ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 17, № 1 (2016) С. 7-10

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 17, № 1 (2016) P. 7-10

DOI: 10.15330/pcss.17.1.7-10

УДК 539.2:621.315.548.
PACS NUMBER (s): 61.50.AH, 64.70FM.

ISSN 1729-4428

М.А. Рувінський, Б.М. Рувінський, О.Б. Костюк

Кінетичні ефекти, обумовлені флуктуаціями товщини квантового напівпровідникового дроту

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна, e-mail: markruvinskii@gmail.com

Теоретично визначено електропровідність, термоерс і теплопровідність квантового напівпровідникового дроту внаслідок гауссівських флуктуацій товщини дроту. Результати наведено для випадків невиродженої і виродженої статистики носіїв заряду. Розглянутий механізм релаксації носіїв заряду є суттєвим для достатньо тонкого і чистого дроту з напівпровідників типу A_3B_5 і A_4B_6 при низьких температурах. Визначено квантово-розмірні ефекти, характерні для квазіодновимірних систем.

Ключові слова: квантовий напівпровідниковий дріт, гауссові флуктуації товщини, електропровідність, термоерс, теплопровідність..

Стаття поступила до редакції 10.09.2015; прийнята до друку 15.12.2015.

Вступ

В тонких напівпровідникових дротах квантування електронного енергетичного спектра призводить до квантово-розмірних ефектів, які виявляються в кінетичних характеристиках квазіодновимірних систем, залежних також від механізму розсіяння носіїв струму. В сучасних технологіях наноелектроніки не можна, взагалі кажучи, нехтувати впливом випадкового поля, пов’язаного з флуктуаціями товщини квантового напівпровідникового дроту [1-3]. Метою даної роботи є узагальнення і уточнення попередніх робіт [4,5] з поширенням впливу таких флуктуацій на основні кінетичні характеристики квантового напівпровідникового дроту.

I. Теоретична модель

В [4] розглянуто модель квантового напівпровідникового дроту з поперечними розмірами, обмеженими за товщиною d (в напрямку координатної осі z) одновимірною потенціальною ямою V(z) з нескінченно високими стінками і за шириною (в напрямку *y*) параболічним потенціалом βy^2 (β>0). Постійне магнітне поле **H** напрямлене вздовж дроту (осі *x*); складові векторного потенціалу магнітного поля: A_x=A_y=0, A_z=*Hy*.

В одноелектронному наближенні [6] гамільтоніан системи має вигляд

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

де $\Delta_\perp = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, $m_\perp = m_x = m_y = m$ і m_z – ефективні маси електрона провідності вздовж відповідних напрямків, *e* – абсолютна величина заряду електрона,

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

$$U(\mathbf{r}_\perp) = a\,[x_1(\mathbf{r}_\perp) - x_2(\mathbf{r}_\perp)] \qquad (3)$$

– потенціальна енергія електрона у випадковому полі, обумовленому флуктуаціями товщини дроту, $a = \partial E_c / \partial d$, E_c – дно зони провідності, $x_{1,2}(\mathbf{r}_\perp)$ – випадкові функції, які визначають амплітуди коливань на різних поверхнях дроту, перпендикулярних осі z. Взаємодія (3) носія струму з випадковим полем вважаємо збуренням, яке викликає квантові переходи у трансляційному русі вздовж дроту (в напрямку ос*і x*). Обмежмось внеском нижнього квантово-розмірного рівня енергії поперечного руху електрона. У наближенні врахування станів електрона з певною парністю по осі *z* хвильова функція незбуреної задачі є

$$y_{k_x}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{p^{1/2} L d y_0}}\exp\left(ik_x x - \frac{y^2}{2y_0^2}\right)\cos\left(\frac{p}{d}z\right), \qquad (4)$$

де L – довжина дроту (L>>d),

$$y_0 = \mathbf{h}^{1/2}\left[2m\left(b + \frac{e^2H^2}{2m_zc^2}\right)\right]^{-1/4}. \qquad (5)$$

Енергія електрона у стані (4):

$$E(k_x) = \frac{\mathbf{h}^2k_x^{\ 2}}{2m} + \frac{p^{\ 2}\mathbf{h}^2}{2m_zd^2} + \mathbf{h}\left[\frac{1}{2m}\left(b + \frac{e^2H^2}{2m_zc^2}\right)\right]^{1/2}. \quad (6)$$

II. Час релаксації

Обернений час релаксації електрона вздовж довжини дроту при розсіянні флуктуаційним полем (3) має вигляд

$$\frac{1}{t_n(k_x)} = \frac{2p}{\mathbf{h}}\sum_{k_x'}\left\langle\left\langle\left|\left\langle k_x'\right|U\left|k_x\right\rangle\right|^2\right\rangle\right\rangle\left(1-\frac{k_x'}{k_x}\right)d\left[E(k_x)-E(k_x')\right], \quad (7)$$

де подвійні дужки $\langle\langle...\rangle\rangle$ визначають усереднення за випадковим полем. Флуктуації на різних поверхнях дроту вважаємо незалежними, а на одній поверхні – гауссовими:

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

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

Після обчислення (7) з урахуванням (3) і (8) знайдемо загальний вираз для часу релаксації [4]

$$\frac{1}{t_n(k_x)} = \frac{a^{\ 2}m\sqrt{2p}}{\mathbf{h}^3\left|k_x\right|}\sum_{i=1}^{2}\frac{\left(\Delta_i\Lambda_i\right)^2}{\sqrt{y_0^2+\Lambda_i^2}}\exp(-2\Lambda_i^2k_x^2)\ . \qquad (9)$$

III. Статична електропровідність

Для електронної провідності з кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації [6] маємо:

$$s_n = \frac{2\mathbf{h}^2e^2}{m^2}\int_0^\infty\left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)k_x^2t_n\left(\left|k_x\right|\right)dk_x\,, \qquad (10)$$

де $f_0 = \{\exp\left[\left(e-m\right)/k_BT\right]+1\}^{-1}$ – функція розподілу Фермі-Дірака, $e = \mathbf{h}^2k_x^2/2m$, μ – хімічний потенціал, відрахований від квантово-розмірного рівня руху електрона поперек дроту, $2\sum_{k_x} f_0(k_x) = N$ – повне число електронів дроту.

В роботі [4] з урахуванням загального виразу для часу релаксації (9) отримано і проаналізовано при довільних значеннях Δ_i, Λ_i, магнітного поля H і температури T дещо громіздкі остаточні вирази для провідності σ_n, знайдені з (10).

Залежності σ_n від поздовжнього магнітного поля H пов'язані із стиском хвильової функції електрона поперек дроту (по осі y) і визначаються множником $\left[y_0^2(H)+\Lambda_i^2\right]^{-1/2}$ (див. (5)). При $y_0^2(H) >> \Lambda_i^2$ і гранично сильному магнітному полі $e^2H^2/2m_zc^2 >> b$, це призводить в σ_n до появи множника $H^{-1/2}$.

Для спрощення в (9) розглянемо випадок $H=0$ $\Lambda_1=\Lambda_2=\Lambda$. Тоді для часу релаксації $t_n(\varepsilon)$ електрона з енергією ε маємо:

$$t_n(e) = Be^{1/2}\exp(ge)\,, \qquad (11)$$

де

$$B = \mathbf{h}^2\Big/\left[a^{\ 2}(p\,m)^{1/2}(A_1+A_2)\right], \qquad (12)$$

$$A_i = \frac{\left(\Delta_i\,\Lambda\right)^2}{\sqrt{y_0^2+\Lambda^2}}\,,\ g = \frac{4m\Lambda^2}{\mathbf{h}^2}. \qquad (13)$$

Згідно (10) електропровідність σ_n може бути записана в формі [7]

$$s_n = e^2\mathbf{K}_0\,, \qquad (14)$$

де

$$\mathbf{K}_0 = \frac{2^{3/2}}{p\,\mathbf{h}m^{1/2}}\int_0^\infty t_n\left(e\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)e^{1/2}de\ . \qquad (15)$$

Для невиродженого випадку напівпровідникового дроту з врахуванням (11) – (13) одержимо:

$$s_n = \frac{2\mathbf{h}^2e^2n}{pa^{\ 2}m^{3/2}}\frac{(k_BT)^{1/2}}{(1-g\,k_BT)^2}\left(A_1+A_2\right)^{-1}, \qquad (16)$$

де $n=N/L$ – число електронів на одиниці довжини. Формула (16) є справедливою при $1-\gamma k_BT>0$ і $\mathbf{h}^2(1-g\,k_BT)p^{\ 2}/2mk_BTl^2 >> 1$, де l – стала гратки вздовж осі дроту. Перша умова пов'язана з тим, що час релаксації (9), (11) – (13) експоненціально зростає з енергією електрона, а максвеллівський розподіл експоненціально спадає. Тому для ефективності розсіяння на гауссових флуктуаціях суттєво, щоб «теплова» довжина хвилі де Бройля носія заряду перевищувала величину кореляційного радіуса Λ.

Друга умова пов'язана з вибором нескінченної верхньої межі в інтегралі (10), (15) і звичайно виконується. У випадку низьких температур $\gamma k_BT<<1$ рухливість електрона вздовж осі дроту $u_n \propto \left(k_BT\right)^{1/2}$, що за температурною залежністю нагадує дипольне розсіяння [8] для тривимірних напівпровідникових матеріалів.

Для виродженого випадку і $k_BT<<\mu$ електропровідність вздовж осі дроту з урахуванням загального виразу для часу релаксації (9) дорівнює

$$s_n \approx \frac{4e^2\mathbf{h}}{a^{\ 2}m\sqrt{2p}}m\times$$
$$\times\left[A_1\exp(-2k_F^2\Lambda_1^2)+A_2\exp(-2k_F^2\Lambda_2^2)\right]^{-1}, \qquad (17)$$

де $k_F^2 = (2m/\mathbf{h}^2)m$. Температурна залежність σ_n визначається хімічним потенціалом одновимірного електронного газу

$$m \approx m_0\left[1+\frac{p^{\ 2}}{12}\left(\frac{k_BT}{m_0}\right)^2\right], \qquad (18)$$

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\pi n\right)^2 . \qquad (19)$$

За оцінками для дротів з матеріалів A_3B_5 (наприклад, GaAs [1,4,5]) і A_4B_6 механізм релаксації носіїв заряду на випадкових нерівностях меж є істотним в області низьких температур $k_BT<\hbar^2/4m\Lambda^2$ для достатньо чистих зразків і нанометрових товщин.

Ефекти типу локалізації [9], які виникають в квазіодновимірних системах в умовах сильного безладу (або при дуже великій концентрації домішок), які не можна пояснити в межах теорії слабкого розсіяння, в нашій роботі не розглядаються. Тому отримані нами температурні залежності провідності істотно відрізняються від наслідків теорії локалізації [9].

IV. Термоерс

За кінетичним рівнянням Больцмана термоерс S_{xx} можна записати [7,10,11] у вигляді

$$S_{xx} = -\frac{1}{eT}\mathbf{K}_0^{-1}\mathbf{K}_1 , \qquad (20)$$

де $\mathbf{K}_0$ визначається формулою (15),

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2^{3/2}}{\pi\hbar m^{1/2}}\int_0^\infty \tau_n(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)(\varepsilon-\mu)\varepsilon^{1/2}d\varepsilon . \qquad (21)$$

Після підстановки в (20) формул (15) і (21) з урахуванням (11) отримаємо [5] при $\gamma k_BT<1$:

$$S_{xx} = -\frac{1}{eT}\left(\frac{F_{2\gamma}}{F_{1\gamma}}-\mu\right), \qquad (22)$$

де

$$F_{2\gamma} = \int_0^\infty \varepsilon^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)e^{\gamma\varepsilon}d\varepsilon , \quad F_{1\gamma} = \int_0^\infty \varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)e^{\gamma\varepsilon}d\varepsilon . \qquad (23)$$

Для невиродженої статистики носіїв заряду $f_0 = \exp\left[(\varepsilon-\mu)/k_BT\right]$ з (22) і (23) знаходимо при $1-\gamma k_BT>0$

$$S_{xx} = -\frac{k_B}{e}\left(\frac{2}{1-\gamma k_BT}-\frac{\mu}{k_BT}\right), \qquad (24)$$

де хімічний потенціал одномірного електронного газу

$$\mu = k_BT\ln\left[\hbar n\left(\frac{\pi}{2mk_BT}\right)^{1/2}\right]. \qquad (25)$$

Завдяки доданку $2(1-\gamma k_BT)^{-1}$ є можливість збільшення термоерс для одновимірного квантового дроту.

Для випадку сильно виродженого одномірного електронного газу при $k_BT<<\mu$, використовуючи стандартні для цього граничного випадку наближення [6], отримаємо

$$S_{xx} = -\frac{\pi^2}{3e}k_B\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)(1+\gamma\mu) , \qquad (26)$$

де хімічний потенціал $\mu(T)$ визначається формулами (18), (19). Завдяки доданку $\gamma\mu$ в (26) маємо принципову можливість підвищення величини термоерс для розглянутого одновимірного випадку.

V. Теплопровідність

Згідно [7,10,11] коефіцієнт електронної теплопровідності визначається формулою:

$$\kappa_n = \frac{1}{T}\left(\mathbf{K}_2-\frac{\mathbf{K}_1^2}{\mathbf{K}_0}\right), \qquad (27)$$

де

$$\mathbf{K}_2 = \frac{2^{3/2}}{\pi\hbar m^{1/2}}\int_0^\infty \tau_n(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)(\varepsilon-\mu)^2\varepsilon^{1/2}d\varepsilon . \qquad (28)$$

Для невиродженої системи носіїв заряду при $1-\gamma k_BT>0$ маємо:

$$\mathbf{K}_0 = \frac{2\hbar^2 n}{\pi\Lambda^2 m^{3/2}}\frac{(k_BT)^{1/2}}{(1-\gamma k_BT)^2}(A_1+A_2)^{-1} , \qquad (29)$$

$$\mathbf{K}_1 = \left(\frac{F_{2\gamma}}{F_{1\gamma}}-\mu\right)\mathbf{K}_0 , \qquad (30)$$

$F_{2\gamma}$ і $F_{1\gamma}$ знаходимо з (23).

$$\mathbf{K}_2 = \frac{2\hbar^2 n}{\pi m^{3/2}\Lambda^2}\frac{(k_BT)^{1/2}}{(1-\gamma k_BT)^2}\times \left[\frac{6(k_BT)^2}{(1-\gamma k_BT)^2}-\frac{4\mu k_BT}{(1-\gamma k_BT)}+\mu^2\right](A_1+A_2)^{-1} . \qquad (31)$$

За формулами (29)–(31) і (27) одержимо остаточний результат для коефіцієнта теплопровідності квантового напівпровідникового дроту, зумовленого флуктуаціями товщини:

$$\kappa_n = \frac{1}{T}\left\{\frac{2\hbar^2 n}{\pi\Lambda^2 m^{3/2}}\frac{(k_BT)^{1/2}}{(1-\gamma k_BT)^2}\times \left[\frac{2(k_BT)^2}{(1-\gamma k_BT)^2}-\frac{2\mu k_BT}{(1-\gamma k_BT)}+\frac{3}{4}\mu^2\right](A_1+A_2)^{-1}\right\}, \qquad (32)$$

де μ – хімічний потенціал одномірного електронного газу (див. (25)).

Використовуючи (16) і (32), знайдемо відношення

$$\frac{\kappa_n}{\sigma_n T} = 2\left(\frac{k_B}{e}\right)^2\left[\frac{1}{(1-\gamma k_BT)^2}-\frac{\mu}{k_BT}\frac{1}{(1-\gamma k_BT)}+\frac{3}{8}\left(\frac{\mu}{k_BT}\right)^2\right], \qquad (33)$$

звідки видно, що закон Відемана-Франца має місце лиш при $\gamma k_BT<<1$ і $\mu<<k_BT$.

Для сильно виродженого випадку електронного газу при $k_BT<<\mu$ і $\Lambda_1=\Lambda_2=\Lambda$ маємо:

$$\mathbf{K}_0 = \frac{2^{3/2}m\hbar}{\Lambda^2 m\pi^{1/2}}(A_1+A_2)^{-1}e^{\gamma\mu} , \quad \sigma_n = e^2\mathbf{K}_0 , \qquad (34)$$

$$\mathbf{K}_1 = \frac{\pi^2}{3}\frac{(k_BT)^2}{\mu}(1+\gamma\mu)\mathbf{K}_0 , \qquad (35)$$

$$\kappa_2 = \frac{2^{3/2}\pi^{1/2}}{3}\frac{\hbar\mu\left(k_BT\right)^2}{a^2 m}\left(A_1 + A_2\right)^{-1} e^{\gamma\mu}. \qquad (36)$$

З (27) і (34) – (36) одержимо

$$\begin{gathered}\kappa_n = \frac{2^{2/3}\pi^{1/2}}{3T}\frac{\mu\hbar}{ma^2}\left(k_BT\right)^2\left(A_1 + A_2\right)^{-1} e^{\gamma\mu}\times \\ \times\left[1 - \frac{\pi^3}{3}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2(1+\gamma\mu)^2\right].\end{gathered} \qquad (37)$$

Відношення

$$\frac{\kappa_n}{\sigma_n T} = \frac{\pi}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2\left[1 - \frac{\pi^3}{3}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2(1+\gamma\mu)^2\right]. \qquad (38)$$

характеризує з якою точністю виконується закон Відемана-Франца для виродженого напівпровідникового квантового дроту.

Висновки

На основі отриманих виразів для часу релаксації носіїв заряду, електропровідності, термоерс і теплопровідності квантового напівпровідникового дроту показано, що механізм релаксації, зумовлений випадковим полем гауссових флуктуацій товщини дроту може виявитись ефективним для достатньо тонкого і чистого дроту з матеріалів A_3B_5 і A_4B_6 в області товщин нанометричних розмірів. Виявлено можливість підвищення деяких кінетичних параметрів квазіодномірних систем.

Рувінський М.А. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Рувінський Б.М. – кандидат фізико-математичних наук, доцент, науковий співробітник Фізико-хімічного інституту;
Костюк О.Б. – аспірант.

[1] P.K. Basu, P. Ray, Phys. Rev. B, 44(4), 1844 (1991).
[2] H. Smith, H. Hojgaard, Transport Phenomena (University Press, Oxford, 1989).
[3] H. Bruns, K. Flensberg, H. Smith, , Phys. Rev. B, 48(15), 11144 (1993).
[4] M.A. Ruvins'kij, B.M. Ruvins'kij, FTP, 39(2), 247(2005).
[5] B.M. Ruvins'kij, M.A. Ruvins'kij, Fizika i himija tverdogo tila, 15(4), 689 (2014).
[6] A.I. Ansel'm, Vvedenie v teoriju poluprovodnikov (Nauka, Moskva, 1978).
[7] Dzh. Zajman, Principy teorii tvjordogo tela (Mir, Moskva, 1974).
[8] B.K. Ridley, Quantum Processes in Semiconductors (Clarendon Press, Oxford, 1999).
[9] J. Imri, Vvedenie v mezoskopicheskuju fiziku (Fizmatlit, Moskva, 2002).
[10] B.M. Askerov, Jelektronnye javlenija perenosa v poluprovodnikah (Nauka, Moskva, 1985).
[11] M.S. Svirskij, Jelektronnaja teorija veshhestva (Prosveshhenie, Moskva, 1980).

M.A. Ruvinskii, B.M. Ruvinskii, O.B. Kostyuk

The Kinetic Effects, Caused by Thickness Fluctuations of Quantum Semiconductor Wire

Vasyl Stefanyk Prekarpathian University,
Shevchenko Str., 57, Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, e-mail: markruvinskii@gmail.com

It was theoretically determined the electrical conductivity, thermopower and thermal conductivity of semiconductor quantum wire conditioned by a random field of Gaussian fluctuations of wire thickness. We present the results for cases nondegenerate and generate statistics of carriers. The considered mechanism of relaxation of the carriers is essential for sufficiently thin and clean wire from the A_3B_5 and A_4B_6 type of semiconductors at low temperatures. The quantum size effects that are typical of quasi-one-dimensional systems were revealed.

Keywords: semiconductor quantum wire, Gaussian fluctuations of thickness, electrical conductivity, thermopower, thermal conductivity.