

研究简报

半导体表面狭通道的定域态密度

叶 红 娟

(中国科学院上海技术物理研究所)

1983年10月17日收到; 1984年1月13日收到修改稿

提 要

在半导体表面的亚微米通道中, 实验上发现电导率随门电压的变化呈现出振荡结构, 本文利用格林函数方法计算了狭通道的定域态密度, 并看到它具有一系列尖峰, 因而定性地解释了电导率振荡的来源。

随着大规模集成电路的发展, 器件密集度越来越高, 这要求半导体表面工艺制备出越来越狭的通道; 目前在硅的反型层 (inversion layer) 和积累层 (accumulation layer) 上已制备出亚微米 (100—1000 Å) 的通道^[1,2], 在降低门电压时可使实际通道的宽度只有 0.01 μm , 此时宽度方向的禁闭效应 (confinement) 已显示出来, 通道的两维持性过渡为一维持性。在实验上除了观察到这种狭通道的电导率随温度的降低而下降外, 最显著的特点是在低温下, 电导率随门电压变化而振荡的现象^[3] (如图 1 所示)。

我们知道门电压的大小决定了通道中载流子的密度, 而载流子密度的变化改变了能带中电子的填充情况, 所以调节门电压实际上是改变费密面的位置。又, 电导率的数值决定于费密面附近的状态密度, 因此电导率随门电压变化而振荡的实验结果是状态密度具有振荡结构的反映。本文利用格林函数方法计算若干排原子所组成的狭通道的状态密度, 其结果呈现明显的振荡结构, 这可用来定性解释上述的实验结果。

为了反映横向的禁闭效应, 最简单的做法是利用边界条件定出横向运动的分立量子能级, 然后对每个能级再算出其一维次能带, 但这样得到的态密度的尖峰分布是不均匀的, 与实验不符, 原因是这种方法不能反映横向的晶格结构。

现在考虑 $N+1$ 排原子的准一维体系 (见图 2), 原子的行和列的指标为 $-\infty < p < +\infty$, $0 \leq n \leq N$, 电子只在相邻原子间跳跃, 其相互作用为 I , 于是哈密顿量为

$$\hat{H} = I \sum_{n,p} (a_{p,n+1}^+ a_{p,n} + a_{p+1,n}^+ a_{p,n}) + \text{c. c.} \quad (1)$$

为了求出它的能谱, 首先对同一列原子 (n 相同) 作 Fourier 变换

$$a_{p,n} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-iakp} c_{k,n},$$

则 $\hat{H}$ 变为

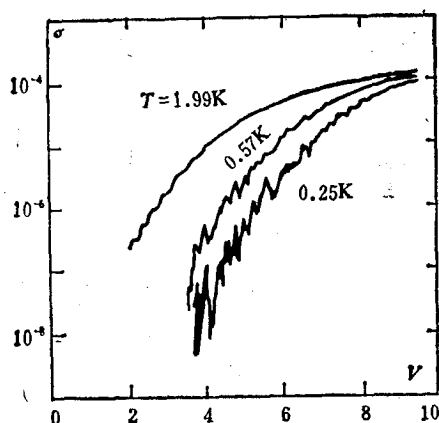


图 1

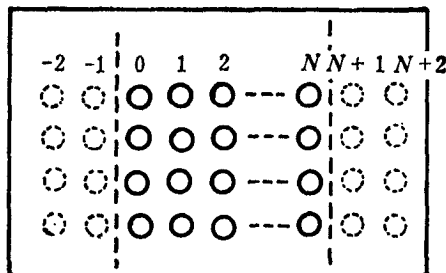


图 2 狭通道示意图

$$\hat{H} = \sum_k \sum_n (2I \cos ka \cdot c_{k,n}^{\dagger} c_{k,n} + I c_{k,n+1}^{\dagger} c_{k,n} + I c_{k,n}^{\dagger} c_{k,n+1}).$$

再对 n 加以对角化,就可得到能谱

$$E_i(k) = 2I \cos ka + A_i \quad (i = 1, \dots, N+1). \quad (1')$$

对于二排情况, $A_1 = +I$, $A_2 = -I$. 对于四排情况, $A_1 = I[(1 + \sqrt{5})/2]$, $A_2 = I[(\sqrt{5} - 1)/2]$, $A_3 = -I[(1 + \sqrt{5})/2]$, $A_4 = -I[(\sqrt{5} - 1)/2]$, 对于六排情况,……。由此能谱可算得态密度为

$$\rho(E) = \sum_{k,i} \delta[E - E_i(k)]. \quad (1'')$$

对于二、六排情况,结果如后面图 3,4 所示(注意上式算得的是各排原子态密度之和,因而需将图中各层态密度相加)。上述对角化方法虽然直接,但有个局限,只能求出各层态密度之总和,不能分别求出各层的定域态密度,(当边缘 I 与中间不一样时,边缘处可能在禁带中出现局域态)因此必须再讨论格林函数方法,它能给出各层原子的定域态密度,其总和当然是与上述结果相同。

我们将哈密顿量(1)式改写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (2)$$

其中

$$\langle l | \hat{H}_0 | l' \rangle = \begin{cases} I & l \text{ 和 } l' \text{ 为近邻,} \\ 0 & \text{其它.} \end{cases} \quad (3)$$

$$\langle 0 | \hat{V} | -1 \rangle = \langle -1 | \hat{V} | 0 \rangle = \langle N | \hat{V} | N+1 \rangle = \langle N+1 | \hat{V} | N \rangle = -I,$$

$$\hat{V} \text{ 的其它矩阵元为零.} \quad (4)$$

$\hat{H}_0$ 是大片二维晶格的哈密顿量, $\hat{V}$ 是将大片晶格在第 0 列与第 -1 列之间, 第 N 列与第 $N+1$ 列之间完全切断, 这时可将 $n < 0$ 和 $n > N$ 的部份拿走, 只剩下 $N+1$ 排原子, 因而哈密顿量(2)和(1)式完全等价^[3], 下面通过 Green 函数的计算还可直接看到(2)和(1)式的结果完全相同。

设 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{H}$ 的 Green 函数分别为 G_0 和 G , G 的 Dyson 方程为

$$G(E) = G_0(E) + G_0(E) \cdot V \cdot G(E). \quad (5)$$

在 Bloch-Wannier 混合表象中^[3],

$$G_0(n) \equiv \langle m, k_y | G_0 | m+n, k_y \rangle = \frac{i}{\mu} \left(\frac{\omega + i\mu}{2I} \right)^n, \quad (6)$$

其中

$$\omega = E - 2I \cos ak_y, \quad (7)$$

$$\mu = \begin{cases} \sqrt{4I^2 - \omega^2} & (4I^2 > \omega^2), \\ \frac{i\omega}{|\omega|} \sqrt{\omega^2 - 4I^2} & (4I^2 < \omega^2). \end{cases} \quad (8)$$

于是 Dyson 方程(5)变为

$$\begin{aligned} \langle m | G | m \rangle &= \langle m | G_0 | m \rangle + I \langle m | G_0 | 0 \rangle \langle -1 | G | m \rangle + I \langle m | G_0 | -1 \rangle \langle 0 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle m | G_0 | N \rangle \langle N+1 | G | m \rangle + I \langle m | G_0 | N+1 \rangle \langle N | G | m \rangle, \\ \langle N | G | m \rangle &= \langle N | G_0 | m \rangle + I \langle N | G_0 | 0 \rangle \langle -1 | G | m \rangle + I \langle N | G_0 | -1 \rangle \langle 0 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle N | G_0 | N \rangle \langle N+1 | G | m \rangle + I \langle N | G_0 | N+1 \rangle \langle N | G | m \rangle, \\ \langle 0 | G | m \rangle &= \langle 0 | G_0 | m \rangle + I \langle 0 | G_0 | 0 \rangle \langle -1 | G | m \rangle + I \langle 0 | G_0 | -1 \rangle \langle 0 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle 0 | G_0 | N \rangle \langle N+1 | G | m \rangle + I \langle 0 | G_0 | N+1 \rangle \langle N | G | m \rangle, \\ \langle -1 | G | m \rangle &= \langle -1 | G_0 | m \rangle + I \langle -1 | G_0 | 0 \rangle \langle -1 | G | m \rangle + I \langle -1 | G_0 | -1 \rangle \langle 0 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle -1 | G_0 | N \rangle \langle N+1 | G | m \rangle + I \langle -1 | G_0 | N+1 \rangle \langle N | G | m \rangle, \\ \langle N+1 | G | m \rangle &= \langle N+1 | G_0 | m \rangle + I \langle N+1 | G_0 | 0 \rangle \langle -1 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle N+1 | G_0 | -1 \rangle \langle 0 | G | m \rangle + I \langle N+1 | G_0 | N \rangle \langle N+1 | G | m \rangle \\ &\quad + I \langle N+1 | G_0 | N+1 \rangle \langle N | G | m \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

解上述联立方程,可得各 $\langle m' | G | m \rangle$, 其中特别是 $\langle -1 | G | m \rangle = 0, \langle N+1 | G | m \rangle = 0$, 实际上因为第 -1 和 $N+1$ 列已和狭通道相互隔离, 此结果是必然的, 限于篇幅, 我们只写出对以后计算定域态密度有用的 $\langle m | G | m \rangle$ 项,

$$\begin{aligned} \langle m | G | m \rangle &= G_0(0) - I G_0(m+1) \frac{G_0(m)[1 + I G_0(1)] - I G_0(N+1) G_0(N-m)}{[1 + I G_0(1)]^2 - I^2 G_0^2(N+1)} \\ &\quad - I G_0(N+1-m) \frac{G_0(N-m)[1 + I G_0(1)] - I G_0(N+1) G_0(m)}{[1 + I G_0(1)]^2 - I^2 G_0^2(N+1)}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $G_0(m)$ 是 $\langle m | G_0 | m \rangle$ 的简写.

由其极点可得到 $N+1$ 排原子体系的能谱, 不难验证, 它和(1')式完全相同, 于是第 m 排的定域态密度 $\rho_m(E)$ 为

$$\rho_m(E) = \frac{a}{2\pi^2} I_m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \langle m | G | m \rangle dk_y. \quad (11)$$

总的态密度为 $\rho(E) = \sum_m \rho_m(E)$. 它与对角化方法得的结果(1'')式相同.

如果狭通道的宽度只有二排原子(0,1), 则

$$\rho_0(E) = \rho_1(E) = (0.50/\pi) \{ [4I^2 - (E+I)^2]^{-\frac{1}{2}} + [4I^2 - (E-I)^2]^{-\frac{1}{2}} \}.$$

狭通道宽度为二排原子时的定域态密度如图 3 所示.

如果狭通道的宽度只有六排原子(0,1,2,3,4,5), 则

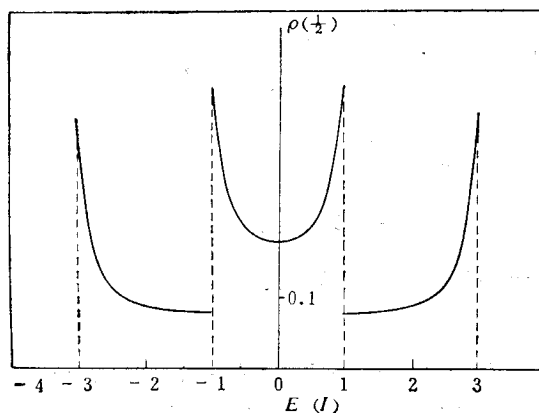


图 3

$$\rho = \rho_0 = \rho_1$$

$$-1.25I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.25I)^2]^{-1/2} + (0.054/\pi)\{[4I^2 - (E - 0.445I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 0.445I)^2]^{-1/2}\},$$

$$\rho_2(E) = \rho_3(E) = (0.175/\pi)\{[4I^2 - (E - 0.445I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 0.445I)^2]^{-1/2}\} + (0.271/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.80I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.80I)^2]^{-1/2}\} + (0.054/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.25I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.25I)^2]^{-1/2}\}.$$

狭通道宽度为六排原子时的定域态密度如图 4 所示.

从以上各式可见狭通道中各排原子的定域态密度有许多峰值,这是一维态密度的特征,为了计算和图示的简明,我们只列出二排和六排的结果,不难看出在一般情况下当通

$$\rho_0(E) = \rho_1(E) = (0.054/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.80I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.80I)^2]^{-1/2}\} + (0.174/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.25I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.25I)^2]^{-1/2}\} + (0.272/\pi)\{[4I^2 - (E - 0.445I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 0.445I)^2]^{-1/2}\},$$

$$\rho_1(E) = \rho_4(E) = (0.175/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.80I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.80I)^2]^{-1/2}\} + (0.271/\pi)\{[4I^2 - (E - 1.25I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 1.25I)^2]^{-1/2}\} + (0.054/\pi)\{[4I^2 - (E - 0.445I)^2]^{-1/2} + [4I^2 - (E + 0.445I)^2]^{-1/2}\},$$

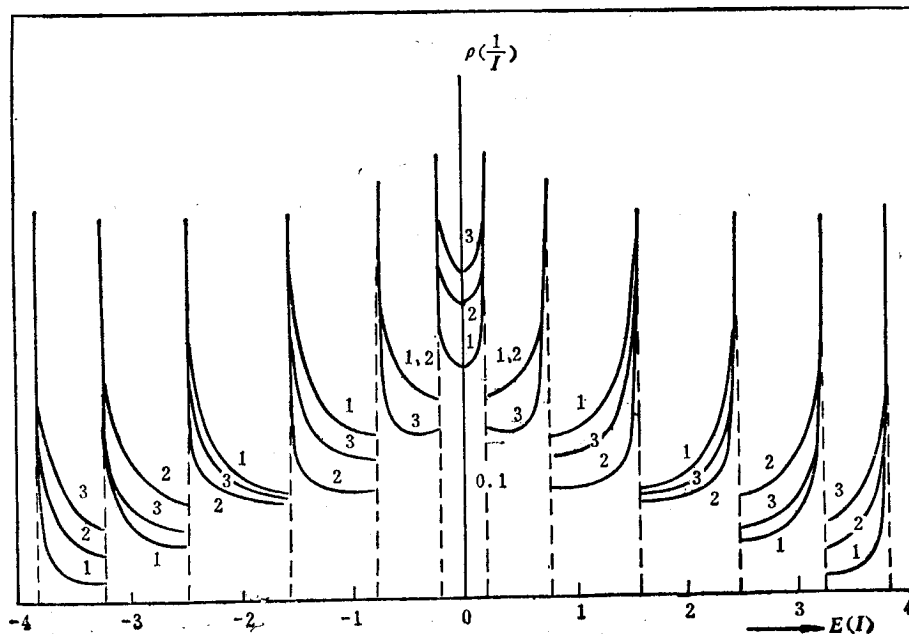


图 4

1 为 $\rho_0 = \rho_1$; 2 为 $\rho_1 = \rho_4$; 3 为 $\rho_2 = \rho_3$

道含有 N 排原子时, 其态密度具有 $2N$ 个尖峰, 在计算中还看到各排原子态密度的峰值位置相同, 也就是说狭通道的总的态密度也在这些能量位置上有峰值, 同时峰值的分布大致是均匀的, 这就解释了图 1 所示的实验结果: 随着门电压提高, 通道中载流子密度也提高, 费密面的位置在变化时将经过这些峰值, 因而电导率就出现了振荡。

我们可以进一步作出数量级的估计来与实验结果相比较, 对于数百埃的狭通道, 其原子的排数 N 为 10^2 , 相邻原子间的相互作用 I 决定于相邻原子波函数之间的交叠, 其数量级为 10^{-2} eV, 根据前面计算, 状态密度中两个峰值之间的能量间隔为 $\Delta E \sim 8I/2N \sim 4 \times 10^{-3}$ eV. 当温度升高时费密面将逐渐变宽, 其宽度为 kT , 于是温度为 T 时费密面附近状态密度, 将是绝对零度时的状态密度在 kT 能量范围内的平均值, 经此平均后原来的峰谷将逐渐平缓, 最后当 $kT \sim \Delta E$ 时, 平均状态密度不再具有峰谷, 电导率的振荡结构也将随之消失, 因此从我们的计算得到, 电导率振荡结构消失的温度为 $T_0 \sim \Delta E/k \sim 4$ K.

图 1 中的实验曲线显示出, 在 $T = 0.25$ K 时, 振荡结构很显著, 随着温度的升高, 振荡逐渐变小, 当 $T = 1.99$ K 时振荡效应已经很小, 可以预料温度若再升高一、两度时振荡将消失, 这与本文的计算相一致。

本文的计算只是定性地说明了电导率振荡的物理原因, 现在还难作出定量的分析, 一方面目前的实验还不能确定振荡的精细结构和通道的准确宽度, 另一方面理论上的定量计算需要考虑定域化对跳跃几率的影响以及电子间的相互作用, 这些有待于进一步研究。

参 考 文 献

- [1] A. B. Fowler *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **48**(1982), 196.
- [2] W. J. Skocpol *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **49**(1982), 951; *Bull. Amer. Phys. Soc.*, **28**(1983), 276.
- [3] D. Kalkstein and P. Soven, *Sur. Sci.*, **26**(1971), 85.

THE LOCAL DENSITY OF STATES FOR THE NARROW CHANNELS OF THE SEMICONDUCTOR SURFACE

YE HONG-JUAN

(Shanghai Institute of Technical Physics)

ABSTRACT

In the sub-micron channels of semiconductor surface, it has been found that the conductivity has oscillation structure with gate voltage. We calculate the local density of states for the narrow channel by using Green function method and see that the density of states shows a series of sharp peaks, which can be used to explain qualitatively the conductivity oscillation.