

УДК 533.1,549.9, 53:51

Я.С. Буджак

До питання про просторове квантування в тонких плівках

Національний університет "Львівська політехніка", 79013 м. Львів-13, вул. С. Бандери, 12

В роботі обґрунтовано критерій просторового квантування спектра носіїв струму в тонких провідних плівках. В зв'язку з цим кінетичні властивості тонких плівок та концентрація носіїв зарядів в них корелюють з їхніми товщинами. Показано, що додаткове розсіювання на поверхні плівок теж може призводити до такої кореляції.

Ключові слова: тонкі плівки, носії струму, просторове квантування.

Стаття постуила до редакції 08.03.2003; прийнята до друку 27.05.2003.

Відомо, що в тонких плівках провідників спостерігається просторове квантування закону дисперсії носіїв струму.

В загальному випадку просторово квантований спектр носіїв струму в кристалічній плівці товщиною d , яка розташована в площині XY , описується такою загальною формулою

$$\varepsilon(n, p_x, p_y) = \varepsilon_1(p_x, p_y) + \frac{h^2 \cdot n^2}{8\pi m_0 d^2}. \quad (1)$$

В цій формулі m_0 – маса вільного електрона, h – постійна планка, $\varepsilon(p_x, p_y)$ – двомірний закон дисперсії, який відповідає умовам симетрії кристалічної ґратки плівки, $n = 1, 2, 3, \dots$ – цілі квантові числа.

Розрахуємо для носіїв струму в плівці великий термодинамічний потенціал $\Omega(d, \mu, T)$, виходячи із умови, що газ носіїв струму в кристалах відноситься до квантових ансамблів із змінною кількістю частинок

$$\Omega(d, \mu, T) = \sum_{n, p_x, p_y} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(n, p_x, p_y)}{kT} \right) \right), \quad (2)$$

де μ – хімічний потенціал носіїв струму, k – постійна Больцмана, T – температура кристалу в шкалі Кельвіна.

Загальна кількість носіїв струму в плівці дорівнює

$$N = - \left(\frac{d\Omega(d, \mu, T)}{d\mu} \right)_T = 2 \sum_{n, p_x, p_y} \frac{1}{\left(\exp \left(\frac{\varepsilon(n, p_x, p_y) - \mu}{kT} \right) + 1 \right)}. \quad (3)$$

Розглянемо випадок, коли носії струму в плівці

не вироджені. Тоді маємо

$$N = 2 \sum_{n, p_x, p_y} e^{-\frac{\varepsilon(n, p_x, p_y) - \mu}{kT}} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{h^2 n^2}{8\pi m_0 k T d^2}} \times \sum_{p_x, p_y} e^{-\frac{\varepsilon(p_x, p_y)}{kT}} \cdot e^{\mu^*}, \quad (4)$$

де $\mu^* = \frac{\mu}{kT}$ – приведений хімічний потенціал.

В цій формулі компоненти вектора квазіімпульсу носіїв струму змінюються квазінеперервно. Тому для обчислення суми за цими компонентами можна використати формалізм переходу від сумування до інтегрування за формулою

$$\sum_{p_x, p_y} e^{-\frac{\varepsilon(p_x, p_y)}{kT}} = \frac{\Delta S}{h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon(p_x, p_y)}{kT}} dp_x dp_y = \Delta S \cdot Z(T). \quad (5)$$

В цій формулі ΔS – площа плівки, а $Z(T)$ дорівнює

$$Z(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon(p_x, p_y)}{kT}} dp_x dp_y.$$

В зв'язку з цим, враховуючи (5), формулу (4) можна записати в такому виді

$$\frac{N}{\Delta S \cdot d} = \frac{N}{V} = n = \left(\frac{2}{d} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi \left(\frac{T_t}{T} \right) n^2} \right) Z(T) e^{\mu^*}. \quad (6)$$

В цій формулі $T_t = \frac{h^2}{8\pi m_0 k}$, $\Delta S \cdot d = V$ – об'єм плівки, а n – концентрація носіїв струму в ній.

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\pi \left(\frac{T_t}{T} \right) n^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\pi \left(\frac{T_t}{T} \right) n^2} - 1 = \theta \left(\frac{T_t}{T} \right) - 1, \quad (7)$$

де $\theta \left(\frac{T_t}{T} \right)$ – відома функція з такими властивостями

$$\theta\left(\frac{T_t}{T}\right) = \sqrt{\frac{T}{T_t}} \theta\left(\frac{T}{T_t}\right), \quad (8)$$

$$\theta\left(\frac{T_t}{T}\right) = 1 + 2e^{-\pi\left(\frac{T_t}{T}\right)} + 2e^{-4\pi\left(\frac{T_t}{T}\right)} + 2e^{-9\pi\left(\frac{T_t}{T}\right)} + \dots \quad (9)$$

В зв'язку із сказаним концентрація носіїв струму дорівнює

$$n = \left[\frac{1}{d} \left(\theta\left(\frac{T_t}{T}\right) - 1 \right) \right] Z(T) e^{\mu^*} = \left[\frac{1}{d} \sqrt{\frac{T}{T_t}} \left(\theta\left(\frac{T}{T_t}\right) - \sqrt{\frac{T_t}{T}} \right) \right] Z(T) e^{\mu^*}. \quad (10)$$

В цій формулі множники, які охоплені квадратними дужками, асимптотично залежать від товщини кристалічної плівки. Ця залежність зникне, коли буде реалізована умова

$$\frac{T_t}{T} = \frac{h^2}{8\pi m_0 k T d^2} = \frac{1.39 \cdot 10^{-11}}{d^2 T} (\text{cm}^2 \text{K}) \ll 1. \quad (11)$$

При цій умові

$$\theta\left(\frac{T}{T_t}\right) \approx 1.$$

Тому

$$n = \left[\frac{1}{d} \sqrt{\frac{T}{T_t}} \right] Z(T) e^{\mu^*} = 2 \sqrt{\frac{2\pi m_0 k T}{h^2}} Z(T) e^{\mu^*}. \quad (12)$$

Формули (11) і (12) означають, що в кристалічних плівках макроскопічної товщини просторове квантування спектра носіїв струму зникає.

Концентрація носіїв струму в провідних плівках – це макроскопічна експериментально вимірювана величина. Якщо в плівках має місце просторове квантування спектра, то згідно з (10) величина концентрації повинна корелювати з товщиною плівки, при умові, що нерівність (11) не виконується.

Розрахунки показують, що чітка кореляція між концентрацією носіїв струму в плівці та її товщиною “d” повинна спостерігатись при умові

$$\frac{T}{T_t} = \frac{8\pi m_0 k T d^2}{h^2} = 7.19 \cdot 10^{10} T d^2 (\text{K}^{-1} \text{cm}^{-2}) \approx 1.$$

Отже, ефективна максимальна товщина плівок, в яких можна спостерігати описану вище кореляцію, становить

$$d \approx \frac{3.73 \cdot 10^{-6}}{\sqrt{T}} (\text{K}^{1/2} \text{cm}). \quad (13)$$

Це дуже тонкі плівки. Одержати досконалі плівки

такої товщини при звичайних умовах спостереження дуже важко.

Експериментальні дослідження показують, що концентрація носіїв струму та кінетичні властивості кристалічних плівок корелюють з їх товщиною у плівках багато більшої товщини, ніж критична товщина d (13).

В роботах [1,2] показано, що така кореляція в провідних тонких плівках пов'язана не з просторовим квантуванням, а внаслідок впливу додаткового розсіювання носіїв струму на поверхні плівки в загальному процесі розсіювання.

Справа в тому, що всі кінетичні властивості масивних кристалів і плівок є складними функціоналами функції розсіювання U [3], яка має розмірність рухливості і описує вплив механізмів розсіювання на кінетичні властивості провідників.

Ця функція, яка має зміст мікроскопічної неусередненої рухливості, в ізотропних плівках має таке значення

$$U = \frac{e}{p} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right) \tau(p, d), \quad (14)$$

де e – заряд носія струму, $\varepsilon = \varepsilon(p)$ – закон дисперсії, $\tau(p, d)$ – ізотропний час релаксації в провідних плівках. Він дорівнює [1,2]:

$$\tau(p, d) = \frac{1}{v} \left(\frac{3}{2} d + \frac{d}{2} \ln \left(\frac{v\tau(p)}{d} \right) \right) \Big|_{\frac{v\tau(p)}{d} \ll 1} \approx \tau(p), \quad (15)$$

де $v = |\nabla_p \varepsilon(p)|$, $\tau(p)$ – час релаксації в масивних кристалах, d- товщина плівки.

Зрозуміло, що при умові

$$\frac{v\tau(p)}{d} \approx 1 \quad (16)$$

неусереднена рухливість (14) залежить від товщини плівки, а, отже, всі кінетичні властивості плівки теж будуть мати цю залежність. Проте, оцінки показують, що умова (16) реалізується в плівках багато більшої товщини, ніж товщина d (13).

Тому в практичних дослідженнях кореляція кінетичних властивостей плівок від їх товщини частіше від додаткового розсіювання носіїв струму на поверхні плівок, ніж від просторового квантування спектра.

Буджак Я.С. – доктор фізико-математичних наук, професор.

- [1] Я.С. Буджак. До теорії електропровідності тонких плівок. // *IV Міжнародна конференція з фізики тонких плівок*. Матеріали конференції, частина 1. Івано-Франківськ, с. 59. (1993).
- [2] Я.С. Буджак. Розмірний ефект в електропровідності тонких провідних плівок. // *V Міжнародна конференція з фізики тонких плівок*. Матеріали конференції. Частина 2. Івано-Франківськ, с. 239. (1995).
- [3] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, Л.Й. Межиловська. Елементи теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів. // *Фізика і хімія твердого тіла*, 1(2), сс. 159-166. (2000).

Я.С. Буджак

Ja.S. Budzhak

About Spatial Quantification on Thin Films

National University "Lvivska Polytechnika", 79013, Lviv-13, Bandery Str., 12

The criterion of spatial quantification of charge carriers of spectrum on thin conduction films is established. Therefore both the kinetic properties of thin films and the carrier concentration on theirs are correlation from thickness. Is shown, that additional scattering on films surface may be lead to that correlation.