Materiały do ćwiczeń na II Pracowni Fizycznej



N1

BADANIE PRZEWODNOŚCI ELEKTRYCZEJ NANODRUTÓW

J.J. Kołodziej, S. Godlewski, A. Tekiel, 2008

1. Wstęp

Miniaturyzacja urządzeń elektronicznych skierowała uwagę badaczy i technologów w stronę obiektów o rozmiarach granicznych czyli takich, które nie podlegałyby dalszej miniaturyzacji. Takie obiekty zwane często nanometrowymi składają się z kilku do kilku tysięcy atomów i na ogół posiadają egzotyczne właściwości elektryczne. Egzotyczność tych obiektów z jednej strony daje nadzieję na konstrukcję zupełnie nowych, nieosiągalnych w większej skali urządzeń, z drugiej stanowi wyzwanie dla badaczy ze względu na będące jej efektem nieoczekiwane charakterystyki nanoukładów. Jednym z najbardziej rozpowszechnionych tematów badawczych współczesnej fizyki jest problem przewodnictwa nanodrutów – czyli podłużnych układów atomów metali których przekroje poprzeczne zawierają od niewiele atomów. Takie nanodruty można wytwarzać np. w tzw. technice MCBJ¹, która opiera się na rozwiązaniach stosowanych w skaningowej mikroskopii prądu tunelowego (STM) i skaningowej mikroskopii sił atomowych (AFM). W ramach tej techniki ostrze wykonane z czystego metalu (np. złota) doprowadzane jest do kontaktu z powierzchnią z tego samego metalu a następnie wycofywane, w wyniku czego najpierw tworzy się złącze a następnie to złącze zrywa. Tuż przed zerwaniem takie złącze może mieć charakter nanodrutu lub nawet pojedynczego łańcuch atomów – zob. Rys. 1. Podczas separacji elektrod (ostrza i powierzchni) przewodność układu zmienia się w nieciągły sposób przyjmując wartości bliskie wielokrotności kwantu przewodności elektrycznej G_0 ($G_0 = 2e^2/h \cong 1/12.9 K \Omega^{-1}$).



Rys. 1. Symulacja procesu MCBJ zrywania nanozłącza. Al - P. Jelinek et al. Surf.Sci 566, 13 (2004)

¹ Z ang. mechanically controllable break junction

2. Elektrony w przestrzeni o trzech (lub mniej) wymiarach

Wewnątrz przewodzącego obiektu o znacznych rozmiarach elektrony przewodnictwa mogą poruszać się w zasadzie swobodnie w dowolnym kierunku (zob. też C. Kittel, *Wstęp do Fizyki Ciała Stałego*, rozdz. 7), analogicznie do cząstek gazu zamkniętych w naczyniu. Dlatego zbiór elektronów przewodnictwa nazywany bywa gazem Fermiego. Z drugiej strony, zajęte stany elektronowe wypełniają tzw. kulę Fermiego w przestrzeni pędów i na skali energii wszystkie znajdują się poniżej pewnego poziomu zwanego energią Fermiego², co przypomina zachowanie cieczy w naczyniu. Dlatego możemy też spotkać się z określeniem, że elektrony przewodnictwa stanowią "ciecz Fermiego".

Elektrony w trójwymiarowej sieci krystalicznej pełniej opisuje teoria Blocha (zob. np. C. Kittel, *Wstęp do Fizyki Ciała Stałego*, rozdz. 7). W tej teorii elektronom są przypisywane jednocząstkowe (niezależne od innych) funkcje falowe, które mają postać biegnących fal płaskich modulowanych z periodycznością sieci.

Jeśli jednak nasz przewodzący obiekt jest cienką warstwą, elektrony będą mogły poruszać się swobodnie tylko w płaszczyźnie warstwy. W kierunku prostopadłym ich ruch będzie ograniczony poprzez powierzchnie warstwy. Jeśli zechcemy opisać ruch naszego elektronu w warstwie za pomocą uproszczonego formalizmu kwantowomechanicznego³ to znajdziemy, że ruch w płaszczyźnie warstwy jest dobrze opisywany poprzez fale biegnące a ruch w kierunku prostopadłym do warstwy poprzez fale stojące. Energia związana z ruchem prostopadłym jest kwantowana podobnie jak energia cząstki w studni potencjału. Na skali energii dostajemy drabinkę dostępnych stanów, a odległość pomiędzy sąsiednimi stanami jest tym większa im mniejsza jest grubość naszej warstwy. Ponieważ elektrony mogą zajmować stany poniżej energii Fermiego tylko niektóre (dolne) ze "szczebli" będą dla nich dostępne. Może się też zdarzyć, że wszystkie elektrony będą zajmować najniższy stan poprzeczny. Bardzo podobna sytuacja będzie miała miejsce jeśli ograniczymy nasz obiekt w dwóch wymiarach, czyli uczynimy cienki drut. Wtedy wzdłuż drutu ruch elektronu opisywać będzie fala biegnąca, a w dwóch kierunkach prostopadłych do drutu, fale stojące. Jeśli drut będzie dostatecznie cienki wtedy w kierunkach poprzecznych elektrony zostaną w stanie podstawowym i utworzy się *stricte* jednowymiarowy układ fizyczny. Taki układ elektronów nazywany jest czasami "cieczą Luttingera" aby odróżnić go od "cieczy Fermiego". Ze względu na oddziaływania kulombowskie i korelacje pomiędzy elektronami właściwości takiego układu mogą być "egzotyczne" tzn. zupełnie inne niż układów trójwymiarowych.

3. Gęstość stanów elektronowych dla obiektu o znacznych rozmiarach

Przypomnijmy na początek definicję pojęcia "gęstość stanów"⁴; przyjmujemy, że dla pewnego obiektu jest to liczba niezależnych rozwiązań równania Schroedingera dla elektronu we wnętrzu tego obiektu, na jednostkę energii i na jednostkę objętości.

Dla elektronu wewnątrz jednorodnego obiektu o znacznych rozmiarach (przyjmijmy dla uproszczenia, że jest to sześcian o boku *L*) rozwiązaniami równania Schroedingera są biegnace fale płaskie:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad \vec{r} = (x, y, z), \quad \vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$$
[1]

² W temperaturze 0 K spełnione dokładnie, powyżej 0 K istnieje rozmycie granicy stanów obsadzonych. Zob. też rozkład Fermiego-Diraca i zakaz Pauliego (np. C. Kittel, Wstęp do Fizyki Ciała Stałego)

³ Zaniedbujemy (uśredniamy) tutaj periodyczny potencjał dla elektronu w krysztale (model prawie swobodnych elektronów). Opis jakościowy problemu pozostaje mimo to poprawny . Intuicyjnie możemy próbować zrozumieć to przybliżenie porównując jazdę na rowerze po gładkim asfalcie i po "kocich łbach". Dla obserwatora zewnętrznego opisy ruchu dla tych dwóch sytuacji nie różnią się zasadniczo.

⁴ W odniesieniu do elektronowej gęstości stanów często można spotkać się ze skrótem "DOS" z ang. density of states.

Dla fal biegnących $\Psi_{\vec{k}}$ przyjmujemy periodyczne warunki brzegowe dla funkcji falowych , czyli :

$$\begin{split} \Psi_{\vec{k}}(x+L, y, z) &= \Psi_{\vec{k}}(x, y, z) \\ \Psi_{\vec{k}}(x, y+L, z) &= \Psi_{\vec{k}}(x, y, z) \\ \Psi_{\vec{k}}(x, y, z+L) &= \Psi_{\vec{k}}(x, y, z) \end{split}$$

Stąd dostajemy:

$$k_{x,(y,z)} = 2l(m,n)\frac{\pi}{L}$$
 [2]

Inaczej mówiąc, pojedyncze rozwiązanie jest opisane przez trzy liczby k_x, k_y, k_z i można przyjąć, że jest reprezentowane w przestrzeni \vec{k} przez sześcian o boku $\frac{2\pi}{L}$ i objętości $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ - zob. Rys 2.



Rys. 2. Całkowanie liczby stanów elektronowych o energii < E. Nakreślona kula w przestrzeni k ma promień $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. *Pojedyncze rozwiązania (stany) zajmują objętości sześcianów o krawędziach* $\frac{2 \pi}{L}$, zilustrowanych na rysunku.

Wykorzystując relację dyspersji dla swobodnego⁵ elektronu: $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ oraz pamiętając o tym, że ze względu na spin elektronu musimy pomnożyć liczbę stanów przez czynnik 2, możemy teraz wyliczyć N(E) tj. liczbę stanów o energii mniejszej niż pewna dowolnie przyjęta energia *E*, jako objętość kuli o promieniu $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ podzieloną przez

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3},$$
stąd $N(E) = \frac{1}{3}\pi^{-2} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)^{3} V, \quad V := L^{3}$
[3]

⁵ Teoria Blocha pokazuje, że relacja dyspersji dla elektronu w periodycznym potencjale (np w krysztale metalu) jest bardzo podobna do relacji dyspersji dla elektronu swobodnego, po zastąpieniu masy elektronu masą efektywną m^* oraz przy założeniu, że energia (E) jest liczona od dna pasma przewodnictwa.

po zróżniczkowaniu dostajemy gęstość stanów jako:

$$g_{3D}(E) = \frac{d^2 N(E)}{dEdV} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$
[4]

Zauważmy, że wynik nie jest obarczony założeniem co do rozmiarów przewodnika (*L*), jeśli tylko może być spełnione przybliżenie ciągłego rozkładu stanów, które zastosowaliśmy przy obliczaniu objętości kuli (czyli $\frac{2\pi}{L} \ll \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$), zatem jest też stosowalny dla przewodników o dowolnym kształcie. Na ogół interesujemy się gęstością stanów w pobliżu *E_F*, czyli w pobliżu energii Fermiego, (gdy zerowa energia jest przypisana do dna pasma przewodnictwa). Wtedy możemy przyjąć granicę stosowalności otrzymanego wyrażenia na $g_{3D}(E)$ ze względu na rozmiary obiektu jako

$$\frac{\pi}{L} \ll \frac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar} \quad , \tag{5}$$

lub równoważnie: $L \gg \lambda_F$, gdzie $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$, $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, [6]

gdzie pomijamy dwójkę bo przy relacji >> nie ma to znaczenia.

Dla obiektu jednowymiarowego o długości L przestrzeń odwrotna (k) jest też jednowymiarowa, a objętość ("długość") zajmowana w tej przestrzeni przez stany o energii niższej niż pewna energia E wynosi $2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, oraz objętość zajmowana przez pojedynczy stan wynosi $\left(\frac{2\pi}{L}\right)$. Postępując podobnie jak powyżej dla przypadku 3D otrzymujemy wyrażenie na ilość stanów o energiach mniejszych od E (pamiętajmy o spinie elektronu):

$$N(E) = 2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar \pi} V, \quad V = L$$
^[7]

i gęstość stanów:

$$g_{ID}(E) = \frac{d^2 N(E)}{dEdV} = \frac{\sqrt{2}\sqrt{m}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{(E)}} = \frac{4}{hv} \quad ,$$
[8]

gdzie $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ (prędkość elektronu o energii *E*).

Wzór jest stosowalny w okolicy energii Fermiego jeśli: $\frac{2\pi}{L} \ll \frac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar}$. [9]

Możemy też napisać ten warunek (patrz równ. [6]) jako: $L \gg \lambda_F$, [10] (gdzie opuściliśmy dwójkę, bo przy relacji ">>" nie ma ona znaczenia).

4. Mikroskopowy obraz przewodzenia prądu elektrycznego w normalnych warunkach

Podstawowym prawem opisującym przewodnictwo w normalnych warunkach (metal 3D, temperatura pokojowa) jest prawo Ohma, czyli prawo proporcjonalności prądu płynącego przez przewodnik (1) do przyłożonego napięcia elektrycznego (U). Współczynnikiem proporcjonalności jest odwrotność oporu elektrycznego przewodnika (1/R). Zastanówmy się jak proces przepływu prądu przebiega w ujęciu mikroskopowym. W potocznym rozumieniu przedstawiamy to następująco: przyłożone napięcie wytwarza wzdłuż przewodnika pole elektryczne, pole elektryczne przyśpiesza elektrony wzdłuż swoich linii, ruch elektronów to przepływ ładunku czyli prad elektryczny. Jeśli konsekwentnie będziemy trzymać się tego schematu dochodzimy tutaj do następujących wniosków: (i) prąd elektryczny w obwodzie po przyłożeniu siły elektromotoryczej (U) stale narasta w czasie bo prędkość elektronów wzrasta, (ii) po odjęciu napięcia stały prąd powinien dalej płynąć bo elektrony mają nadaną prędkość. Widzimy zatem, że taki schemat rozumowania nie wyjaśnia przepływów prądu w "normalnych" obwodach elektrycznych (opisuje za to dobrze zachowanie pradów w pierścieniowym akceleratorze elektronów w próżni). Zatem w "normalnym" przewodniku elektrony muszą stale tracić ukierunkowaną energię ruchu nadaną im przez pole elektryczne. W tzw. klasycznej teorii przewodnictwa Drude'go przyjęto, że energia ta jest tracona w wyniku procesów zderzeń swobodnych elektronów przewodnictwa z rdzeniami jonowymi. Przepływ pradu elektrycznego dają się poprawnie opisać przy założeniu lepkiego przepływu elektronów (nośników ładunku) pod wpływem przyłożonego pola \vec{E} gdzie prędkość średnią nośnika wyznacza zależność:

$$m\frac{d}{dt}\langle \vec{v}\rangle = q\vec{E} - \gamma \langle \vec{v}\rangle \quad , \tag{11}$$

gdzie m jest masą efektywną , $\langle \vec{v} \rangle$ jest prędkością średnią nadaną przez przyłożone

pole, γ współczynnikiem tarcia, a q ładunkiem nośnika.

Dla stacjonarnego przepływu mamy zależność:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{q \vec{E}}{\gamma} = \frac{q \tau \vec{E}}{m} = \mu E$$
[12]

wyrażaną za pomocą średniego swobodnego czasu nośnika (τ) lub za pomocą ruchliwości nośników (μ) .

Jeśli założymy jeszcze, że gęstość przestrzenna nośników ładunku wynosi *n* to otrzymujemy znany wzór określający prąd płynący przez jednostkę przekroju poprzecznego makroskopowego przewodnika:

$$I = nq\langle \vec{v} \rangle \quad , \tag{13}$$

lub też

$$I = nq \,\mu E \tag{14}$$

czyli prawo Ohma w ujęciu mikroskopowym.

Zastanówmy się teraz jakie wartości przyjmuje $\langle \vec{v} \rangle$ w typowych warunkach przewodzenia. Załóżmy, że prąd o natężeniu 10 A płynie przez miedziany drut o przekroju poprzecznym $1 mm^2$. Zakładając, że gęstość elektronów przewodnictwa jest $10^{23} cm^{-3}$ (zob. też Tabela 1), czyli taka jak atomów metalu (bo jeden atom dostarcza około jeden elektron do pasma przewodnictwa metalu) - dostajemy prędkość unoszenia około 0.6 *mm/s*. Z drugiej strony elektrony są w ciągłym ruchu (jako cząstki gazu Fermiego), a prędkości związane z tymi ruchami są rzędu $10^6 m/s$, czyli dziewięć(!!!) rzędów wielkości większe niż prędkości dryfu (zob. Tabela 2).

Fabela 1. Gęstości przestrzenne elektronów przewodnictwa	$[x 10^{22} / cm^3]$
--	-----------------------

Cu	8.47
Ag	5.86
Au	5.90
Be	24.7
Mg	8.61
Ca	4.61
Ba	3.15
Fe	17.0
Zn	13.2
Cd	9.27
Al	18.1
Ga	15.4
In	11.5
Sn	14.8
Pb	13.2
Dane num	eryczne z N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Fizyka Ciała Stałego.

Tabela 2. Energie Fermiego i prędkości Fermiego

	Energia Fermiego [eV]	Predkość Fermiego[x 10 ⁶ m/s]
Li	4.74	1.29
Na	3.24	1.07
Κ	2.12	0.86
Rb	1.85	0.81
Cu	7.00	1.57
Ag	5.49	1.39
Au	5.53	1.40
Be	14.3	2.25
Mg	7.08	1.58
Ca	4.69	1.28
Fe	11.1	1.98
Mn	10.9	1.96
Zn	9.47	1.83
Cd	7.47	1.62
Hg	7.13	1.58
Al	11.7	2.03
Ga	10.4	1.92
In	8.63	1.74
Sn	10.2	1.90
Pb	9.47	1.83

Dane numeryczne z N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Fizyka Ciała Stałego.

Musimy zatem zweryfikować nieco naszą intuicję dotyczącą przewodnictwa elektrycznego; elektron który przesuwa się w kierunku "od minusa do plusa" o 1m musiał przebyć w ruchu chaotycznym drogę około 2 milionów kilometrów! Trudno jest zilustrować charakter takiego ruchu niemniej fragment trajektorii mógłby pewnie wyglądać tak jak to pokazano na Rys. 3.



Rys. 3. Obraz ruchu elektronu w normalnie przewodzącym metalu. Aby zachować przybliżone proporcje rozmiarowe dla przykładu dyskutowanego w tekście należałoby jakieś 1 000 razy zmniejszyć nakreśloną trajektorię elektronu dla niskich temperatur, a 100 000 razy dla temperatury pokojowej.

Po kilkudziesięciu ruchach (Rys. 3.) trudno będzie zauważyć jakąkolwiek systematyczną zmianę położenia... Wartość oczekiwana położenia zmienia się jednostajnie i bardzo powoli, co jednak jest wystarczające by spowodować obserwowany makroskopowy przepływ prądu, ponieważ działa tu prawo wielkich liczb (w drucie znajduje się ~ 10^{23} elektronów przewodnictwa).

Można wyliczyć, biorąc pod uwagę opór właściwy miedzi, że aby spowodować przepływ prądu jak w opisanym przykładzie powyżej (tj. 10 A, po drucie o przekroju 1mm², 1m długim) należy przyłożyć napięcie ~ 0.2 V. Posługując się wzorem [12] możemy następnie wyliczyć średni czas pomiędzy zderzeniami i dalej mnożąc go przez prędkość Fermiego, średnią drogę swobodną w modelu Drudego. Dostaniemy ok. 10 nm dla temperatury pokojowej. Dla normalnie przewodzących metali opór liniowo spada z temperaturą i dla niskich temperatur możemy już dostać drogi swobodne rzędu 1000 nm. Dla bardzo czystych metali w temperaturach helowych obserwowano centymetrowe drogi swobodne (C. Kittel).

Jak pogodzić ze sobą klasyczną teorię przewodnictwa i teorię Blocha, która mówi nam, że elektrony nie podlegają rozpraszaniu na potencjale sieci? Na czym więc rozpraszają się elektrony? Otóż sieć kryształu w normalnych warunkach nie jest idealna jak w teorii Blocha, lecz istnieją w niej fluktuacje termicznie, defekty, domieszki. A zatem elektron może podlegać rozpraszaniu na niejednorodnościach sieci, co pozwala reinterpretować teorię Drude'go, przy jednoczesnym zachowaniu tej szczególnej właściwości, że *idealna* sieć jest dla swojego pasmowego elektronu "przeźroczysta". Możemy zatem oczekiwać, że bardzo czyste i prawie idealnie uporządkowane kryształy metali powinny mieć opór elektryczny zdominowany przez rozpraszanie elektronów na fluktuacjach termicznych (na fononach) i dla temperatur bliskich zeru bezwzględnemu powinny tracić opór elektryczny. I tak rzeczywiście jest⁶.

^{6 (}Zob. też C. Kittel, "Wstęp do Fizyki Ciała Stałego", rozdz. 7. Dla metali opór zależy liniowo od temperatury w szerokim zakresie temperatur. Jednak w niskich temperaturach mogą uwidocznić się zjawiska będące poza tematyką tej instrukcji, które zaburzają tę zależność; może to być np. rozpraszanie na resztkowych domieszkach, efekt Kondo, nadprzewodnictwo.

5. Obraz balistycznego przewodzenia prądu elektrycznego w złączu jednowymiarowym

Wyznaczymy teraz przewodnictwo elektryczne idealnego złącza jednowymiarowego⁷. Weźmy dwa kawałki metalu (L i P) i połączmy je idealnym złączem jednowymiarowym tak jak na Rys. 4A i 4B. Następnie spróbujmy spowodować przepływ prądu elektrycznego poprzez przyłożenie napięcia (V). Relacje między pasmami elektronowymi elementów L i P po przyłożeniu napięcia ilustruje Rys. 4C. Zwróćmy uwagę na to, że w rezerwuarach L i P znajdują

się elektrony o prędkościach od 0 do v_F poruszające się w każdym z możliwych kierunków (c.f. kula Fermiego, rys. 2), z tego zbioru złącze wybierze elektrony które może przenieść na drugą stronę, czyli te poruszające się równolegle do złącza i zlokalizowane blisko osi złącza. Ponieważ elektrony w idealnym złączu nie podlegają rozpraszaniu, wszystkie *"wystrzelone"* do złącza z elementu L zostaną przeniesione na drugą stronę. W przeciwnym kierunku sytuacja jest nieco odmienna ponieważ elektrony o energii mniejszej niż Ve muszą się odbić na którymś z końców złącza (aby dostać się do L musiałyby wspiąć się na stopień o wysokości Ve⁸, a nie mają na to dostatecznej energii).



Rys. 4. Diagramy ilustrujące obliczenia prądu płynącego w złączu jednowymiarowym. A) dwa rozłączone obiekty metalowe i odpowiadające im diagramy pasmowe. Kolor czerwony oznacza poziomy zapelnione, kolor biały – puste. B) po połączeniu obiektów kanałem jednowymiarowym, w wyniku krótkotrwałego przepływu elektronów wyrównują się poziomy Fermiego obiektu L(ewego) i P(rawego). C) po wymuszeniu różnicy potencjałów (V) przez złącze płynie stały prąd, który możemy obliczyć jako różnicę prądu wypływającego z obiektu L i prądu wypływającego z obiektu P. Czerwone strzałki obrazują prędkości elektronów na różnych poziomach pasm elektronowych. Dla energii krańcowych, które ustaliły się po przyłożeniu napięcia istnieją następujące zależności:

$$E_{F}^{P} - E_{min}^{P} = E_{F}, \quad E_{F}^{L} - E_{min}^{L} = E_{F}, \quad E_{F}^{L} - E_{F}^{P} = Ve, \quad E_{min}^{L} - E_{min}^{P} = Ve$$

⁷ Przepływ elektronów pomiędzy dwoma rezerwuarami był rozważany po raz pierwszy przez R. Landauer'a w IBM J. Res. Develop. 1, 223, (1957).

⁸ Tak naprawdę sa dwa stopnie o wysokości Ve/2 na wejściu i na wyjściu ze złącza.

Wykonajmy teraz obliczenie prądu (I) płynącego przez kanał jednowymiarowy biorąc różnicę prądu elektronów wypływającego z obiektu L i prądu elektronów wypływającego z obiektu P (pamiętajmy o tym, że ale elektrony o niedostatecznej energii muszą się odbić i wrócić, a zatem netto nie spowodują wypływu prądu):

$$I = \frac{1}{2} \left[e \int_{E_{min}^{L}}^{E_{F}^{L}} g'_{ID}(E') v dE' - e \int_{E_{min}^{L}}^{E_{F}^{F}} g''_{ID}(E'') v dE'' \right] .$$
[15]

Funkcje g' i g'' opisują gęstość stanów jednowymiarowych dla obiektów L i P na wspólnej skali energii (są to odpowiednie przesunięcia funkcji g), a $\frac{1}{2}$ pojawia się dlatego, że bierzemy stany o prędkościach tylko w jednym kierunku.

Wykonajmy jeszcze zmiany zmiennych całkowania tak by minimom pasm można było przypisać energie zerowe:

$$E''' = E' - E_{min}^{L}$$
$$E''' = E'' - E_{min}^{P}$$

Dla długiego drutu (o długości L) $L \gg \lambda_F$ i wyprowadzone wcześniej wyrażenie na gestośc stanów (wz. [8]) jest stosowalne

Wykorzystujemy to teraz i dostajemy:

,

$$I = \frac{1}{2} \left[e \int_{0}^{E_{r}} g_{ID}(E^{\prime\prime\prime\prime}) v \, dE^{\prime\prime\prime\prime} - e \int_{V_{e}}^{E_{r}} g_{ID}(E^{\prime\prime\prime\prime\prime}) v \, dE^{\prime\prime\prime\prime} \right] , \qquad [16]$$

$$I = \frac{1}{2} \left[e \int_{0}^{E_{r}} \frac{4}{hv} v \, dE^{\prime\prime\prime\prime} - e \int_{V_{e}}^{E_{r}} \frac{4}{hv} v \, dE^{\prime\prime\prime\prime} = e \int_{0}^{E_{r}} \frac{4}{h} dE^{\prime\prime\prime\prime} - e \int_{V_{e}}^{E_{r}} \frac{4}{h} dE^{\prime\prime\prime\prime} \right] = \frac{2e}{h} \left[E_{r} - 0 - E_{r} + Ve \right] . \qquad [16]$$

Zwróćmy uwagę na zaskakującą właściwość złącza jednowymiarowego; na każdym poziomie pasma płynie taki sam przyczynek do prądu [4e/h dE] co wynika z tego, że gęstość stanów jest odwrotnie proporcjonalna do prędkości elektronów.

7]

Ostatecznie dostajemy proste wyrażenie na prąd:

$$I = \frac{2e^2}{h}V \quad , \tag{18}$$

i na wartość przewodności jednowymiarowej:

$$G_0 = \frac{2e^2}{h}$$
 . [19]

Aby zaobserwować opisane zjawiska transportu balistycznego najlepiej byłoby badać przewodzenie prądu przez cienkie druty (bo prawdopodobieństwo rozproszenia elektronu jest małe ze względu na dozwolone rozproszenia tylko w przód i w tył) wytworzone z metalu o dużej czystości (aby nie było rozpraszających defektów struktury) oraz w niskich temperaturach (aby nie było rozproszen elektronów na fononach). Ogólnie rzecz biorąc, droga swobodna elektronu w kanale powinna być znacznie dłuższa od długości tego kanału.

6. Określenie przewodności elektrycznej dla rzeczywistego złącza

Przyjmujemy następujące założenia:

- do opisu zachowania elektronów przewodnictwa stosujemy model gazu elektronów swobodnych Fermiego, czyli uśredniamy potencjał kryształu.

- wprowadzamy prostokątny kartezjański układ współrzędnych, długość złącza przyjmujemy w kierunku osi y, szerokość złącza w kierunkach osi x i z,

- złącze jest ograniczone nieskończonymi barierami potencjału w kierunku osi x i z (czyli dla danego y elektrony uwięzione są w dwuwymiarowej studni potencjału o nieskończonych brzegach), przekrój poprzeczny złącza jest prostokątem o wymiarach $L_x(y) \ge L_z(y)$,

- zakładamy, że zachowanie funkcji falowej w kierunku osi x i z zmienia się powoli wraz ze zmianą y,

- rozważania dotyczą temperatury 0 K.

Złącze takie przedstawia schematycznie Rysunek 5.



Rys. 5. Schemat nanozłącza.

Aby znaleźć wyrażenie opisujące przewodność złącza należy przeanalizować zachowanie funkcji falowej elektronów przewodnictwa. Ponieważ założyliśmy, że zachowanie funkcji falowej w kierunku osi x i z zmienia się powoli wraz ze zmianą y (co jest prawdziwe dla długich drutów), możemy teraz przyjąć że funkcje falowe w kierunkach wzajemnie prostopadłych są niezależne. Przedstawiamy zatem funkcję falową elektronu jako iloczyn funkcji falowych opisujących elektron w kierunku wzdłuż złącza ($\phi_k(y)$) oraz w kierunku poprzecznym ($X_n(x,z)$):

 $\Psi_{n,k}(x, y, z) = \chi_n(x, z)\phi_k(y)$, gdzie *n* numeruje nam stany kwantowe poprzeczne a *k* określa liczbę kwantową dla stanu wzdłużnego (wzdłuż drutu). [20]

Równanie falowe rozpada się teraz na niezależne równania opisujące elektron w kierunku wzdłużnym i w płaszczyźnie poprzecznej:

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + V(x, y, z) \end{bmatrix} \chi_n(x, z) = E_n^T(y) \chi_n(x, z)$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(x, y, z) \end{bmatrix} \phi_k(y) = E_k(y) \quad \phi_k(y)$$
[21]

Jeśli uśrednimy potencjał *V* (*co pociąga za sobą, że V*(*x*,*y*,*z*)=*const.*) to funkcje ϕ_k przybiorą postać biegnących fal płaskich (k_n oznacza tu wektor falowy wzdłuż złącza), a w kierunku poprzecznym nasz problem sprowadzi się do modelu cząstki w studni potencjału. Możemy zatem napisać:

$$E_n^T(y) = \frac{h^2}{8m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2(y)} + \frac{n_z^2}{L_z^2(y)} \right], \quad n = (n_x, n_y) \quad ,$$
[22]

gdzie E^{T} oznacza część energii elektronu związaną z poprzecznymi (do osi drutu) stopniami swobody: x,y, Obsadzone są stany poniżej poziomu Fermiego, więc energie własne stanów obsadzonych spełniają warunek:

$$E_n^T(y) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq E_F$$
[23]

Zauważmy teraz że gdy szerokość złącza maleje, to wartości własne energii poszczególnych modów poprzecznych podnoszą się, co jest własnościwością nieskończonej studni potencjału. Płynie stąd wniosek, że decydujące znaczenie dla przewodności złącza mają wymiary w jegonajwęższym miejscu. Zauważmy bowiem, że z równania [23] wynika :

[24]

$$E_{\mu}^{T}(y) \leq E_{\mu}$$

ze względu na nieujemność energii kinetycznej. Ponieważ zaś wartości własne są największe w najwęższym miejscu przewodnika, więc szerokość przewodnika w tym miejscu wyznacza tzw. otwarte kanały, czyli takie mody poprzeczne, że będące w nich elektrony mogą przejść przez złącze. Tylko takie elektrony mogą brać udział w przewodnictwie. Przedstawioną sytuację ilustruje Rysunek 6.



Rys. 6. Ilustracja zamykania kanałów przewodnictwa w modelu dwuwymiarowym. Kanały dla n=1 i n=2 są otwarte bo energie elektronów mieszczą się pod poziomem Fermiego. Kanały dla n=3 i wyżej są zamknięte.

Ostatecznie przewodność elektryczna złącza wyraża się następująco (zgodnie z zakazem Pauliego każde dwa elektrony w układzie muszą się różnić przynajmniej jedną liczbą kwantową):

$$G = NG_0 = N\frac{2e^2}{h}$$
[25]

gdzie N jest liczbą otwartych kanałów, a $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ jest podstawowym kwantem przewodności.

Widzimy więc, że przewodność w nanoskali przyjmuje tylko dyskretne wartości będące wielokrotnością G_{θ} i co więcej przewodność nie zależy ani od rodzaju przewodnika, ani od jego długości (o ile tylko zachodzi balistyczny transport elektronów), ani od rodzaju materiału, z którego wytworzono złącze. Wartość liczbowa G_{θ} wynosi:

$$G_0 \approx \frac{1}{12907 \,\Omega}$$
[26]

7. Metoda pomiaru

Kluczową sprawą badań kwantowania przewodności w układach nanoskopowych jest możliwość utworzenia struktur o rozmiarach odpowiadających warunkowi obserwacji zjawiska kwantowego, czyli takich które spełniają warunki: $L \ll l$ (gdzie l jest drogą swobodna elektronu w złączu) oraz W jest rzędu λ_F (W – rozmiar poprzeczny złącza). Kwantowanie przewodności elektrycznej zostało po raz pierwszy zaobserwowane w dwuwymiarowym gazie elektronów (2DEG) przez B. J. van Weesa⁹ w roku 1988. W kolejnych badaniach wykorzystywano skaningowy mikroskop tunelowy (STM)¹⁰. Tworzenie nanodrutu odbywało się w sposób przedstawiony na Rysunku 7: a) rejestrowano prąd tunelowania (próbka była skanowana przed właściwą częścią doświadczenia), b) wymuszano kontakt igły z próbką, c) tak utworzony kontakt metaliczny przewężano i rozciągano poprzez odsuwanie igły od powierzchni próbki aż do momentu d), w którym następowało jego zerwanie.



Rys. 7. Zastosowanie skaningowego mikroskopu tunelowego do tworzenia nanodrutów.

Inną metodą tworzenia nanodrutów jest kontakt makroskopowych elektrod. J. L. Costa-Krämer¹¹, który badał zjawisko kwantowania przewodności w nanodrutach formowanych między elektrodami mikro- i makroskopowymi, zasugerował, że niezależnie od początkowego kształtu i rozmiaru elektrod ostatni nanodrut przed rozerwaniem połączenia pomiędzy elektrodami formuje się w podobny sposób (Rysunek 8). Takie podejście potwierdza możliwość stosowania w badaniach kwantowania przewodności układów znacznie prostszych niż mikroskop STM.





makroskopowymi elektrodami formuje się w podobny sposób jak między igłą i próbką w mikroskopie STM.

Najprostszą realizacją układu do badania kwantowania przewodności między elektrodami makroskopowymi jest zastosowany przez J. L. Costa-Krämera układ składający się z dwóch opartych o siebie złotych drutów. W wyniku ich drgań kontakt między elektrodami jest cyklicznie tworzony i niszczony. Przy utrzymaniu stałego napięcia na złączu i rejestracji prądu płynącego przez układ w funkcji czasu, można zaobserwować skokowe zmiany natężenia prądu, które odpowiadają skokowym zmianom przewodności elektrycznej ewoluującego złącza.

Zastosowana w doświadczaniu metoda pomiaru, opisana poniżej, stanowi kompilację dwóch powyżej przedstawionych metod, tzn. zastosowania skaningowego mikroskopu tunelowego i kontaktu makroskopowych elektrod. Nanodruty były tworzone podobnie jak w układzie STM, poprzez zmianę, przy zastosowaniu piezoelementu, odległości między igłą i próbką. Ruch igły względem próbki powtarzał się cyklicznie. Po zbliżeniu się, utworzeniu się kontaktu, uformowaniu nanodrutu i następnie jego zerwaniu cały cykl zaczynał się od początku. Z powodu częstego wymuszania uderzeń igły w próbkę, co powodowało zmianę kształtu i rozmiaru tworzonego kontaktu, należy założyć, że kontakt odpowiadający sytuacji (b) na Rysunku 7 był kontaktem makroskopowym. Następnie przy oddalaniu się igły

⁹ B.J. Van Wees et al., Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).

¹⁰ J.I. Pascual et al., Phys. Rev. Lett. 71, 1852 (1993).

¹¹ J.L. Costa-Krämer et al., Phys. Rev. B 55, 5416 (1997).

następował proces przedstawiony na Rysunku 8, gdzie w momencie poprzedzającym zerwanie ostatniego nanodrutu można było zaobserwować skokowe zmiany przewodności. Nanodruty formowane były więc w sposób dynamiczny. Pozwalało to także ominąć trudności wynikające z braku izolacji układu doświadczalnego od bardzo trudnych do wytłumienia drgań mechanicznych o częstotliwości rzędu kilku Hz, ponieważ rejestracja czasowego przebieg prądu (lub innej wielkości z nim związanej) odbywała się w czasie znacznie krótszym niż okres wspomnianych drgań.

8. Układ doświadczalny

Zastosowany układ doświadczalny przedstawiono schematycznie na Rysunku 9. Ramę układu stanowią dwie grube stalowe płytki połączone sztywnymi podpórkami. Dolna płytka do której przymocowany jest układ próbki jest nieruchoma natomiast górna może być odchylana za pomocą śruby mikrometrycznej. Układ taki pozwala na zgrubne (z dokładnością do kilku mikrometrów) ustawienie odległości igła-próbka. Próbka jest osadzona na elemencie piezoelektrycznym, co pozwala na precyzyjne (do ułamków nanometra) ustalenie wysokości na jakiej znajduje się jej górna powierzchnia. Zastosowano piezoelement składający się z wielu szeregowo (i naprzemiennie) złożonych piezokryształów, co pozwala na uzyskanie stosunkowo dużych odkształceń przy dość niskich napięciach. Dla przyłożonego napięcia 100 V zastosowany "piezostack" wydłuża się o 6 µm. Podczas doświadczenia wykorzystuje się złotą próbkę przygotowaną poprzez rozgniecenie czystego, złotego drutu. Przygotowanie igły polega jedynie na przycięciu złotego drutu.

Na piezoelement podaje się sygnał trójkątny, który wymusza ciągłe, wzajemne przybliżanie i oddalanie się igły i próbki. Szeregowo do złącza igła-próbka włączony jest opornik R_I , dzięki któremu można określić wartość natężenia prądu płynącego przez złącze, a stąd także jego przewodność.



Rys. 9. Schemat i widok układu doświadczalnego

W praktyce, w tym celu obserwuje się na ekranie oscyloskopu czasowy przebieg spadku potencjału na oporniku R_I . Proces zbierania przebiegów czasowych powyższego spadku potencjału odpowiadających ewolucji czasowej przedstawia Rysunek 10.

Zastosowany układ doświadczalny z elektronicznego punktu widzenia jest dzielnikiem napięcia zbudowanym z oporu R będącego oporem złącza igła-próbka oraz oporu R_I . Układ jest zasilany stałym, stabilizowanym napięciem U_Z (Rysunek 10A). W przypadku gdy na jeden kanał oscyloskopu podamy sygnał sterowania piezoelementem (przebieg trójkątny), natomiast na drugi kanał spadek potencjału na oporniku R_I , to na ekranie oscyloskopu zobaczymy przebieg przedstawiony na Rysunku 10B. Obserwowany sygnał prostokątny związany jest ze skokowym (w tej skali czasu) procesem tworzenia i niszczenia kontaktu między igłą i próbką. Jeżeli dokonamy zmiany skali czasu i tym samym skoncentrujemy się na zaznaczonym fragmencie, to będziemy mogli dostrzec skokowe zmiany rejestrowanej wielkości (Rysunek 10C).



Rys. 10. Proces akwizycji przebiegów czasowych spadku potencjału na oporniku R₁.

Pozostaje więc jedynie odwikłać z rejestrowanych danych, odpowiadających napięciu na oporniku R_I , wartość przewodności złącza igła-próbka. Jak już wspomniano, układ stanowi dzielnik napięcia. Zatem napięcie rejestrowane przez oscyloskop U_0 związane jest z napięciem zasilania U_Z i występującymi oporami w układzie poprzez związek

$$U_0 = \frac{\kappa_I}{R + R_I} U_Z$$
 [27]

Stąd:
$$\sigma = \frac{1}{R} = \frac{1}{R_I} \frac{U_0}{U_Z - U_0}$$
 [28]

Zatem w przypadku znajomości U_Z i R_I przewodność jest jednoznacznie określona.

9. Program ćwiczenia

1. Ustawić parametry układu pomiarowego potrzebne do uzyskanie cyklicznego powstawania i zrywania kontaktu elektrycznego w układzie igła-próbka.

W tym celu:

- podać na piezoelement napięcie piłokształtne (wytwarzane w generatorze impulsów i wzmocnione we wzmacniaczu napięciowym) o częstotliwości kilku Hz i amplitudzie U_{PIEZO} około 25 V sygnał obserwować na kanale nr 2 oscyloskopu;
- ustalić wartość napięcia U_Z (zakres 0 1 V) polaryzującego układ igła-próbka;
- na kanale nr 1 oscyloskopu obserwować spadek napięcia U₀ na oporniku R_I podłączonym szeregowo do układu igła-próbka;
- za pomocą śruby mikrometrycznej zbliżyć igłę do powierzchni próbki na odległość, dla której cyklicznie powstaje i zrywany jest kontakt elektryczny pomiędzy igłą i próbką; napięcie 0 V na kanale nr 1 oscyloskopu odpowiadać będzie brakowi kontaktu między igłą i próbką natomiast wartość Uz będzie obserwowana w momencie wystąpienia zwarcia między igłą i próbką.

2. Wykonać serię pomiarów zależności spadku napięcia U_0 na oporniku R_I w funkcji czasu, dla procesu zrywania kontaktu pomiędzy igłą i próbką.

3. Zmierzyć wartość napięcia U_z, polaryzującego układ igła-próbka.

4. Zmierzyć wartość opornika R₁, podłączonego szeregowo z układem igła-próbka, na których wyznacza się spadek napięcia.

10. Opracowanie wyników

1. Z zarejestrowanej serii charakterystyk czasowych spadków napięcia U_0 w procesie zrywania kontaktu utworzyć histogram.

2. Wyznaczyć wartość podstawowego kwantu przewodności.

11. Aparatura

1. Układ igła – próbka.

- 2. Zasilacz napięcia stałego polaryzującego układ igła-próbka.
- 3. Generator impulsów piłokształtnych wraz ze wzmacniaczem.
- 4. Oscyloskop.

12. Tematy do kolokwium

Przewodnictwo elektryczne i prawo Ohma Balistyczny transport elektronów Efekt piezoelektryczny

Materiały dodatkowe

- S. Godlewski, A. Tekiel, Postępy Fizyki, 5 str. 210 (2005).
- W. Nawrocki, M. Wawrzyniak, Zjawiska kwantowe w metrologii elektrycznej, Wydawnictwo Politechniki Poznańskiej (książka dostępna w bibliotece AGH).
- C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego.