
ТЕРМОЕРС У НАНОДРОТАХ Vi У ПОПЕРЕЧНОМУ ПОСТІЙНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

Синявський Е.П.¹, Соловенко В.Г.², Карпетян С.А.²

¹Інститут прикладної фізики Академії наук Молдови, вул. Академічна, 5, Кишинів, MD-2028, Молдова;

²Придністровський державний університет ім. Т.Г. Шевченка, вул. 25 Жовтня, 107, Тирасполь, MD-3300, Молдова)

- Теоретично досліджується термоЕРС у квантових дротах Vi , коли потенціальна енергія носіїв для простоти описується параболоїдом обертання, а постійне електричне поле спрямоване перпендикулярно осі наносистеми. У розрахунках термоЕРС урахувалося розсіювання електронів і дірок на шорсткуватій дельта-корельованій поверхні. Зокрема показано, що зі зростанням напруженості електричного поля термоЕРС має немонотонний характер і в основному визначається електронами (термоЕРС негативна).

Вступ

У квантових дротах як наслідок одномірності досліджуваної наносистеми на дні розмірно-квантованих зон виникають особливості в щільності енергетичних станів. Саме ця обставина призводить зокрема до особливостей оптичних властивостей нанодротів [1 – 4] і помітно впливає, як буде показано нижче, на кінетичні коефіцієнти в нанодротах з виродженим електронним (дірковим) газом. У цій праці теоретично досліджується термоЕРС квантових дротів типу Vi у моделі квадратичного потенціалу. Така модель часто застосовується в розрахунках кінетичних коефіцієнтів у нанодротах [5, 6] і має своє теоретичне обґрунтування [7]. Якщо постійне електричне поле E , спрямоване уздовж осі розмірного квантування наноструктури, за певних умов може істотно впливати на рухливість [8], то становить інтерес досліджувати вплив E на термоЕРС низькорозмірних систем.

Постановка задачі. Загальні співвідношення

Досліджується термоЕРС квантових дротів типу Vi з потенціальною енергією носіїв у формі параболоїда обертання в постійному електричному полі E , спрямованому перпендикулярно осі досліджуваної наноструктури. У розглянутій моделі енергія електронів з ефективною масою m_c у розмірно-квантованій зоні провідності має вигляд

$$\varepsilon_c = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_c} + \hbar\omega_c (n + k + 1) - \Delta_c, \Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_c \omega_c^2}, \quad (1)$$

де k_x – хвильовий вектор носія уздовж осі нанодротини, $\hbar\omega_c$ – крок розмірного квантування, який просто пов'язаний з величиною потенційної енергії ΔE_c на границі наноструктури з радіусом R :

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar}{R} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m_c}}.$$

Як безпосередньо впливає з (1), з ростом напруженості електричного поля дно розмірно-квантованої зони провідності опускається в заборонену зону. Саме ця обставина призводить до того, що з урахуванням розсіювання електронів на шорсткуватій поверхні час релаксації залежить від E , що й призводить до помітної зміни кінетичних коефіцієнтів [8]. З ростом E носії «притискаються» до поверхні наноструктури, тобто їхня взаємодія із шорсткуватою поверхнею збільшується, що призводить до зменшення часу релаксації. Аналогічним чином можна

обчислити енергію електронів з ефективною масою m_v в розмірно-квантованій валентній зоні.

$$\varepsilon_v = \Delta - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_v} - \hbar\omega_v (n + k + 1) + \Delta_v, \quad (2)$$

$$\Delta_v = \frac{e^2 E^2}{2m_v \omega_v^2}, \quad \hbar\omega_v = \frac{\hbar}{R} \sqrt{\frac{2\Delta E_v}{m_v}}.$$

Надалі для нанодротів Ві розглянемо найпростішу модель зон, що перекриваються (рис. 1). На рис. 1. суцільними лініями зображено розмірно-квантовані рівні c і v зон. Пунктирними лініями показано енергії носіїв у постійному електричному полі. Розрахунки термоЕРС α_{xx} (слабко тягнуче електричне поле спрямовано уздовж осі x) здійснювалися з використанням загальних співвідношень, що зв'язують α_{xx} із щільністю потоку теплової енергії γ_{xx} носіїв і з електропровідністю σ_{xx} електронів і дірок [9]. У наближенні часу релаксації [10] електропровідність і щільність потоку теплової енергії електронів мають вигляд:

$$\sigma_{xx}^{(c)} = \frac{\beta e^2 \hbar^2}{2Vm_c^2} \sum_{\alpha} k_x^2 \tau_{\alpha}^{(c)} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \quad (3 a)$$

$$\gamma_{xx}^{(c)} = \frac{\beta e^2 \hbar^2}{2Vm_c^2} \sum_{\alpha} (E_{\alpha}^c - \xi) k_x^2 \tau_{\alpha}^{(c)} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \quad (3 б)$$

де n_{α} – рівноважна функція розподілу носіїв з енергією E_{α}^c ; α – набір квантових чисел, що описують стан електрона; $1/\tau_{\alpha}^{(c)}$ визначає повну квантово-механічну ймовірність розсіювання частки в одиницю часу; ξ – хімічний потенціал досліджуваної системи, $\beta = 1/k_0 T$; T – температура; V – об'єм основної області наноструктури.

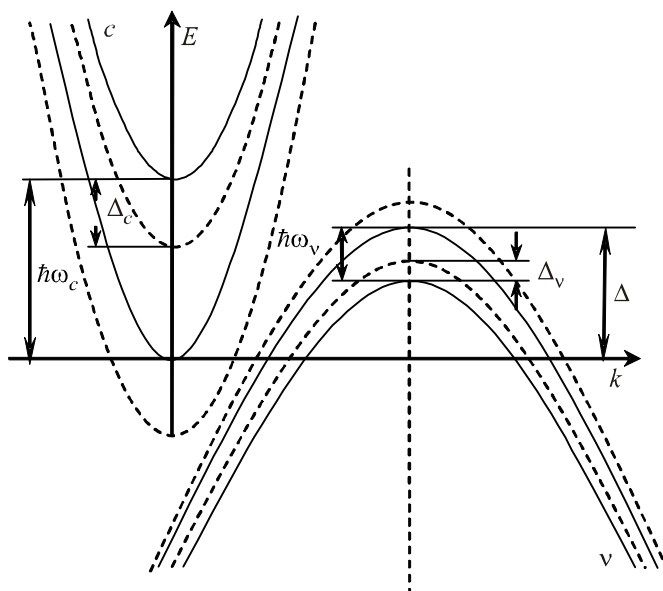


Рис. 1. Схема енергетичних зон квантового дроту Ві у постійному електричному полі.

Аналогічно можна записати $\sigma_{xx}^{(h)}$, $\gamma_{xx}^{(h)}$ дірок в v зоні. Розрахунки часу релаксації τ_{α} здійснимо з урахуванням розсіювання носіїв на шорсткуватій поверхні аналогічно [8]. У випадку δ -образної флуктуації поверхні неважко одержати

$$\frac{1}{\tau_{\alpha}^{(c)}} = \frac{2m_c \omega_c^2 \gamma_0}{\hbar R^2 |k_x|} [n + k + 1 + N_c]^2, \quad (4)$$

де $N_c = 2\Delta_c / \hbar\omega_c$, γ_0 – описує висоту флуктуації. При розрахунках часу релаксації для випадку гаусової флуктуації [11] за низьких температур (саме за низьких температур розсіювання носіїв на шорсткуватій поверхні найбільш активне), $1/\tau_{\alpha}^{(c)}$ описується співвідношенням (4), у якому потрібно γ_0 замінити на $\pi\Delta_0^2\Lambda^2$ (Δ_0 – висота гаусової флуктуації, Λ – її довжина). Зауважимо, що $\tau_{\alpha}^{(c)}$ (для будь-якого типу флуктуації) у точності дорівнює транспортному часу релаксації, який використовується для вирішення кінетичного рівняння Больцмана. Аналогічно записується $\tau_{\alpha}^{(v)}$ дірок. У результаті вираз термоЕРС після підсумовування за k_x набуває вигляду:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \left\{ \sum_{n,m} \left[v \frac{F_2(\eta_{nm}^c) - \eta_{nm}^c F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} - \frac{F_2(\eta_{nm}^v) - \eta_{nm}^v F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\} \times \left\{ \sum_{n,m} \left[v \frac{F_1(\eta_{nm}^c)}{(n+m+1+N_c)^2} + \frac{F_1(\eta_{nm}^v)}{b(n+m+1+aN_c)^2} \right] \right\}^{-1}, \quad (5)$$

$$a = \left(\frac{m_h}{m_c} \right)^2 \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_h} \right)^2, \quad b = \frac{\Delta E_h}{\Delta E_c},$$

$$\eta_{nm}^c = \beta [\Delta_c + \xi - \hbar\omega_c (n+m+1)],$$

$$\eta_{nm}^v = \beta [\Delta + \Delta_v - \xi - \hbar\omega_v (n+m+1)],$$

$$F_k(\eta) = \int_0^{\infty} dx \cdot x^k \cdot \frac{e^{x-\eta}}{(e^{x-\eta} + 1)^2}, \quad F_1(\eta) = \ln(e^{\eta} + 1).$$

v – кількість зон провідності, що бере участь у кінетичних процесах. Хімічний потенціал ξ визначається з умови електронейтральності досліджуваної наноструктури (число електронів у розмірно-квантованих c зонах дорівнює числу дірок в v зоні):

$$v \sqrt{\frac{m_c}{m_v}} \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^c) = \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^v). \quad (6)$$

Аналітичний розв'язок рівняння (6) для хімічного потенціалу можна знайти для окремих випадків.

Якщо носії перебувають на найнижчому розмірно-квантованому рівні ($n=m=0$) і електронний і дірковий газ вироджені (хімічний потенціал позитивний і $\beta\xi \gg 1$), то за $m_c \ll m_v$ з (6) не важко визначити ξ :

$$\xi - \hbar\omega_c = \Delta + \Delta_v - (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v), \quad \left(\frac{\Delta_v}{\Delta_c} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} > 1 \right)$$

$\xi - \hbar\omega_c$ – хімічний потенціал, відлічуваний від дна розмірно-квантованої зони.

У такої простої моделі термоЕРС набуває вигляду:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^3}{3} \frac{1 - \frac{1}{bv} \left(\frac{1+N_c}{1+aN_c} \right)^2}{\beta [\Delta_c + \Delta + \Delta_v - \hbar\omega_c - \hbar\omega_v]}. \quad (7)$$

Отже, термоЕРС негативна, тобто визначається електронами, і зі збільшенням

напруженості електричного поля E зменшується.

У протилежному випадку, тобто у випадку невивіржених електронного й діркового газів (це справедливо за малих радіусів квантового дроту $d \ll 500 \text{ \AA}$, за $T = 77 \text{ K}$ [3]), як впливає з рівняння (6), хімічний потенціал визначається зі співвідношення

$$v \sqrt{\frac{m_c}{m_v}} \exp(\eta_{00}^c) = \exp(\eta_{00}^v). \quad (8)$$

У результаті

$$\alpha_{xx}^{(nd)} = -\frac{k_0}{e} \left\{ 2 + \beta \left[\frac{1}{2} \ln(v^2 \frac{m_c}{m_h}) + (\hbar\omega_c + \hbar\omega_v - \Delta + \Delta_v + \Delta_c) \right] \right\}. \quad (9)$$

Розрахунки термоЕРС у загальному випадку проведено за співвідношенням (5) з урахуванням розмірно-квантованих v і c зон за типових значень параметрів квантового дроту: $\Delta E_c = 0.5 \text{ eV}$, $\Delta E_v = 0.3 \text{ eV}$, $\Delta = 0.038 \text{ eV}$, $m_c = 0.01 m_0$, $m_v = 0.1 m_0$, при $R = 500 \text{ \AA}$. Залежність термоЕРС від напруженості постійного електричного поля наведено на рис. 2.

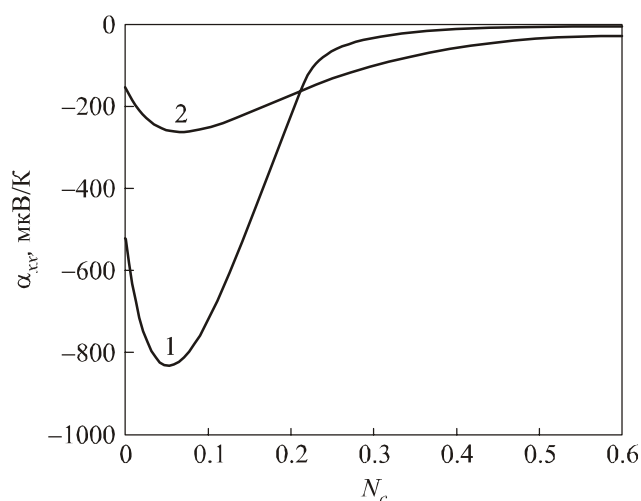


Рис. 2. Залежність питомої термоЕРС квантового дроту від напруженості поперечного електричного поля.

Криву 1 отримано за $T = 10 \text{ K}$, криву 2 обчислено за $T = 50 \text{ K}$. Як безпосередньо впливає з рис. 2, зі збільшенням температури величина термоЕРС за абсолютною величиною зменшується, а зі збільшенням E прямує до нуля, залишаючись при цьому негативною.

У нанодротах, як наслідок одномірності наноструктури, густина станів на дні кожної розмірно-квантованої зони виникають особливості. Тому зі збільшенням напруженості постійного електричного поля екстремуми, наприклад, розмірно-квантованих v зон, піднімаючись нагору за енергією, можуть перетинати хімічний потенціал, що, природно, призводить до особливостей кінетичних коефіцієнтів (наприклад, рухливості). Однак у термоЕРС ці особливості не дуже яскраво проявляються, оскільки α_{xx} визначається відношенням потоку теплової енергії носіїв до електропровідності.

За $E = 0$ дірки вносять помітний вклад у термоЕРС, зменшуючи її в абсолютній величині. Зі збільшенням напруженості електричного поля (для розглянутих вище параметрів нанодрота $a \sim 7$) внесок дірок у термоЕРС швидко зменшується, а це й призводить до того, що в залежності α_{xx} від N_c (рис. 2) виникає характерний мінімум.

Висновки

Виходячи з вищевикладеного, зовнішнє електричне поле дає унікальну можливість управляти величиною термоЕРС, що робить можливим сподіватися на приладове застосування передвіщеного ефекту. На закінчення відзначимо, що сильна анізотропія ефективних мас у нанодротах Bi (залежно від напрямку кристалографічних осей маси для електронів у c -зоні мінюються від $0.001m_0$ до $0.26m_0$, валентній зоні від $0.059m_0$ до $0.634m_0$ [4]) впливає на величину розглянутого ефекту, що зберігає залежність термоЕРС від E практично незмінної.

Робота виконана за часткового фінансування Українським Науково-технологічним центром і Академією наук Молдови (грант 5062).

Література

1. M.R. Black, P.L. Hagelstein, S.B. Cronin, Y.M. Lin and M.S. Dresselhaus. Optical absorption from an indirect transition in bismuth nanowires. *Phys. Rev. B* 68, 235417 (2003).
2. M.R. Black, M. Padi, S.B. Cronin, Y.-M. Lin, O. Rabin, T. McClure, G. Dresselhaus, P.L. Hagelstein, and M.S. Dresselhaus. Intersubband transitions in bismuth nanowires. *Appl. Phys. Lett.* 77, 4142 (2000).
3. M.R. Black, Y.-M. Lin, S.B. Cronin, O. Rabin, and M.S. Dresselhaus. Infrared absorption in bismuth nanowires resulting from quantum confinement. *Phys. Rev. B* 65, 195417 (2002)
4. J. Levin, M.R. Black, and M.S. Dresselhaus. Indirect L to T point optical transition in bismuth nanowires. *Phys. Rev. B* 79, 165117 (2009).
5. Гейлер В.А. Проводимость квантовой проволоки в продольном магнитном поле / В.А. Гейлер, В.А. Маргулис // ЖЭТФ. – 1998. – № 113. – С. 1376 – 1382.
6. Гейлер В.А. Проводимость квантовой проволоки в параллельном магнитном поле / В.А. Гейлер, В.А. Маргулис // ФТП. – 1999. – Т. 33, В. 9. – С 1141 – 1143.
7. C.W.J. Beenakker and H. van Houten. *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures. Solid State Physics.* (Academic, New York, 1991). Vol. 44, p. 83.
8. Синявский Э.П. Исследования подвижности в низкоразмерных системах в постоянном поперечном электрическом поле / Э.П. Синявский, С.А. Карапетян // ФТП. – 2011. – Т. 45. – С. 1062.
9. Kubo R., Yokota M., Nakajima S. *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance.* *J. Phys. Soc. Jpn.* 12, 1957, p. 1203.
10. Синявский Э.П. Особенности электропроводности параболической квантовой ямы в магнитном поле / Э.П. Синявский, Р.А. Хамидуллин // ФТП. – 2002. – Т. 36. – С. 989.
11. I. Vurgafman, J.R. Meyer. TE- and TM-polarized roughness-assisted free-carrier absorption in quantum wells at midinfrared and terahertz wavelengths. *Phys. Rev.* 60, 1999, p. 14294.

Надійшла до редакції 18.05.2011.