

電子トラップ起因の近藤効果による、 バリスティック伝導の電流ばらつき

(株)東芝研究開発センター
LSI基盤技術ラボラトリー

棚本哲史

共同研究者:内田建、藤田忍

Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

はじめに一問題設定

($L_g \leq 10\text{nm}$)

■ Si MOSFETの微細化

- バリステック領域
- high-k 材料導入などによる避けられない**トラップ準位**

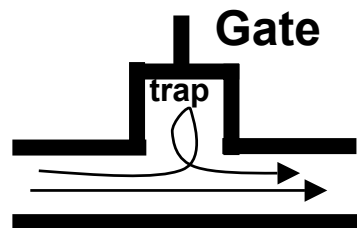
⇒ **問題: バリステック領域におけるトラップの効果**

.....主に物理的解析に役立つ方法.....低温での振舞い

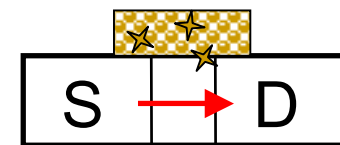
■ トラップはバリステック伝導をどう変えるか?

- **局在した電子**とチャネル電子の間の**干渉効果**

⇒ 電気伝導度に現れる**“窪み”**
(*Fano-Kondo*効果)



⇒ **Fano-Kondo効果: 電流ばらつき**
: 解析式の提案

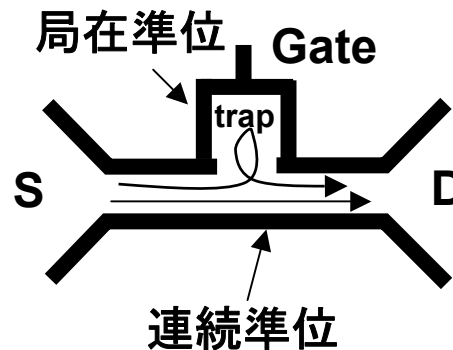


No scattering

ファノ近藤効果とは？

■ ファノ効果とは

- 離散準位と連続準位があるとき、量子力学的な共鳴と干渉が同時に起こる結果、連続準位が離散準位の影響を受け、透過確率が非対称な形状となる現象を指す。



例えば東京大学物性研究所、家・勝本研究室のホームページを参照

http://kats.issp.u-tokyo.ac.jp/kobayashi/fano/fano_effect.htm

近藤効果とは

■ 近藤効果

- 通常、金属の電気抵抗はフォノンの効果により温度を下げると T^5 で単調減少するのであるが、磁性不純物を少量含んだ金属では、電気抵抗に極小が見られる。
- 1964年に近藤淳先生が、伝導電子(連続準位)が磁性不純物(局在準位)の持つスピンによってスピン交換散乱を起こすために生じることを明らかにした。

(*)産総研の下記のホームページを参照

http://www.aist.go.jp/aist_j/information/result/1965_002/index.html

- 最近では量子ドット系の問題として脚光を浴びる

例えば、慶応大学江藤幹雄先生のホームページを参照

<http://www.phys.keio.ac.jp/faculty/eto/Eto-text05b.pdf>

ファノ近藤(Fano-Kondo)効果: 従来例

Quantum dot & Quantum Wire

- (理論): Kang et al. Phys. Rev. B 63, p113304 (2001)

- 電気伝導度に窪み

$$G = \frac{2e^2}{h} \cos\left(\frac{\pi}{2} n_d\right) \cdots n_d \approx 1 \text{ (Kondo limit)} \quad \text{Long QW}$$

- (実験): Sato et al, Phys. Rev. Lett. 95, 066801 (2005).

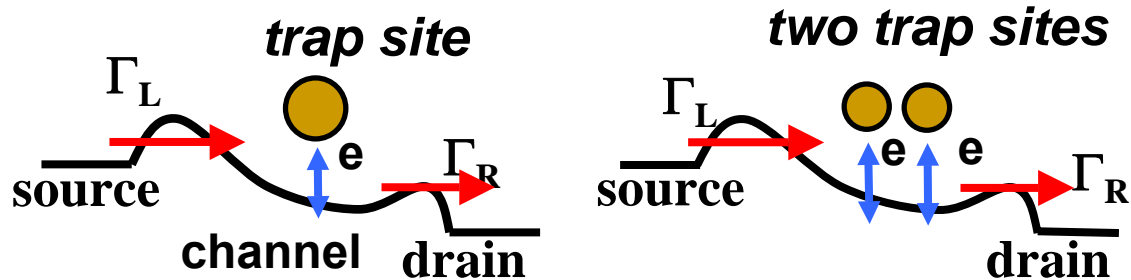
- GaAs/AlGaAs系で電気伝導度に窪み

- ファノ近藤効果は予測された温度依存性から、確かめられた

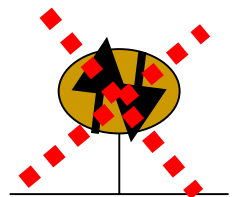
このままではゲート長の短いバリスティックTrに適用できない: 電極との相互作用

目的

- **ファノ近藤効果がバリスティック領域** で発現することを理論的に示し **電流/電気伝導度の公式**を導く。



- チャネルとS/Dとの結合をトンネリング確率 Γ_L, Γ_R で表す
- 電流/電気伝導度は Keldysh Green関数法を用いる
- **Slave-boson 平均場近似 (SBMFA)**
 - **トラップ準位内には強いクーロン相互作用=> 二重占有禁止**



Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

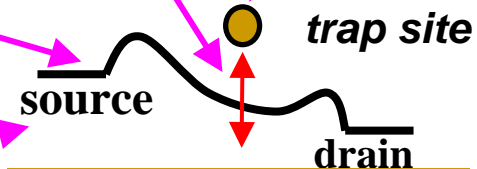
モデル

■ Hamiltonian: (Anderson Model)

$$H_{\text{chan}}^{(I)} = \sum_{ks} E_k c_{ks}^+ c_{ks} + \varepsilon_f \tilde{d}_s^+ \tilde{d}_s + \sum_{ks} [V_d \tilde{d}_s^+ c_{ks} + \text{h.c.}] + U \tilde{d}_\uparrow^+ \tilde{d}_\uparrow \tilde{d}_\downarrow^+ \tilde{d}_\downarrow$$

$$H_{\text{tran}} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k_1 k_2 s} (t_{k_1 k_2}^\alpha c_{k_1 s}^+ f_{k_2 s}^\alpha + \text{h.c.})$$

$$H_{\text{elec}} = \sum_{ks} (E_{kL} f_{ks}^{L+} f_{ks}^L + E_{kR} f_{ks}^{R+} f_{ks}^R)$$



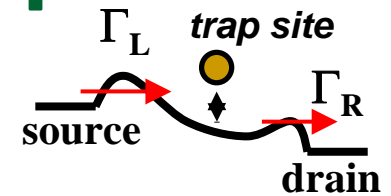
One trap モデル

■ 問題はトラップのクーロン相互作用

- 対角化は容易ではない
- $H_{\text{chan}}^{(I)}$ の厳密解は存在するが扱いにくい

Bosonの導入により二次形式にする: つまり対角化可能にする

モデル- Slave-boson 法とは？



One trap モデル

■ Slave-boson 法

□ D. M. Newns and N. Read, Adv. Phys. 36, 799 (1987)

□ 量子ドットの問題などによく適用

□ 電子がない⇒Boson がいる

■ Boson演算子(vacancy)の導入

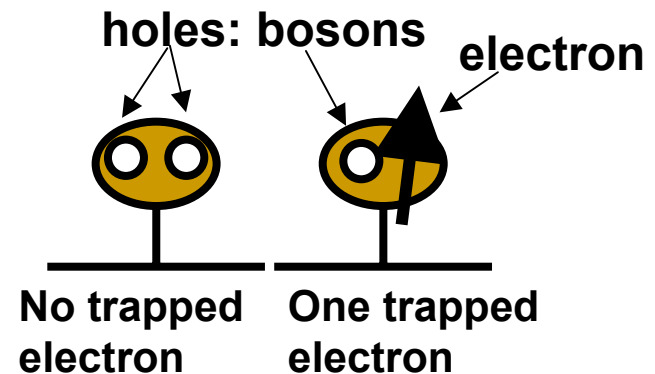
$$\tilde{d}_s(t) \Rightarrow b^+(t)d_s(t)$$

□ 制約条件

■ トラップには電子が二つ入らない

■ $U = \infty$

$$b^+(t)b(t) + \sum_s d_s^+(t)d_s(t) = 1$$



Slave-boson 平均場理論: 平均場の導入

■ 平均場近似

- Slave-boson導入だけでは問題を置き換えただけ
- boson (**vacancy**)の平均値: $\langle b^+ \rangle = \langle b \rangle = \sqrt{z}$
- Lagrange 未定乗数: $H \Rightarrow H + \lambda(b^+b + d_s^+d_s - 1)$

■ 平均場のHamiltonian

$$H_{\text{chan}}^{(I)} = \sum_{ks} E_k c_{ks}^+ c_{ks} + \varepsilon_f d_s^+ d_s + \sqrt{z} \sum_{ks} [V_d d_s^+ c_{ks} + \text{h.c.}] + (\varepsilon_f - E_D)(z - 1)$$

$$H_{\text{elec}} = \sum_{ks} (E_{kL} f_{ks}^{L+} f_{ks}^L + E_{kR} f_{ks}^{R+} f_{ks}^R)$$

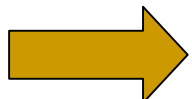
$$H_{\text{tran}} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k_1 k_2 s} (t_{k_1 k_2}^{\alpha} c_{k_1 s}^+ f_{k_2 s}^{\alpha} + \text{h.c.})$$

これで対角化可能になった

Slave-boson 平均場理論: 自己無撞着方程式

- 平均場の満たす方程式
 - 二つのパラメーター: z と λ
 - 自己無撞着方程式

$$\partial \langle H \rangle / \partial z = 0, \quad \partial \langle H \rangle / \partial \lambda = 0$$


$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\eta_0(\omega - \varepsilon_f)}{(\omega - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta_0^2} F_1(\omega) = E_D - \varepsilon_f$$

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{z \eta_0}{(\omega - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta_0^2} F_1(\omega) = 1 - z$$

これは数値的に解くしかない。

$$F_1(\omega) \equiv \{y_0[\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega)] / (\Gamma_L + \Gamma_R) + f_c(\omega)\} / (1 + y_0)$$

z と $\varepsilon_f = \varepsilon_0 + \lambda$
が解くべきパラ
メータ

電流と電気伝導度

--Keldysh Green関数法

■ 電流公式 (Pekka et al PRB50,5528(1994))

$$I = e \langle \dot{N}_L \rangle = \frac{ie}{\hbar} \langle [H, N_L] \rangle = \frac{2e}{\hbar} \text{Re} \left\{ \sum_{k_L k'} V_L G_{k'k_L}^<(t, t) \right\}$$

$$\text{ここで } G_{k'k_L}^<(t, t') \equiv i \langle f_{k_L s}^+(t') c_{ks}(t) \rangle$$

■ Keldysh Green関数法

- Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. 68 (1991) 2512.

- 一般的なLandauerの公式

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \text{tr} \{ G^a \Gamma^R G^r \Gamma^L \}$$

- S.Datta, “Electronic Transport in Mesoscopic Systems”
 - 上記の公式を発展させ、シミュレーションを行う方法を示す

電流と電気伝導度

--Keldysh Green関数法

■ $G_{k'k_L}^<(t, t') \equiv i \langle f_{k_L s}^+(t') c_{k s}(t) \rangle$ を求める

□ 運動方程式を利用

$$\omega d_s = i \dot{d}_s = [d_s, H] = [d_s, E_D d_s^+ d_s + \sqrt{z} V_d \sum_k d_s^+ c_{k s}] = E_D d_s + \sqrt{z} V \sum_k c_{k s}$$

$$\omega f_{k_L s} = i \dot{f}_{k_L s} = [f_{k_L s}, H] = E_{f_{k_L}} f_{k_L s} + \sum_{k'} t_{kk'}^L c_{k' s}$$

$$\omega c_{k s} = i \dot{c}_{k s} = [c_{k s}, H] = E_k c_{k s} + V_d d_s + \sum_{k'} (t_{kk'}^L f_{k_L s} + t_{kk'}^R f_{k_R s})$$

□ Green関数を作る

$$(\omega - E_k) c_{k s} - V_d d_s - \sum_{k'} (t_{kk'}^L f_{k_L s} + t_{kk'}^R f_{k_R s}) = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (\omega - E_k) G_{c_{k s} c_{k s}}(\omega) - V_d G_{d_s c_{k s}}(\omega) - \sum_{k_1} (t_{k_1 k}^L G_{f_{k_1 L s} c_{k s}}(\omega) + t_{k_1 k}^R G_{f_{k_1 R s} c_{k s}}(\omega)) = \delta_{kk} \\ (\omega - E_k) G_{c_{k s} d_s}(\omega) - V_d G_{d_s d_s}(\omega) - \sum_{k'} (t_{k_1 k'}^L G_{f_{k_1 s} d_s}(\omega) + t_{k_1 k'}^R G_{f_{k_1 R s} c_{k s}}(\omega)) = 0 \\ (\omega - E_k) G_{c_{k s} f_{k_L s}}(\omega) \dots\dots \\ (\omega - E_k) G_{c_{k s} f_{k_R s}}(\omega) \dots\dots \end{cases}$$

例えばキツテル“固体の量子論”

電流と電気伝導度

--Keldysh Green関数法

- $G_{k'k_L}^<(t, t') \equiv i \langle f_{k_L s}^+(t') c_{k s}(t) \rangle$ を求める

- 最後にKeldyshの関係式を使う

$$G_{k_L k'}(\omega) = g_{k_L}(\omega) \sum_{k_1} t_{kk_1}^L G_{k_1 k'}(\omega)$$

$$G_{k_L k'}^<(\omega) = \sum_{k_1} t_{kk_1}^L [g_{k_L}^r(\omega) G_{k_1 k'}^<(\omega) + g_{k_L}^<(\omega) G_{k_1 k'}^a(\omega)]$$

ここで $g_{k_L}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - E_{k_L}^L + i\delta}$ また $g_{k_L}^<(\omega) = 2\pi i f_L(\omega) \delta(\omega - E_{k_L}^L)$

- この式により電流公式が求まる

トラップがある場合の電流の式

■ 電流の式

$$I_D = g_0 \int d\omega \frac{(\omega - \varepsilon_f)^2}{(\omega - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta^2} (f_L(\omega) - f_R(\omega))$$

ここで

$$g_0 = \frac{e}{h} \frac{y_0}{(1 + y_0)^2} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\gamma}, \text{ : トラップ無しの場合の電気伝導度}$$

$$\eta = \eta_0 y_0 (1 + y_0), \quad \gamma = (\Gamma_L + \Gamma_R) / 2$$

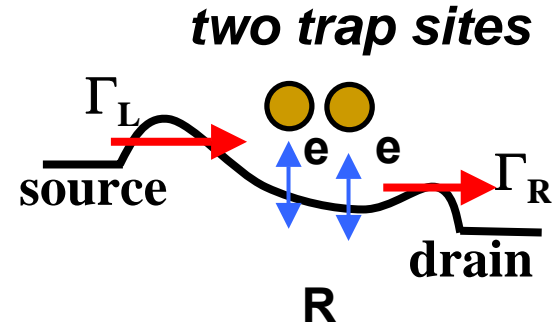
$$f_L(\omega) = \{\exp[(\omega - E_F + eV_D)/T] + 1\}^{-1}, \quad f_R(\omega) = \{\exp[(\omega - E_F)/T] + 1\}^{-1}$$

- $y_0 = \pi N_c(E_F) \gamma$: エネルギー幅 γ 内の電子数
- $\eta_0 = V_d / \gamma$: **トラップとチャネルとのトンネリング確率**

二つのトラップがある場合の電流の式

■ 仮定

- 二つのトラップは同じ種類
- 二つのトラップ間に相関はなし



$$\begin{aligned}
 H_{\text{chan}}^{(II)} &= \sum_{ks} E_k c_{ks}^+ c_{ks} + \varepsilon_f^{(2)} (n_{d1} + n_{d2}) + \sqrt{z} \sum_{ks} [V_d c_{ks}^+ (d_{1s} e^{i\frac{kR}{2}} + d_{2s} e^{-i\frac{kR}{2}}) + \text{h.c.}] + 2(\varepsilon_f^{(2)} - E_D)(z-1) \\
 &= \sum_{P=\pm} \left\{ \sum_{ks} E_k c_{ks}^{P+} c_{ks}^P + \varepsilon_f^{(2)} n_d^P + \sqrt{z} \sum_{ks} V_d^P (c_{ks}^{P+} d_s^P + \text{h.c.}) + 2(\varepsilon_f^{(2)} - E_D)(z-1) \right\}
 \end{aligned}$$

$$c_{ks}^{(+)} = \frac{1}{N_+} \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \cos\left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{R}}{2}\right) c_{\vec{k}s}, \quad c_{ks}^{(-)} = \frac{1}{N_-} \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \sin\left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{R}}{2}\right) c_{\vec{k}s}$$

$$d_s^P = d_{1s} + P d_{2s}, \quad V_d^P = V_d \sqrt{2N_P}, \quad N_P = (1 + P \sin(k_F R) / (k_F R)) / 2$$

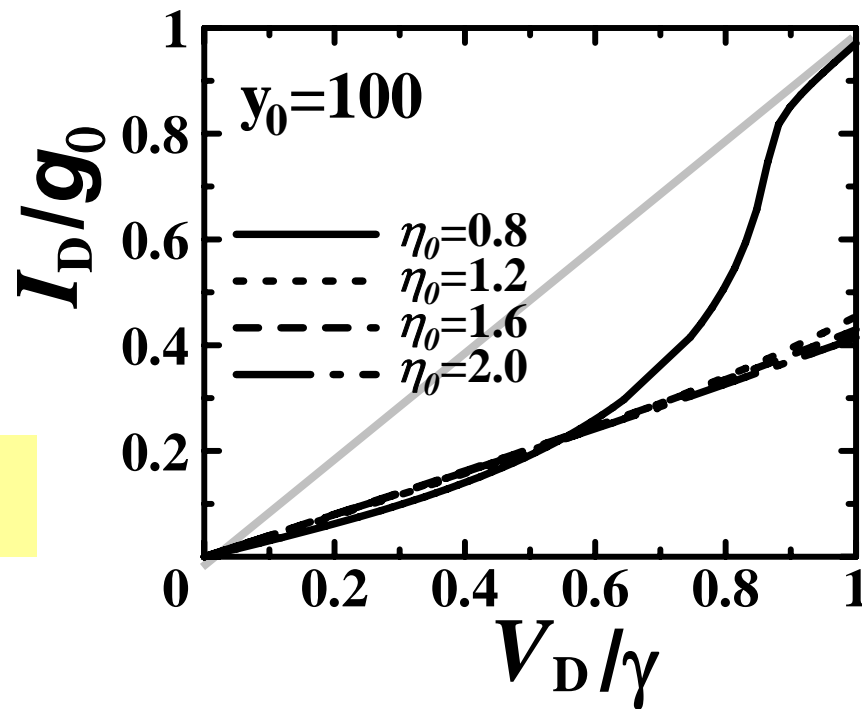
■ 電流は二つの独立な部分の和

Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

数値計算結果 : 電流値

$I_D \cdot V_D$ for a trap site



トラップにより電流値が大きく減少



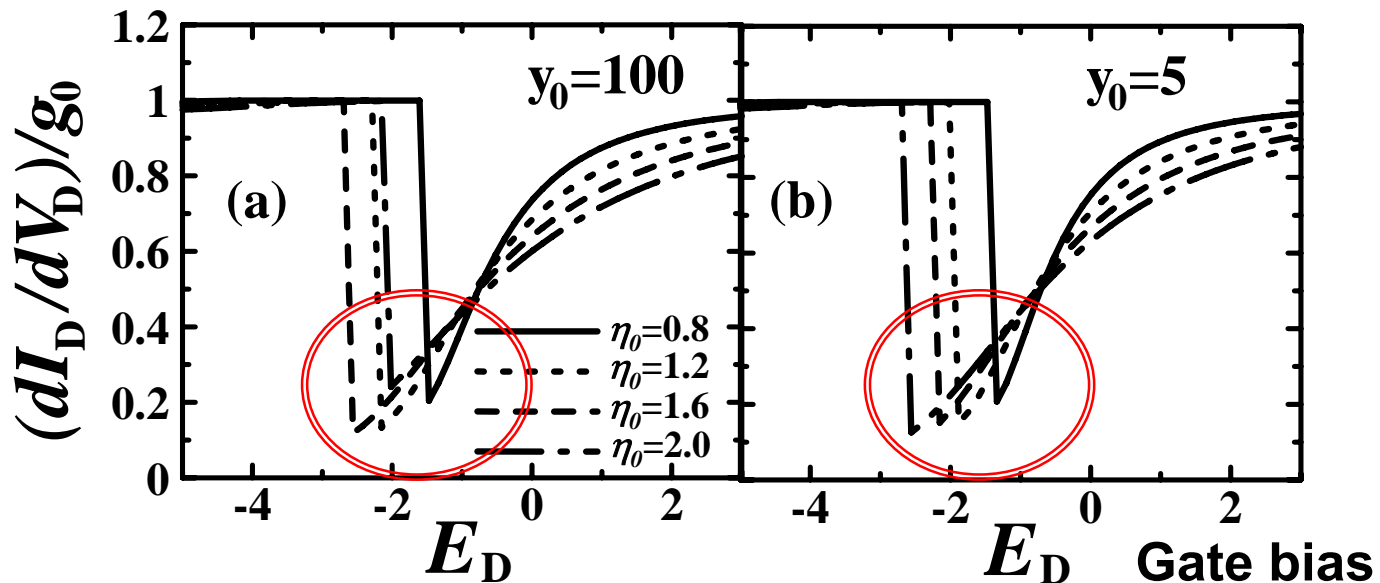
ファノ近藤効果は電流ばらつきの大きな原因

$$\eta_0 = V_d/\gamma$$

$E_D = -1.2\gamma$, $y_0=100$, $D=6\gamma$, $E_F=0$ and $T=0.01\gamma$.
we set $\Gamma_L=\Gamma_R$, and γ as a energy unit.

数値計算結果(電気伝導度)

- 電気伝導度 $G=dI/dV_D$ for a trap

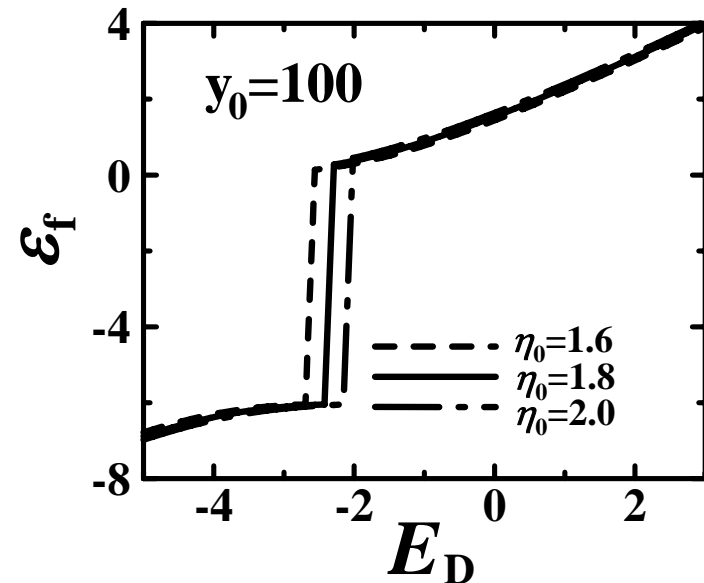
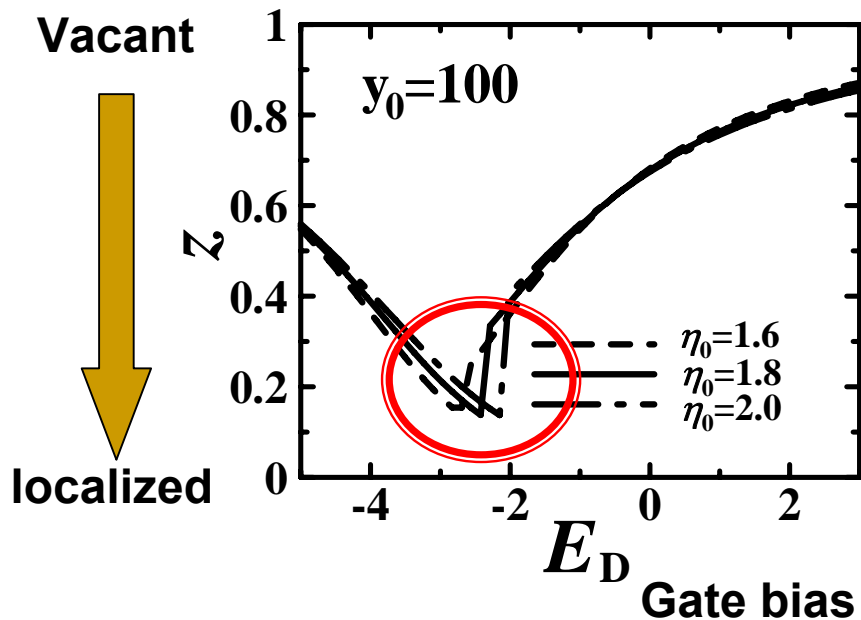


明確な窪みが見られる: $V_d \approx \gamma$ ($\eta_0 \approx \gamma$)

$V_D=0.01\gamma$, $D=6\gamma$, $E_F=0$ and $T=0.01\gamma$.

自己無撞着解

■ 平均場解: E_D 依存性



Not linear dependence

窪みのときに電子が局在する

Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

解析式の導出

- 電気伝導度 $G = dI/dV$ ($T=0$): 一つのトラップ

$$G = g_0 \frac{(E_F - \varepsilon_f)^2}{(E_F - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta_0^2}$$

- 窪み構造

- 電気伝導度: 二つのトラップ

$$G = g_0 \sum_{P=\pm} \frac{(E_F - \varepsilon_f)^2}{(E_F - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta_P^2}$$

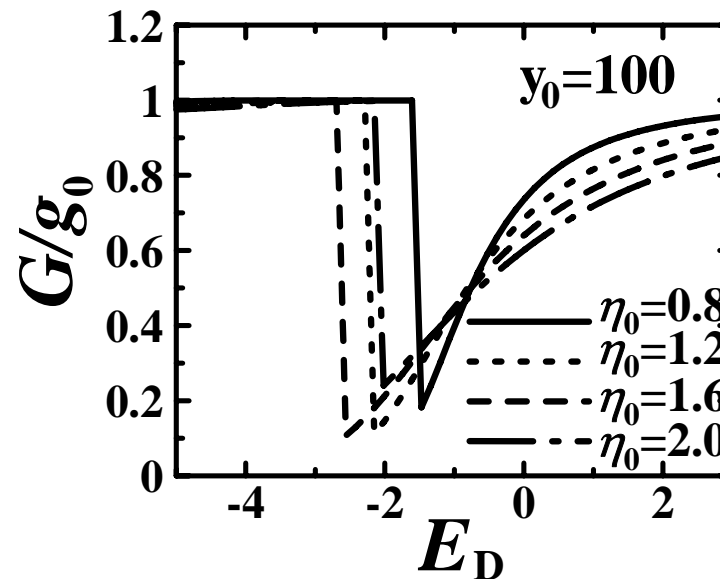
$$\eta_P = \eta_{P0} \frac{y_0}{1 + y_0}, \quad \eta_{P0} = [N_P V_d]^2 / \gamma, \quad N_P = (1 + P \sin(k_F R) / (k_F R)) / 2$$

- 二つのトラップ間に相関がないと仮定
- 独立トラップの場合の和

解析式の正当性

■ 解析式と数値計算との比較

$$G = g_0 \frac{(E_F - \varepsilon_f)^2}{(E_F - \varepsilon_f)^2 + z^2 \eta_0^2}$$



ほとんど
一致

- 自己無撞着の値を使用: z 、 ε_f
- 解析式が有効であることがわかった

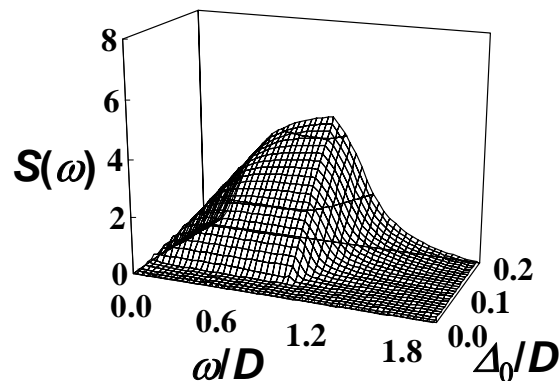
Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

ノイズスペクトル

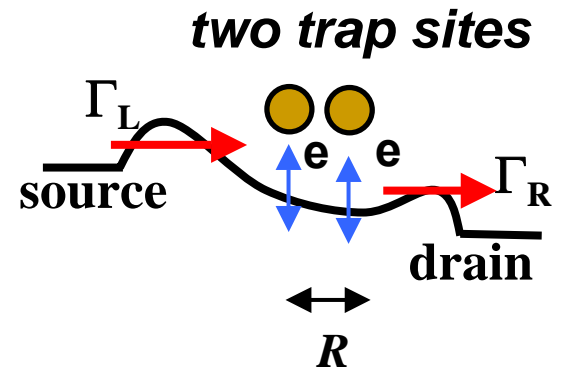
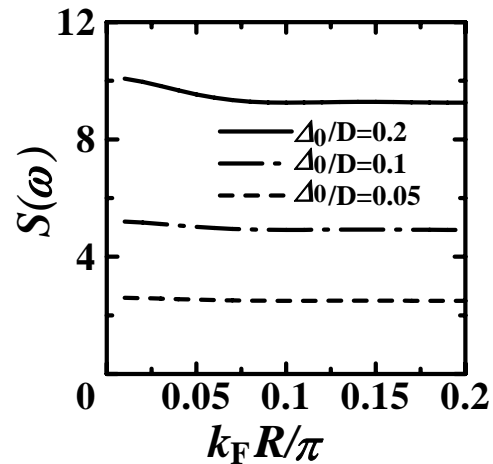
■ 一つのトラップが生むノイズ特性

$$\begin{aligned}
 S(\omega) &= \frac{1}{2} \int_{-D}^D dt e^{i\omega t} \langle I(t)I(0) + I(0)I(t) \rangle \\
 &= \frac{e^2 \omega V_d^4}{\omega^2 + 4\Gamma^2} \left\{ \int_{-D}^{D+\omega} dx \left[\frac{-2(x-a)}{(x-a)^2 + \Gamma^2} + \frac{2(x+\omega-a)}{(x+\omega-a)^2 + \Gamma^2} + \frac{\omega}{(x-a)^2 + \Gamma^2} + \frac{\omega}{(x+\omega-a)^2 + \Gamma^2} \right] f(x)(1-f(x+\omega)) \right. \\
 &\quad \left. + \int_{-D+\omega}^D dx \left[\frac{2(x-a)}{(x-a)^2 + \Gamma^2} - \frac{2(x-\omega-a)}{(x-\omega-a)^2 + \Gamma^2} + \frac{\omega}{(x-a)^2 + \Gamma^2} + \frac{\omega}{(x-\omega-a)^2 + \Gamma^2} \right] f(x)(1-f(x-\omega)) \right\}
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 E_D &= -0.01D, \\
 T &= 0.001D, E_F = 0
 \end{aligned}$$

ノイズスペクトル: 二つのトラップの場合



- 電流が二つの独立な電流の和となるためのノイズも和をなる
- 近づくとノイズの増幅が見られる

Outline

- はじめに
- モデル
- 数値計算の結果
- 解析式の導出
- ノイズ特性
- ファノ近藤効果を見るためには
- 結論

ファノ近藤効果を見るためには

- 近藤温度 $T_K = D \exp(\pi\varepsilon_0/2V_d)$ の評価
 - $V_d \approx \gamma$ ($\eta_0 \approx \gamma$)
 - バンド幅 $D \approx (\hbar^2/2m)(3\pi^2n) \approx 4 \text{ meV}$
 - 有効質量 $m=0.2m_0$ (m_0 自由電子質量)、チャネル電子密度 $n=10^{17} \text{ cm}^{-3}$
 - $T_K \sim 44.8 \text{ K}$ ($y_0=100$)
 - $T_K \sim 32.7 \text{ K}$ ($y_0=5$)
- 室温で影響が残るかどうかはトラップとの結合の強さによる。
- トラップ準位の解析に用いることができる

結論

- 極限MOSで生じる量子効果はサイズ効果だけではない。
- バリステック領域におけるトラップサイトの効果
 - トラップとの量子干渉効果に注目
- 窪み が現れる $V_d \approx \gamma$ ($\eta_0 \approx \gamma$)
- 電流値の減少 \Rightarrow 電流値のばらつき
- 電気伝導度の解析式の提案

ファノ近藤効果によるトラップの解析

今後の課題

- MOS構造を反映したモデルの必要性
 - 現在は E_D をゲートと同じと見なしている
 - Fermi面でいくつかの物理量を近似
- 室温での影響
 - 量子干渉はコヒーレンスが関わってくる
 - 極限MOSにおけるコヒーレンスの研究の重要性
 - フォノンとの関連性