

УДК 530.145.1+620.5

А.М. Сиротенко, к.т.н.
¹В.В. Ковальчук, д.ф.-м.н.
²А.В. Андрианов, к.т.н.
³В.О. Рац

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ

¹Одесская государственная военная академия, Одесса, lslvv@rambler.ru

²Одесский национальный политехнический университет

³Кременецкий гуманитарно-педагогический институт им.Т.Шевченка

Предложен механизм, позволяющий объяснить экспериментально выявленную температурную зависимость сопротивления квантово-размерных проводников

Ключевые слова: температура, квантово-размерный, проводник

Введение и постановка задачи. Квантово-размерные проводники (далее - КРП), созданные на основе цинковых наноконструкций (в зависимости от величины поперечного сечения) выявляют качественно различные зависимости сопротивления от температуры [1]. Так, при нагревании проводников сечением менее 4 нм выявляется аномальный спад сопротивления. Попытка объяснения выявленного эффекта на основе модели, предложенной авторами работы [2] не позволяет выяснить причины качественного изменения установленной зависимости. Авторы [2] провели лишь обратный пересчет длины фазовой когерентности электронов проводимости (L_ϕ) на основе данных по измерению сопротивления. Существенное влияние на электрические характеристики КР проводников и приборов на их основе оказывает инжекция электронов из контактных областей в проводящий канал [3-5]. Учет этого факта позволяет объяснить наблюдаемые высокие значения плотности тока в канале полевого транзистора на основе углеродной нанотрубки [6]. Количественный анализ по методике работы [6] показывает, что концентрация собственных электронов в нанотрубке на порядок меньше, чем инжектированных. Поэтому, с нашей точки зрения, именно инжекция носителей практически полностью определяют электропроводность КР прибора [7]. В предлагаемой статье исследовано влияние поперечных размеров КР проводников на их удельное сопротивление.

Изложение основного материала. На рис.1 представлена модель КРП, состоящего из двух контактов – эмиттерного (ЭК) и коллекторного (КК) и соединяющего их проводящего канала (ПК).

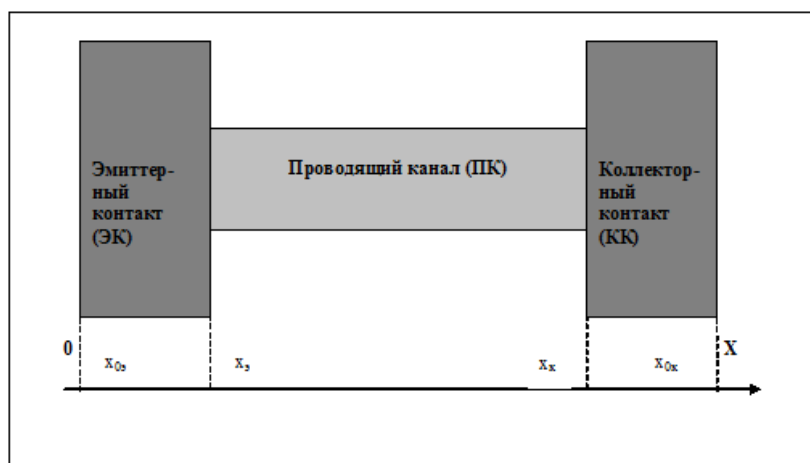


Рис. 1. Модель квантово-размерного проводника

первые восемь уровней энергии электронов, возникающих в ПК за счет размерного квантования, для трех значений поперечного размера канала $L = 15$ нм, 9 нм, 4 нм. Хорошо видно, что плотность состояний электронов быстро уменьшается с уменьшением L .

Предположим, что ПК - это прямоугольный параллелепипед, расположенный вдоль оси OX, длиной L . Заметим, что форма поперечного сечения ПК влияет лишь на количественные характеристики прибора. Через x_1 и x_2 обозначим координаты по оси OX «металлургических» границ контактов и проводящего канала (рис. 1).

На рис. 2 показаны

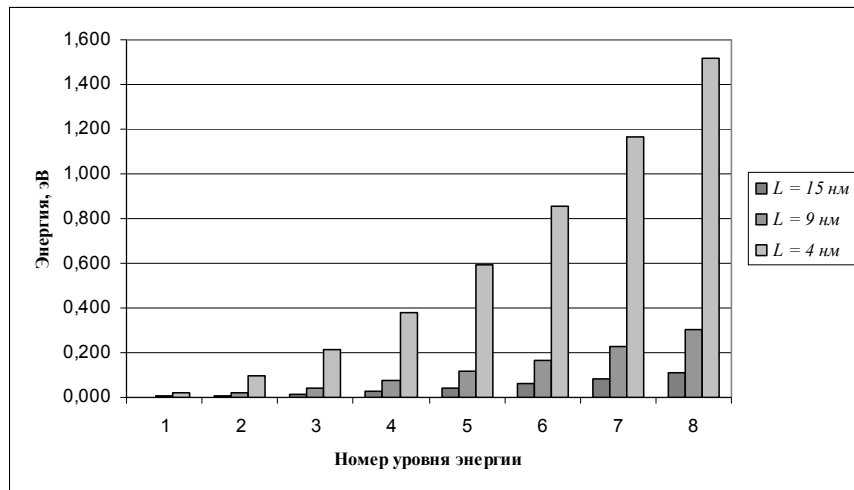


Рис. 2. Первые восемь уровней размерного квантования энергии электронов в ПК для различных поперечных размеров проводящего канала $L = 15$ нм, 9 нм, и 4 нм.

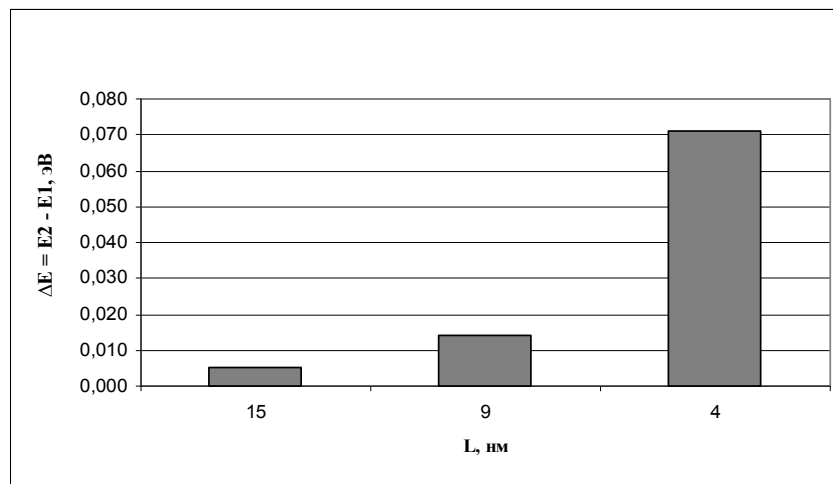


Рис. 3. Разница между энергиями электронов на втором и первом уровнях размерного квантования в ПК с $L = 15$ нм, 9 нм и 4 нм.

На рис. 3 показана разница в энергиях электронов второго и первого уровней размерного квантования $\Delta E = E_2 - E_1$ для тех же значений поперечного размера ПК. При $L = 15$ нм ΔE порядка 5 мэВ плотность электронных состояний в ПК достаточно высока. При $L = 9$ нм величина $\Delta E = 14$ мэВ, а энергетический спектр электронов разрежен в полтора раза по отношению к КРП с $L = 15$ нм. Для КРП с $L = 4$ нм значение $\Delta E = 70$ мэВ, т.е. энергетический спектр электронов разрежен почти в четыре раза по отношению к спектру в ПК с $L = 15$ нм.

Количественные изменения в спектре размерного квантования энергии электронов, регулируемые размером поперечного сечения ПК, приводят к качественным изменениям в эффективном потенциальном рельефе для электронов проводимости в КРП. Зависимости энергия Ферми (E_F) и эффективный потенциальный рельеф U^{eff} для электронов проводимости в КП в направлении Ox при нулевом смещении (рис. 4) свидетельствуют о том, что для провода длиной 15 нм потенциальный барьер, создаваемый ПК между контактными областями, ниже энергии Ферми (примерно на 26,1 мэВ для рассчитываемой структуры). Определим такой КРП как т-КРП. Уменьшение поперечного размера проводящего канала приводит к уменьшению плотности электронных состояний в нем. При достаточно малых L потенциальный барьер, создаваемый ПК, становится выше энергии Ферми. Такие КРП определим как у-КРП. Как следует из рис. 4, КП с $L = 9$ нм и $L = 4$ нм являются у-КРП.

Для электронов в КП возможны три механизма переноса заряда:

- дрейфово-диффузионный перенос электронов [8] с энергией, большей высоты потенциального барьера, создаваемого ПК;

- туннельний перенос через потенціальний бар'єр електронів с енергією, меншеї висоти цього бар'єра [4];
- інжекційний перенос електронів с енергією, меншеї висоти цього бар'єра [3,4].

Под інжекційним переносом здесь понимается процесс, при котором в контакте, к которому приложено меньшее напряжение, электроны с энергией, меншеї висоти бар'єра, поглощают енергію тепловых флуктуаций, увеличивая свою енергію до значений, превышающих высоту бар'єра. Далее они перемещаются в ПК между контактами посредством дрейфа и диффузии, а затем излучают дополнительную енергію в контакте с большим приложенным напряжением. Заметим, что уменьшение энергии инжектированных электронов возможно и в ПК, однако оно ограничено снизу высотой потенциального бар'єра. Для описания переноса заряда в КП воспользуемся моделью, подробно описанной в [9]. Она позволяет в рамках единого формализма учесть все возможные механизмы проводимости в мезоскопических структурах, к которым относятся КРП. Разделим допустимые электронные состояния в КП на две группы: a – электроны (энергия которых превышает максимальное значение эффективного потенциала U^{eff}) и b – электронов (энергия которых ниже максимальное значение эффективного потенциала U^{eff}). Такое разделение обусловлено тем, что a -электроны могут свободно распространяться между контактами КП. Плотность их микроскопического потока

$$\mathbf{j} = \frac{-i\hbar}{2m^*} \{ \Psi * (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi *) \Psi \}, \quad (1)$$

описываемых волновой функцией Ψ , состояниях не равна нулю. Следовательно, ненулевым является и плотность макроскопического потока, вычисляемая на основе соотношения

$$\mathbf{N} = \sum_E \mathbf{j}(E) f(E, \mathbf{F}, T) \quad (2)$$

где $f(E, \mathbf{F}, T)$ – функция распределения электронов по допустимым состояниям. В данной модели она имеет вид

$$f(E, \mathbf{F}, T) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F - F + \tau(v, \nabla F))/kT}} \quad (3)$$

Здесь: E – энергия электронов, E_F – их энергия Ферми электронов, F – химический потенциал электронов, τ – время релаксации их импульса, $v = \mathbf{j}/\rho$

- микроскопическая скорость электронов, а $\rho = \Psi^* \Psi$

- микроскопическая плотность числа частиц, T – температура окружающей среды.

Для b -электронов плотность потока \mathbf{j}_b практически равна нулю, поскольку потенциальный бар'єр, образуемый проводящим каналом между контактами, достаточно широк (как правило, более 100 нм), и коэффициент прохождения b -электронов через него пренебрежимо мал. Соответственно, согласно (2) можно считать близкой к нулю и плотность макроскопического потока b -электронов \mathbf{N}_b .

Предположим, что a и b – электроны представляют собой две фазы электронного газа, химические потенциалы F_a и F_b которых могут быть различны. В результате поглощения энергии тепловых флуктуаций происходят переходы электронов из b – состояний в a – состояния и обратные переходы, сопровождающиеся излучением энергии. Эти процессы, лежащие в основе инжекционного механизма переноса заряда в КП, можно описать по модели [9] как обмен электронами между a и b – фазами, используя соответствующие уравнения баланса

$$\begin{cases} (\nabla, \mathbf{N}_a) = -\frac{\gamma}{\hbar} (F_a - F_b)(\mathbf{n}_a + \mathbf{n}_b) \\ (\nabla, \mathbf{N}_b) = -\frac{\gamma}{\hbar} (F_b - F_a)(\mathbf{n}_a + \mathbf{n}_b) \end{cases} \quad (4)$$

Правые части уравнений (4) описывают обмен электронов между фазами. Для фигурирующих в (4) макроскопических концентраций электронов в a и b – фазах справедливы выражения, аналогичные (2)

$$\mathbf{n}_{a,b} = \sum_E \rho_{a,b}(E_{a,b}) f_{a,b}(E_{a,b}, \mathbf{F}_{a,b}, T), \quad (5)$$

Постоянная γ характеризует скорости переходов между фазами (в расчетах она принималась равной 1/8).

Уравнения (4) решались совместно с уравнениями Шредингера и Пуассона. Из уравнения Шредингера определялись допустимые состояния электронов, их волновые функции и связанные с ними микроскопические плотности и скорости.

Уравнение Пуассона использовалось для определения самосогласованного потенциала U^{eff} . В качестве граничных условий для химических потенциалов принимались

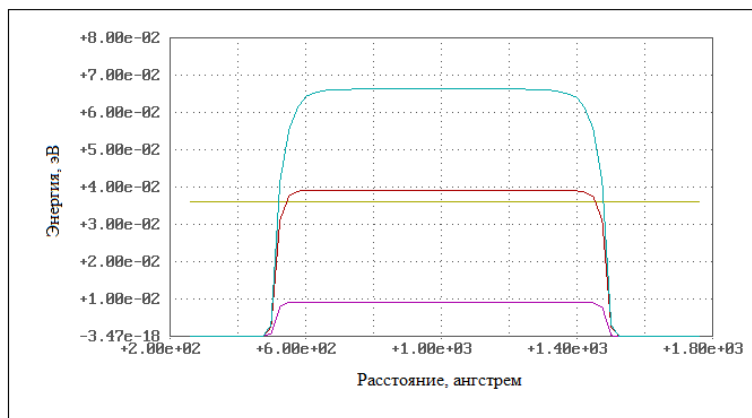
$$\begin{aligned} F_a(x_{0a}) &= F_b(x_{0a}) = 0 \\ F_a(x_{0k}) &= F_b(x_{0k}) = -e \cdot V \end{aligned} \quad (6)$$

где e – заряд электрона, V приложенное в коллекторному контакту напряжение. Такая постановка граничных условий позволила описать перенос заряда как в проводящем канале, так и в контактных областях, в которых происходит инжекция электронов. Формулы (2) и (3) дают возможность учесть как квантовые, так и классические явления. В приближении малого времени релаксации τ при условии равновесия a и b – фаз $F_a = F_b$. А из соотношений (3) и (2) получается обычное соотношение для потока дрейфово-диффузионной модели [7].

Если энергия Ферми электронов превышает высоту потенциального барьера более чем на среднюю энергию тепловых флуктуаций kT , то количество b -электронов в ПК много меньше, чем количество a -электронов. В этом случае основной вклад в проводимость дают надбарьерные a -электроны, и тип проводимости КП не отличается от типа проводимости контактных областей. Поэтому зависимость сопротивления от температуры для КП с поперечным размером проводящего канала $L = 15$ нм имеет обычный, характерный для металлов вид (рис. 4 и 5). Она, главным образом, определяется температурной зависимостью времени релаксации импульса электронов τ .

Для КП типа у-КРП, когда энергия Ферми меньше высоты эффективного потенциального барьера, основным становится инжекционный механизм проводимости. Концентрация собственных a -электронов в ПК в этом случае мало. Этим обусловлено высокое удельное сопротивление провода при низких температурах. При увеличении температуры согласно соотношению (5) возрастает количество электронов с энергией, большей E_F . Соответственно увеличивается и коэффициент при разности химических потенциалов в правых частях уравнений (4). Как следствие, возрастает число инжектируемых в проводящий канал электронов. Рис. 5 иллюстрирует рассчитанную температурную зависимость сопротивлений КРП различного поперечного размера, нормированных на их значения при комнатной температуре ($T = 300$ К).

Характер температурной зависимости сопротивления КП полностью коррелирует с особенностями его потенциального рельефа, демонстрируемого на рис. 4. Если энергия Ферми превышает высоту потенциального барьера, создаваемого ПК, то сопротивление металлического КП при повышении температуры растет. Если энергия Ферми меньше высоты потенциального барьера, то сопротивление КП при увеличении температуры уменьшается.



$L = 4$ нм

Рис. 4. Энергия Ферми (E_F) и эффективный потенциальный рельеф U^{eff} для электронов проводимости в КП в направлении $0X$ для случаев $L = 15$ нм, 9 нм и 4 нм при нулевом смещении.

Эти качественные изменения в электрических характеристиках КП регулируются поперечным размером проводящего канала.

При реализации в КП инжекционного механизма проводимости количество электронов в ПК начинает существенно зависеть от температуры. Чем выше температура, тем большее количество электронов инжектируется в ПК из

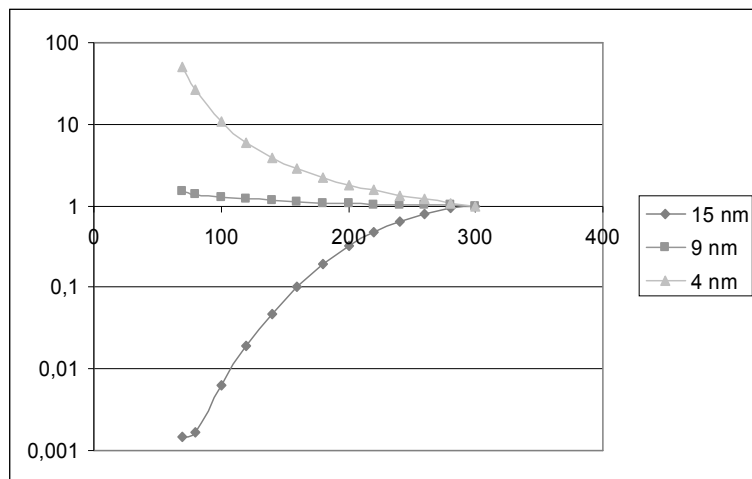


Рис. 5. Зависимость сопротивления КРП, нормированного на сопротивление при $T = 300$ К, от температуры для различных значений поперечного размера проводящего канала $L = 15$ нм, 9 нм, 4 нм.

температурной зависимостью τ .

Выводы

Итак, предложена модель, позволяющая объяснить экспериментальные результаты представленные в статье [1]. Сопротивление τ -КРП возрастает с температурой так же, как и сопротивление объемного материала. Это связано с тем, что в таких проводах энергия Ферми электронов проводимости превышает высоту расположенного между контактными областями потенциального барьера, создаваемого проводящим каналом прибора. Основным механизмом переноса заряда в этом случае является дрейфово-диффузионный, а основной вклад в проводимость дают надбарьерные электроны. При уменьшении поперечного размера проводящего канала высота потенциального барьера увеличивается и, наконец, начинает превышать энергию Ферми. Доминирующую роль в переносе заряда в КРП начинает играть инжекционный механизм [10]. Концентрация электронов, инжектированных из контактов в проводящий канал, тем больше, чем выше температура. Именно этим обусловлено уменьшение сопротивления τ -КРП при увеличении температуры.

Список литературных источников

- Heremans J. P., Thrusch C. M., Morelli D. T., Wu M.-C. Resistance, Magnetoresistance, and Thermopower of Zinc Nanowire Composites // *Phys. Rev. Lett.* – 2003.- v.91.- P.076804-076810
- Beutler D.E., Giordano N. Localization and electron-electron interaction effects in thin Bi wires and films// *Phys. Rev.* – 1988. - В 38. – P.8-13
- Ковальчук В.В., Долінська Л.В. Принципи дослідження апаратного забезпечення нановимірювань // *Метрологія та прилади.* - 2010. - №4(24).-С.49-59
- Alivatos A.P. Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots // *Science.*-1996. - v.271.- P933-941
- Ковальчук В.В. Кластерная модификация полупроводниковых гетероструктур. Научное издание К.: Hi-Tech., 2007.- 309 с.
- Martel R., Schmidt T., Shea H.R., Hertel T., Avouris Ph. Single- and multi-wall carbon nanotube field-effect transistors // *Appl. Phys. Lett.* – 1998.- v. 73.- P.2447-2455
- Ковальчук В.В. Оптические и электрические свойства гетероперехода, содержащего пленочную подсистему // *Вісник інженерної академії України.*-№2.-2010.-С.12-16
- Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. - М.: «Наука», 1990. - 688 с.
- Обухов И.А., Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах, Москва-Киев-Минск-Севастополь: «Вебер», 2005. - 226 с.
- Дроздов В.А., Ковальчук В.В. Електронні процеси в наноструктурах с субфазим кремнієм // *Журнал фізичних досліджень.*-2003.- № 4.- С.25-32

контактов, и их концентрация в канале возрастает.

Дифференциальное сопротивление ПК пропорционально величине $(\tau n_a)^{-1}$. В расчетах предполагалось, что τ обратно пропорционально температуре. Для τ -КРП уменьшение сопротивления с ростом температуры происходит за счет увеличения концентрации электронов в ПК. Этот эффект превышает обратное влияние, обусловленное