

ELEKTRONOVÝ TRANSPORT V NANO-STRUKTURÁCH

Jiří J. Mareš, FZÚ-AVČR v.v.i.

Odd. polovodičů

Úvod

- I. Ohm – Kirchhoffova konstitutivní relace
- II. Transport omezený prostorovým nábojem (SCL)
- III. Fenomenologie vlnové mechaniky,
- IV. Mikroskopický model transportu náboje
- V. Tunelování
- VI. Tunelování elektronů vibrující bariérou
- VII. Slabá lokalizace
- VIII. Aharonov - Bohmův jev

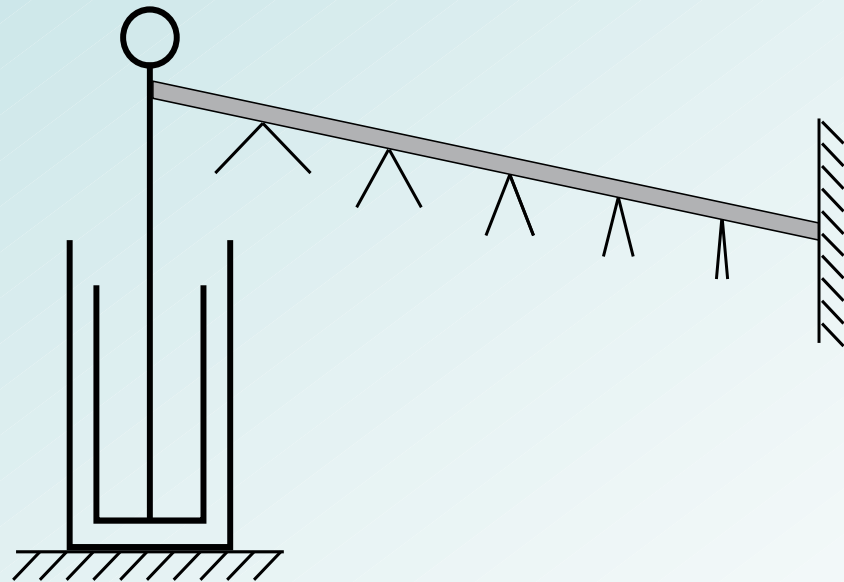
I. Ohm – Kirchhoffova konstitutivní relace

Ermanův experiment
(1802)

⇒ „Ohmův zákon“

$$\mathbf{i} = \gamma \mathbf{F} \quad (1)$$

platí pro homogenní
izotropní vodič, \mathbf{i} = hustota
proudu (A/m^2),



γ = **konstanta**, tzv. vodivost
(S/m).

Základní experimentální poznatek při studiu přenosu elektřiny pomocí vodičů:

„Elektrického stavu podél vodiče, kterým protéká elektřina, rovnoměrně ubývá.“

Příslušné kvantitativní vztahy na základě experimentů odvodili Davy, Ohm a Fechner.

Upozornění: „Ohmův zákon“ není **přírodní zákon**, platný v každém systému, ale je vždy vztažen ke konkrétnímu materiálnímu systému, je to tzv. **konstitutivní relace**.

Zápis v diferenciálním tvaru (1) umožňuje formulovat konstitutivní vztahy i v případě, že systém není homogenní.

Na nelineárním elektronovém transportu (tj. transportu nesplňujícím Ohmův zákon) je založena veškerá polovodičová elektronika, diody, transistory, integrované obvody atd.

Otázka I. Proč je Coulombův zákon (působení elektrických nábojů) přírodním zákonem?

Protože platí ve všech materiálních systémech, bez ohledu na jejich konkrétní složení.

V případě jednoduché geometrie homogenního vodiče, lze integraci diferenciálního tvaru provést snadno:

Délka vodiče L

Průřez vodiče A

Potenciálový spád na vodiči $V = \varphi_1 - \varphi_2$

$$i = I / A = \gamma \mathbf{F} = \gamma V/L \Rightarrow V/I = (L/\gamma A)$$

což je **integrální tvar** Ohmova zákona,

veličina v závorce se nazývá elektrický odpor vodiče

Foronomické podmínky

Rovnici (1) je třeba doplnit obecně platnými požadavky na transport „nezničitelné“ substance

$$\operatorname{div} \mathbf{i} = 0 \quad (\text{rovnice kontinuity}) \quad (2a)$$

$$i_v = 0 \quad (\text{rovnice diskontinuity}) \quad (2b)$$

Jaká je fyzikální povaha veličiny \mathbf{F} ?

Fyzikální význam foronomických podmínek:

2a) Elektrické „fluidum“ protékající vodičem se nikde netvoří a nikde nezaniká.

2b) Elektrické „fluidum“ nemůže z vodiče uniknout bočními stěnami. Podmínka je porušena jen na plochách kde elektrický proud vstupuje příp. vystupuje z vodiče.

Užitečné: Zopakuj si význam diferenciálních operátorů grad, div, rot a Δ

Dvě interpretace zobecněné síly \mathbf{F}

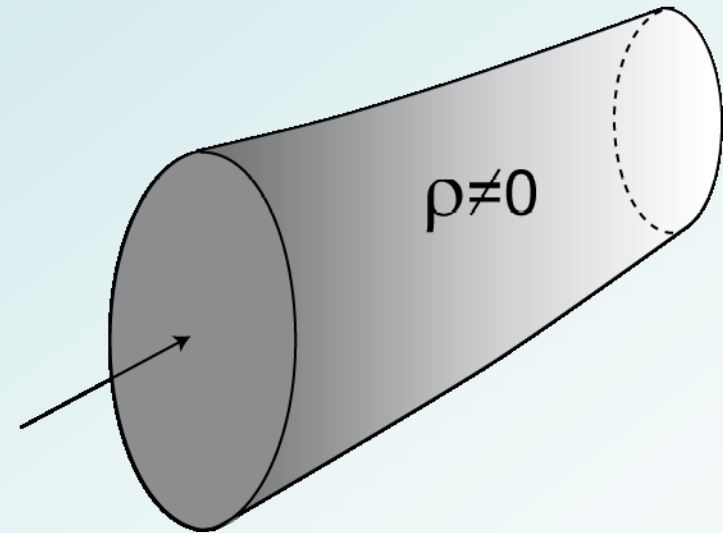
1. Ohm (1827)

$$\mathbf{F} \propto -\text{grad } \rho \quad (3)$$

“Elektroskopische Kraft“ \Leftrightarrow
experiment & Fourierův zákon
(ρ = makroskopická hustota
elektrického náboje C/m^3)

(3) popisuje dobře experiment,
ale pro $\mathbf{i} = 0$ obecně dává

$$\rho \neq 0, \Rightarrow$$



Podle (3) má při vypnutí proudu být:

$$\mathbf{i} = \gamma \mathbf{F} = -\gamma \operatorname{grad} \rho = 0, \quad \gamma = \text{const.}$$

Integrace $\operatorname{grad} \rho = 0 \Rightarrow \rho = \text{const.} \neq 0$ (integrační konstanta respektuje stav před vypnutím)

Rozpor s Cavendishovým teorémem

(\Leftrightarrow Coulombův zákon)

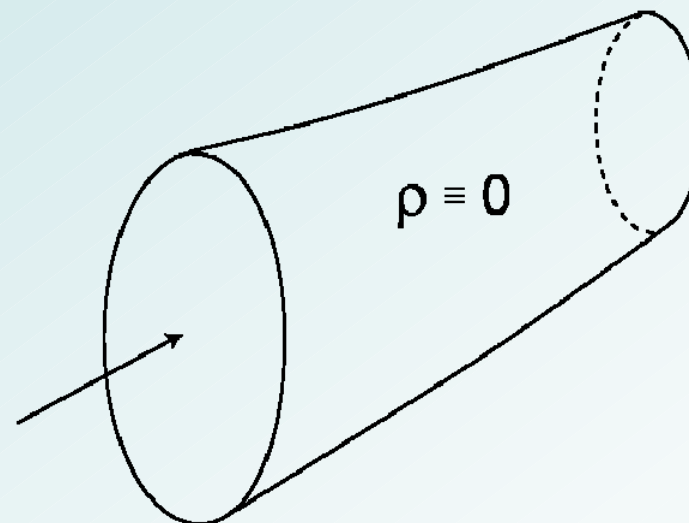
2. Kirchhoff, (1849)

$$\mathbf{F} \propto -\text{grad } \varphi \quad (4)$$

(φ = elektrostatický potenciál (V))

Podmínka (2a) spolu s (1) a (4) \Rightarrow
(Laplaceova rovnice)

$$\rho \equiv 0.$$



$\mathbf{F} \propto -\text{grad } \varphi$

$\mathbf{i} = \gamma \mathbf{F} \Rightarrow$ vypočteme $\text{div } \mathbf{i}$

$\text{div } \gamma \mathbf{F} = -\gamma \text{div grad } \varphi = \rho \Rightarrow$ (Poissonova rovnice
elektrostatiky)

(podle 2a) ale musí být $\rho = 0 \Rightarrow$ (Laplaceova rovnice
elektrostatiky pro prostor bez náboje)

⇒ **Uvnitř vodiče protékaného proudem neexistuje makroskopický elektrický náboj**



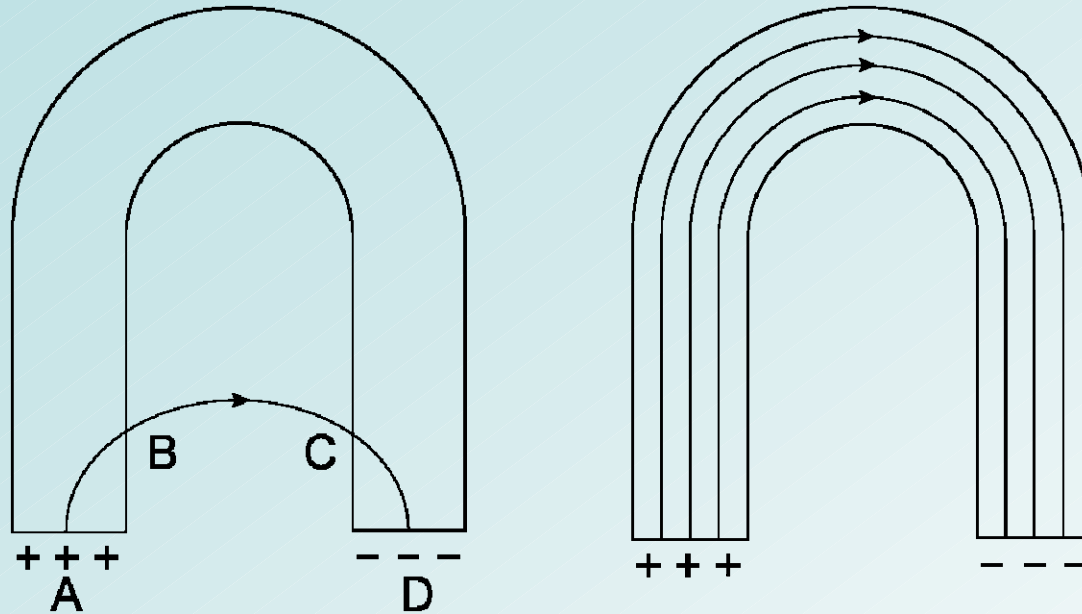
V případě existence **prostorového náboje** ve vodiči protékaném proudem je Ohm-Kirchhoffova relace (1) neplatná.

Prostorový náboj existuje v případě nelineárního transportu: Schottkyho bariéra, proudy omezené prostorovým nábojem (SCL).

Existuje i v případě lineárního (Ohmického) transportu?

⇐ **přechodové jevy**

Jak protéká elektrický proud drátem?



Po „zapnutí proudu“ začnou nosiče proudu sledovat původní siločáry (ABCD), čímž nabijí body (B a C) na povrchu vodiče a vytvoří proudovou trubici (spheruloid) splňující podmínku (2b).

Povrchový náboj dokonale odstíňuje proudovou trubici uvnitř vodiče. To umožňuje, mimo jiné, transport elektřiny libovolně „zamotaným“ vodičem, bez ohledu na původní elektrické pole aplikované ke koncům vodiče.

U povrchu každého vodiče, kterým teče proud, tak existuje prostorový náboj

⇒ Nutnost **zobecnění Ohm–Kirchhoffovy relace!**

Spojení Ohmova a Kirchhoffova lineárního přiblížení

(Physica E **12** (2002) 340) ⇒

$$\mathbf{i} = -\gamma \operatorname{grad} (\varphi + \lambda^2 \rho / \epsilon \epsilon_0) \quad (5)$$

λ je zatím volný délkový parametr zaručující homogenitu rovnice, $\epsilon \epsilon_0$ je permitivita materiálu.

Důsledky vztahu (5), významnost korekce

$$i_v = 0 \Rightarrow \rho = \rho_0 \exp(-v/\lambda)$$

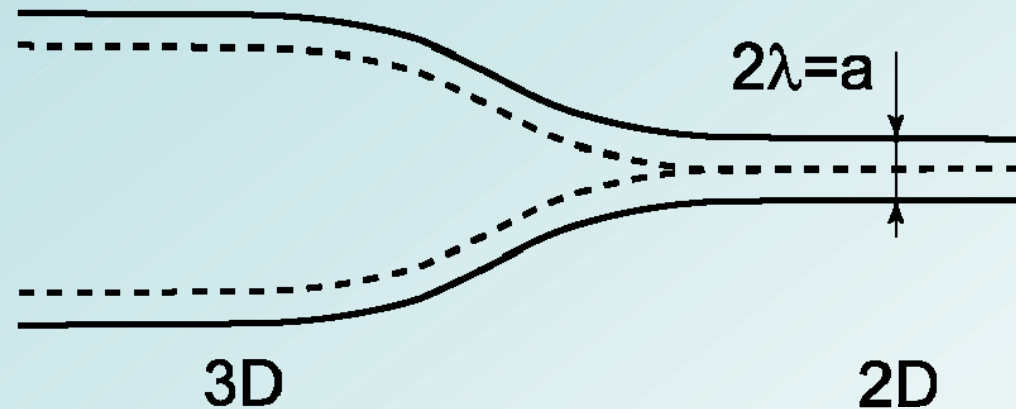
kde v je délka měřená podél normály pod povrch vodiče.

$$i = 0 \Rightarrow \varphi + \lambda^2 \rho / \epsilon \epsilon_0 = \varphi_0$$

Gouyova podmínka lokální rovnováhy, $\varphi_0 = \text{const.}$ je povrchový potenciál.

λ má význam stínící délky

Co nastane, když $a \approx 2\lambda$?



⇒ **Klasická definice dvojrozměrného elektronového plynu a heterodimensionálního přechodu.**

Zmizí neutrální oblast, transport probíhá za přítomnosti prostorového náboje. Vzniká stínící deficit vzhledem k vnějším polím, t.j. elektrické pole proniká vodičem.

- Dá se ukázat, že tato klasická definice je ekvivalentní s definicí v kvantové mechanice (Thoulessovo kritérium)
- 2D systém z kovu je prakticky nerealizovatelný, neboť
- λ je srovnatelná s tloušťkou monoatomární vrstvy.
- 2D jsou tak jen z polovodičů

Pro kovy nemá „chemický člen“ v (5) praktický význam.

Stínicí tzv. Thomasova-Fermiova délka v kovech

$$\lambda \approx 10^{-11} \text{m}, \varepsilon \rightarrow 1.$$

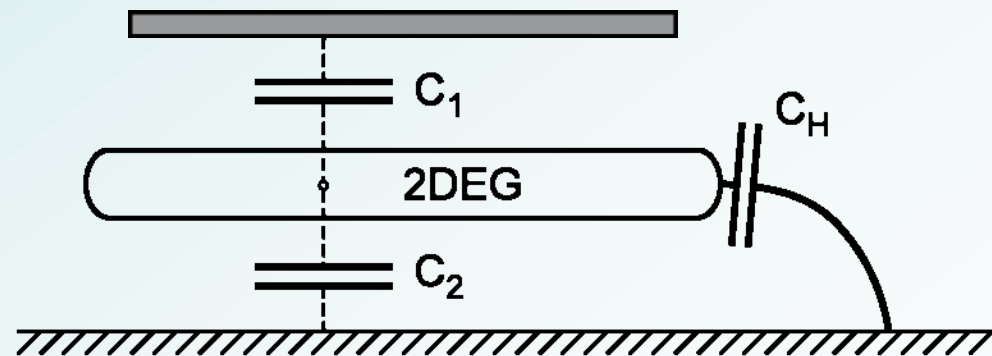
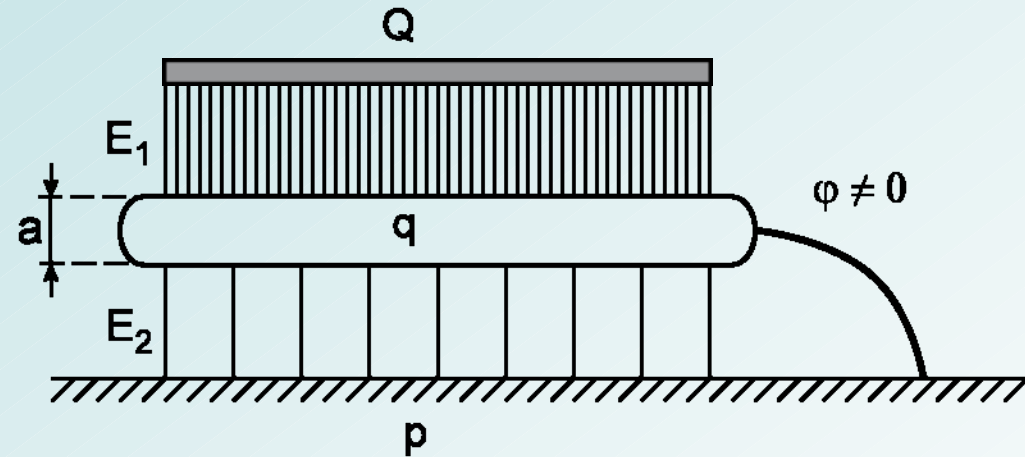
Odpovídající korekce v rovnici (5) je nepatrná

$$\lambda^2/\varepsilon_0 \approx (10^{-11})^2 \times 8.85 \times 10^{-12} \approx 1.1 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{F}$$

Pro polovodiče kde λ dosahuje $\sim 10^{-5}$ m představuje ale chemický člen závažnou korekci k φ .

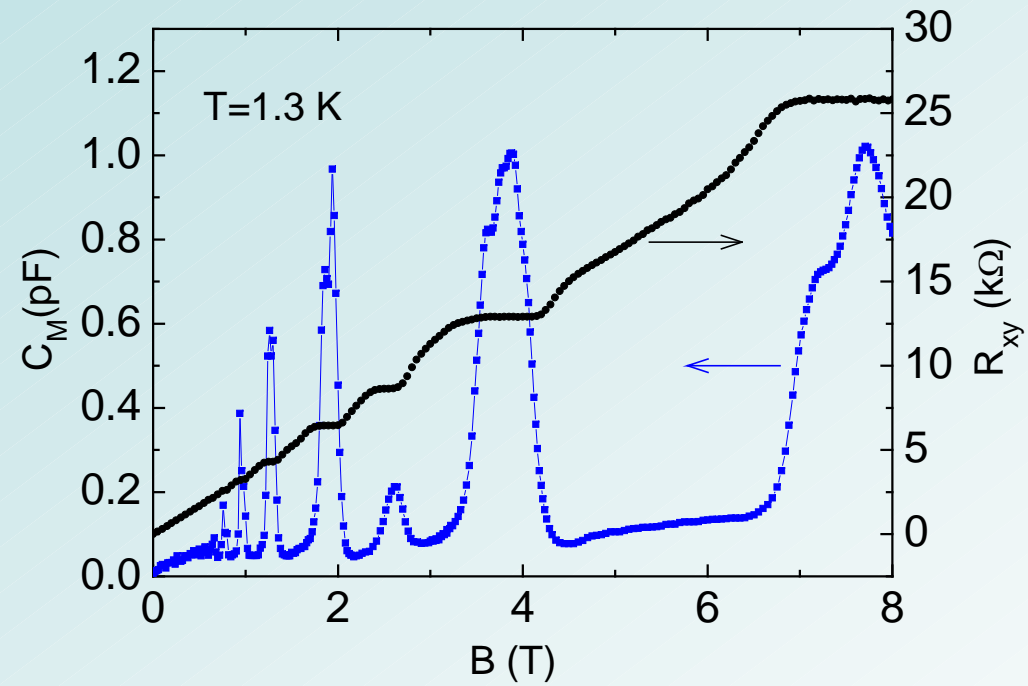
Elektrostatické stínění 2DEG

Základ
experimentálního
studia 2DEG
kapacitními
metodami.



- Pronikání elektrického pole vodivou vrstvou odlišuje „tenký“ vodič od 2D systému.

2DEG v GaAs/GaAlAs QW



Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 4699

- Kapacitní signál C_M v závislosti na magnetickém poli B měřený napříč kvantovou (2D) jámou odráží jinak nezjistitelnou strukturu elektronových stavů v tzv. Hallovských platech (viz. Kvantový Hallův jev QHE).

II. Transport omezený prostorovým nábojem (SCL)

Mottova – Gurneyova relace (kondensátor tloušťky L)

Náboj $Q = CV$

Proud $I = Q/\tau$, τ je čas průchodu

Vztahy pro kapacitu a pohyblivost $\mu \Rightarrow$

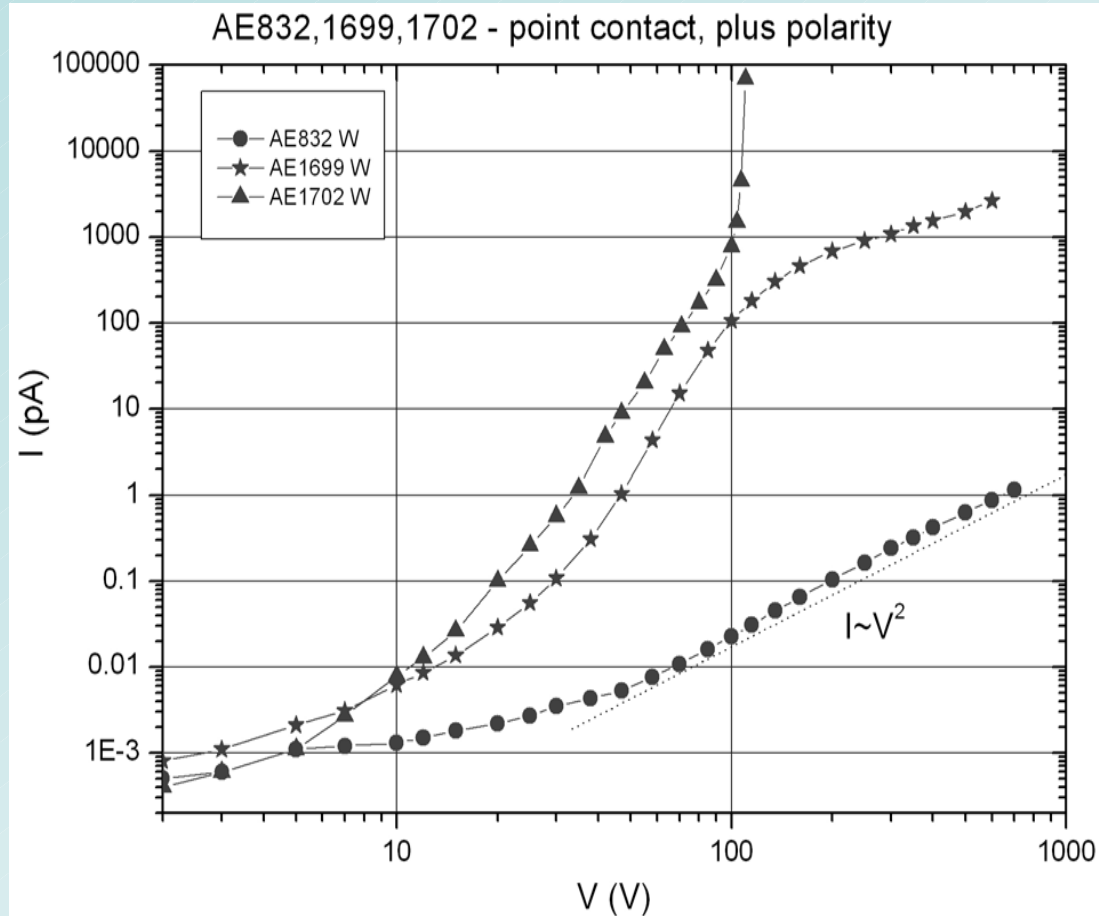
$$Q = \epsilon\epsilon_0 V/L \text{ a } \tau = L^2/\mu V \Rightarrow$$

$$I = \epsilon\epsilon_0 \mu \theta V^2/L^3 ,$$

θ je frakce náboje zachyceného v pastech. (Mocniny ve vzorci závisí citlivě na konfiguraci a dimenzi struktury.)

- SCL je velmi častý typ elektronového transportu v polovodičích a izolátorech podmíněný injekcí (vstřikováním) a záchytem elektrického náboje ve struktuře.

Příklad I-V křivek v SCL režimu



Semi-izolační

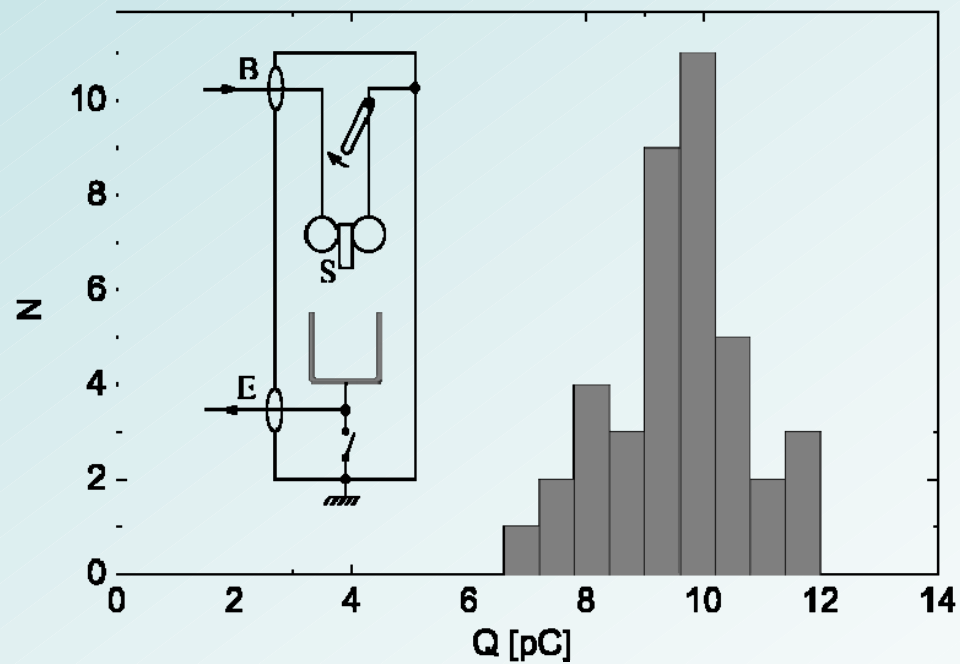
GaN:Fe,

(Kyma Technologies
Inc. NC, USA)

- I-V charakteristiky a jejich analýza umožňuje získat informaci o rozložení pastí v tomto izolátoru, která je jinými způsoby prakticky nezjistitelná (elektrický odpor u 1 V je $> 10^{16} \Omega$!)

Přímý důkaz zachytu náboje

Měření zachyceného náboje pomocí Faradayova válce ,
 $\tau > 10^{-5}$ s. (Nucl. Meth. Instr. A **434** (1999) 57)



- Odchylky od Ohmovy-Kirchhoffovy relace svědčí o přítomnosti prostorového náboje ve vzorku. Tento fakt lze dokázat i přímo:
- Vzorkem S visícím mezi dvěma kulovými kontakty se pustí proud odpovídající SCL režimu. Poté se klíčem kontakty oddálí a vzorek spadne do Faradayova válce, kde je elektrometrem změřen zachycený náboj (viz připojený histogram).

III. Fenomenologie vlnové mechaniky a kvantové hypotézy

Sommerfeldova hypotéza (kvantové kritérium, 1911)

Je-li při nějakém procesu charakteristická **veličina typu akce** srovnatelná s Planckovou konstantou \hbar , chová se objekt (částice) jako vlna tj. projevuje se tzv.

vlnově-částicový dualismus.

$$\hbar \approx 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

- Somerfeldovo kritérium dovoľuje jednoduchým odhadom určiť, zda máme zkoumaný systém interpretovat jako kvantový nebo klasický.

Vlnově-částicový dualismus

de Broglieova hypotéza (1923)

Částice o hybnosti mv se za jistých experimentálních podmínek projevuje jako vlna o vlnové délce

$$\lambda = 2\pi\hbar / mv$$

Kvantové kritérium je splněno pro charakteristické rozměry systému $a \approx \lambda / 2\pi$

$$(m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, v = 10^5 \text{ m/s: } \Rightarrow a \approx 1.1 \times 10^{-9} \text{ m})$$

\Rightarrow „nanoscience“

- Odhad tedy ukazuje, že běžné systémy kolem nás, se začínají chovat kvantově (tedy trochu „podivně“) právě při dosažení nano-metrických rozměrů.

Relace neurčitosti (Heisenberg 1925)

Veličiny typu akce:

$$E \times t, mv \times x, J \times \alpha/2\pi, \sigma \times \alpha/4\pi$$

Konjugované proměnné = proměnné, jejichž součin má rozměr „akce“ [Js]

Heisenbergův princip =

Existence nejvyšší dolní meze veličiny typu akce, tj.

$$\hbar \leq (\text{akce})$$

- Heisenbergův princip umožňuje již sám o sobě pomocí trojčlenky provádět dosti přesnou kvantitativní analýzu systémů z oblasti „nanoscience“.
- Začněte tedy vždy počítat od Heisenbergova principu!

Spin elektronu

Uhlenbeck, Goudsmit (1926)

Invariance vzhledem k otočení:

Klasický moment hybnosti

$$J \times \alpha/2\pi$$

Dodatečná vazba = relativistická invariance \Rightarrow

Intrinsický moment hybnosti (spin)
(polonásobky celých čísel)

$$\sigma \times \alpha/4\pi$$

- Spin je relativistický efekt vznikající podobně jako magnetismus v důsledku relativistické transformace prostoru a času (tzv. konformní transformace) vztažené k elementární částici.
- Z těchto důvodů spin a magnetismus spolu úzce souvisí.

Přestávka

IV. Mikroskopický model transportu náboje

Drudeho vztah

τ je střední čas mezi dvěma následujícími srážkami

n koncentrace nosičů (elektronů)

m hmotnost elektronu

$$G = e^2 \tau n / m = e \mu n$$

μ pohyblivost

$$e\tau/m = \mu = v / \text{grad}\phi$$

Aktivovaný transport

(S. Arrhenius , Z. physik. Chem. 4 (1889) 226) \Rightarrow

Podmínkou vstupu částice do reakce je její aktivace

Drudeho vztah & **Boltzmannův faktor** pro vnitřní termální aktivaci nosičů náboje (ϵ je aktivační energie)

$$G = e^2 \tau n/m , \quad n = n_0 \exp(-\epsilon/kT) \Rightarrow$$

$$\ln (G/G_0) = -\epsilon/kT$$

Nejběžnější typ transportu v polovodičích

Relace neurčitosti a vodivost

Průchod elektronu transportním kanálem za čas $\tau \Rightarrow$

$$I = e / \tau$$

Terminály kanálu mají potenciálový rozdíl $-\varphi$

Relace neurčitosti:

$$\tau \approx \hbar / e\varphi$$

$$(\text{Energie } 1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J})$$

$$\text{Vodivost kanálu} = I/V = e^2 / \hbar$$

Otázka II. Kolik kvantových kanálů by bylo třeba propojit paralelně, abychom realizovali vodivost velikosti 1S (Siemens) ?

Odpověď:

- $e^2 / \hbar = (1.6 \times 10^{-19})^2 / 1.05 \times 10^{-34} = 2.44 \times 10^{-4} \text{ S} \Rightarrow$
- Bylo by potřeba $1 / 2.44 \times 10^{-4} \approx 4\,100$ kanálů

Balistický transport

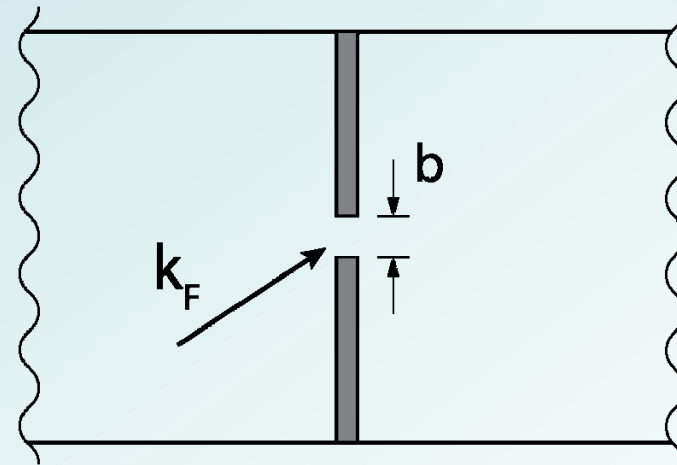
$$R_N = (\hbar / e^2) (\pi^2 / k_F b)$$

Sharvinova 2D formule

$$R_N = (\hbar / e^2) (2\pi / k_F b)^2$$

Sharvinova 3D formule

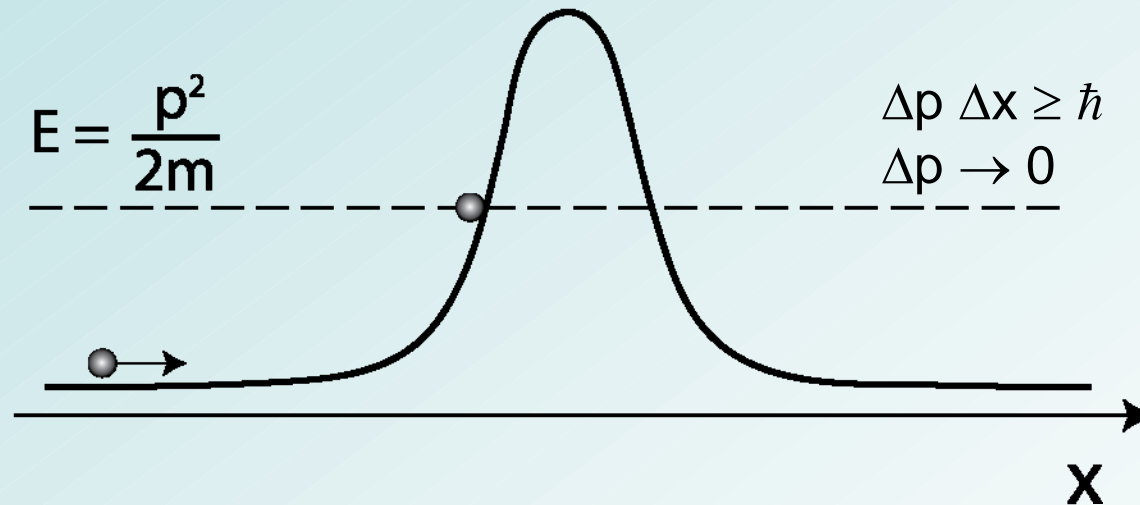
b charakteristický rozměr kontaktu



- Vodivost kvantového kanálu určuje balistické vodivosti v nano-systémech ($1/R_N$). Průchodnost konkrétního kanálu je modifikována jeho geometrií a topologií („dimenzí“).

V. Tunelování

Interpretace „tunelování částice“ podle Kodaňské školy
(Gamow, 1928)



Částice se po zastavení nachází „kdekoliv“ na stejné energetické úrovni. Časový faktor \Rightarrow exponenciální útlum s x .

Pravděpodobnost průchodu bariérou

Koeficient tunelové transmise bariérou tloušťky x :

$$D(x) = 4 \exp(-2\alpha x)$$

α se nazývá parametrem lokalizace

$D(x)$ charakterizuje

útlum vlnové funkce uvnitř bariéry \Rightarrow

umožňuje modelové výpočty, např:

Přeskoková vodivost - hopping

1) Přeskok na energeticky blízkou hladinu (VRH)

$$\ln (G/G_0) = - \beta / T^{1/4} \quad (\text{Mott, 3D})$$

$$\beta = 2[\alpha^3/k N(E_F)]^{1/4}$$

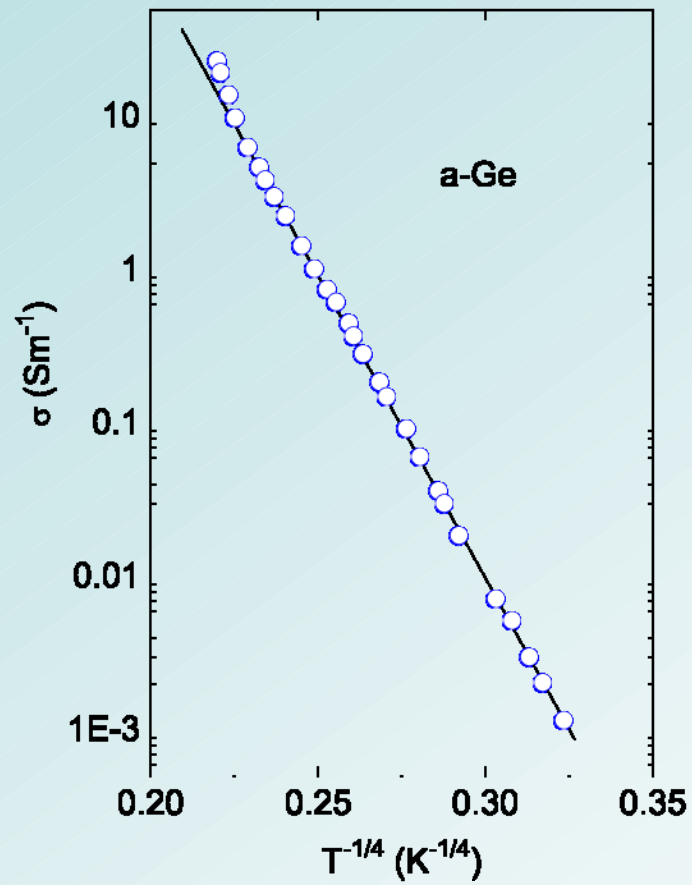
Závislost na efektivní dimenzi systému

$$\ln (G/G_0) = - \beta' / T^{1/3} \quad (\text{Knotek, 2D})$$

2) Přeskok do stavu geometricky nejbližšího (NNH)

$$\ln (G/G_0) = -\beta'' / T^{1/2} \quad (\text{Efros})$$

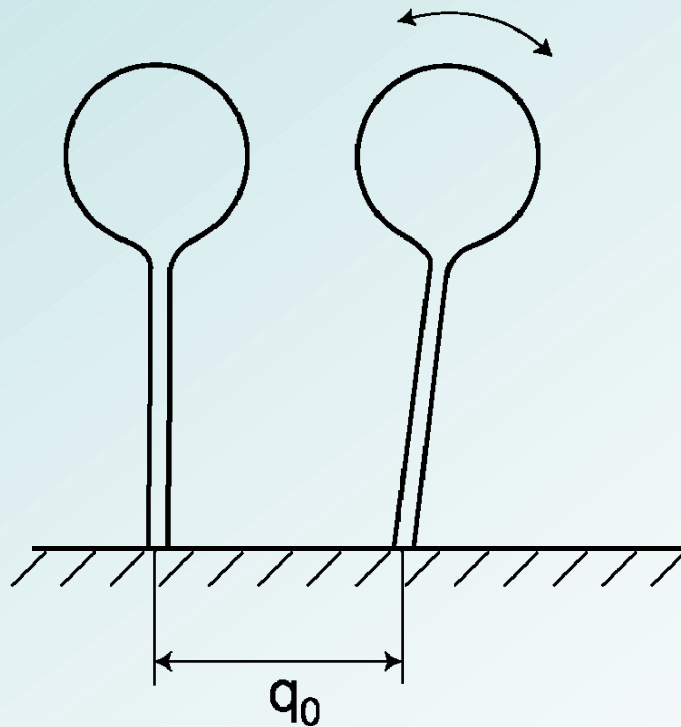
Hopping v neuspořádaném nano-systému



Přeskoková vodivost
v amorfním germániu

VI. Tunelování elektronů vibrující bariérou

Tepelně vibrující centra, (vzdálenost q_0 , teplota T , parametr lokalizace α).



Berthelotovská závislost (odvození)

Gaussova distribuce výchylky q

$$P(q) = (\kappa/2\pi kT)^{1/2} \exp(-\kappa q^2/2kT)$$

$\kappa = M\omega^2$ je tuhost oscilátoru. Koeficient tunelové transmise bariérou tloušťky $q_0 + q$:

$$D(q) = 4 \exp[-2\alpha(q_0 + q)].$$

Střední hodnota koeficientu transmise
(integrace $-\infty, +\infty$)

\Rightarrow

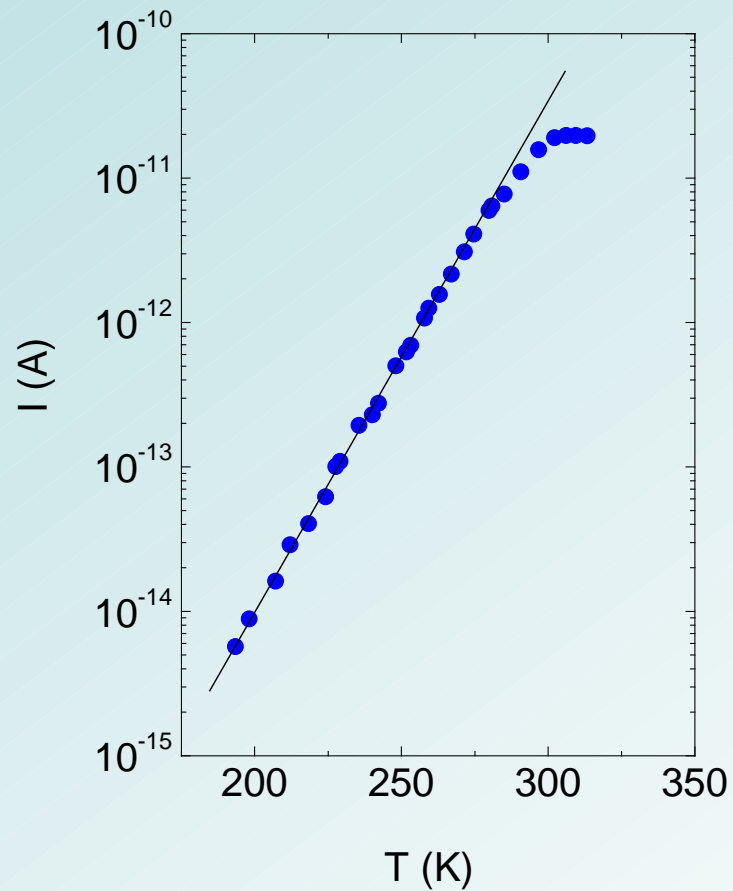
$$\langle D \rangle = \int P(q) D(q) dq = 4 \exp(-2\alpha q_0) \exp(2\alpha^2 kT/\kappa)$$

Experimentálně pozorovaná vodivost $G \propto \langle D \rangle \Rightarrow$

$$\log G = (2\alpha^2 k / M\omega^2 \ln 10) T + \text{const.}$$

Parametry α , M a ω jsou experimentálně zjistitelné např.
z optických měření.

Příklady: Berthelotovský typ vodivosti se pozoruje na površích semi-izolačních materiálů (GaAs, různé organické polymery) a v porézním křemíku,



Nano-porézní Si
Appl. Phys. Lett. **63** (1993) 180

VII. Slabá lokalizace elektronů ve vodiči

(G. Bergmann, Phys. Rev. B **28** (1983) 2914)

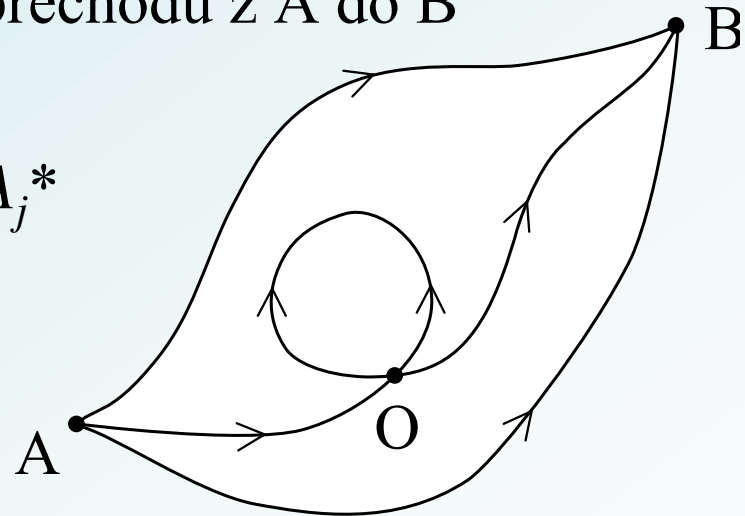
Alternativní dráhy ve vodiči pro přechod elektronu

$A \rightarrow B$,

A_i je amplituda pravděpodobnosti přechodu částice podél i -té dráhy

w je celková pravděpodobnost přechodu z A do B

$$w = |\sum_i A_i|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^*$$



Pro silně oscilující vlnové funkce je interferenční člen zanedbatelný, s výjimkou autoincidenčních drah.

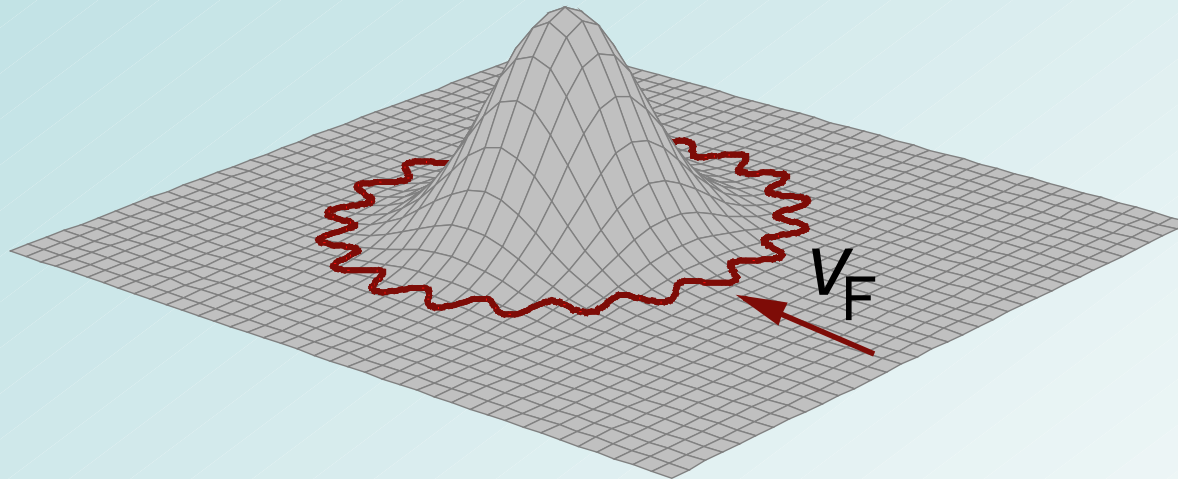
Pravděpodobnost návratu elektronu do bifurkačního bodu O je dána vztahem

$$|A_1|^2 + |A_2|^2 + 2\text{Re} A_1 A_2^* = 4|A_1|^2$$

Případ záchytu elektronu:

parciální amplituda $A_1 = A_2 \approx \frac{1}{2} + i0 \Rightarrow w \approx 1 \Rightarrow$

⇒ **Slabá lokalizace elektronu u Fermiho hladiny**

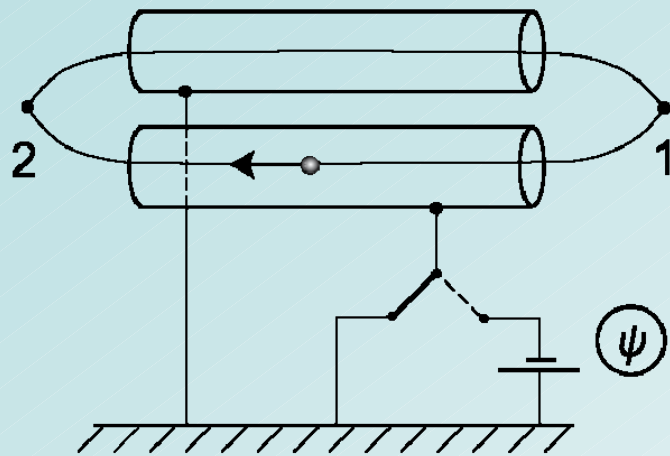


Konstruktivní interference parciálních elektronových vln v
okolí potenciálové fluktuace ⇒
Stabilní interferenční obrazec zvaný

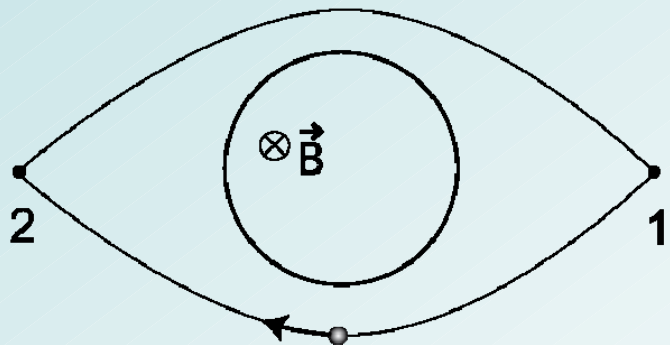
Slabě lokalizovaná (WL) orbita

- Slabě lokalizovaná orbita je zvětšenou analogií atomových orbit v centrálním poli atomového jádra.
- Atomová orbita je stabilní, dokud odpovídající de Broglieova vlna interferuje konstruktivně. V případě
- Destruktivní interference přechází elektron na jinou stabilní orbitu o jiné vlastní energii.

VIII. Vliv elektromagnetických polí na WL orbity, Aharonov - Bohmův jev



Y. Aharonov and D. Bohm,
Phys. Rev. **115** (1959) 485.



Fáze elektronu závisí na časové změně
skalárního potenciálu ψ a hodnotě
vektorového potenciálu \mathbf{A} ,
a to i za nepřítomnosti elektrického
nebo magnetického pole!

Poznámka: Aharonov-Bohmův jev „funguje“ i při nepřítomnosti elektrického (\mathbf{F}) nebo magnetického (\mathbf{B}) pole, jen když jsou přítomny příslušné potenciály!

Objasnění: Např. $\psi = \text{const.} \neq 0$, ale dle definice je

$\mathbf{F} = -\text{grad } \psi = 0$ (nepřítomnost sil elektrického pole)

- Aharonov s Bohmem odvodili teoreticky následující rovnice z myšlenkového pokusu (Gedanken Versuch), při němž zapnuli a vypnuli zdroj napětí (ψ) právě v době kdy elektron prolétával kovovou trubicí (viz obrázek).

Zobecnění pro magnetické pole (vektorový potenciál \mathbf{A}) bylo provedeno formální transformací, neboť magnetické pole je vlastně elektrické pole nazírané z pohybující se soustavy.

Aharonov-Bohmův fázový posuv $\Delta\varphi$

$$\Delta\varphi = (e/\hbar) \int_C \{(\partial t/\partial \mathbf{x})\psi - A\} d\mathbf{x},$$

(kde ψ a A jsou skalární a vektorový potenciál)

$$\Delta\varphi \approx 1, \Rightarrow$$

Destrukce interferenčního obrazce \Rightarrow

Externí míra WL orbit

Elektrický člen: (B-B radiace, optické fonóny)

$$(e/\hbar) \int_C (\partial t / \partial \mathbf{x}) \psi \, d\mathbf{x} \rightarrow (e\psi/\hbar v) \times 4\xi_\varphi \Rightarrow$$

$$\xi_\varphi = \hbar v / 4kT$$

Magnetický člen: (stacionární magnetické pole)

$$-(e/\hbar) \int_C \mathbf{A} \, d\mathbf{x} \rightarrow (e/\hbar) \int_S \mathbf{B} \, d\mathbf{S} \rightarrow (e/\hbar) |\mathbf{B}| \xi_B^2 \Rightarrow$$

$$\xi_B = \sqrt{(\hbar / eB)}$$

Experimentální důsledky

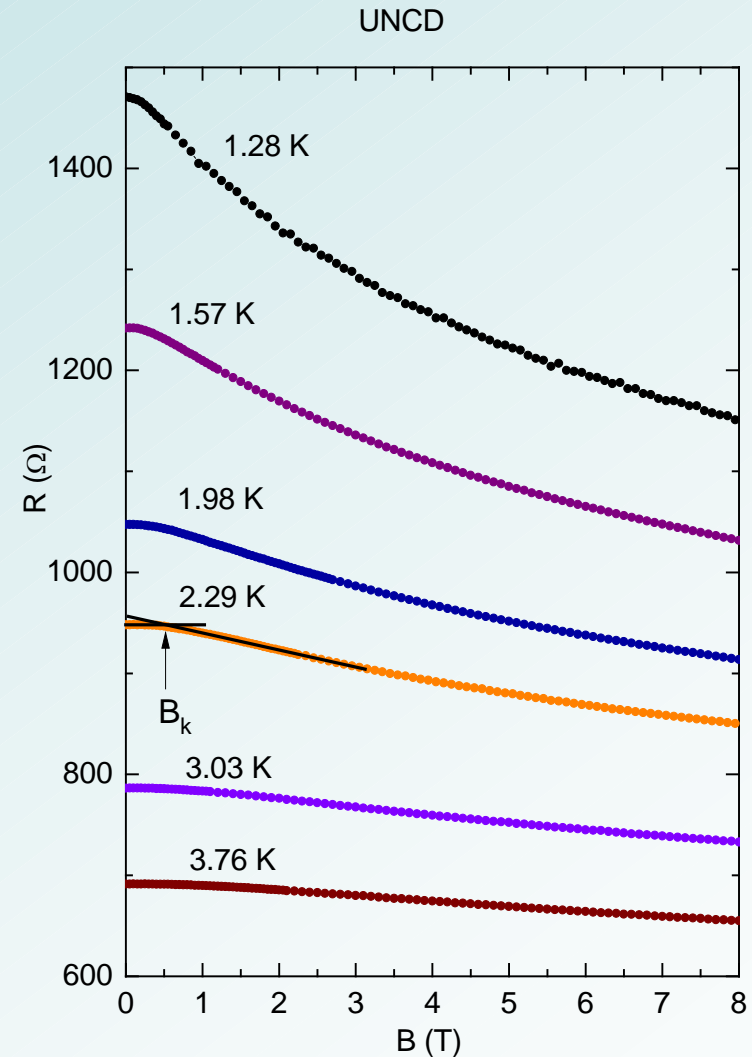
Koherentní vlnová funkce
nemůže existovat vně oblasti

$$> \xi = \min(\xi_{\varphi}, \xi_B) \Rightarrow$$

„shrinkage effect“ a gigantická
negativní magnetoresistence v
2DEG

Ultra-nano-krystalický diamant

Appl. Phys. Lett. **88** (2006) 092107



KONEC

Děkuji za pozornost