевидно, что уменьшение проницаемости индивидуального барьера (увеличение амплитуды осцилляций синей линии) ведет к уменьшению ширины энергетических подзон. Во-вторых, как упоминалось в разделе 2.1, все физически различные значения квазиимпульса  $k$  могут быть уложены в интервал шириной  $2\pi/a$ , например,  $-\pi/a < k < \pi/a$ . В центре и на границах этого интервала  $d\varepsilon/dk \propto dk_1/dk = 0$ , то есть групповая скорость квазичастиц в сверхрешетке обращается в нуль.

**Задача:** Пользуясь Рис. 57, построить качественный вид спектра квазичастиц в сверхрешетке.

## VI. Кулоновская блокада.

### 6.1. Постановка задачи.

В металлических пленках, в двумерных электронных системах полупроводниковых структур, а также в гранулированных системах могут быть созданы объекты, обладающие при низких температурах уникальными транспортными свойствами. Снимок с помощью электронного микроскопа одного из таких объектов показан на Рис.58а.

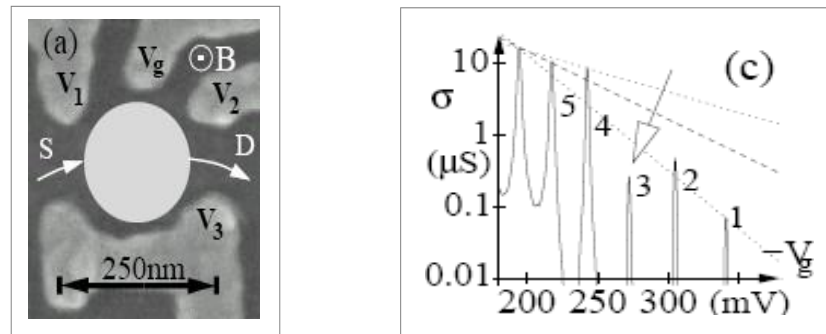


Рис.58 . Из статьи А. К. Huettel, Н. Qin, А. W. Holleitner, R. H. Blick, К. Neumaier, D. Weinmann, К. Eberl, and J. P. Kotthaus arXiv:cond-mat/0109104

На основе одиночного гетероперехода GaAs/AlGaAs изготовлена структура, позволяющая приложением отрицательного потенциала на затворы выделить квантовую точку, схематически изображенную на рисунке белым кругом. Характерный размер этого круга 200nm. Квантовая точка с помощью двух туннельных контактов (стрелки на рисунке) соединена с берегами: истоком (S) и стоком (D). Кондактанс такой системы как функция напряжения на среднем затворе демонстрирует ряд узких эквидистантных пиков (Рис. 58с). Свойства квантовой точки определяются соотношением между несколькими энергетическими параметрами. Характерное расстояние между электронными квантовыми уровнями оценим с помощью соотношения неопределенности

$$kD \sim 1: \hbar^2 k^2 / m \sim \hbar^2 / D^2 m. \quad (6.1)$$

Здесь  $D$  – диаметр точки. Исходно квантовая точка электронейтральна. Приложение напряжения на затвор  $V_g$  позволяет нарушить электронейтральность и изменять число электронов в точке по одному. Оценим дополнительную энергию, которая необходима,



чтобы поместить на точку дополнительный электрон. Это - кулоновская энергия с масштабом  $e^2/kD$  ( $k$  – диэлектрическая проницаемость среды). Сравнивая (6.1) с оценкой кулоновской энергии приходим к выводу, что расстояние между квантовыми уровнями относится к кулоновской энергии как боровский радиус к диаметру точки. Как правило, это отношение заметно меньше единицы.

Явление кулоновской блокады состоит в подавлении транспорта между берегами структуры за счет увеличения кулоновской энергии точки при попадании на нее хотя бы одного электрона. Наша задача состоит в том, чтобы понять, почему при изменении потенциала дополнительного затвора эффект подавления исчезает при определенных напряжениях на этом затворе и почему всплески кондуктанса наблюдаются через равные интервалы по напряжению. Для качественного рассмотрения кулоновской блокады можно пренебречь дискретностью спектра электронов.

Оценим температуру, при которой кулоновская блокада будет заметна. Для этого сравним кулоновскую энергию с  $kT$ . Подставив диаметр, показанный на Рис. 58, и диэлектрическую проницаемость GaAs, получим температуру 5К. Обычно блокаду наблюдают при температурах на порядок ниже.

Первые экспериментальные наблюдения эффектов, обусловленных кулоновской блокадой были сделаны в работах Zeller H.R. , Giaever I. (Phys.Rev. 181, 789(1969) ) и Янсон И.К, Власенко А.А. (Письма в ЖЭТФ 9, 657 (1969)). Теоретически кулоновская блокада впервые рассмотрена в работе Кулик И.О. и Шехтер Р.И. (ЖЭТФ 68, 623 (1975)). Искусственные структуры, в частности, одноэлектронные транзисторы, появились в 80 годы прошлого века (Кузьмин Л.С., Лихарев К.К. (Письма в ЖЭТФ 45,389 (1987), Fulton T.A., Dolan G. J. (Phys. Rev. Lett., 59, 109 (1987)).

## 6.2. Одноэлектронный транзистор. Принцип работы.

Вернемся к обсуждению работы одноэлектронного транзистора. Для большей ясности снимок затворов, нанесенных на структуру с двумерным электронным газом, полученный с помощью атомно-силового микроскопа показан на Рис. 59. Пусть на квантовой точке находится  $n$  электронов. Процесс переноса электрона между берегами можно представить себе в виде

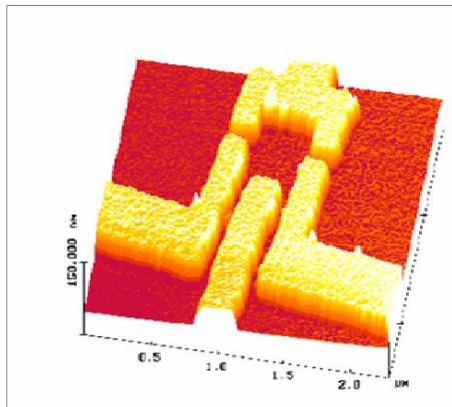


Рис.59.

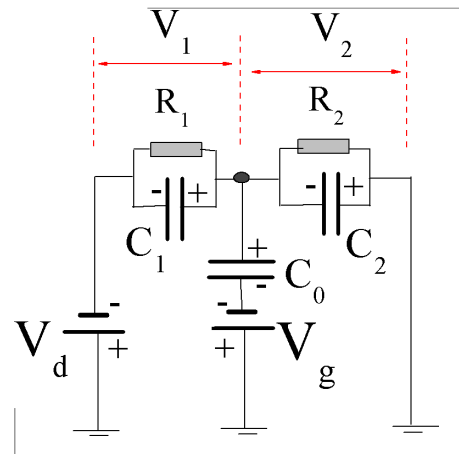


Рис.60.

одного из конкурирующих процессов: либо с одного берега на точку туннелирует дополнительный  $(n+1)$ -й электрон, а затем один из электронов из точки туннелирует на противоположный берег. Либо сначала точку покидает один из электронов, а затем потеря восполняется электроном с противоположного берега.

На Рис.60 представлена радиотехническая схема квантовой точки и затвора. Сопротивления  $R_1$  и  $R_2$  отвечают туннельным сопротивлениям между точкой и берегами, а  $C_1$  и  $C_2$  – соответствующие паразитные емкости. Напряжение  $V_g$  и емкость  $C_0$  относятся

к управляющему затвору. Сразу же оговоримся: представление туннельного контакта в виде сопротивления не вполне корректно. В обычном сопротивлении обязательно происходит потеря памяти о фазе прошедшего сопротивления электрона, а в туннельном контакте этого не происходит. В общем случае к транзистору приложено напряжение  $V_d$ , однако пока мы будем считать для простоты это напряжение нулевым, то есть мы не будем рассматривать перенос тока в системе, а ограничимся на первом этапе рассмотрением флуктуаций числа электронов в квантовой точке.

Энергия нескомпенсированного заряда  $Q$ , помещенного на квантовую точку, равна

$$E(Q) = Q^2/2C + QV_g(C_0/C); \quad C=C_0+C_1+C_2. \quad (6.2)$$

Зависимость (6.2) представляет собой параболу, сдвинутую относительно начала координат так, как это показано на Рис. 61.

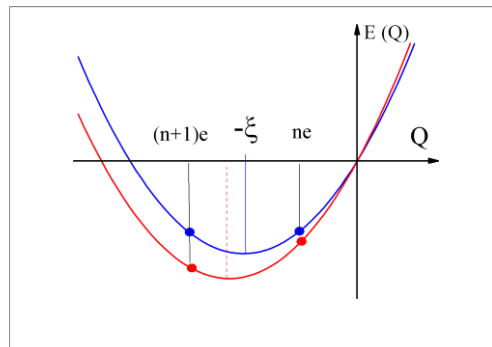


Рис. 61.

Нам нужно учесть дискретность электронного заряда. Перепишем (6.2) в виде

$$E_n = e^2/2C ( n^2 + 2n \xi ), \quad (6.3)$$

где  $\xi = V_g C_0/e$  является непрерывным параметром. Как видно из Рис.61 (синие точки). При полуцелом отрицательном значении  $\xi$  энергия состояния с  $n$  электронами на квантовой точке и состояния с  $n+1$  электроном совпадают. Следовательно, возможен перенос электронов через точку в отсутствие кулоновского барьера. Подобный перенос будет реализован с периодом по затворному напряжению  $\Delta V_g = e/C_0$ . При всех других значениях параметра  $\xi$  одно из состояний с целым числом электронов будет иметь минимальную энергию и перенос заряда через квантовую точку возможен только за счет тепловых флуктуаций.

При полуцелом  $\xi = (2n+1)/2$  среднее число избыточных электронов на квантовой точке  $\langle n \rangle = (2n+1)/2$ , а отклонение числа электронов от среднего равно  $\pm(1/2)$ . При других  $\xi$  среднее значение  $\langle n \rangle$  - целое и флуктуации числа электронов малы в меру малости температуры.

Пользуясь рисунком 60, не сложно оценить емкость  $C_0 = 10^{-5}$  пф и максимальное расстояние между энергиями, отвечающими двум разным числам электронов на точке, отличающимся на единицу:  $\Delta E \sim 100$ К. Эксперимент, показанный на Рис. 60, выполнен при электронной температуре 100 мК поэтому ширина пиков не может определяться температурой.

### 6.3. Одноэлектронный транзистор. Диаграмма стабильности.

Нам предстоит рассмотреть реалистическую ситуацию, в которой нужно учесть конечность напряжения  $V_g$ . От нас потребуется решить систему алгебраических уравнений. Для зарядов и потенциалов Рис.60 мы имеем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_2 V_2 + Q &= C_1 V_1 + C_0 V_0, \\ V_d &= V_1 + V_2, \\ V_g &= V_0 + V_2. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Решив эту систему, получаем для  $V_1$  и  $V_2$ :

$$\begin{aligned} V_1 &= 1/C \{Q - C_0 V_g + V_d (C_0 + C_2)\}, \\ V_2 &= 1/C \{C_1 V_d + C_0 V_g - Q\}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

В качестве первого шага положим  $V_g = 0$ ,  $C_0 = 0$ , то есть сведем задачу к схеме, показанной на Рис. 62.

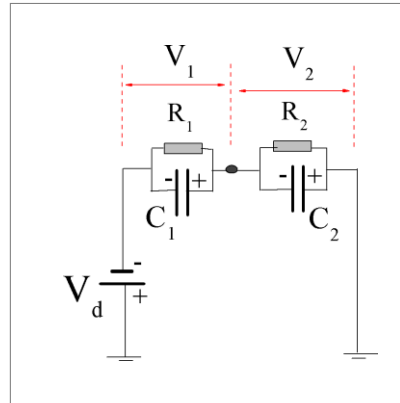


Рис. 62.

Рассматриваемая система не является равновесной (в ней способен протекать ток). Значит кинетические процессы обязаны происходить таким образом, чтобы понижать свободную энергию системы (включая, естественно, и батарею). Вычислим изменение свободной энергии системы при туннелировании одного электрона через левый (сопротивление  $R_1$ ) или правый барьер. Энергия заряженных конденсаторов равна

$$E_C = \frac{1}{2} \{C_1 V^2 + C_2 V^2\} = 1/(2C) \{Q^2 + V^2 C_1 C_2\}. \quad (6.6)$$

Свободная энергия Гельмгольца равна кулоновской энергии за вычетом работы, совершенной батареей.\*

$$F = E_C - A. \quad (6.7)$$

Рассмотрим работу, совершаемую батареей при перемещении заряда  $-Q_1$  через левый барьер. (Мы специально выписали знак «минус» имея в виду отрицательный заряд электрона). Вопрос сводится к выяснению какой заряд протекает через батарею при переносе заряда  $-Q_1$  на точку через левый барьер.

Перенеся заряд  $-Q_1$ , мы изменили величину  $Q$  в выражении (6.5) и, следовательно, изменили  $V_1$ . Это напряжение изменилось на  $-Q_1/C$ . Заряд на обкладках конденсатора изменился на  $-Q_1 C_1/C$ . Отрицательный заряд на левой пластине конденсатора уменьшился! Другими словами, слева направо (по сопротивлению  $R_1$  на Рис.62) переместился заряд  $-Q_1$ , а в обратном направлении ушел заряд  $Q_1 C_1/C$ . Через батарею прошел разностный заряд, равный  $-Q_1 C_2/C$ . Интересующая нас работа равна

$$A = -Q_1 V_d C_2 / C. \quad (6.8)$$

Изменение свободной энергии при переносе одного электрона на точку через левый или

правый барьер равно в соответствии с (6.6-6.8)

$$\begin{aligned}\Delta F^{\pm 1} &= e/C \{e/2 \pm (V_d C_2 + ne)\} \\ \Delta F^{\pm 2} &= e/C \{e/2 \pm (V_d C_1 - ne)\}\end{aligned}\tag{6.9}$$

Проследим за изменением свободной энергии при переносе первого ( $n=0$ ) электрона через всю систему. Перенос электрона на точку слева возможен при  $\Delta F^+1 < 0$ . Последнее возможно, если  $V_d < 0$ ,  $|V_d| > e/2C_2$ . Уход электрона с точки направо возможен при отрицательных  $V_d$  всегда, поскольку изменение свободной энергии в этом процессе равно  $\Delta F^+2$  (в начальном состоянии  $n=1$ , а в конечном  $n=0$ ). Вольт-амперная характеристика будет иметь вид, показанный на Рис. 63. Приход электрона на точку и уход с нее будут скоррелированы во времени. Два туннельных процесса не будут одновременными, однако, после появления избыточного или недостающего электрона обязательно произойдет второй акт туннелирования.

---

\* *Как известно, свободная энергия равна работе внешних сил в изотермическом процессе. Полная совершенная работа, в общем случае складывается из работы внешних сил, произведенной над конденсаторами, и работы батарейки. Работа затрачивается на изменение свободной энергии, запасенной в конденсаторах. Поэтому изменение свободной энергии системы равно изменению свободной энергии, запасенной в конденсаторе ( $E_c$ ), за вычетом работы батарейки.*

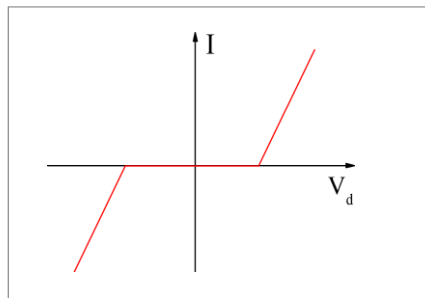


Рис. 63.

Интересно качественно рассмотреть случай сильно различающихся вероятностей туннелирования через правый и левый контакты. Будем считать, что вероятность туннелирования через левый контакт значительно выше, чем через правый. Тогда электрон, попавший на точку будет оставаться на ней значительное время, а после ухода с нее через правый контакт, быстро восполняться следующим электроном, прибывшим слева. Вероятность ухода направо возрастает по мере увеличения числа электронов на точке (определяемым через  $V_d$ , согласно (6.9), поэтому вольт- амперная характеристика будет иметь вид лестницы, каждая из ступеней которой отвечает целому числу электронов, накопленному на точке. Пример расчета кулоновской лестницы при некоторой конечной температуре показан на Рис. 65.

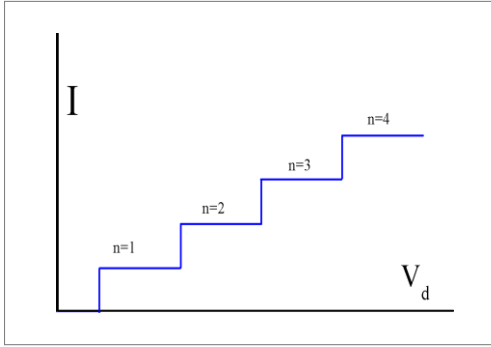


Рис. 64.

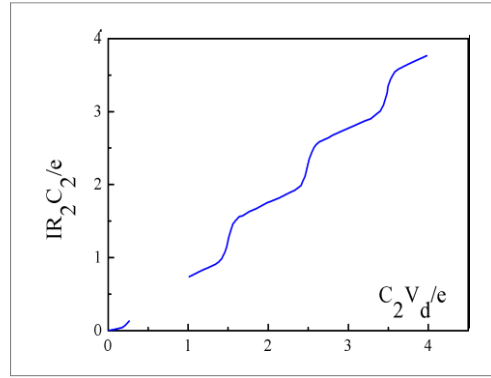


Рис. 65. В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер, Физика квантовых низкоразмерных структур. Центр «Интеграция» 2000г.

Обратимся теперь к случаю транзистора с затвором (Рис. 60). Изменения, которые нам предстоит ввести в расчет, не велики. При выводе изменений в свободной энергии (6.9) нам нужно учесть полные выражения (6.5) для напряжений  $V_1$  и  $V_2$ . В результате вместо (6.9) имеем:

$$\begin{aligned} \Delta F^{\pm 1} &= e/C \{e/2 \pm (V_d[C_2 + C_0] - C_0 V_g + ne)\}, \\ \Delta F^{\pm 2} &= e/C \{e/2 \pm (V_d C_1 + V_g C_0 - ne)\}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

В условие стабильности теперь войдут два напряжения  $V_d$  и  $V_g$  с линейной связью между ними. Потребовав вновь, чтобы в каждом акте туннелирования свободная энергия Гельмгольца понижалась, получим диаграмму стабильности на плоскости  $(V_d, V_g)$ . Для случая  $n=0$  она показана на Рис. 66. Залиты области диаграммы, в которых из-за кулоновской блокады стабильным (и без транспортного тока) является состояние с указанным количеством электронов на точке. На границах этих областей имеются пики кондактанса, подобные изображенным на Рис. 58.

При бесконечно малом напряжении  $V_d$  период между пиками кондактанса будет определяться соотношением  $\Delta V_g = e/C_0$ , а их ширина либо температурой, либо временем жизни электрона на точке.

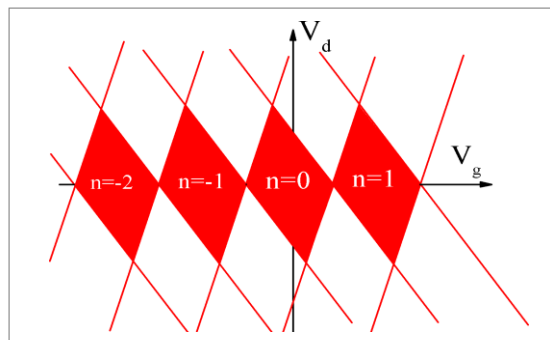


Рис. 66.

В случае конечного напряжения  $V_d$  мы будем двигаться параллельно оси абсцисс на некотором расстоянии от нее. Период пиков останется прежним, а ширина будет определяться величиной  $V_d$ .