

О температурной зависимости аномальных особенностей кондактанса и термоЭДС в квантовых точечных контактах

О. А. Ткаченко¹⁾, В. А. Ткаченко

Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 11 сентября 2012 г.

После переработки 29 октября 2012 г.

В рамках подхода Ландауэра показано, что наличие 0.7-особенности кондактанса баллистического микроконтакта и соответствующего плато термоЭДС означает пиннинг высоты потенциального барьера на глубине $k_B T$ под уровнем Ферми. Предложен простой способ учета влияния электрон-электронного взаимодействия на форму и температурную зависимость одномерного плавного потенциального барьера в нижней подзоне микроконтакта. Вычисленные зависимости кондактанса и коэффициента Зеебека соответствуют экспериментальным затворным характеристикам, включая появление аномальных плато с ростом температуры.

Квантование кондактанса субмикронных сужений в двумерном электронном газе [1] хорошо описывается формулой Ландауэра в предположении спинового вырождения одночастичных одномерных подзон в нулевом магнитном поле [2–5]. В том же подходе, в соответствии с формулой Мотта, $S \propto \partial \ln G(V_g, T) / \partial V_g$, объясняется чередование нулевых плато и пиков термоЭДС (коэффициента Зеебека S) [6, 7]. Однако на затворной зависимости кондактанса $G(V_g)$ имеется небольшая область аномального поведения – плато $0.7 \cdot 2e^2/h$ [8]. Оно разрабатывается с ростом температуры [8–12], может отсутствовать в пределе $T \rightarrow 0$ [9, 10, 12], но сохраняется при полном тепловом размывании ступеней квантования кондактанса [13, 10, 11]. С 0.7-особенностью кондактанса тесно связано аномальное плато термоЭДС $S \neq 0$ [13], что означает нарушение формулы Мотта. В [14, 15] можно найти десятки ссылок на работы с попытками объяснения 0.7-особенности. Предложено множество трактовок, в том числе спиновая поляризация, эффект Кондо, вигнеровский кристалл, волна зарядовой плотности, формирование квазилокализованного состояния. Расчеты, дающие необычное температурное поведение 0.7-особенности кондактанса, проведены пока только в подгоночных феноменологических моделях со спиновыми подзонами [16] либо за рамками формулы Ландауэра [14]. Хотя остается неясным конкретный механизм появления аномальных плато кондактанса и термоЭДС, их общей причиной признается электрон-электронное взаимодействие, которое сильнее всего должно проявляться на пороге заполнения первой подзоны, где электронная система является одномерной.

В данной работе мы исходим из стандартного подхода Ландауэра к описанию кондактанса и термоЭДС [6] одномодового сужения при спиновом вырождении:

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} \int_0^\infty D(E, U(x, V_g)) F(\epsilon) dE, \\ S &= -\frac{2ek_B}{hG} \int_0^\infty D(E, U(x, V_g)) \epsilon F(\epsilon) dE, \end{aligned} \quad (1)$$

где D – коэффициент прохождения, E – энергия баллистических электронов, $U(x, V_g)$ – эффективный одномерный отражающий барьер, $\epsilon = (E - E_F)/k_B T$, $F(\epsilon) = 4k_B T \text{ch}^{-2}(\epsilon/2)$ – производная по $-E$ от функции распределения Ферми. Взаимодействие учитывается в (1) через T -зависимый потенциал $U(x, V_g)$. Сначала мы показываем, что наблюдение 0.7-особенности означает пиннинг высоты плавного потенциального барьера в микроконтакте на глубине $k_B T$ под уровнем Ферми E_F и что этот же пиннинг дает плато $S \neq 0$. Далее, по аналогии с учетом фриделевских осцилляций (ФО), окружающих дельта-барьер в одномерном электронном газе [17], предлагается простая формула, которая сводит T -зависимую часть поправки к потенциалу от взаимодействия к температурной зависимости одномерной электронной плотности. Расчет кондактанса и коэффициента Зеебека для поправленного потенциала дает поведение, которое соответствует опубликованным в [8–13] экспериментальным результатам.

Если барьер $U(x)$ в одномерном канале достаточно широк (расчеты трехмерной электростатики затворно-управляемых сужений показывают [4], что полуширина барьера $\gtrsim 200$ нм), то ступень на зависимости коэффициента прохождения $D(E)$ является резкой и соответствующий переход по энергии E

¹⁾ e-mail: oatkach@gmail.com

много уже, чем характерные $k_B T$, при которых наблюдается 0.7-плато. Тогда из (1) следует

$$G = \frac{2e^2}{h}(1 + e^{-\eta})^{-1}, \quad (2)$$

$$S = -\frac{k_B}{e}[(1 + e^{-\eta}) \ln(1 + e^\eta) - \eta],$$

где $\eta = (E_F - U)/k_B T$, $U = U(x=0)$ – высота барьера $U(x, T, V_g)$. Видно, что зависимости $G(E_F - U)$ при разных T представляют собой просто плавные ступени единичной высоты, на которых есть фиксированная общая точка $G = e^2/h$. При этом значения $G \approx 0.7 \cdot 2e^2/h$ ничем не выделены, кроме того, что для них $\eta \approx 1$. Однако в экспериментах при этих значениях возникает плато $G(V_g)$, что означает пиннинг $U(V_g)$ на глубине $k_B T$ под уровнем Ферми (рис. 1). Исходя из (2) можно ожидать, что выявленный пин-

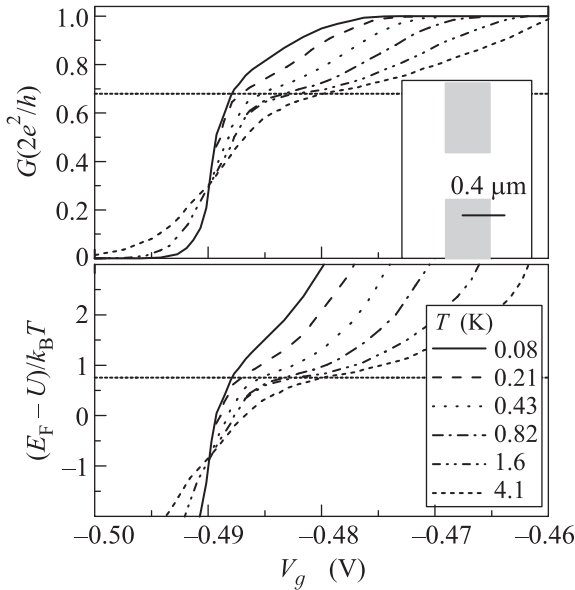


Рис. 1. Результат применения (2) к экспериментальным зависимостям $G(V_g)$. Вверху – исходные данные из [10] для структуры с расщепленным металлическим затвором. Внизу – найденные зависимости $\eta = [E_F - U(V_g)]/k_B T$. Горизонтальным пунктиром отмечено положение аномальных особенностей в G и η

нинг даст на зависимости $S(V_g)$ плато $S \approx -0.8k_B/e$. Проверка одинаковости η в G и S на конкретном эксперименте вынесена в [18].

Указанный пиннинг кажется парадоксальным и заставляет думать, что баллистический пробный электрон, попадая из резервуара в центр барьера, “видит” потенциал $U(T, V_g)$, который отличается от потенциала $V(T, V_g)$, самосогласованного с электронной плотностью. Действительно, по аналогии с прежними расчетами [4, 5] мы рассчитали

3D-электростатику одномоновых сужений, используя разные способы самосогласования потенциала и электронной плотности с учетом [19] и без учета обмена и корреляций в локальном приближении. Эти расчеты показали вполне ясный результат: одномерная концентрация электронов в центре барьера n_c почти не зависит от T и линейно зависит от V_g , начиная с малой n_{c0} , т.е. при $G \geq e^2/h$ соблюдается постоянство электрической емкости затвор–сужение [4, 18]. Кроме того, поскольку плотность состояний положительна, $d(E_F - V)/dn_c > 0$ и зависимость высоты самосогласованного барьера $V(V_g)$ не дает пиннинга, даже если учтены обменно-корреляционные поправки в локальном приближении. Поэтому мы полагаем, что выявленный пиннинг высоты отражающего барьера возникает в результате нелокального взаимодействия.

В физике атома, поверхности металла и туннельного зазора между двумя металлами давно известно, что потенциал, который “видит” пробный электрон в области малой плотности, отличается от самосогласованного потенциала, найденного с учетом взаимодействия в локальном приближении [20]. Подобное отличие было отнесено к нелокальному обмену и корреляциям, т.е. к притяжению электрона к обменно-корреляционной дырке, которая осталась в области большой плотности [21]. На данный момент отсутствует рассмотрение этого явления применительно к квантовому точечному контакту, хотя аналогия между двумя металлическими пластинами, разделенными туннельным промежутком и резервуарами с двумерным электронным газом, разделенными потенциальным барьером, является очевидной. Мы думаем, что баллистический электрон, попадая в область барьера, где плотность n_c мала, разделяется со своей обменно-корреляционной дыркой, которая находится в области плотного электронного газа. В результате локальное описание поправки к потенциалу теряет работоспособность. Хотя дырка имеет сложную форму, ей можно приписать эффективный центр. Тогда понижение потенциала для баллистического электрона в центре барьера будет составлять $U - V \approx -\gamma e^2/(4\pi\epsilon\epsilon_0 r)$, где r – дистанция между центрами барьера и дырки, $\gamma \lesssim 1$ учитывает форму дырки и слабо зависит от r . В рамках теории возмущений мы интересуемся малой (т.е. T -зависимой) частью поправки:

$$\delta U \approx -[e^2/(4\pi\epsilon\epsilon_0)]\gamma[r(T)^{-1} - r(0)^{-1}], \quad (3)$$

а поправка для $T = 0$ предполагается включенной в независимую переменную – исходный барьер $U_0(x)$. Очевидно, что r падает с ростом n_c , до тех пор пока

электрон и дырка не сольются и в центре барьера не станет справедливым локальное приближение для поправки взаимодействия. Исходя из этой тенденции и малости T -зависимой поправки можно считать, что $\gamma[r(T)^{-1} - r(0)^{-1}] \approx [n_c(T) - n_c(0)]/(r^*n_c^*)$, где $n_c(T)$, $n_c(0)$ определяются по теории возмущений одночастичными волновыми функциями в барьере $U_0(x)$. В некотором интервале высот этого барьера можно также пренебречь изменением феноменологического положительного параметра $\gamma r^*n_c^*$. С учетом этих допущений с формальной точки зрения выражение (3) является частным случаем поправки взаимодействия в локальном приближении $\delta U(x) \propto -\alpha \Delta n(x)$, где $\Delta n(x)$ есть фриделевские осцилляции плотности. К данной поправке сводится расчет прохождения через дельта-барьер в одномерной электронной системе [17], когда $\alpha = \alpha(0) - \alpha(2k_F)$ есть результат конкуренции обменного ($\alpha(0)$) и прямого ($\alpha(2k_F)$) вкладов во взаимодействие. Аналогичная поправка использовалась для моделирования многомоновых сужений [20]. Мы можем попробовать распространить действие подобной поправки с изменением смысла α на всю первую подзону сужения, включая вершину плавного барьера.

Чтобы найти такую поправку по теории возмущений, мы сначала вычисляем полный набор волновых функций $|\Psi(x, E)|^2$ для исходного плавного барьера $U_0(x)$ и находим электронную плотность $n(x)$ при заданной температуре:

$$n = \frac{1}{2\pi b} \int_0^\infty \frac{dE}{(EE_0)^{1/2}} \frac{|\psi_L(x, E)|^2 + |\psi_R(x, E)|^2}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}}, \quad (4)$$

где $E_0 = \hbar^2/2m^*b^2$, $b = 1$ нм – единица длины, $m^* = 0.067m_e$ – эффективная масса электрона, $\psi_L(x, E)$, $\psi_R(x, E)$ – волновые функции, отвечающие падению на барьер слева и справа. Амплитуда падающей волны полагалась равной 1. Исходный потенциал задавался в виде $U_0(x) = V_0/\text{ch}^2(x/a)$. Такой потенциал хорошо подходит для моделирования коротких баллистических каналов, включая выходы в двумерные резервуары [3, 4]. Этот потенциал не дает никаких особенностей коэффициента прохождения $D(E)$, кроме ступени единичной высоты [23]. Значения параметров брались типичными для баллистических сужений в двумерном электронном газе на основе GaAs/AlGaAs. Вычисленная зависимость $n(x, T)$ приведена в [18]. С позиций анализа следствий (2) и (3) основной интерес представляет зависимость электронной плотности n_c в центре барьера от его исходной высоты V_0 при разных T (рис. 2). На этом рисунке хорошо видны детали T -зависимого поведения n_c и Δn_c , когда независимой переменной

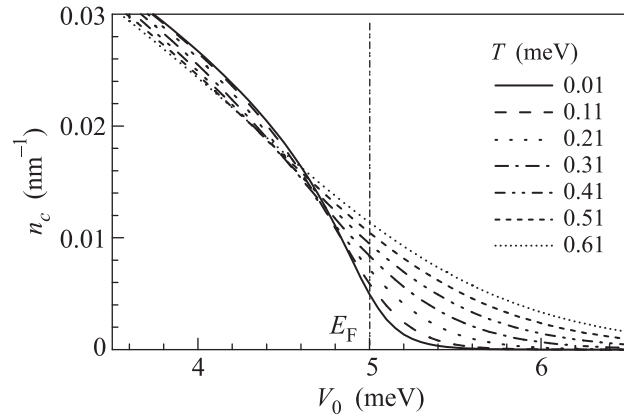


Рис. 2. Вычисленная из (4) зависимость электронной плотности n_c в центре барьера от его исходной высоты V_0 в случае исходного потенциала $U_0(x) = V_0/\text{ch}^2(x/a)$ при параметрах $a = 200$ нм и $E_F = 5$ мэВ

является $U_0(x)$. В эксперименте, наоборот, независимо меняется затворное напряжение V_g и по условиям электростатики выше некоторого малого n_{c0} имеется линейная связь между n_c и V_g , а температурной зависимостью $n_c(V_g)$ можно пренебречь. Согласно рис. 2 эта коллизия разрешается, если считать, что при фиксированных n_c или V_g величина V_0 в действительности является T -зависимой. Связь между V_g и высотой исходного потенциального барьера V_0 опосредована волновыми функциями электронов и распределением Ферми. Эта связь и рассмотренные $n(x, T)$ в первом приближении по теории возмущений не зависят от взаимодействия. Однако они в нем проявляются. T -зависимая часть поправки взаимодействия к исходному $U_0(x)$ вычислялась по феноменологической формуле, которая объединяет (3) и учет ФО в одномерном электронном газе [17]:

$$\delta U(x) = -\alpha \hbar v_F [n(x, E_F, T) - n_0(x, E_F)], \quad (5)$$

где $\alpha = \text{const} > 0$, $(\hbar v_F)^{-1}$ – одномерная плотность состояний вдали от барьера, $n_0(x = 0) = n_c(T = 0)$, $n_0(x \neq 0) = \langle n(x, T = 0) \rangle$ – усредненная по ФО плотность. На рис. 3 показан поправленный взаимодействием потенциал $U(x)$ при разных V_0 и T . При высоких V_0 и низких T проникновение падающего электрона в классически запрещенную область барьера оказывается очень низким, а температурное возмущение электронной плотности внутри барьера несущественно. Поэтому высота барьера практически не меняется. При $V_0 = E_F$ с ростом T происходит значительное понижение вершины барьера $U(x)$. При фиксированных $V_0 < E_F$ барьер $U(x)$ повышается с ростом T , что противоположно его поведению при $V_0 \geq E_F$. Более детально поведение высоты U

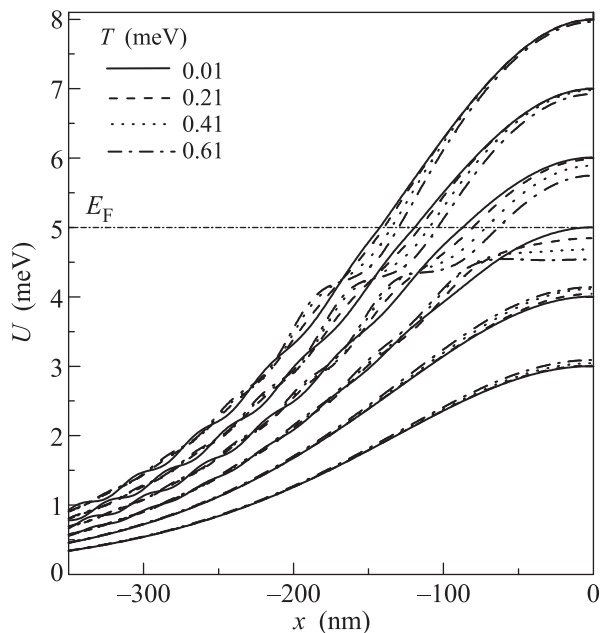


Рис. 3. Потенциал $U_0 + \delta U(V_0, T)$, вычисленный из (5) для $\alpha = 0.2$ в случае $U_0(x) = V_0/\text{ch}^2(x/a)$, $a = 200$ нм и $V_0 = 3, 4, 5, 6, 7, 8$ мэВ

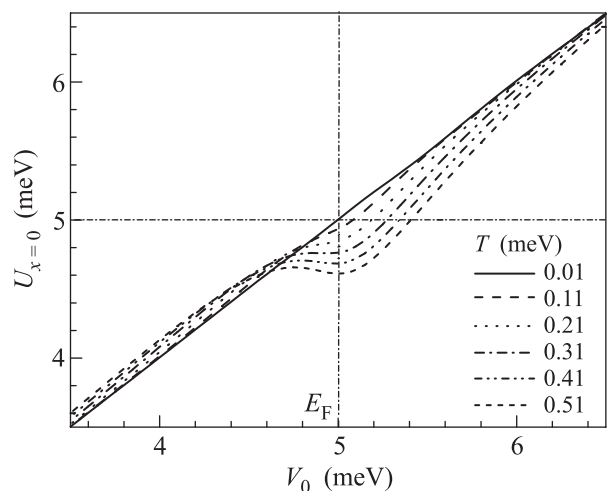


Рис. 4. Зависимость высоты поправленного барьера от высоты исходного барьера V_0 при тех же параметрах, что и для предыдущего рисунка

барьера $U(x)$ показано на рис. 4. Видно, что U теряет зависимость от V_0 вблизи E_F . Ниже E_F возникает плато. Оно расширяется и углубляется с ростом T . Относительная поправка $\Delta U(x)/V_0$ при указанных параметрах достигает 10%. Это недалеко от предельного значения для изучаемого приближения, по смыслу которого поправка должна быть малой. Этим ограничен рост T и α в модели. Рисунок 4 вместе с формулой (2) позволяет на качественном уровне понять развитие 0.7-особенности кондактанса и плато

термоЭДС с ростом температуры. Видно, что высота U температурно-зависимого барьера вблизи E_F стабилизируется ниже E_F на величину, близкую к T . Результат расчета $G(V_0, T)$ по формуле (1) для потенциалов с рис. 3 рассмотрен в [18]. В плане сравнения с экспериментом интерес представляют соответствующие зависимости от электронной плотности в центре барьера n_c . Они приведены на рис. 5. Видно, что с

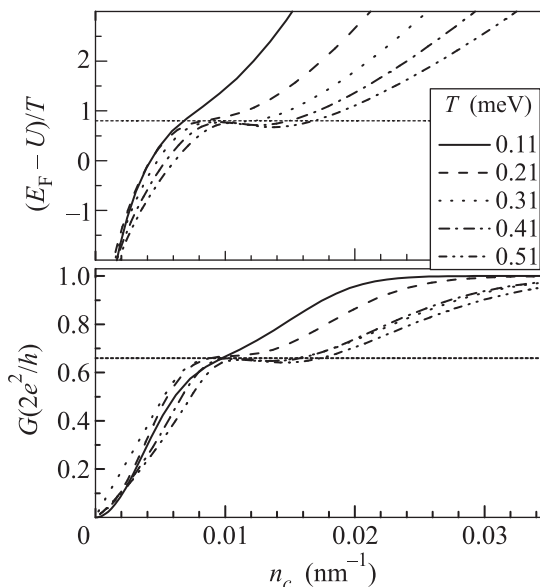


Рис. 5. Вверху – рассчитанная зависимость $\eta(n_c) = (E_F - U)/k_B T$ в случае $E_F = 5$ мэВ, параметра взаимодействия $\alpha = 0.2$ и исходного потенциала $U_0(x) = V_0/\text{ch}^2(x/a)$ с $a = 200$ нм. Внизу – вычисленный кондактанс одномерного канала с поправленным потенциалом в зависимости от n_c

ростом температуры формируются и становятся выраженными ступени в параметре $\eta = (E_F - U)/k_B T$ и в кондактансе. Их форма получилась почти такой же, как в экспериментах (см. рис. 1 и [18]). С точностью до небольших вариаций затворной емкости ширины плато по n_c на рис. 5 и по V_g в разных экспериментах [8–12] согласуются [18]. В нашей модели много упрощений. Поэтому детальная подгонка рассчитанных кривых под экспериментальные данные едва ли уместна. Например, проверено, что приближение (2) при расчете кондактанса вполне заменяет более общую формулу (1) (кроме случая самой низкой $k_B T$). Таким образом, найденный эффект не связан с деталями формы барьера $U(x)$, а вызван лишь зависимостью разности $E_F - U$ от n_c , т.е. важна поправка $\delta U(T)$ в центре барьера, где предположительно работает (3) и дает знак $\alpha > 0$. Найти α из теоретических соображений трудно. Однако сходство экспериментальных и расчетных кривых сохра-

няется при изменении α в пределах 50%. Заметим, что эффективному $\alpha = 0.2$ соответствует значение $r^*n_c^* \approx 1.5$, т.е. дистанция r между пробным электроном в центре барьера и обменно-корреляционной дыркой составляет $1.5\gamma/n_c$. Исходя из характерных значений $n_c \sim 0.01 \text{ нм}^{-1}$ (см. рис. 2 и 5) условия перехода от (3) к (5) можно считать выполненными.

Из (4), (5) и (1) нами была вычислена зависимость коэффициента Зеебека от E_F и T (рис. 6). В данном

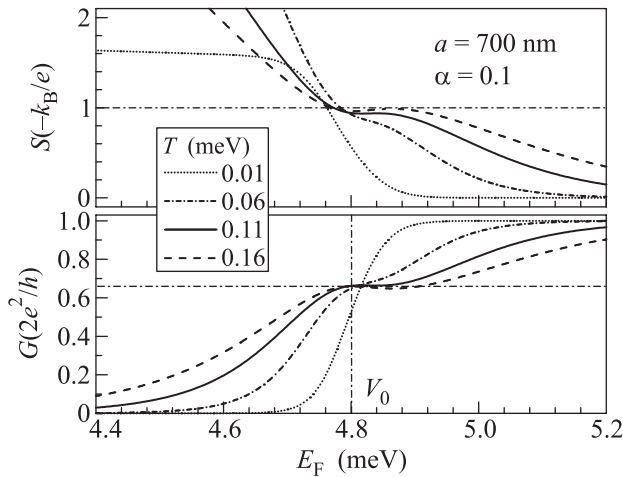


Рис. 6. Вычисленные коэффициент Зеебека и кондактанс как функция E_F при фиксированном V_0 для одномерного канала (параметры указаны на рисунке)

случае полуширина барьера бралась большей, а коэффициент α – меньшим, чем прежде. В согласии с анализом в рамках (2) и подобно эксперименту [13] в $S(E_F)$ имеется аномальная ступень высотой 0.9–1.0 от $-k_B/e$. Хорошо видно, как эта ступень формируется с ростом T одновременно с 0.7-особенностью кондактанса. Заметим, что экспериментально такой совместной температурной эволюции [18] пока не наблюдалось. Поэтому для дополнительной проверки предложенной модели предлагается поставить соответствующий эксперимент.

Итак, в данной работе в рамках подхода Ландауэра при спиновом вырождении предложена простая трактовка аномальных плато кондактанса и термоЭДС одномерных баллистических каналов. Ключевыми моментами трактовки являются пиннинг высоты эффективного одномерного барьера U на глубине $k_B T$ под уровнем Ферми при изменении одномерной плотности в центре барьера или затворного напряжения, а также учет всех (локальных и нелокальных) T -зависимых поправок взаимодействия посредством феноменологической формулы (5).

Работа выполнялась при поддержке Программы #24 Президиума РАН и Интеграционного проекта ИП130 СО РАН. Авторы благодарят З. Д. Квона, М. В.

Буданцева, А. П. Дмитриева и И. В. Горного за полезные обсуждения.

1. B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker et al., Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988); D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury et al., J. Phys. C **21**, L209 (1988).
2. L. I. Glazman, G. B. Lesovik, D. E. Khmel'nitskii, and R. I. Shekhter, JETP Lett. **48**, 238 (1988).
3. M. Büttiker, Phys. Rev. B **41**, 7906 (1990).
4. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheyev et al., J. Appl. Phys. **89**, 4993 (2001).
5. C.-T. Liang, O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko et al., Phys. Rev. B **70**, 195324 (2004).
6. H. van Houten, L. W. Molenkamp, C. W. J. Beenaker, and C. T. Foxon, Semicond. Sci. Technol. B **7**, 215 (1992).
7. A. M. Lunde and K. Flensberg, J. Phys.: Condens. Matter **17**, 3879 (2005).
8. K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Pepper et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 135 (1996).
9. A. Kristensen, H. Bruus, A. E. Hansen et al., Phys. Rev. B **62**, 10950 (2000); cond-mat/9808007.
10. S. M. Cronenwett, H. J. Lynch, D. Goldhaber-Gordon et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 226805 (2002).
11. K. M. Liu, V. Umansky, and S. Y. Hsu, Phys. Rev. B **81**, 235316 (2010).
12. Y. Komijani, M. Csontos, I. Shorubalko et al., EPL **91**, 67010 (2010).
13. N. J. Appleyard, J. T. Nicholls, M. Pepper et al., Phys. Rev. B **62**, 16275(R) (2000).
14. C. Sloggett, A. I. Milstein, and O. P. Sushkov, Eur. Phys. J. B **61**, 427 (2008).
15. A. P. Micolich, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 443201 (2011).
16. H. Bruus, V. V. Cheianov, and K. Flensberg, Physica E **10**, 97 (2001); D. J. Reilly, Phys. Rev. B **72**, 033309, (2005).
17. D. Yue, L. I. Glazman, and K. A. Matveev, Phys. Rev. B **49**, 1966 (1994).
18. See Supplemental Material at [URL to be inserted by publisher].
19. D. Schmerek and W. Hansen, Phys. Rev. B **60**, 4485 (1999).
20. J. Bardeen, Phys. Rev. **49**, 653 (1936); R. Latter, Phys. Rev. **99**, 510 (1955); S. Ossicini and C. M. Bertoni, Phys. Rev. B **35**, 848 (1987).
21. O. Gunnarsson, M. Jonson, and B. I. Lundqvist, Phys. Rev. B **20**, 3136 (1979).
22. V. T. Renard, O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 186801 (2008).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1974.