

К. ф.-м. н. И. А. ОБУХОВ

Россия, г. Москва, «Интерфейс-МФГ»
E-mail: obukhov@interface-mfg.ru

Дата поступления в редакцию
13.02 2006 г.

Оппонент д. ф.-м. н. В. А. ДРОЗДОВ
(ОИСВ, г. Одесса)

ЗАВИСИМОСТЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ПРОВОДОВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Дано объяснение наблюдаемого в эксперименте изменения температурной зависимости сопротивления металлических квантовых проводов при изменении их поперечного размера.

В статье [1] представлены результаты измерений температурной зависимости сопротивления квантовых проводов на основе Zn-наноконпозитов. Оказалось, что она качественно различна для «толстых» и «тонких» проводов. Так, при диаметре провода 15 нм наблюдался типичный для металлов практически линейный рост сопротивления с ростом температуры. Однако для проводов диаметром 9 и 4 нм при возрастании температуры наблюдался уже не рост, а уменьшение сопротивления. Эта аномальная температурная зависимость сопротивления более выражена для провода диаметром 4 нм.

Приведенная в статье [1] теоретическая интерпретация результатов измерений не кажется убедительной. Она основывается на формуле, связывающей сопротивление квантового провода с длиной фазовой когерентности (phase-breaking length) электронов проводимости L_ϕ (см. работу [2]). При этом никак не исследуются причины качественного изменения зависимости L_ϕ от температуры при уменьшении диаметра провода, а только производится обратный пересчет L_ϕ , исходя из упомянутой формулы, на основе данных по измерению сопротивления.

В работах [3, 4] показано, что при определенных условиях существенное влияние на электрические характеристики квантовых проводов и приборов на их основе оказывает инжекция электронов из контактных областей в проводящий канал. В частности, учет этого явления позволяет объяснить наблюдаемые высокие значения плотности тока в канале полевого транзистора на основе углеродной нанотрубки [5]. Проведенные расчеты [4, 6] показывают, что собственных электронов в нанотрубке оказывается на порядок меньше, чем инжектированных, и именно последние практически полностью определяют электропроводность прибора.

В настоящей статье исследуется влияние поперечных размеров металлических квантовых проводов на их удельное сопротивление.

Механизмы электронной проводимости в квантовом проводе

Представим квантовый провод (см. рис. 1) состоящим из эмиттерного (ЭК) и коллекторного (КК) контактов и соединяющего их проводящего канала (ПК).

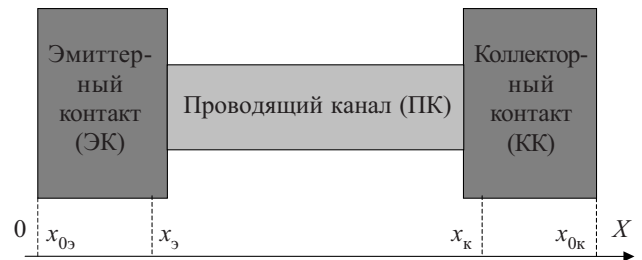


Рис. 1. Квантовый провод, состоящий из эмиттерного и коллекторного контактов и проводящего канала

Для простоты положим, что ПК представляет собой прямоугольный параллелепипед с квадратным сечением плоскостью, перпендикулярной оси OX . Длину стороны этого квадрата (поперечный размер ПК) обозначим через L . Очевидно, что форма поперечного сечения ПК может повлиять на количественные характеристики прибора, но не скажется на его качественных особенностях. Через $x_э$ и $x_к$ обозначим координаты по оси OX «металлургических» границ контактов и проводящего канала.

На рис. 2 показаны первые восемь уровней энергии электронов, возникающих в ПК за счет размерного квантования, для трех значений поперечного размера канала L — 15, 9 и 4 нм. Хорошо видно, что

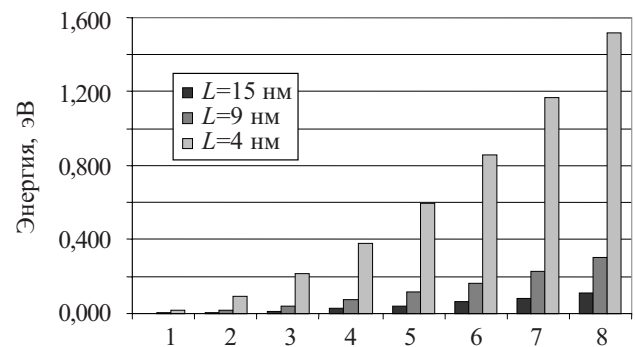


Рис. 2. Первые восемь уровней размерного квантования энергии электронов в ПК для различных поперечных размеров проводящего канала L

плотность состояний электронов быстро уменьшается с уменьшением L .

На рис. 3 показана разница в энергии электронов второго и первого уровней размерного квантования ($E=E_2-E_1$) для тех же значений поперечного размера ПК. При $L=15$ нм E составляет порядка $5 \cdot 10^{-3}$ эВ, плотность электронных состояний в ПК достаточно высока. При $L=9$ нм величина E равна $1,4 \cdot 10^{-2}$ эВ, а энергетический спектр электронов разрежен в полтора раза по отношению к проводу с $L=15$ нм. Для провода с $L=4$ нм $E=7 \cdot 10^{-2}$ эВ, т. е. энергетический спектр электронов разрежен почти в четыре раза по отношению к спектру в ПК с $L=15$ нм.

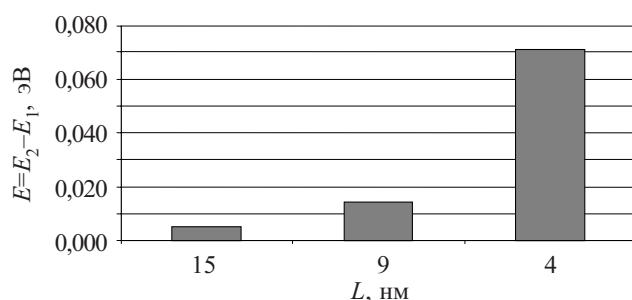


Рис. 3. Разница между энергией электронов на втором и первом уровнях размерного квантования в ПК с различным значением L

Количественные изменения в спектре размерного квантования энергии электронов, регулируемые размером поперечного сечения ПК, приводят к качественным изменениям в эффективном потенциальном рельефе для электронов проводимости в квантовом проводе [4]. На рис. 4 видно, что для провода с $L=15$ нм потенциальный барьер, создаваемый ПК между контактными областями, ниже энергии Ферми (примерно на $2,61 \cdot 10^{-2}$ эВ для рассчитываемой структуры). Назовем такие провода «толстыми». Уменьшение поперечного размера проводящего канала приводит к уменьшению плотности электронных состояний в нем. При достаточно малых L потенциальный барьер, создаваемый ПК, становится выше энергии Ферми. Такие квантовые провода (на рис. 4 с $L=9$ нм и $L=4$ нм) назовем «тонкими».

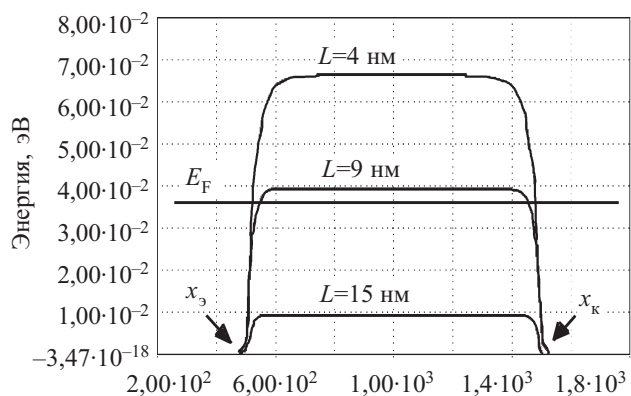


Рис. 4. Энергия Ферми (E_F) и эффективный потенциальный рельеф U^{eff} для электронов проводимости в квантовом проводе в направлении OX для различных значений L при нулевом смещении

Для электронов в квантовом проводе возможны три механизма переноса заряда [4]:

- дрейфово-диффузионный перенос электронов [7] с энергией, большей высоты потенциального барьера, создаваемого ПК;
- туннельный перенос через потенциальный барьер электронов с энергией, меньшей высоты этого барьера;
- инжекционный перенос электронов с энергией, меньшей высоты этого барьера [3, 4].

Под инжекционным переносом здесь понимается процесс, при котором в контакте, к которому приложено меньшее напряжение, электроны с энергией, меньшей высоты барьера, поглощают энергию тепловых флуктуаций, увеличивая свою энергию до значений, превышающих высоту барьера. Далее они перемещаются в ПК между контактами посредством дрейфа и диффузии, а затем излучают дополнительную энергию в контакте с большим приложенным напряжением. Заметим, что уменьшение энергии инжектированных электронов возможно и в ПК, однако оно ограничено снизу высотой потенциального барьера.

Для описания переноса заряда в квантовом проводе воспользуемся моделью, подробно описанной в [4]. Она позволяет в рамках единого формализма учесть все возможные механизмы проводимости в мезоскопических структурах, к которым относятся квантовые провода.

Разделим допустимые электронные состояния в квантовом проводе на две группы — a - и b -электронов. К a -электронам отнесем те, чья энергия превышает максимальное значение эффективного потенциала U^{eff} , а к b -электронам — те, чья энергия меньше максимального значения U^{eff} .

Такое разделение обусловлено тем, что a -электроны могут свободно распространяться между контактами квантового провода. Плотность их микроскопического потока

$$j = -i\hbar/2m^* \{ \Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi \} \quad (1)$$

в состояниях, описываемых волновой функцией Ψ , не равняется нулю. (Здесь и далее i — мнимая единица, \hbar — постоянная Планка, m^* — эффективная масса электронов, ∇ — оператор градиента.)

Следовательно, ненулевой является и плотность макроскопического потока, вычисляемая на основе соотношения

$$N = \sum_E j(E) f(E, F, T), \quad (2)$$

где $f(E, F, T)$ — функция распределения электронов по допустимым состояниям;

E — энергия электронов;

F — химический потенциал электронов;

T — температура окружающей среды.

В используемой модели

$$f(E, F, T) = (1 + \exp\{(E - E_F - F + \tau(v, \nabla F))/kT\})^{-1}, \quad (3)$$

где E_F — энергия Ферми электронов;

τ — время релаксации их импульса;

$v = j/\rho$ — микроскопическая скорость электронов;

$\rho = \Psi^*\Psi$ — микроскопическая плотность числа частиц.

Для b -электронов плотность потока j_b практически равна нулю, поскольку потенциальный барьер, образуемый проводящим каналом между контактами, достаточно широк (как правило, более 100 нм), и коэффициент прохождения b -электронов через него пренебрежимо мал. Соответственно, согласно (2), можно считать близкой к нулю и плотность макроскопического потока b -электронов N_b .

Положим, что a - и b -электроны представляют собой две фазы электронного газа, химические потенциалы F_a и F_b которых могут быть различны. В результате поглощения энергии тепловых флуктуаций происходят переходы электронов из b -состояний в a -состояния и обратные переходы, сопровождающиеся излучением энергии. Эти процессы, лежащие в основе инжекционного механизма переноса заряда в квантовом проводе, можно описать [4] как обмен электронами между a - и b -фазами, используя соответствующие уравнения баланса:

$$\begin{cases} (\nabla, N_a) = -(\gamma/\hbar)(F_a - F_b)(n_a + n_b); \\ (\nabla, N_b) = -(\gamma/\hbar)(F_b - F_a)(n_a + n_b). \end{cases} \quad (4)$$

Правые части уравнений (4) описывают обмен электронами между фазами. Для фигурирующих в (4) макроскопических концентраций электронов в a - и b -фазах справедливы выражения, аналогичные (2):

$$n_{a,b} = \sum_E \rho_{a,b}(E_{a,b}) f_{a,b}(E_{a,b}, F_{a,b}, T). \quad (5)$$

Постоянная γ характеризует скорости переходов между фазами; в расчетах она принималась равной 1/8.

Уравнения (4) решались совместно с уравнениями Шредингера и Пуассона. Из уравнения Шредингера определялись допустимые состояния электронов, их волновые функции и связанные с ними микроскопические плотности и скорости. Уравнение Пуассона использовалось для определения самосогласованного потенциала U^{eff} . В качестве граничных условий для химических потенциалов принимались

$$F_a(x_{0a}) = F_b(x_{0a}) = 0; F_a(x_{0k}) = F_b(x_{0k}) = -eV, \quad (6)$$

где V — приложенное к коллекторному контакту напряжение.

Такая постановка граничных условий позволила описать перенос заряда как в проводящем канале, так и в контактных областях, в которых происходит инжекция электронов. Формулы (2) и (3) дают возможность учесть как квантовые, так и классические явления. В приближении малого времени релаксации τ при условии равновесия a - и b -фаз ($F_a = F_b$) из (3) и (2) получается обычное соотношение для потока дрейфово-диффузионной модели [7].

Зависимость сопротивления квантового провода от температуры

Если энергия Ферми электронов превышает высоту потенциального барьера более чем на среднюю энергию тепловых флуктуаций kT , то количество b -электронов в ПК много меньше, чем количество a -электронов. В этом случае основной вклад в проводимость дают надбарьерные a -электроны, и тип проводимости квантового провода не отличается от типа

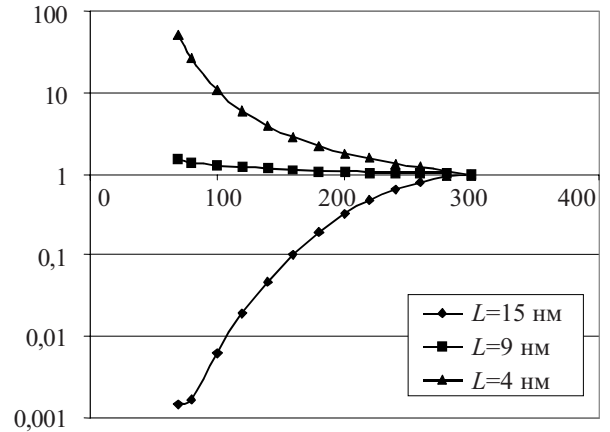


Рис. 5. Зависимость сопротивления квантового провода, нормированного относительно сопротивления при $T=300$ К, от температуры для различных значений L

проводимости контактных областей. Поэтому зависимость сопротивления от температуры для квантового провода с поперечным размером проводящего канала $L=15$ нм имеет обычный для металлов вид (см. рис. 5). Она определяется главным образом температурной зависимостью времени релаксации импульса электронов τ .

Для «тонких» ПК, когда энергия Ферми меньше высоты эффективного потенциального барьера, основным становится инжекционный механизм проводимости. Количество собственных a -электронов в ПК в этом случае мало. Этим обусловлено высокое удельное сопротивление провода при низких температурах. При увеличении температуры, согласно (5), возрастает количество электронов с энергией, большей E_F . Соответственно увеличивается и коэффициент при разности химических потенциалов в правых частях уравнений (4). Как следствие, возрастает число инжектируемых в проводящий канал электронов. На рис. 5 показана рассчитанная температурная зависимость сопротивлений квантовых проводов различного поперечного размера, нормированных относительно их значений при комнатной температуре ($T=300$ К).

Характер температурной зависимости сопротивления квантового провода полностью коррелирует с особенностями его потенциального рельефа, демонстрируемого на рис. 4. Если энергия Ферми превышает высоту потенциального барьера, создаваемого ПК, то сопротивление металлического квантового провода при повышении температуры растет. Если энергия Ферми меньше высоты потенциального барьера, то сопротивление квантового провода при увеличении температуры уменьшается. Эти качественные изменения в электрических характеристиках квантовых проводов регулируются поперечным размером проводящего канала.

При реализации в квантовом проводе инжекционного механизма проводимости количество электронов в ПК начинает существенно зависеть от температуры. Чем выше температура, тем большее количество электронов инжектируется в ПК из контактов, и их концентрация в канале возрастает. Дифференциальное сопротивление ПК пропорционально $(\tau n_a)^{-1}$.

В расчетах предполагалось, что τ обратно пропорционально температуре. Для «тонких» квантовых проводов уменьшение сопротивления с ростом температуры происходит за счет увеличения концентрации электронов в ПК. Этот эффект превышает обратное влияние, обусловленное температурной зависимостью τ .

Заключение

Результаты измерений температурной зависимости сопротивления металлических квантовых проводов, представленные в статье [1], можно объяснить особенностями переноса заряда в квантовых проводах различного поперечного размера.

Сопротивление «толстых» металлических проводов возрастает с температурой так же, как и сопротивление объемного материала. Это связано с тем, что в таких проводах энергия Ферми электронов проводимости превышает высоту расположенного между контактными областями потенциального барьера, создаваемого проводящим каналом прибора. Основным механизмом переноса заряда в этом случае является дрейфово-диффузионный, а основной вклад в проводимость дают надбарьерные электроны.

При уменьшении поперечного размера проводящего канала высота потенциального барьера увеличивается и, наконец, начинает превышать энергию Ферми. Превалирующую роль в переносе заряда в

квантовом проводе начинает играть инжекционный механизм. Количество электронов, инжектированных из контактов в проводящий канал, тем больше, чем выше температура. Именно этим обусловлено уменьшение сопротивления «тонких» металлических квантовых проводов при повышении температуры.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Heremans J. P., Thrush C. M., Morelli D. T., Wu M.-C. Resistance, magnetoresistance and thermopower of zinc nanowire composites // *Phys. Rev. Lett.*— 2003.— Vol. 91.— P. 076804-1—076804-4.
2. Beutler D. E., Giordano N. Localization and electron-electron interaction effects in thin Bi wires and films // *Phys. Rev. B.*— 1988.— Vol. 38, N 8.— P. 8—12.
3. Обухов И. А., Квяткевич И. И., Лавренчук А. А., Румянцев С. В. Статические характеристики пересекающихся квантовых проводов // *Мат-лы 14-й Междунар. Крымской Микроволновой конф.*— Севастополь.— 2004.— С. 507—511.
4. Обухов И. А. Моделирование переноса заряда в мезоскопических структурах.— Москва-Киев-Минск-Севастополь: Вебер, 2005.
5. Martel R., Schmidt T., Shea H. R. et al. Single- and multi-wall carbon nanotube field-effect transistors // *Appl. Phys. Lett.*— 1998.— Vol. 73.— P. 2447—2449.
6. Квяткевич И. И., Обухов И. А., Чекандин М. С. Моделирование полевого транзистора на основе квантового провода // *Мат-лы 12-й Междунар. Крымской Микроволновой конф.*— Севастополь.— 2002.— С. 455—457.
7. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников.— М.: Наука, 1990.

НОВЫЕ КНИГИ

Ю. Альтман. Военные нанотехнологии.— М.: Техносфера, 2006.— 416 с.

В связи с уже полученными революционными результатами в нанотехнологии (НТ), многие страны развернули обширные научно-исследовательские программы в этой области, которые пока носят, в основном, мирный характер. Однако все чаще появляются сообщения о военных программах НИОКР в нанотехнологии (это особенно заметно на примере правительственных программ США). Предлагаемая книга является первым систематическим и сравнительным обзором возможных военных применений НТ.

В течение ближайших двух десятилетий эти технологии могут быть использованы в производстве сверхмалых компьютеров, роботов, ракет, спутников, систем запуска и датчиков. НТ могут привести также к созданию более легких (и одновременно более прочных) материалов, которые найдут применение в производстве боевой техники и оружия, имплантантов (вводимых в организмы солдат), новых типов стрелкового вооружения (без использования металлов), автономных боевых устройств, а также более портативных систем химического и биологического оружия.

В предлагаемом обзоре эти потенциальные возможности применения НТ рассматриваются с точки зрения проблем международной безопасности и новых критериев контроля над вооружениями. Обсуждаются также вопросы международного права и новых угроз устойчивости мирового сообщества, связанных с возможной гонкой вооружений в этой области, появления новых типов оружия, опасности для гражданского населения и общественной жизни. Естественно, что некоторые возможные результаты развития нанотехнологий настолько тесно связаны с мирными применениями, что их невозможно отделить от военных (например, в разработке компьютеров). С другой стороны, некоторые результаты (например, производство биодатчиков для регистрации средств биологической войны) могут оказаться весьма полезными как в борьбе против терроризма, так и при контроле выполнения условий соответствующих международных соглашений по разоружению.

В книге предложены некоторые специфические подходы контроля и превентивного ограничения возможных военных применений новых технологий. Рассматриваются меры по укреплению взаимного доверия, рассчитанные на поддержание мира, а не на усиление национальных военных потенциалов. Книга представляет большой интерес для специалистов в области военных технологий, так называемого несмертельного (нелетального) оружия, разоружения и общих проблем международной безопасности.

