

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕОДНОРОДНЫХ ПО ТОЛЩИНЕ КВАНТУЮЩИХ ПРОВОЛОК

А. А. КИРАКОСЯН

Рассмотрено влияние шероховатости проволочной поверхности (неоднородности по толщине) на термодинамические характеристики тонких проволок в условиях проявления квантового размерного эффекта (КРЭ). Показано, что учет поверхностной шероховатости приводит к устранению сингулярностей плотности состояний. Вычислена также поправка к уровню Ферми в случае заполнения первой подзоны энергии за счет неоднородности по толщине.

Наряду с многими факторами, влияющими на физические свойства тел, влияние размеров и формы образца может оказаться решающим. С одной стороны, ограниченность образца приводит к размерным эффектам, что выражается в осцилляционной зависимости различных физических характеристик (времени релаксации, электропроводности, подвижности и т. д. [1, 2]) от толщины пленок и проволок, с другой стороны, само состояние поверхности может существенно повлиять на эти характеристики. Влияние поверхностной шероховатости (неоднородности по толщине) на физические характеристики тонких квантованных пленок было рассмотрено в [3, 4]. В данной работе исследуются характеристики квантующих проволок с учетом шероховатости проволочной поверхности.

Направим ось z цилиндрической системы координат по оси проволоки. Тогда радиус произвольного сечения проволоки, перпендикулярного оси z , можно представить в виде

$$R = R_0 + \Delta(z, \varphi), \quad (1)$$

где R_0 — радиус идеально гладкой проволоки, $\Delta(z, \varphi)$ — случайная неровность проволочной поверхности. Одним из необходимых условий проявления квантового размерного эффекта является достаточная однородность пленки или проволоки по толщине [5], т. е. $|\Delta(z, \varphi)| \ll R_0$.

Спектр энергии электрона в квантующей проволоке, согласно [2], дается выражением

$$\varepsilon_{nlk}(R) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (\lambda_i^{[n]})^2}{2mR^2}, \quad (2)$$

где k — волновой вектор электрона по оси z , m — эффективная масса (для простоты считаем ее изотропной), $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\lambda_i^{[n]}$ — i -ый корень функции Бесселя $J_{|n|}(x)$.

С учетом (1) выражение (2) можно представить в виде

$$\varepsilon_{nlk}(R) = \varepsilon_{nlk}(R_0) - \frac{\hbar^2 (\lambda_i^{[n]})^2}{mR_0^3} \Delta. \quad (3)$$

Второй член в (3) можно интерпретировать как энергию электрона в некотором случайном поле, созданном поверхностными неоднородностями. Таким образом, задача сводится к исследованию термодинамических характеристик системы, находящейся в случайном поле.

Одной из точных характеристик системы является плотность состояний, которую в общем случае можно представить в виде [6]

$$\rho(E) = \frac{2}{V} \text{Sp Im} \langle G_r \rangle. \quad (4)$$

Здесь V — объем системы, Sp означает суммирование по всем переменным, входящим в мнимую часть опережающей антикоммутирующей функции Грина $\text{Im } G_r$, $\langle \dots \rangle$ — означает усреднение по случайному полю.

Рассматривая совокупность электронов в проволоке как идеальный газ и используя выражение для $G_r^{(0)}$ [6], запишем

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle G_r^{(0)} \rangle &= -\frac{1}{2\pi} \text{Im} \left\langle \frac{1}{E - \varepsilon_{nik}(R) + i\gamma} \right\rangle_{\gamma \rightarrow +0} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left\langle i \int_0^\infty \exp[is(E - \varepsilon_{nik}(R_0) + \beta\Delta)] ds \right\rangle = \\ &= \frac{1}{\delta_{ni}(2\pi)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(E - \varepsilon_{ni}^0)^2}{2\delta_{ni}^2} \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

При усреднении по случайному полю было использовано правило

$$\langle \exp(i\beta s \Delta) \rangle_P = \exp \left(-\frac{1}{2} \beta^2 s^2 \Delta^2 \right),$$

$\Delta^2 = \langle \Delta^2 \rangle_P$ — функция корреляций поверхностных неоднородностей, а P — функционал гауссовского типа [7]. В (5) были введены следующие обозначения: $\varepsilon_{nik}^0 = \varepsilon_{nik}(R_0)$, $\gamma = (\psi/R_0^2)^{1/2}$ — малый параметр задачи, $\delta_{ni} = 2\gamma \varepsilon_{ni}^0$ — размазка энергетического уровня ε_{ni}^0 .

Подставляя (5) в (4) и произведя суммирование по n, i и по спинам с учетом диагональности G_r , а также переходя от суммы по волновому вектору к интегралу, получим

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi^2 R_0^2 (2\pi)^{1/2}} \sum_{n,i} \frac{1}{\delta_{ni}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[-\frac{(E - \varepsilon_{ni}^0 - \hbar^2 k^2 / 2m)^2}{2\delta_{ni}^2} \right]. \quad (6)$$

Полученный интеграл можно выразить через функцию параболического цилиндра [8]

$$D_p(z) = \frac{\exp(-z^2/4)}{\Gamma(-p)} \int_0^\infty x^{-p-1} \exp \left(-zx - \frac{x^2}{4} \right) dx \quad (\text{Re } p < 0), \quad (7)$$

$\Gamma(x)$ — гамма-функция.

Окончательно, для плотности состояний получаем следующее выражение:

$$\rho(E) = \frac{m^{1/2}}{\pi^2 R_0^2 \hbar} \sum_{n,l} \frac{1}{\delta_{nl}^{1/2}} \exp \left[-\frac{(E - \varepsilon_{nl}^0)^2}{4 \delta_{nl}^2} \right] D_{-1/2} \left(-\frac{E - \varepsilon_{nl}^0}{\delta_{nl}} \right) \equiv \sum_{n,l} \rho_{nl}(E). \quad (8)$$

Исследуем поведение плотности состояний отдельной подзоны $\rho_{nl}(E)$ в зависимости от E .

а). В особой точке плотности состояний идеально гладкой проволоки $E = \varepsilon_{nl}^0$ при учете поверхностной неоднородности получим

$$\rho_{nl}(\varepsilon_{nl}^0) \sim \delta_{nl}^{-1/2}. \quad (9)$$

Таким образом, учет неоднородности и, тем самым, конечной ширины энергетического уровня ε_{nl}^0 приводит к ограничению плотности состояний в особой точке.

б). При $E < \varepsilon_{nl}^0$, воспользовавшись асимптотическим представлением $D_p(z)$ для $z \gg 1$, получим

$$\rho_{nl}(E) \sim (\varepsilon_{nl}^0 - E)^{-1/2} \exp \left[-\frac{(E - \varepsilon_{nl}^0)^2}{2 \delta_{nl}^2} \right]. \quad (10)$$

в). Наконец, при $E > \varepsilon_{nl}^0$ имеем

$$\rho_{nl}(E) \sim (E - \varepsilon_{nl}^0)^{-1/2}. \quad (11)$$

Как следует из (9)–(11), наличие поверхностной неоднородности приводит к существенному изменению поведения плотности состояний от энергии идеальной проволоки лишь в области $E \simeq \varepsilon_{nl}^0 \pm \delta_{nl}$.

Поправка к уровню Ферми

Уровень Ферми в общем случае определяется как функция температуры (T) и концентрации (n_0) носителей заряда условием нормировки

$$n_0 = \int \rho(E) f(E) dE, \quad (12)$$

где $f(E) = [\exp[(E - \mu)/kT] + 1]^{-1}$ — функция распределения Ферми, μ — химический потенциал (уровень Ферми), k — постоянная Больцмана. В случае полного вырождения ($T = 0$) после несложных расчетов условие нормировки можно записать в виде

$$n_0 = \frac{m^{1/2}}{\pi^2 R_0^2 \hbar} \sum_{n,l} \delta_{nl}^{1/2} \exp \left[-\frac{(\mu - \varepsilon_{nl}^0)^2}{4 \delta_{nl}^2} \right] D_{-3/2} \left(-\frac{\mu - \varepsilon_{nl}^0}{\delta_{nl}} \right). \quad (13)$$

Перейдем к вычислению поправки к химическому потенциалу, обусловленной поверхностными неоднородностями при условии заполнения только первой подзоны энергии $\varepsilon_{01}^0 = \varepsilon_1$. В случае квантования энергии согласно (2) это условие выглядит так

$$n_0 R_0^3 \lesssim 6/\pi^2. \quad (14)$$

Учитывая, что $\mu - \varepsilon_1/\delta_1 \gg 1$, и пользуясь асимптотическим представлением $D_{-3/2}\left(-\frac{\mu - \varepsilon_1}{\delta_1}\right)$, из (13) получим

$$n_0 = \frac{m^{1/2}}{\pi^2 R_0^3 \hbar} \delta_1^{1/2} \left\{ 2^{3/2} \left(\frac{\mu - \varepsilon_1}{\delta_1} \right)^{1/2} + \left(\frac{\delta_1}{\mu - \varepsilon_1} \right)^{3/2} \exp \left[- \frac{(\mu - \varepsilon_1)^2}{2 \delta_1^2} \right] \right\}. \quad (15)$$

В частности, при $\delta_1 = 0$ из (15) получается выражение для уровня Ферми идеально гладкой проволоки

$$\mu_0 = \varepsilon_1 + \frac{\pi^4 \hbar^2 n_0^2 R_0^4}{8 m}. \quad (16)$$

В первом неисчезающем приближении по малому параметру γ из (15) можно получить поправку $\Delta\mu$ к уровню Ферми

$$\Delta\mu \simeq -0,7 \varepsilon_1 \frac{\gamma^2}{(n_0 R_0^3)^2} \exp \left(- \frac{c}{\gamma^2} \right), \quad (17)$$

где

$$c = \frac{1}{2} \left[\frac{\pi^2}{2^{3/2} \gamma^{1/2}} (n_0 R_0^3) \right]^4 \simeq 2,2 (n_0 R_0^3)^4. \quad (18)$$

Полученное выражение (17) для $\Delta\mu$ проволоки по структуре аналогично выражению для поправки к химическому потенциалу пленки, однако зависимости от параметров γ и $(n_0 R_0^3)$ более сильные (в случае пленки $\Delta\mu \sim \gamma^3$ и $c \sim (n_0 L_0^3)^2$, L_0 — толщина идеально гладкой пленки [4]).

Ереванский государственный
университет

Поступила 21.VI.1974

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Б. А. Тавгер, В. Я. Демиковский. УФН, 96, 61 (1968).
2. Б. А. Тавгер, М. Д. Блох, Е. Л. Фишман. ФММ, 33, 1137 (1972).
3. А. В. Чаплик, М. В. Энтин. ЖЭТФ, 55, 990 (1968).
4. Э. М. Казарян, А. А. Киракосян. Препринт ЕГУ, 72—05, 1973.
5. В. Я. Демиковский, Б. А. Тавгер. Радиотехника и электроника, 11, 1147 (1966).
6. В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов. Метод функций Грина в статистической механике, М., 1961.
7. В. Л. Бонч-Бруевич. Сб. Статистическая физика и квантовая теория поля, Изд. Наука, М., 1973.
8. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., 1962.

ՀԱՍՏՈՒԹՅԱՆ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ ԲԱՐԱԿ ՔՎԱՆՏԱՑՆՈՂ ԼԱՐԵՐԻ
ԹԵՐՄՈՂԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ԲՆՈՒԹԱԳՐԵՐԸ

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Դիտարկված է մակերևութային անհարթությունների (ըստ հաստության անհամասեռության) ազդեցությունը բարակ լարերի թերմոդինամիկական բնութագրերի վրա թվանաշին շա-

ժային էֆեկտների (ՔՉէ) առկայության պայմաններում: Յույց է տրված, որ մակերևութային անհարթությունների հաշվառումը բերում է վիճակների խտության եզակիությունների վերացմանը: Հաշվված է նաև հաստության անհամասեռության հետևանքով պայմանավորված ուղղումը Ֆերմիի մակարդակի վրա առաջին էներգետիկ ենթամակարդակի լրացման դեպքում:

THE THERMODYNAMICAL CHARACTERISTICS OF INHOMOGENEOUS-IN-THICKNESS QUANTIZING WIRES

A. A. KIRAKOSSIAN

The influence of the roughnesses of a wire surface on the thermodynamical characteristics of thin wires under conditions of quantum-size-effect (QSE) is considered. It is shown, that the consideration of surface roughnesses leads to the elimination of singularities of state density function. The correction to the Fermi-level in the case of filling the first energy-subband owing to inhomogeneity of thickness is also calculated.