

Д.В. Матулка, Б.А. Лукіянець

Квантова ємність в наноструктурах різної електричної природи

Національний університет „Львівська політехніка”, 79013, м. Львів, вул. С. Бандери, 12,
dariya2009@gmail.com

Проведено теоретичний аналіз квантової ємності в одновимірних наноб'єктах різної електричної природи - металі, власному напівпровіднику, напівметалі. Отримано нетривіальні залежності ємності від прикладеного потенціалу.

Ключові слова: Лі наноб'єкт, електрична ємність, квантоворозмірні ефекти.

Стаття постуила до редакції 22.05.2011; прийнята до друку 15.10.2011.

Вступ

Класична електродинаміка трактує електричну ємність C як результат перерозподілу протилежних зарядів величиною q на двох протилежних об'ємних провідниках, розділених діелектриком. Іншими словами, класична ємність має електростатичну природу. Ємність пов'язана з потенціальною енергією W співвідношенням $W=q^2/2C$. Проте в потенціальній енергії повинен бути присутній ще один внесок, спричинений зміною хімічного потенціалу при заряджанні: заповнення порожніх електронних станів з одночасною появою дірок у валентній зоні, якщо мова йде про напівпровідник [1]. Тому потенціальну енергію слід переписати так:

$$W = \frac{q^2}{2C} = \frac{q^2}{2C_{el}} + \frac{q^2}{2C_q},$$

звідки загальна ємність визначається

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{el}} + \frac{1}{C_q},$$

тобто як сума двох послідовно включених ємностей C_{el} - класичної та C_q - квантової.

Переважаю $C_q \gg C_{el}$, отже, при послідовному ввімкненні $C \approx C_{el}$, тобто C_q неефективне. Проте з появою наноб'єктів спостерігається зворотна ситуація. Тому останнім часом інтерес до явища квантової ємності різко зріс. Зовсім недавно в роботі [2] було повідомлено, що вперше вдалося експериментально виміряти квантову ємність в такому популярному нині об'єкті, як графен, дослідження якого було удостоєно нобелівської премії з фізики 2010 р. [3]. Автори відносять дослідження квантової ємності до таких самих за

важливістю характеристик, як більш популярна до цього часу характеристика - рухливість електронів.

Дослідження умов, ефектів розмірності на величину ємності є особливо інтенсивними останніми роками. Вперше на ці обставини була звернена увага в роботі [4], де досліджувалась поведінка електрона в двохмірних структурах Si і GaAs, застосовуючи густину електронних станів 2D-системи (D - dimension - розмір). Саме в цитованій роботі було введено таке поняття як квантова ємність.

Відомо [5], що густина станів як неперервна функція енергії є різною для різних за розмірністю, тобто 1D-, 2D- чи 3D-, впорядкованих структур, в яких ідеальність структури (граничні умови Борна-Кармана), залишаються справедливими, але лише відповідно в одному, двох чи трьох кристалографічних напрямках. В цитованій роботі [4] електронній енергетичній структурі відповідає густина станів як постійна неперервна функція енергії E . Тому широкоживана формула (4) через специфіку $g(E)$ дозволяє зробити висновки про ті чи інші фізичні характеристики, вибраної системи щодо розмірності.

У випадку 2D-структури прикладене поперечне електричне поле, на противагу, до масивної металічної пластини, не повністю екранується. Це породжує ємність, розраховану на одиничну площу $C_q = \frac{me^2}{p\hbar^2}$. В подальших роботах [6] ця ідея була поширена на одновимірні моделі, зокрема, кремнієві нанотрубки. Проте висновки роботи застосовні до інших типів одновимірних наноструктур.

В одновимірному кристалі поява квантової ємності є проявом особливостей електронного

спектру, що на мові густини станів $g(E)$ виглядає так:

$$g(E) = \frac{n(E)}{ph} \sqrt{\frac{2m}{E}},$$

де $n(E)$ – кількість зон, які дають внесок при даній енергії.

У випадку 3D-системи густина станів $g(E) \sim \sqrt{E}$.

В загальному випадку ємність системи C визначається, як

$$C = \frac{dQ}{dV}, \quad (1)$$

тобто як зміна заряду Q , спричинену одиничним електростатичним полем V . За відсутності електричного поля

$$Q = e \sum_n f(E_n) \quad (2)$$

Тут

$$f(E_n) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_n - m}{kT}\right) + 1}$$

розподіл Фермі-Дірака (μ – хімічний потенціал чи рівень Фермі E_F). Сумування в (2) ведеться по квантових станах системи E_n .

У випадку ідеального кристалу їхній спектр – це квазінеперервний набір рівнів. Отже, сумування по станах в (2) можна замінити інтегруванням по енергії з врахуванням густини рівнів $g(E)$, тобто

$$Q = e \int g(E) \frac{1}{\exp\left(\frac{E - m + eV}{kT}\right) + 1} dE \quad (3)$$

Рівняння (3) записано в припущенні електрично-статичного поля, що жорстко зсуває електронні рівні.

Проте формула (3), як виглядає, не зовсім придатна 3-мірного кристалу з обмеженими в хоча би в одному з напрямків геометричними розмірами. Яскравим їх прикладом є так звані наноструктури (див., напр., [7]). Визначення наноструктури має більш строгий критерій – її розміри повинні бути співмірні або менші від довжини хвилі де Бройля в ній. Хай ми маємо одомірну структуру скінчених розмірів. Розглянемо, той випадок, коли її потенціал прямокутна яма, шириною a з нескінченно високими стінками. Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера при цьому твердить, що енергетична структура станів – система дискретних рівнів з $E_n = E_1 n^2$ [8] ($n=1, 2, 3, \dots$ – номер дискретного стану,

$E_1 = \frac{h^2 p^2}{2ma^2}$ – енергія основного стану). Таким чином,

для структур з розмірами $a=20$ нм, $E_1=9,4 \cdot 10^{-4}$ еВ, що відповідає імпульсу $p = \sqrt{2mE_1} = 16,54 \cdot 10^{-27} \frac{e\hbar \cdot i}{\text{н}}$.

Електрон в основному стані має довжину хвилі де Бройля $\lambda_B = \frac{h}{p} \cong 50$ нм. Для потенціальної ями

шириною $a = 10$ нм, $E_1=4 \cdot 9,4 \cdot 10^{-4}$ еВ, а $\lambda_B \cong 25$ нм і т.д. Для збуджених станів такі хвилі будуть ще меншими. При цьому відстань між дискретними

рівнями $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{h^2 p^2}{2ma^2} (2n+1) \Rightarrow \frac{h^2 p^2}{2ma^2} 2n$ при

$n \gg 1$ або на мові довжини хвилі де Бройля

$$\Delta E = \frac{h}{m \lambda_B^2} n \quad (\lambda_{B1} - \text{довжина хвилі де Бройля в основному стані}).$$

У цьому випадку – коли електрон в стані з довжиною хвилі де Бройля співмірною чи меншою від розмірів системи – його дискретний характер, пов'язаний з так званим просторовим квантуванням. При цьому мова густини станів, а отже, процедура квантування типу, що у формулі (3) [6] є нестроюю і її висновки можуть втрачати тонкощі, що є наслідком існуючої дискретизації станів. Проте нижче ми будемо користуватись термінами „зона провідності”, „валентна зона”, „заборонена зона”, пам'ятаючи, що під зоною в даному випадку, слід розуміти набір дискретних рівнів.

Виникає питання про прояви в явищі квантової ємності більш тонких особливостей електронного спектру в низькорозмірних структурах, а саме, розмірного квантування.

I. Розрахунок квантової ємності

Розглянемо одомірні моделі з прямокутними нескінченно глибокими ямами, які моделюють низькорозмірні структури різної електричної природи – метали, напівпровідники, напівметали. На рис.1 представлені потенціали таких структур. Нижче скористаємося відомими енергетичними станами електрона в такій моделі (див. вище) для аналізу квантової ємності в металах, напівпровідниках, напівметалах. Розрахунки проводились для

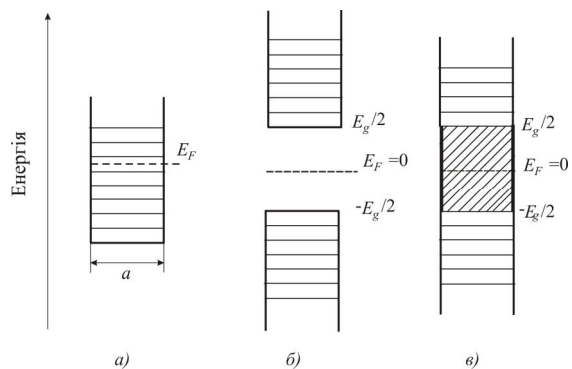


Рис. 1. Нескінченно глибокі ями, що моделюють одомірні структури: а) металічну; б) напівпровідну; в) напівметалічну. (E_F – рівень Фермі, a – ширина ями). У випадках б) і в) положення рівня Фермі E_F (хімічного потенціалу μ), вибране як початок відліку посередині забороненої зони між зонами електронів і дірок зі співпадаючими ефективними масами; заштрихована область на рисунку в) – перекриття на величину E_g зони провідності та валентної зони.

ями з шириною 20 нм зі значеннями енергетичних характеристик, записаних в eB .

Випадок металічної наночастки.

Вираз для квантової ємності з врахуванням формул (1), (2) в даному випадку набуває такого вигляду:

$$C_q = e \frac{d}{dV} \sum_n \frac{1}{\exp\left(\frac{E_n - m + eV}{kT}\right) + 1} = -\frac{e^2}{4kT} \sum_n ch^{-2} \left(\frac{E_n - m + eV}{2kT} \right) \quad (4)$$

На рис. 2а представлений модуль ємності в одиницях (як і далі) $\frac{e^2}{4kT}$ як функція прикладеного електричного зміщення V . При $V=0$ під рівнем Фермі E_F є певна кількість рівнів. Зі збільшенням поля все більша їхня кількість виштовхується вище E_F . Це супроводжується зменшенням кількості електронів у структурі. Осциляційна поведінка $C_q(V)$ пояснюється дискретним характером пересікання E_F електронними рівнями. Особливо велика амплітуда осциляцій при малих V , яка практично пропадає при підході $E_1 + eV$ (E_1 , як і вище, – основний стан

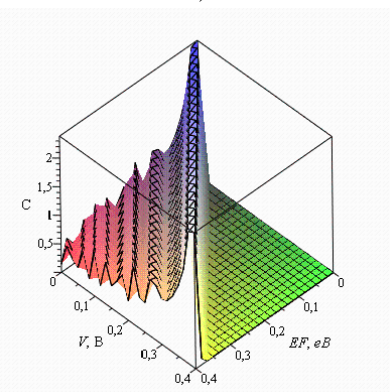
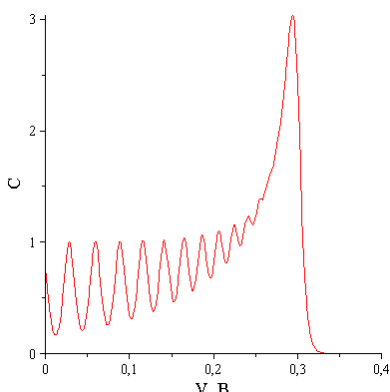


Рис. 2. Залежність квантової ємності C (тут і нижче в одиницях $-e^2/4kT$) від потенціалу V при $m=0.3$ (а) та в координатах параметрів V та хімічного потенціалу (б) у металічній наночастці

електрона в наносистемі). При $E_1 + eV = E_F$ крива досягає максимального значення. Подальше збільшення V виштовхує E_1 – найнижче значення спектру – вище E_F , і нижче рівня Фермі електрони відсутні. При цьому $C_q(V) \approx 0$ і визначається „хвостом” розподілу Фермі-Дірака.

На рис. 2б зображена більш загальна залежність квантової ємності – $C_q(V, \mu)$, яка дозволяє бачити аналогічну до зображеної на рис. 2а при різних положеннях m (чи E_F).

Випадок напівпровідникової наночастки.

Накладання електростатичного поля V до напівпровідника з симетричними відносно рівня Фермі E_F (як це має місце, напр., в графені) зони провідності та валентної зони (див. рис. 1б) породжує зарядову густину Q :

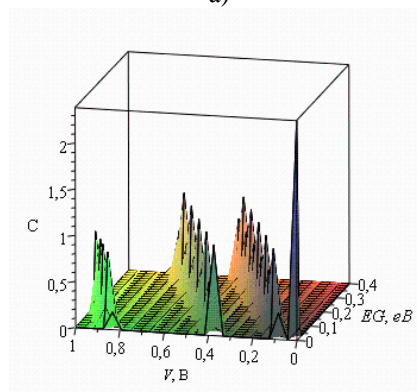
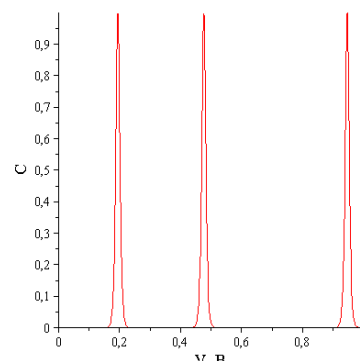


Рис. 3. Залежність квантової ємності від потенціалу V при $E_g = 0,2$ (а) та в координатах параметрів V та ширини забороненої зони E_g (б) у напівпровідниковій наночастці

$$Q = e \sum_{s=1}^{\infty} \left\{ f \left(E_s + \frac{E_g}{2} + eV \right) - f \left(E_s + \frac{E_g}{2} - eV \right) \right\},$$

а отже, квантову ємність

$$C_q = -\frac{e^2}{4kT} \sum_{s=1}^{\infty} \left\{ ch^{-2} \left(\frac{E_n + E_g/2 + eV}{2kT} \right) + ch^{-2} \left(\frac{E_n + E_g/2 - eV}{2kT} \right) \right\} \quad (5)$$

На рис. 3а зображена залежність квантової ємності $C_q(V)$, а на рис. 3б більш загальна

залежність– $C_q(V, E_g)$

Випадок напівметалічної наночастки.

З врахуванням, що в даному випадку, згідно рис. 1б, дно зони провідності (стеля валентної зони) міститься при значенні $-E_g/2$ ($E_g/2$) вираз для

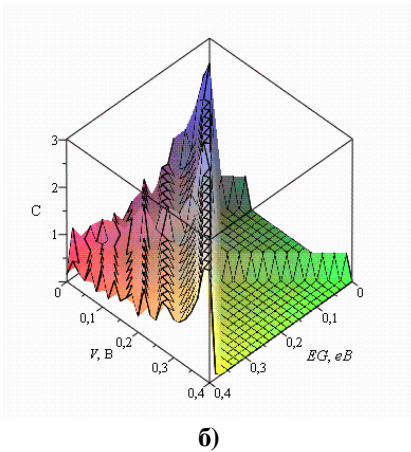
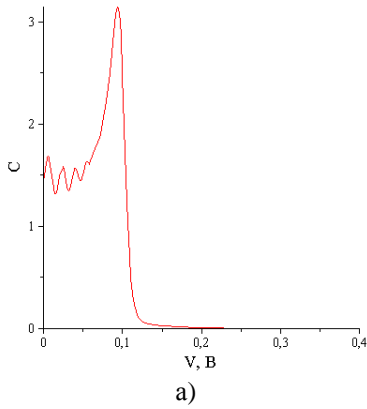


Рис. 4. Залежність квантової ємності від потенціалу V при ширини забороненої зони $E_g = 0,2$ (а) та в координатах параметрів V та E_g (б) у напівметалічній наночастці.

квантової ємності виглядає так:

$$C_q = -\frac{e^2}{4kT} \sum_{s=1}^{\infty} \left\{ ch^{-2} \left(\frac{E_n - E_g/2 + eV}{2kT} \right) + ch^{-2} \left(\frac{E_n - E_g/2 - eV}{2kT} \right) \right\} \quad (6)$$

На рис. 4а зображена залежність квантової ємності $C_q(V)$ а на рис. 4б більш загальна залежність – $C_q(V, E_g)$.

II. Аналіз результатів

Проаналізуємо спочатку фрагменти результатів $C_q(V, E_g)$, поданих на рисунках 2б, 3б, 4б, а саме їхні фрагменти при фіксованих значеннях E_F (рис. 2а) та E_g (рис. 3а та рис. 4а).

Залежності квантової ємності $C_q(V)$ для металу та напівметалу якісно нагадують одна одну, а саме, її осциляційний ріст до максимального значення при

$$V \approx \frac{1}{e} (E_F - E_1) \quad \text{в металі} \quad \text{чи} \quad V \approx \frac{1}{e} \left(E_1 - \frac{E_g}{2} \right) \quad \text{в}$$

напівметалі (в даному випадку $\frac{E_g}{2}$ відповідає ролі E_g

в металі). Поведінка $C_q(V)$ при $V > \frac{1}{e} (E_F - E_1)$ для

металу описана вище. Для напівметалу поведінка $C_q(V)$ при $V > \frac{1}{e} (E_F - E_1)$ якісно відрізняється від

$C_q(V)$ від поведінки в металі появою додаткового піка. Його можна пояснити присутністю валентної зони. Дійсно, прослідкуємо за поведінкою першого (що відповідає зоні провідності) та другого (валентна зона) доданків під сумою для $E = E_1$ при подальшому збільшенні V від зазначеного вище його значення. При цьому величина другого доданка буде рости і одночасно падати величина першого. При значенні

$$V \approx \frac{1}{e} \left(E_1 - \frac{E_g}{2} \right)$$

остаточно сума таких протилежних за поведінкою доданків реалізує пік $C_q(V)$.

Рис. 2б та рис. 4б дозволяють скласти уяву про $C_q(V)$ при різних значеннях відповідно E_F та E_g .

Істотно відмінною від приведених є поведінка $C_q(V)$ в напівпровідниковій наночастці. З рис.3а випливає, що $C_q(V)$ являє собою набір d -подібних піків. Рис. 3б з залежністю $C_q(V, E_g)$ підтверджує такий висновок.

При вибраному потенціалі, що описує напівпровідникову наночастку (рис. 1б), – це власний напівпровідник зі співпадаючими ефективними масами електронів n та дірок p . При $V = 0$ має місце рівність $n = p$, так як заповнення в тих самих станах n зони провідності і валентній зоні співпадають. Величина носіїв визначається ступінню розмиття $\sim kT$ розподілу Фермі-Дірака в околі рівня Фермі E_F . Тому їхня величина набагато нижча, ніж у випадку металу чи напівметалу.

При накладанні потенціалу зміщення V компенсація носіїв порушується. Так, при рості V в залежності від його знаку відбувається зсув рівнів до дна зони провідності з одночасним зсувом від стелі валентної зони чи навпаки. Тому, якщо розглядати конкретний рівень n , хай зони провідності, то при зміні V , що притискає його до дна зони, при певному значенні V можлива його часткова компенсація рівнем $(n - 1)$ валентної зони, далі з $(n - 2)$ і т.д. Така ситуація в поведінці концентрацій носіїв породжує залежність квантової ємності $C_q(V)$, зображеної на рис. 3.

Таким чином, спостережувані немонотонні залежності квантової ємності від потенціалу зміщення є проявами розмірного квантування, а також виявляють залежність від типу електричної природи наноструктур.

Ще одним доказом достовірності зробленого висновку є результати аналогічних до приведених розрахунків при ширині ями $a = 10$ нм. При цьому якісна поведінка $C_q(V)$ співпадає з отриманою вище для випадку $a = 20$ нм. Проте відстані між максимумами у випадку металу і напівметалу чи між d -подібними піками у випадку напівпровідника

збільшується. Це корелює, з врахуванням виразу для електронних станів $E_n = \frac{\hbar^2 p^2}{2ma^2} n^2 = E_1 n^2$, їхнього зростання як в цілому, так і відстані між сусідніми рівнями при звуженні ширини ями a .

Лук'янець Б.А – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри інженерного матеріалознавства та прикладної фізики Національного університету «Львівська політехніка».

Матулка Д.В. – аспірант кафедри інженерного матеріалознавства та прикладної фізики Національного університету «Львівська політехніка».

- [1] N. Kumar.// *Current Science*/ **68**(9), pp. 945-946 (1995).
- [2] Jil.in Xia, Fang Chen, Jinghong Li, Nonjan Tao. // *Nature Nanotechnology*. 4, pp. 505-509 (2009).
- [3] http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates (2010).
- [4] S. Luryi. // *Appl.Phys.Letters*. **52**(8), pp. 501–503 (1988)
- [5] Л.Е. Воробьев, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин. *Оптические свойства наноструктур.*, Наука, Санкт-Петербург, 188 с.(2001).
- [6] D.L. John, L.C. Castro, D.L. Pulfrey. // *Appl.Phys.Letters*. **96**(9), pp. 5180–5184 (2004).
- [7] L. Edward. Wolf. *Nanophysics and nanotechnology: introduction to modern concepts in nanoscience*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 184 p. (2004).
- [8] А.С. Давыдов. *Квантовая механика*, Наука, Москва, 704 с. (1973).

D.V. Matulka, B.A. Lukiyanets

Quantum Capacity in Nanoobjects of Various Electrical Essence

National University «Lviv Politehnica», 12, S.Bandery Str., Lviv, 79013, dariya2009@gmail.com

Quantum capacitance in one-dimensional nanoobjects of various electrical nature: metal, an intrinsic semiconductor, semimetal is analysed. Nontrivial dependence of the capacitance on the applied potential is obtained.

Key words: nanoobjects, electrical capacity, quantum effects.