УДК 621.794.4: 546

ISSN 1729-4428

Б.М. Рувінський[1], М.А. Рувінський[2]

Вплив флуктуацій товщини на електропровідність і термоерс квантового напівпровідникового дроту

[1] *Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, вул. Карпатська, 15, м. Івано-Франківськ, 76000, Україна,*
[2] *Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76000, Україна,*
bruvinsky@gmail.com

Визначено електропровідність і термоерс квантового напівпровідникового дроту, зумовлені випадковим полем гауссівських флуктуацій товщини дроту. Результати наведено для випадків невиродженої і виродженої статистики носіїв струму. Показано, що розглянутий механізм релаксації носіїв заряду є суттєвим для достатньо тонкого і чистого дроту з GaAs при низьких температурах і допускає принципову можливість підвищення величини термоерс порівняно з випадком масивного тривимірного зразка.

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

Стаття поступила до редакції 10.07.2014; прийнята до друку 17.09.2014.

Вступ

Квантування електронного енергетичного спектра в значній мірі обмежує поперечний рух електронів і дірок [1-3]. Такі квантово-розмірні обмеження виявляються і в електропровідності і термоерс, які визначаються типом механізму розсіяння у квазіодновимірних системах наноелектроніки. Сучасні технології не виключають можливості існування випадкового поля, пов'язаного з флуктуаціями товщини квантового напівпровідникового дроту. Метою даної роботи є визначення впливу таких флуктуацій на час релаксації носіїв струму, електропровідність, термоерс квантового напівпровідникового дроту.

I. Модель

Розглянемо модель квантового напівпровідникового дроту [4] 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 $(\beta > 0)$.

В одноелектронному наближенні [3] гамільтоніан системи має вигляд

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\perp}\Delta_\perp - \frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \beta y^2 + U(\vec{r}_\perp), \qquad (1)$$

де $\Delta_\perp = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$, $m_\perp = m_x = m_y = m$ і m_z – ефективні маси електрона провідності вздовж відповідного напрямку, e – абсолютна величина заряду електрона,

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

$$U(\vec{r}_\perp) = \alpha[\xi_1(\vec{r}_\perp) - \xi_2(\vec{r}_\perp)] \qquad (3)$$

– потенціальна енергія електрона у випадковому полі, зумовленому флуктуаціями товщини дроту, $\alpha = \partial E_c/\partial d$, E_c – дно зони провідності, $\xi_{1,2}(\vec{r}_\perp)$ – 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 осі x). Обмежимось 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

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

де L – довжина дроту ($L >> d$),

$$y_0 = \hbar^{1/2}(2m\beta)^{-1/4}. \qquad (5)$$

Енергія електрона у стані (4):

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_z d^2} + \hbar\left(\frac{\beta}{2m}\right)^{1/2}. \qquad (6)$$

II. Час релаксації та електропровідність

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

$$\frac{1}{\tau_n(k_x)} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{k_x'} \left\langle\left\langle \left|\left\langle k_x' \,|\, U \,|\, k_x \right\rangle\right|^2 \right\rangle\right\rangle \left(1 - \frac{k_x'}{k_x}\right) \delta[E(k_x) - E(k_x')], \qquad (7)$$

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

$$\left\langle\left\langle \xi_i(\vec{r}_{\perp 1}) \xi_j(\vec{r}_{\perp 2}) \right\rangle\right\rangle = \delta_{ij} \Delta_i^2 \exp\left[-\frac{\vec{r}_{\perp 1} - \vec{r}_{\perp 2}}{2\Lambda_i^2}\right], \qquad (8)$$

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

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

$$\frac{1}{\tau_n(k_x)} = \frac{\alpha^2 m \sqrt{2\pi}}{\hbar^3 |k_x|} \sum_{i=1}^{2} \frac{(\Delta_i \Lambda_i)^2}{\sqrt{y_0^2 + \Lambda_i^2}} \exp(-2\Lambda_i k_x^2). \qquad (9)$$

При $\Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda$ отримаємо з (9) остаточний результат для часу релаксації $\tau_n(\varepsilon)$ електрона з енергією $\varepsilon = \hbar^2 k_x^2 / 2m$:

$$\tau_n(\varepsilon) = B\varepsilon^{1/2} \exp(\gamma\varepsilon), \qquad (10)$$

де

$$B = \hbar^2 / [\alpha^2 (\pi m)^{1/2} (A_1 + A_2)], \qquad (11)$$

$$A_i = \frac{(\Delta_i \Lambda)^2}{\sqrt{y_0^2 + \Lambda^2}}, \quad \gamma = \frac{4m\Lambda^2}{\hbar^2}. \qquad (12)$$

Для електронної провідності з кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації [2] маємо:

$$\sigma_n = \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) k_x^2 \tau_n(|k_x|)\, dk_x, \qquad (13)$$

де $f_0 = \{\exp[(\varepsilon - \mu)/k_B T)] + 1\}^{-1}$ – функція розподілу Фермі-Дірака, μ – хімічний потенціал, відрахований від квантово-розмірного руху електрона поперек дроту, $2\sum_{k_x} f_0(k_x) = N$ – повне число електронів дроту. Згідно (13) електро–провідність σ_n може бути записана у формі [2]

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

де $$\mathbf{K}_0 = \frac{2^{3/2}}{\pi \hbar m^{1/2}} \int_0^\infty \tau_n(\varepsilon) \cdot \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon. \qquad (15)$$

Для невиродженого випадку напівпровідникового дроту з врахуванням (10)-(12) одержимо:

$$\sigma_n = \frac{4\pi e^2 n}{\hbar (2\pi m)^{1/2}} \frac{(k_B T)^{1/2}}{(1 - \gamma k_B T)^2} (A_1 + A_2)^{-1}, \qquad (16)$$

де $n = N/L$ – число електронів на одиниці довжини дроту. Формула (16) є справедливою при $1 - \gamma k_B T > 0$ і $\hbar^2 (1 - \gamma k_B T) \pi^2 / 2mk_B T \ell^2 >> 1$, де ℓ – стала гратки вздовж осі дроту. Перша умова пов'язана з тим, що час релаксації (9), (10)-(12) 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_i. Друга умова пов'язана з вибором нескінченної верхньої межі в інтегралі в (13), (15) і звичайно виконується. У випадку низьких температур $\gamma k_B T << 1$ рухливість електрона вздовж осі дроту $u_n \propto (k_B T)^{1/2}$, і механізм розсіяння на флуктуаціях товщини стає суттєвим для невиродженого напівпровідникового дроту в низькотемпературній області. При достатньо високих температурах $\gamma k_B T > 1$ ($k_B T \geq \hbar^2 / 4m\Lambda^2$) або достатньо великих радіусах флуктуацій Λ величина рухливості сильно зростає, і розглянутий механізм є неефективним порівняно з розсіянням на поздовжніх акустичних (LA) фононах. Невироджений випадок має місце при температурі $T > \pi(\hbar n)^2 / 2k_B m$. Для GaAs при одновимірній концентрації електронів $n = 1{,}6 \cdot 10^5$ см$^{-1}$ і ефективній масі $m = 0{,}067 m_0$ ця температура становить $T > 5{,}3$K [4]. Для виродженого випадку і при $k_B T << \mu$ електропровідність вздовж осі дроту

$$\sigma_n \approx \frac{4e^2}{\hbar^2} \mu [A_1 \exp(-2k_F^2 \Lambda_1^2) + A_2 \exp(-2k_F^2 \Lambda_2^2)]^{-1}, \qquad (17)$$

де $k_F^2 = (2m/\hbar^2)\mu$. Температурна залежність σ_n визначається хімічним потенціалом одномірного електронного газу

$$\mu(T) \approx \mu_0 \left[1 + \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^2\right], \qquad (18)$$

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

За оцінками для дроту з GaAs механізм релаксації носіїв заряду на випадкових нерівностях меж є істотним порівняно з розсіянням на акустичних фононах при товщинах $d \leq 7$ нм в області низьких температур $k_B T < \hbar^2 / 4m\Lambda^2$ і домішковим розсіянням при $u_{imp} = (7.5-50)$ м^2 / Вс .

III. Термоерс квантового напівпровідникового дроту

Згідно [2,5,6], термоерс S_{xx} можна записати у вигляді

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

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

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2^{3/2}e}{\pi\mathbf{h}Tm^{1/2}}\int_0^\infty \tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)(\varepsilon-\mu)\varepsilon^{1/2}d\varepsilon \ . \tag{21}$$

Враховуючи (15), (21) і (20), отримаємо:

$$S_{yy} = -\frac{1}{eT}\left[\frac{\int_0^\infty \tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\varepsilon^{3/2}d\varepsilon}{\int_0^\infty \tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\varepsilon^{1/2}d\varepsilon} - \mu\right]. \tag{22}$$

Після підстановки в (2) формули (15) для $\tau(\varepsilon)$ будемо мати при $\gamma k_B T < 1$:

$$S_{yy} = -\frac{1}{eT}\left(\frac{F_{2\gamma}}{F_{1\gamma}} - \mu\right), \tag{23}$$

де

$$F_{2\gamma} = \int_0^\infty \varepsilon^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)e^{\gamma\varepsilon}d\varepsilon, \ F_{1\gamma} = \int_0^\infty \varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)e^{\gamma\varepsilon}d\varepsilon. \tag{24}$$

Для невиродженої статистики носіїв заряду $f_0 = \exp[-(\varepsilon-\mu)/k_B T]$ з (23) і (24) знаходимо при $1-\gamma k_B T > 0$

$$S_{xx} = -\frac{k_B}{e}\left(\frac{2}{1-\gamma k_B T} - \frac{\mu}{k_B T}\right). \tag{25}$$

де хімічний потенціал одномірного електронного газу

$$\mu = k_B T \ln\left[\mathbf{h} n\left(\frac{\pi}{2mk_B T}\right)^{1/2}\right]. \tag{26}$$

Порівнюючи (25) з відомою формулою Писаренко [5,6]

$$S_{xx} = -\frac{k_B}{e}[r+2-(\mu/k_B T)] \tag{27}$$

для невиродженного тривимірного електронного газу, можна зробити висновок про можливість збільшення величини термоерс для одновимірного квантового дроту, якщо, наприклад,

$$2(1-\gamma k_B T)^{-1} > r+2 \tag{28}$$

при умові реалізації розглянутого механізму розсіяння, зумовленого гауссовими флуктуаціями товщини дроту, порівняно з іншими механізмами розсіяння (r – параметр розсіяння, $\tau(\varepsilon) \sim \varepsilon^{r-1/2}$).

Розглянемо тепер випадок сильно виродженого одномірного електронного газу при $k_B T << |\mu|$. Використовуючи стандартні для цього граничного випадку наближення [2-6], отримаємо

$$S_{xx} = -\frac{\pi^2}{3e}k_B\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)\cdot(1+\gamma\mu) \ , \tag{29}$$

де хімпотенціал $\mu(T)$ визначається формулами (18), (19). Відповідна відома формула для тривимірного випадку [5,6]

$$S_{xx} = -\frac{\pi^2}{3e}k_B\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)(r+1) \ . \tag{30}$$

Порівнюючи (29) з (30), маємо принципову можливість підвищення величини термоерс для розглянутого одновимірного випадку при

$$1+\gamma\mu > r+1 \ . \tag{31}$$

Висновки

На основі отриманих виразів для часу релаксації носіїв заряду, електропровідності і термоерс квантового напівпровідникового дроту показано, що механізм релаксації, зумовлений випадковим полем гауссових флуктуацій товщини дроту може виявитись ефективним для достатньо тонкого і чистого дроту з GaAs. Виявлено можливість підвищення величини термоерс в розглянутому випадку.

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри загальної та прикладної фізики.
Рувінський М.А. – д.ф.-м.н., професор кафедри фізики і хімії твердого тіла.

[1] J.Imri, Vvedenie v mezoskopicheskuju fiziku (Fizmat, Moskva, 2002).
[2] Dzh.Zajman, Principy teorii tverdogo tela (Mir, Moskva, 1974).
[3] A.I.Ansel'm, Vvedenie v teoriju poluprovodnikov (Nauka, Moskva, 1978).
[4] M.A.Ruvinskij, B.M.Ruvinskij, FTP 39(2), 247 (2005).
[5] B.M.Askerov, Jelektronnye javlenija perenosa v poluprovodnikah (Nauka, Moskva, 1985).
[6] M.S.Svirskij, Jelektronnaja teorija veshhestva. (Prosveshhenie, Moskva, 1980).

B.M.Ruvinskii[1], M.A.Ruvinskii[2]

The Influence of Thickness Fluctuations on the Electroconductivity and Thermopower of Quantum Semiconductor Wire

[1]Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine,
[2]Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine
bruvinsky@gmail.com

It was determined the electrical conductivity and thermopower of semiconductor quantum wire conditioned by a random field of Gaussian fluctuations of wire thickness. We present the results for cases degenerate and nondegenerate statistics of carriers. The considered mechanism of relaxation of the charge carriers is essential for sufficiently thin and clean GaAs wire at low temperatures and allows in principle the possibility of increasing the value of thermopower compared to the case of three-dimensional solid model.