Статистика электронов в полупроводниковых нанонитях

Г. Гулямов[*,1], А.Б. Давлатов[2], Х.Н. Жураев[2]

[1] Наманганский инженерно строительный институт, ул. И. Каримова 12, 160103, Наманган, Узбекистан
[2] Физико-технический институт АН РУз, ул. Ч. Айтматова 2б, 100084, Ташкент, Узбекистан

Получена 29.11.2020

* Corresponding author: e-mail abror.davlatov.2012@mail.ru Phone: +998 99 977 06 09

В работе приведены выражения для концентрации носителей заряда в полупроводниковых нанонитях. Для нахождения концентрации использовано уравнение полного числа частиц. Используя функцию распределения Ферми-Дирака, получены разные приближенные выражения для концентрации носителей заряда в нанонитях. Для различных температур получена связь между химическим потенциалом и концентрацией электронов в нанонитях. Сглаживание дискретных уровней с ростом температуры объясняется температурной зависимостью термодинамической плотности состояний в нанонитях.

Ключевые слова: нанонить, концентрация, термодинамическая плотность состояний, химический потенциал.

The paper presents expressions for the concentration of charge carriers in semiconductor nanowires. To find the concentration, the equation for the total number of particles is used. Using the Fermi-Dirac distribution function, various approximate expressions for the concentration of charge carriers in nanowires are obtained. For various temperatures, a relationship was obtained between the chemical potential and the electron concentration in nanowires. The smooth out of discrete levels with increasing temperature is explained by the temperature dependence of the thermodynamic density of states in nanowires.

Keywords: nanowires, concentration, thermodynamic density of states, chemical potential.

I. Введение

Исследование низкоразмерных полупроводниковых квантовых нитей, квантовых точек и квантовых слоев обусловлен развитием наноэлектроники и является актуальной задачей физики полупроводников.

В работах [1-3] приведены технологии выращивания нанонитей. Для цилиндрических и прямоугольных нанонитей с параболическим законом дисперсии для электронов вычислены энергетические уровни [4]. В работах [5-11] для нанонитей с потенциальной ямой конечной глубины с параболическим законом дисперсии решались уравнения Шредингера и вычислены энергетические уровни электронов. Плотность состояний для квазиодномерного электронного газа квантовой нити с параболическим и непараболическим законом дисперсии вычислена в работах [12-14] и [14-15]. В работе [16] теоретически исследована температурная зависимость плотности состояний и рассмотрена термодинамика квазидвумерного электронного газа.

Настоящая работа посвящена статистике электронов в полупроводниковых нанонитях, получены приближенные выражения для концентраций и плотности термодинамических состояний.

II. Концентрация носителей зарядов в полупроводниковых нанонитях

Для определения концентрации заряженных частиц воспользуемся уравнением для полного числа частиц, которое в одномерном электронном газе определяется выражением:

$$N_0 = (2s+1)\frac{L_z}{2\pi}\sum_{n,l}\int_{-\infty}^{\infty} dk_z f(E). \qquad (1)$$

Здесь L_z – размер образца в направлении оси z, $f(E)$ – функция Ферми-Дирака, s = 1/2 – спиновое число.

В одномерном электронном газе энергетический спектр электронов имеет следующий вид:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + E_{n,l}. \qquad (2)$$

В этом случае уравнение (1) может быть записано в следующем виде:

$$N_0 = (2s+1)\frac{L_z}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{d\left(\sqrt{E-E_{n,l}}\right)}{dE}f(E)dE = (2s+1)\frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}}f(E). \qquad (3)$$

Из этого уравнения для концентрации одномерного электронного газа получим выражение

$$n_L = \frac{N_0}{L_z} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{1}{\exp(\frac{E-\mu}{kT})+1}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}} \qquad (4)$$

Это выражение определяет концентрацию электронов в квантовой нити. Выражение (4) в аналитическом виде не решается.

Поэтому проведем приближенное вычисление. Введем следующие обозначения

$$n_0 = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}},$$
$$n_L = n_0\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{1}{\exp(\frac{E-\mu}{kT})+1}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}} \qquad (5)$$

При $T\to 0$ последнее выражение принимает следующий вид

$$n_L = n_0\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{1}{\exp(\frac{E-\mu}{kT})+1}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}} \approx n_0\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\mu=E_F}\frac{\Theta\left(E-E_{n,l}\right)dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}} = 2n_0\sum_{n,l}\sqrt{E_F-E_{n,l}}\,\Theta\left(E_F-E_{n,l}\right). \qquad (6)$$

Здесь, $\Theta(x)$ – функция Хевисайда:

$$\Theta\left(E-E_{n,l}\right) = \begin{cases} 1, & E > E_{n,l} \\ 0, & E < E_{n,l} \end{cases}. \qquad (7)$$

Выражение (5) соответствует интегралу Ферми при $j = -1/2$. Для вычисления интеграла при любой температуре воспользуемся интегральной функцией Ферми при $j = 1/2$ с разными приближенными решениями. Если учесть, что

$$F_j(m) = \frac{1}{\Gamma(j+1)}\int_0^{\infty}\frac{x^j}{1+\exp(x-m)}dx, \qquad (8)$$

то имеет место следующее соотношение

$$F_{-1/2}(m) = 2\frac{\partial}{\partial m}F_{1/2}(m). \qquad (9)$$

Приближенные решения для $F_{1/2}(m)$ приведены во многих работах [см. 17-23].

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

$$F_{1/2}(m)\approx\begin{cases}\dfrac{2\sqrt{\pi}\exp(m)}{4+\exp(m)}, & m<1.33\\ \dfrac{2\sqrt{m^3}}{3}\left(1+\dfrac{1}{8}\dfrac{\pi^2}{m^2}\right), & m\geq 1.33\end{cases}. \qquad (10)$$

Число 1.33, с которым сравнивается m, определяется из условия непрерывности (см. рис. 1, 2)

$$F_{-1/2}(m)=2\frac{\partial}{\partial m}F_{1/2}(m)\approx\begin{cases}\dfrac{16\sqrt{\pi}e^m}{\left(4+e^m\right)^2}, & m<1.33\\ 2\sqrt{m}-\dfrac{\pi^2}{12\sqrt{m^3}}, & m\geq 1.33\end{cases} \qquad (11)$$

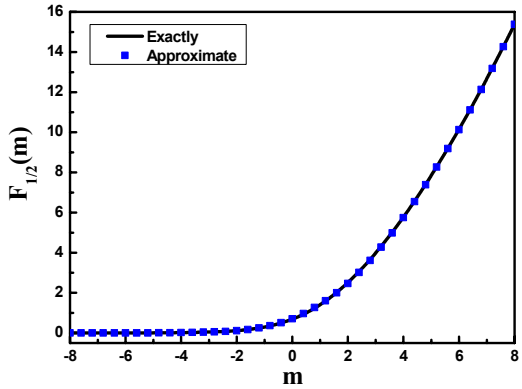


Рисунок 1. $F_{1/2}(m)$ зависимость интеграла Ферми от аргумента m.

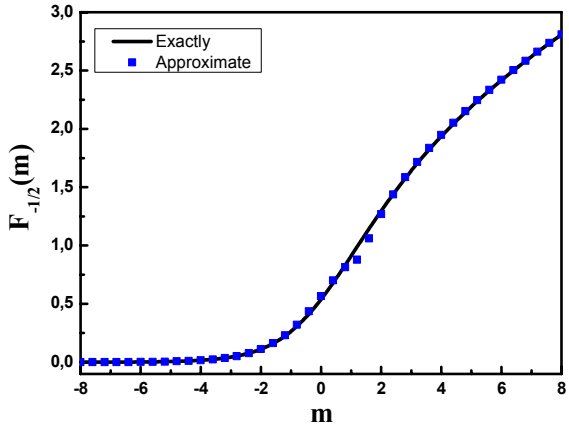


Рисунок 2. $F_{-1/2}(m)$ зависимость интеграла Ферми от аргумента m.

Проведем следующие замены:

$$x=\frac{E-E_{n,l}}{kT},\quad m=\frac{\mu-E_{n,l}}{kT},\quad dE=kTdx$$
$$n_L=n_0\sqrt{kT}\sum_{n,l}\int_0^{\infty}\frac{1}{e^x e^{-m}+1}\frac{dx}{\sqrt{x}} \qquad (12)$$

Используя выражения (11) и (12), преобразуем уравнение (5) к следующему виду:

$$n_L\approx\begin{cases}n_0\sqrt{kT}\sum\limits_{n,l}\dfrac{16\sqrt{\pi}\exp\left(\dfrac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)}{\left(4+\exp\left(\dfrac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)\right)^2}, & \mu<E_{n,l}+1.33kT\\ n_0\sqrt{kT}\sum\limits_{n,l}\dfrac{1}{\sqrt{\left(\dfrac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)^3}}\left(2\left(\dfrac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)^2-\dfrac{\pi^2}{12}\right), & \mu\geq E_{n,l}+1.33kT\end{cases}. \qquad (13)$$

III. Плотность энергетических состояний в полупроводниковых нанонитях

Для того чтобы определить термодинамическую плотность состояний, воспользуемся уравнением (5). Тогда по определению

$$N(\mu,T)=\frac{\partial n_L}{\partial\mu}=$$
$$=\frac{n_0}{4kT}\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\infty}\frac{1}{\cosh\left(\dfrac{E-\mu}{2kT}\right)^2}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}} \qquad (14)$$

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

При $T\to 0$ выражение (14) принимает следующий вид.

$$N(\mu,T)\overset{T\to 0}{=} g(E_F)=\frac{n_0}{4kT}\sum_{n,l}\int_{E_{n,l}}^{\mu=E_F}\frac{1}{\cosh\left(\frac{E-\mu}{2kT}\right)^2}\frac{dE}{\sqrt{E-E_{n,l}}}=\frac{n_0}{2}\sum_{n,l}\frac{\Theta\left(E_F-E_{n,l}\right)}{\sqrt{E_F-E_{n,l}}}. \qquad (15)$$

Пользуясь выражением (13), получим приближенные значения (14) при различных температурах.

$$N(\mu,T)\approx\begin{cases}16n_0\sqrt{\frac{\pi}{kT}}\sum_{n,l}\left(\frac{\exp\left(\frac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)\left(\exp\left(\frac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)-4\right)}{\left(4+\exp\left(\frac{\mu-E_{n,l}}{kT}\right)\right)^3}\right), & \mu<E_{n,l}+1.33kT\\ \frac{n_0}{8}\sum_{n,l}\frac{(\pi kT)^2+8E_{n,l}^2-16\mu E_{n,l}+8\mu^2}{\left(\mu-E_{n,l}\right)^{5/2}}, & \mu\geq E_{n,l}+1.33kT\end{cases}. \qquad (16)$$

IV. Результаты и заключение

Расчеты были проведены для нанонитей с бесконечно глубокими потенциальными ямами для энергий первого уровня E_n=0.05 eV и E_l=0.1 eV[**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. На рис. 3 приведены зависимости концентрации носителей зарядов от химического потенциала электронов в нанонитях.

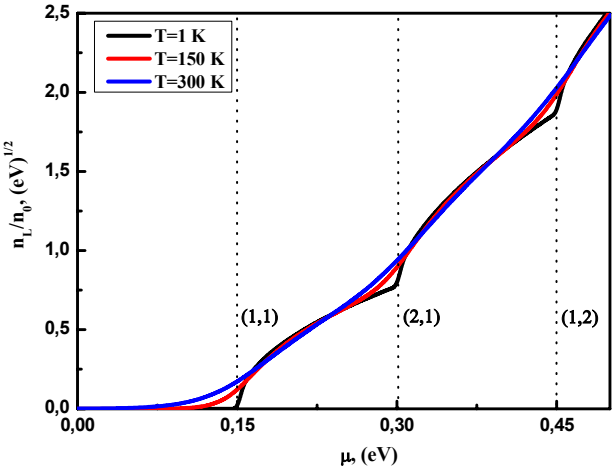


Рисунок 3. Зависимость концентрации электронов от химического потенциала при различных температурах.

Как видно из рисунка, с ростом температуры зависимости сглаживаются. Однако с увеличением химического потенциала одномерного электронного газа зависимости меняются то с переменной, то с постоянной скоростью. Отсюда следует, что с ростом температуры химический потенциал меняется с переменной скоростью. На рис. 4 приведена зависимость концентрации электронов от энергии Ферми при температуре 0 К.

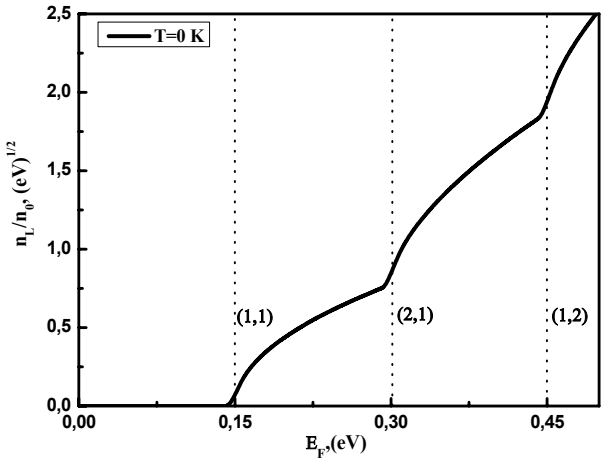


Рисунок 4. Зависимость концентрации электронов в нанонити от энергии Ферми при температуре T=0 К.

Как видно из рисунка, при пересечении энергии Ферми с энергетическими уровнями наблюдаются резкие изломы.

На рис. 5-7 приведены зависимости концентраций электронов от химического потенциала в нанонитях при температурах 1, 150, 300 К. Как видно, приближенные и точные значения концентраций, полученные с помощью формул (5) и (13), не сильно различаются. Отсюда следует, что для вычисления концентрации носителей зарядов в

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

нанонитях можно использовать приближенную формулу (13).

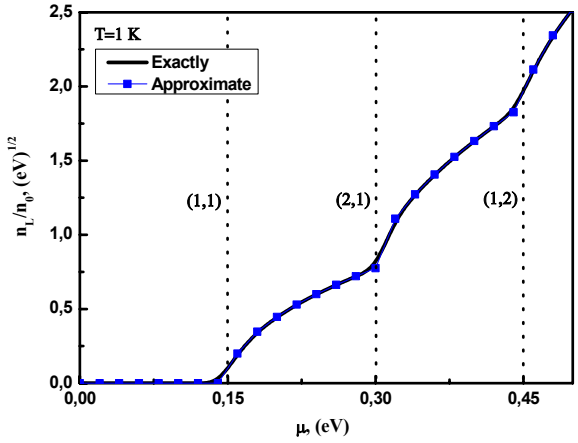


Рисунок 5. Зависимость концентрации электронов в нанонити от химпотенциала при температуре T=1 K.

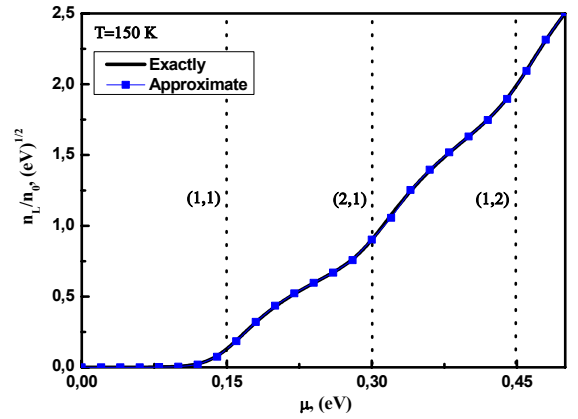


Рисунок 6. То же, что на рис. 5, при температуре T=150 K.

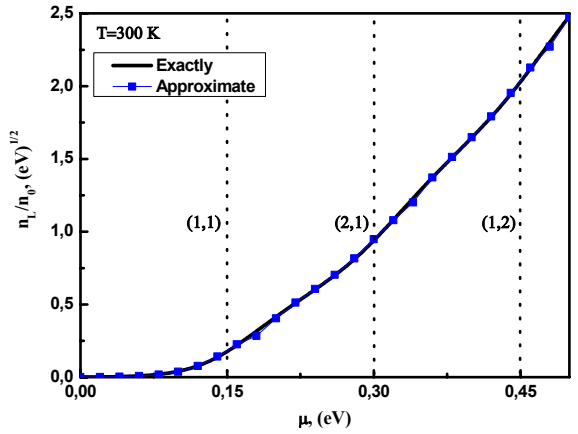


Рисунок 7. То же при температуре T=300 K.

Формула (16) выражает приближенное значение плотности термодинамических состояний. При низких температурах результаты расчетов по формуле (16) очень близки к результатам, полученным по точной формуле (14). На рис. 8 для различных температур приведены зависимости термодинамической плотности состояний от химического потенциала электронов в нанонитях.

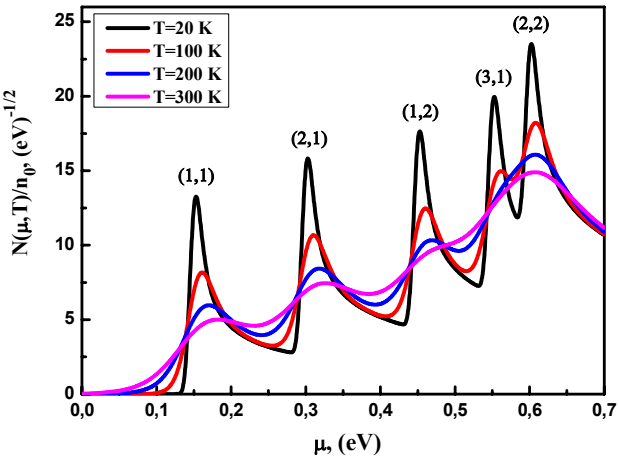


Рисунок 8. Зависимость термодинамической плотности состояний от химпотенциала в нанонитях при различных температурах.

Как видно из рисунка, с ростом температуры резкие пики термодинамической плотности состояний уменьшаются.

Метаданные

Statistics of electrons in semiconductor nanowires

G. Gulyamov, A.B. Davlatov, H.N. Zhuraev

[1]Namangan Engineering Construction Institute, Islam Karimov street, 12, 160103, Namangan, Uzbekistan
[2]Physical-Technical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Chingiz Aytmatov street, 2 B, 100084, Tashkent, Uzbekistan

The paper presents expressions for the concentration for a charge carrier in semiconductor nanowires. To find the concentration, the equation for the total number of particles is used. Using the Fermi-Dirac distribution function, various approximate expressions for the concentration of a charge carrier in nanowires are obtained. For various temperatures, a relationship was obtained between the chemical potential and the electron concentration in nanowires. The washing away of discrete levels with increasing temperature is explained by the temperature dependence of the thermodynamic density of states in nanowires.

Keywords: nanowires, concentration, thermodynamic density of states, chemical potential.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

Литература (References)

[1] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Controlled growth of highly uniform, axial/radial direction-defined, individually addressable InP nanowire arrays. Nanotechnology **16**, 2903–2907 (2005); doi:10.1088/0957-4484/16/12/029.

[2] J. Motohisa, J. Noborisaka, J. Takeda, M. Inari, T. Fukui. Catalyst-free selective-area MOVPE of semiconductor nanowires on (111) B oriented substrates. J. Cryst. Growth **272**, 180–185 (2004); doi:10.1016/j.jcrysgro.2004.08.118.

[3] P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui. Realization of conductive InAs nanotubes based on lattice-mismatched InP/InAs core-shell nanowires. Appl. Phys. Lett. **88**, 013110 (2006); doi: 10.1063/1.2161576.

[4] G. Gulyamov, A.G. Gulyamov, A.B. Davlatov, B.B. Shahobiddinov. Electron Energy in Rectangular and Cylindrical Quantum Wires. J. Nano-Electron. Phys. **12**, No 4, 04023 (2020); https://doi.org/10.21272/jnep.12(4).04023..

[5] G. Gulyamov, A. G. Gulyamov, A. B. Davlatov, and Kh. N. Juraev. Energy Levels in Nanowires and Nanorods with a Finite Potential Well. Hindawi. Advances in Condensed Matter Physics. Volume 2020, Article ID 4945080, 12 pages. https://doi.org/10.1155/2020/4945080.

[6] N.V. Tkach, I.V. Pronishin, A.M. Makhanets. Spectrum of an electron in a superlattice along a cylindrical quantum wire. Russian Physics Journal **41**, 178 (1998). doi: 10.1007/BF02766566.

[7] F.M.S. Lima, O.A.C. Nunes, A.L.A. Fonseca, M.A.Amato, E.F. Da Silva Jr. Effect of a terahertz laser field on the electron-DOS in a GaAs/AlGaAs cylindrical quantum wire: finite well model. Semicond. Sci. Technol. **23**, 125038 (2008); doi:10.1088/0268-1242/23/12/125038.

[8] A. Radu. Transverse laser dressing effects on the subband density of states in a 20-nm-wide GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ quantum well wire. Physica E **44**, 1446–1453 (2012); doi: 10.1016/j.physe.2012.03.009.

[9] V.A. Arutyunyan. Poluprovodnikoviy sloi v sil'nom electricheskom pole: spektr nositeley i vnutrizonnie perekhodi. Fizika tverdogo tela **52**, 1621 (2010).

[10] N.V. Tkach, V.A. Golovatcki. Kvazistatcionarnie sostoyaniya electronov dyrok v otkrytoi slozhnoy tsilindricheskoy kvantovoi provoloke. Fizika tverdogo tela **43**, 350 (2001).

[11] N.V. Tkach, V.P. Zharkoy. Spektr i electron-fononnoe vzaimodeistvie v srede s tsilindricheskoy kvantovoi provolokoy. Fizika I tekhnika poluprovodnikov **33**, 598 (1999).

[12] P.J. Baymatov, A.G. Gulyamov, A.B. Davlatov, B.B. Uzakov. Broadening thermal energy levels and density states of quasi one-dimensional electron gas. Journal of Applied Mathematics and Physics **4**, 706-710 (2016); http://dx.doi.org/10.4236/jamp.2016.44081.

[13] D.N. Quang, N.H. Tung. Analytic solution for the density of states of the disordered quasi-one-dimensional electron gas in a quantum wire. Journal of the Physical Society of Japan **70**, No 2, 449-459 (2001); https://doi.org/10.1143/JPSJ.70.449.

[14] E.B. Ramayya, D. Vasileska, S.M. Goodnick, I. Knezevic. Electron transport in silicon nanowires: The role of acoustic phonon confinement and surface roughness scattering. Journal of Applied Physics **104**, 063711 (2008); https://doi.org/10.1063/1.2977758.

[15] I. Knezevic, E.B. Ramayya, D. Vasileska, S.M. Goodnick. Diffusive Transport in Quasi-2D and Quasi-1D Electron Systems. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. **6**(8), 1725–1753 (2009); https://doi.org/10.1166/jctn.2009.1240

[16] P.J. Baymatov, A.G. Gulyamov, B.T. Abdulazizov. On the heat capacity of a quasi-two-dimensional electron gas. Advances in Condensed Matter Physics, Article ID 8317278 (2019); https://doi.org/10.1155/2019/ 8317278.

[17] V.V. Karasiev, D. Chakraborty, S.B. Trickey. Improved analytical representation of combinations of Fermi–Dirac integrals for finite-temperature density functional calculations. Computer Physics Communications **192**, 114-123 (2015); doi:10.1016/j.cpc.2015.03.002.

[18] O.N. Koroleva, A.V, Mazhukin, V.I. Mazhukin, P.V. Breslavskiy. Analytical approximation of the Fermi-Dirac integrals of half-integer and integer orders. Mathematical Models and Computer Simulations **9**(3), 383-389 (2017); doi:10.1134/S2070048217030073

[19] F.G. Lether. Analytical expansion and numerical approximation of the Fermi-Dirac integrals $F_j(x)$ of Order $j=-1/2$ and $j=1/2$. Journal of Scientific Computing **15**, 479-497 (2000); https://doi.org/10.1023/A:1011136831736.

[20] T. Fukushima. Precise and fast computation of inverse Fermi-Dirac integral of order 1/2 by minimax rational function approximation. Applied Mathematics and Computation **259**, 698-707 (2015); doi:10.1016/j.amc.2015.03.015

[21] T. Fukushima. Computation of a general integral of Fermi–Dirac distribution by McDougall–Stoner method. Applied Mathematics and Computation **238**, 485–510 (2014); doi:10.1016/j.amc.2014.04.028.

[22] H. Huang, L. Xiao. Comment on "A new approximation of Fermi-Dirac integrals of order 1/2 for degenerate semiconductor devices". Superlattices and Microstructures **144**, 106572 (2020); doi:10.1016/j.spmi.2020.106572.

[23] A. AlQurashi, C.R. Selvakumar. A new approximation of Fermi-Dirac integrals of order 1/2 for degenerate semiconductor devices. Superlattices and Microstructures **118**, 308-318 (2018); doi:10.1016/j.spmi.2018.03.072.

Яримўтказгичли наноипда электронлар статистикаси

Г. Гулямов, А.Б. Давлатов, Х.Н. Жураев

[1]Наманган муҳандислик-қурилиш институти, И. Каримов кўчаси, 12 уй, 160103, Наманган, Ўзбекистан; [2]ЎзРФА Физика-Қуёш ИИЧБ, Физика-техника институти, Ч. Айтматов кўчаси, 2В уй, 100084, Тошкент, Ўзбекистон.

Бу ишда яримўтказгичли наноипда ток ташувчи зарралар учун концентрация ифодаси келтирилган. Концентрацияни топишда тўла зарралар сони тенгламасидан фойдаланилган. Ферми-Дирак тақсимот функциясини турли тақрибий ифодаларидан фойдаланиб концент-рация учун

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

тақрибий ифодалар келтирилган. Турли ҳароратларда концентрация ва кимёвий потенциал орасидаги боғланишлар топилган. Яримўтказгичли наноипларда энергетик ҳолатлар зичлиги ҳисоблан ган ва тақрибий ифода келтирилган. Термодинамик ҳолатлар зичлигини ҳароратга боғлиқлиги графики турли ҳароратлар учун келтирилган. Ҳарорат ортиши билан сатҳлар ёйилиб кетиши термодинамик ҳолатлар зичлиги орқали тушинтирилган.

Калит сўзлар: наноип, концентрация, термодинамик ҳолатлар зичлиги, кимёвий потенциал.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.