
ТЕРМОЭДС В НАНОПРОВОЛОКАХ Bi В ПОПЕРЕЧЕНОМ ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Синяевский Э.П.¹, Соловенко В.Г.², Карапетян С.А.²

¹Институт прикладной физики Академии наук Молдовы,
ул. Академическая, 5, Кишинев, MD-2028, Молдова;

²Приднестровский государственный университет им. Т.Г. Шевченко,
ул. 25 Октября, 107, Тирасполь, MD-3300, Молдова)

- Теоретически исследуется термоЭДС в квантовых проволоках Bi , когда потенциальная энергия носителей, для простоты, описывается параболоидом вращения, а постоянное электрическое поле направлено перпендикулярно оси наносистемы. При расчете термоЭДС учитывалось рассеяние электронов и дырок на шероховатой дельта-коррелированной поверхности. В частности показано, что с ростом напряженности электрического поля термоЭДС носит немонотонный характер и, в основном, определяется электронами (термоЭДС отрицательна).

Введение

В квантовых проволоках, как следствие одномерности исследуемой наносистемы, на дне размерно-квантованных зон возникают особенности в плотности энергетических состояний. Именно это обстоятельство приводит, в частности, к особенностям оптических свойств нанопроволок [1 – 4], и заметным образом влияет, как будет показано ниже, на кинетические коэффициенты в нанопроволах с вырожденным электронным (дырочным) газом. В настоящей работе теоретически исследуется термоЭДС квантовых проволок типа Bi в модели квадратичного потенциала. Такая модель часто применяется при расчетах кинетических коэффициентов в нанопроволах [5, 6] и находит свое теоретическое обоснование [7]. Если постоянное электрическое поле E , направленное вдоль оси размерного квантования наноструктуры, при определенных условиях может существенным образом влиять на подвижность [8], то представляет интерес исследовать влияние E на термоЭДС низкоразмерных систем.

Постановка задачи. Общие соотношения

Исследуется термоЭДС квантовых проволок типа Bi с потенциальной энергией носителей в форме параболоида вращения в постоянном электрическом поле E , направленном перпендикулярно оси исследуемой наноструктуры. В рассматриваемой модели энергия электронов с эффективной массой m_c в размерно-квантованной зоне проводимости имеет вид:

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

здесь k_x – волновой вектор носителя вдоль оси нанопроволоки, $\hbar\omega_c$ – шаг размерного квантования, который простым образом связан с величиной потенциальной энергии ΔE_c на границе наноструктуры с радиусом R :

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

Как непосредственно следует из (1), с ростом напряженности электрического поля дно размерно-квантованной зоны проводимости опускается в запрещенную зону. Именно это

обстоятельство приводит к тому, что при учете рассеяния электронов на шероховатой поверхности время релаксации зависит от E , что и приводит к заметному изменению кинетических коэффициентов [8]. С ростом E носители «прижимаются» к поверхности наноструктуры, т.е. их взаимодействие с шероховатой поверхностью увеличивается, что приводит к уменьшению времени релаксации. Аналогичным образом можно вычислить энергию электронов с эффективной массой m_v в размерно-квантованной валентной зоне.

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

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

В дальнейшем для нанопроволок *Vi* рассмотрим простейшую модель перекрывающихся зон (рис. 1). На рис. 1. сплошными линиями изображены размерно-квантованные уровни c и v зон. Пунктирными линиями представлены энергии носителей в постоянном электрическом поле. Расчет термоЭДС α_{xx} (слабое тянущее электрическое поле направленно вдоль оси x) проводился с использованием общих соотношений, связывающих α_{xx} с плотностью потока тепловой энергии γ_{xx} носителей и с электропроводностью σ_{xx} электронов и дырок [9]. В приближении времени релаксации [10] электропроводность и плотность потока тепловой энергии электронов принимают вид:

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

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

здесь n_{α} – равновесная функция распределения носителей с энергией E_{α}^c ; α – набор квантовых чисел, описывающих состояние электрона; $1/\tau_{\alpha}^{(c)}$ – определяет полную квантово-механическую вероятность рассеяния частицы в единицу времени; ξ – химический потенциал исследуемой системы, $\beta = 1/k_0 T$; T – температура; V – объем основной области наноструктуры.

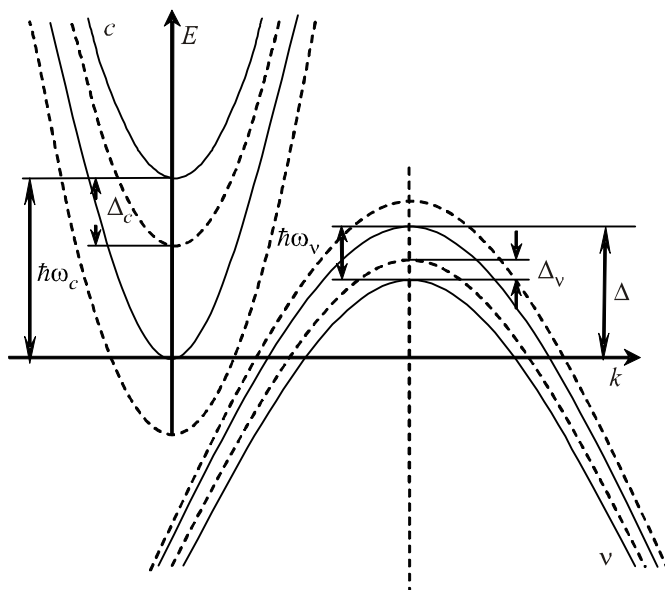


Рис. 1. Схема энергетических зон квантовой проволоки *Vi* в постоянном электрическом поле.

Аналогично можно записать $\sigma_{xx}^{(h)}$, $\gamma_{xx}^{(h)}$ дырок в v зоне. Расчет времени релаксации τ_α проведем с учетом рассеяния носителей на шероховатой поверхности аналогично [8]. В случае δ -образной флуктуации поверхности нетрудно получить:

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

где $N_c = 2\Delta_c / \hbar\omega_c$, γ_0 – описывает высоту флуктуации. При расчете времени релаксации для случая гауссовой флуктуации [11] при низких температурах (именно при низких температурах рассеяние носителей на шероховатой поверхности наиболее активно), $1/\tau_\alpha^{(c)}$ описывается соотношением (4), в котором нужно γ_0 заменить на $\pi\Delta_0^2\Lambda^2$ (Δ_0 – высота гауссовой флуктуации, Λ – ее длина). Заметим, что $\tau_\alpha^{(c)}$ (для любого типа флуктуации) в точности равно транспортному времени релаксации, используемому при решении кинетического уравнения Больцмана. Аналогично записывается $\tau_\alpha^{(v)}$ дырок. В результате выражение термоЭДС после суммирования по k_x принимает вид:

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

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

$$a = \left(\frac{m_h}{m_c} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_h} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad b = \frac{\Delta E_h}{\Delta E_c},$$

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

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

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

v – количество зон проводимости, участвующих в кинетических процессах. Химический потенциал ξ определяется из условия электронейтральности исследуемой наноструктуры (число электронов в размерно-квантованных s зонах равно числу дырок в v зоне):

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

Аналитическое решение уравнения (6) для химического потенциала можно найти для частных случаев.

Если носители находятся на самом нижнем размерно-квантованном уровне ($n = m = 0$) и электронный и дырочный газ вырождены (химический потенциал положителен и $\beta\xi \gg 1$), то при $m_c \ll m_v$ из (6) не трудно определить ξ :

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

$\xi - \hbar\omega_c$ – химический потенциал, отсчитываемый от дна размерно-квантованной зоны.

В такой простой модели термоЭДС принимает вид:

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

Следовательно, термоЭДС отрицательна, т.е. определяется электронами, и с ростом напряженности электрического поля E уменьшается.

В противоположном случае, т.е. в случае невырожденных электронного и дырочного газов (это справедливо при малых радиусах квантовой проволоки $d \ll 500 \text{ \AA}$, при $T = 77 \text{ K}$ [3]), как следует из уравнения (6), химический потенциал определяется из соотношения:

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

В результате

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

Расчет термоЭДС в общем случае проведен по соотношению (5) с учетом размерно-квантованных v и c зон при типичных значениях параметров квантовой проволоки: $\Delta E_c = 0.5 \text{ эВ}$, $\Delta E_v = 0.3 \text{ эВ}$, $\Delta = 0.038 \text{ эВ}$, $m_c = 0.01m_0$, $m_v = 0.1m_0$, при $R = 500 \text{ \AA}$. Зависимость термоЭДС от напряженности постоянного электрического поля приведена на рис. 2.

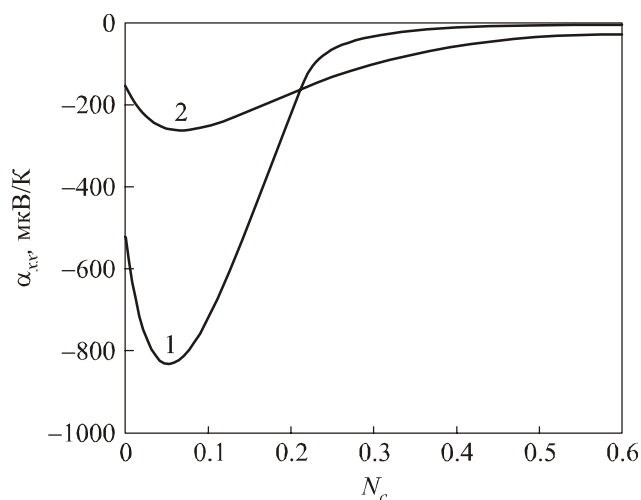


Рис. 2. Зависимость удельной термоЭДС квантовой проволоки от напряженности поперечного электрического поля.

Кривая 1 получена при $T = 10 \text{ K}$, кривая 2 вычислена при $T = 50 \text{ K}$. Как непосредственно следует из рис. 2, с ростом температуры величина термоЭДС по абсолютной величине уменьшается, а при увеличении E , стремится к нулю, оставаясь при этом отрицательной.

В нанопроволоках, как следствие одномерности наноструктуры, плотность состояний на дне каждой размерно-квантованной зоны возникают особенности. Поэтому с ростом напряженности постоянного электрического поля экстремумы, например, размерно-квантованных v зон, поднимаясь вверх по энергии, могут пересекать химический потенциал, что, естественно, приводит к особенностям кинетических коэффициентов (например, подвижности). Однако в термоЭДС эти особенности не очень ярко проявляются, поскольку α_{xx} определяется отношением потока тепловой энергии носителей к электропроводности.

При $E = 0$ дырки вносят заметный вклад в термоЭДС, уменьшая ее по абсолютной

величине. С ростом напряженности электрического поля (для рассмотренных выше параметров нанопроволоки $a \sim 7$), вклад дырок в термоЭДС быстро уменьшается, а это и приводит к тому, что в зависимости α_{xx} от N_c (рис. 2) возникает характерный минимум.

Выводы

Исходя из вышеизложенного, внешнее электрическое поле дает уникальную возможность управлять величиной термоЭДС, что позволяет надеяться на приборное применение предсказанного эффекта. В заключение отметим, что сильная анизотропия эффективных масс в нанопроволоках *Bi* (в зависимости от направления кристаллографических осей массы для электронов в *s*-зоне меняются от $0.001m_0$ до $0.26m_0$, валентной зоне от $0.059m_0$ до $0.634m_0$ [4]) влияет на величину рассматриваемого эффекта, что сохраняет зависимость термоЭДС от E практически неизменной.

Работа выполнена при частичном финансировании Украинским Научно-технологическим центром и Академией наук Молдовы (грант 5062).

Литература

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.

Поступила в редакцию 18.05.2011.