

# استتار کوانتومی گاز الکترونی یک بعدی در نانوسیم‌های ZnO و InAs

## در محیط دی‌الکتریک

قاسم انصاری پور<sup>۱\*</sup>، بهاره شایقی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران

<sup>۲</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

### چکیده

در این مقاله با استفاده از یک مدل خود سازگار و با لحاظ تقریب فاز تصادفی، تابع دی‌الکتریک گاز الکترونی نانوسیم‌های نیم‌رسانای ZnO و InAs پوشیده شده با یک محیط دی‌الکتریک محاسبه شده است. همچنین نشان داده‌ایم هنگامی که این نانوسیم‌ها با محیطی با ثابت دی‌الکتریک بالا (بزرگتر از ثابت دی‌الکتریک نانوسیم نیم‌رسانا) پوشش داده شود، استتار بارهای آزاد درون ساختار نانو کاهش می‌یابد. در حالی که در محیطی با ثابت دی‌الکتریک کوچک (کوچکتر از ثابت دی‌الکتریک نیم‌رسانا) قدرت تابع دی‌الکتریک افزایش می‌یابد. همچنین رفتار تابع دی‌الکتریک برحسب تغییرات شعاع، چگالی حامل نانوسیم و دی‌الکتریک محیط در دمای هلیوم مایع و در گستره دمای ۳۰۰-۴ کلوین مورد پژوهش قرار داده‌ایم.

**کلیدواژگان:** استتار کوانتومی، گاز الکترونی، نانوسیم، تابع دی‌الکتریک

### مقدمه

حقیقت است که برهم‌کنش کولنی بین خود حامل‌ها و بین حامل‌ها و ناخالصی‌ها در درون نانوسیم را می‌توان با تغییر پوشش نانوسیم، تغییر داد. انتظار داریم این تغییر در برهم‌کنش حامل-حامل توسط پوشش دی‌الکتریک، بسیاری از آثار ذاتی، همچون استتار دی‌الکتریک توسط گاز الکترونی یک بعدی درون نانوسیم را تغییر داده و اصلاح نماید. استتار دی‌الکتریک درون نانوسیم با افزایش چگالی حامل‌ها افزایش می‌یابد و هرچه چگالی حامل‌ها بیشتر باشد تأثیر محیط دی‌الکتریک بر استتار در شعاع کمتری از بین خواهد رفت [۱۰].

خواص ترابرد بار درون نانوسیم‌های نیم‌رسانا به‌طور چشمگیری به‌واسطه پوشش آن‌ها با یک ماده مناسب به‌عنوان محیط دی‌الکتریک، تغییر می‌کند، چرا که بارهای تصویری در مرز بین محیط و نیم‌رسانا، پتانسیل

کاربردهای پیش‌تازانه افزاره‌های نانو ساختار دو بعدی و به‌ویژه یک بعدی در بین دستگاه‌های الکترونیکی و اپتو الکترونیکی پرسرعت، آنها را از هیجان انگیزترین سیستم‌ها در بیشتر کارهای پژوهش ساخته است [۱-]. [۹]. نانوسیم‌های نیم‌رسانا بسته به نوع کاربردشان در دستگاه‌های مختلف، به‌صورت پوشیده با محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت (با ثابت دی‌الکتریک بالا و یا پایین) و یا بدون پوشش به‌کار می‌روند. در ترانزیستورهای اثر میدان (FET) سیم‌ها معمولاً با دی‌الکتریک‌هایی با ثابت دی‌الکتریک بالا مانند ( $ZrO_2$ ), ( $HfO_2$ ) پوشیده می‌شوند تا کنترل بار و همچنین تحرک بالای الکترون‌ها بهبود یابد. این مزیت ناشی از این

\* نویسنده مسئول: gansaripour@basu.ac.ir

۲

$$s(u) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dE \ln \left| \frac{\sqrt{E+\sqrt{u/2}}}{\sqrt{E-\sqrt{u/2}}} \right| \times \left[ \cosh^2 \left( E - \frac{u}{2} \right) \right]^{-1}$$

که در آن  $u = E_F/k_B T$  و  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$  است و  $k_F = n_{1D} \pi / 2$  می‌باشد.

### تابع دی‌الکتریک در دمای صفر کلونین برای نانوسیم با پوشش دی‌الکتریک

در اینجا از مدلی که در مرجع [۱۱] آمده برای محاسبه تابع دی‌الکتریک نانوسیم‌های ZnO و InAs در دمای هلیوم مایع استفاده می‌کنیم. پتانسیل خودسازگار شامل اختلال اصلی و پتانسیل استتار شده توسط بارهای متحرک است و به صورت

$$V(\mathbf{r}, t) = V_0(\mathbf{r}, t) + V_S(\mathbf{r}, t) \quad ۳$$

می‌باشد. برای به دست آوردن تابع دی‌الکتریک، محاسبه پتانسیل استتار ضروری است. با استفاده از تبدیل فوریه، پتانسیل استتار با معادله زیر داده می‌شود [۱۱]:

$$V_S(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \int_0^R G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{q}) n^{ind}(\mathbf{r}') r' dr' \quad ۴$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{q}) = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{I_0(qr_{<}) K_0(qr_{>})}{g^{inhom}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} + \frac{U(qR) I_0(qr) K_0(qr')}{g^{hom}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \right]$$

$$U(x) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_e) K_0(x) K_1(x)}{\epsilon_e I_0(x) K_1(x) + \epsilon_s K_0(x) I_1(x)} \quad ۵$$

که در آن  $I_n$  و  $K_n$  توابع بسل اصلاح شده مرتبه  $n$ م و  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{q})$  تابع گرین با لحاظ عامل عدم تطابق ثابت دی‌الکتریک می‌باشد.  $n^{ind}(\mathbf{r}')$  چگالی باری است که به دلیل حضور ذره خارجی در گاز الکترونی القاء شده است.  $g^{hom(inhom)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  قسمت همگن (غیرهمگن) تابع گرین و  $x = qR$  است. در  $x$ های بزرگ

کلونی و برهم کنش الکترون-الکترون درون نانوسیم را تغییر می‌دهد. به عبارت دیگر برای یک نانوسیم نیم‌رسانا با پوشش دی‌الکتریک می‌توان گفت که بار نقطه‌ای (که می‌تواند ناخالصی باشد) درون نانوسیم، توسط بارهای تصویری ناشی از عامل عدم تطابق ثابت دی‌الکتریک نانوسیم و محیط دی‌الکتریک، استتار می‌شود و این باعث کاهش پتانسیل کلونی بار نقطه‌ای می‌شود. هر چه قدرت این استتار بیشتر باشد، با کاهش بیشتر پتانسیل کلونی روبرو می‌شویم [۱۱، ۱۲]. میزان تحرک حاملین بار درون نانوسیم به تنهایی پایین است [۱۳]، اما پوشش نانوسیم با یک محیط دی‌الکتریک مناسب، می‌تواند تحرک حامل‌ها را تا حدود زیادی افزایش دهد [۱۰]. در این مقاله، تابع دی‌الکتریک نانوسیم‌های یک بعدی ساختارهای ZnO و InAs در چند محیط دی‌الکتریک برحسب پارامترهای مختلف مورد مطالعه قرار داده و با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

### ملاحظات نظری-تابع دی‌الکتریک در دمای صفر کلونین برای نانوسیم بدون پوشش

برای یک گاز الکترونی یک بعدی در محدوده کوانتومی تنها پس پراکندگی<sup>۱</sup> مجاز می‌باشد که منجر به تغییر جهت آینه‌ای و در نتیجه تغییر اندازه حرکت  $q = 2k_F$ ، در هر فرآیند پراکندگی کشسان می‌شود [۱]. در محدوده استاتیک ( $\omega = 0$ )، تابع دی‌الکتریک  $\epsilon_{1D}(q, 0)$ ، در  $T=0$  برای  $q = 2k_F$  تکینه است. در دمای صفر کلونین این تکینگی با اضافه کردن جمله‌ای دیگر به رابطه  $\epsilon_{1D}(q, 0)$  برطرف خواهد شد: [۱۳، ۱۴]

$$\epsilon_{1D}^T(q = 2k_F, 0) = 1 + \frac{4e^2 m^* F(2k_F)}{\pi \hbar^2 2k_F} S(u) \quad ۱$$

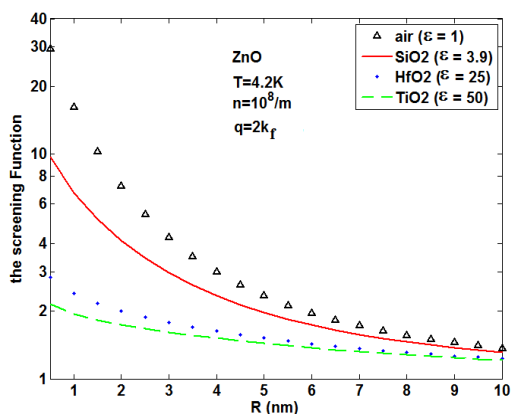
<sup>۱</sup> Back scattering

$$\Pi(q, R, T) = \frac{\frac{1}{2} + I_1(v) \left[ \frac{\pi y e^{-2v}}{2} I_1(v) - K_1(v) \right]}{\pi R^2 a_B^*} S(u) \quad ۱۰$$

که در آن  $V=2qR$  و  $S(u)$  از رابطه ۲ به دست می‌آید.

### بحث و نتیجه گیری

در شکل ۱ تغییرات تابع دی‌الکتریک برحسب شعاع برای نانوسیم ZnO و در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش شعاع، قدرت استتار گازالکترونی یک‌بعدی برای همه محیط‌ها کاهش می‌یابد ولی این کاهش زمانی که نانوسیم در محیطی با ثابت دی‌الکتریک کمتر از ثابت دی‌الکتریک نانوسیم قرار می‌گیرد، با شدت بیشتری است.



شکل ۱. تابع دی‌الکتریک برحسب شعاع نانوسیم ZnO در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت.

تابع دی‌الکتریک برحسب شعاع نانوسیم برای نانوسیم‌هایی از جنس‌های ZnO, GaAs, InAs در شکل ۲، زمانی که هر سه در محیط دی‌الکتریک  $TiO_2$  قرار گرفته‌اند، رسم شده است. این شکل نشانگر این است که تغییرات تابع دی‌الکتریک در دمای پایین بسته به جنس نانوسیم در شعاع‌های مختلف اختلاف زیادی ندارند، گرچه قدرت استتار برای ZnO به دلیل  $\gamma$  بزرگتر، کمی بیشتر از GaAs و InAs است. شکل‌های ۱ و ۲ نشان می‌دهند که استتار الکترون‌های آزاد درون نانوسیم بستگی به پوشش محیطی آن دارد. برای یک

$U(x) \approx \frac{\pi y e^{-2x}}{2}$  در نتیجه  $(x > |n^2 - 1|)$  را خواهیم داشت که در آن:

$\gamma = ((\epsilon_s - \epsilon_e)) / ((\epsilon_s + \epsilon_e))$  فاکتور عدم تطابق ثابت دی‌الکتریک است. تابع دی‌الکتریک یک گاز الکترونی یک‌بعدی در دمای صفر برابر است با:

$$\epsilon_{1D}(q, \omega, E_F) = 1 - \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s V_{11}} \int_0^R \phi_1^2(r) r \times \int_0^R G(r, r') n^{ind}(r') r' dr' dr$$

$$= 1 + \frac{1}{\pi a_B^* R^2} \frac{F(x)}{q^3} \ln \left| \frac{(q+2k_F)^2 - \left(\frac{2m^* \omega}{\hbar q}\right)^2}{(q-2k_F)^2 - \left(\frac{2m^* \omega}{\hbar q}\right)^2} \right| \quad ۶$$

که در آن شعاع  $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s \hbar^2 / m^* e^2$  مؤثر بوهر، بردار موج فرمی و  $k_F = \pi n_{1D} / 2$ ،  $x = qR$

$F(x) = \left[ \frac{1}{2} + I_1(x) [U(x)I_1(x) - K_1(x)] \right]$  است. ولی همان‌طور که در بخش قبل ذکر شد مبحث تراپرد بار درون نانوسیم مرتبط با تابع دی‌الکتریک در حالت ایستا یعنی  $\epsilon_{1D}(q, \omega = 0)$  است. بنابراین داریم:

$$\epsilon_{1D}(q, 0, E_F) = 1 + \frac{F(x)}{\pi R^2 a_B^* q^3} \ln \left| \frac{(q+2k_F)^2}{(q-2k_F)^2} \right| \quad ۸$$

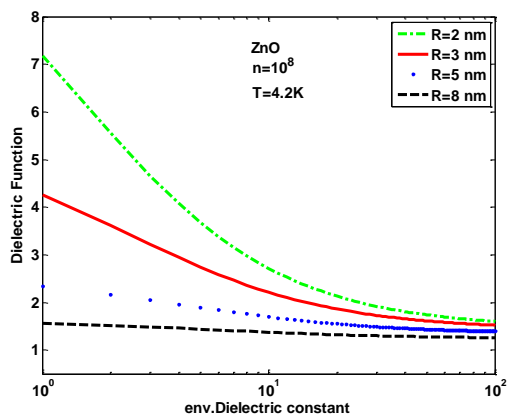
### تابع دی‌الکتریک در دماهای معین برای نانوسیم با پوشش دی‌الکتریک

برای محاسبه تابع دی‌الکتریک در دماهای معین با لحاظ عدم تطابق ثابت دی‌الکتریک، از مرجع [۱۳] استفاده شده است.

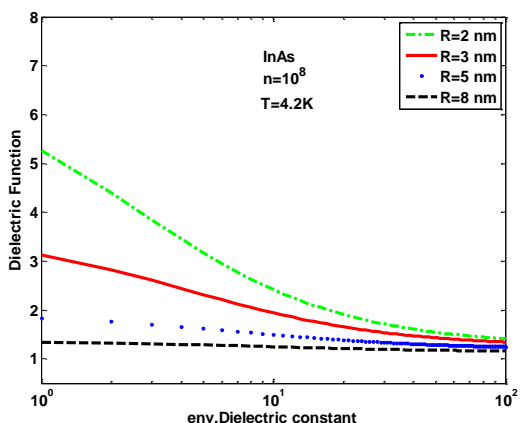
$$\epsilon_{1D}^T(q, 0) = \int_0^\infty dE \epsilon_{1D}(q, 0, E) \times \left[ 4k_B T \cosh^2 \left[ \frac{E-E_F}{2k_B T} \right] \right]^{-1} \quad ۹$$

که برای  $q = 2k_F$  این رابطه را می‌توان به شکل زیر نوشت [۱۵]:

$$\epsilon_{1D}^T(q = 2k_F, 0) = 1 + \Pi(2k_F, R, T) / q^3$$



شکل ۳. تابع دی الکتریک در دمای محدود برحسب ثابت دی الکتریک محیط در شعاع‌های متفاوت برای نانوسیم ZnO.

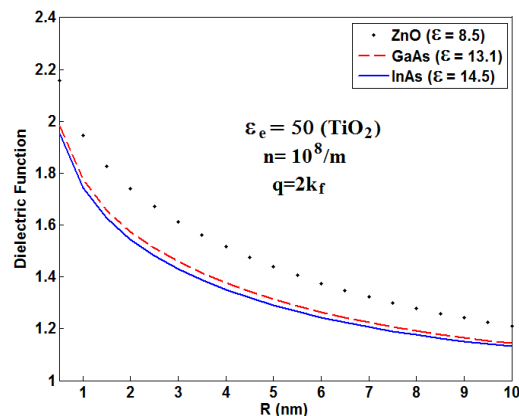


شکل ۴. تابع دی الکتریک در دمای معین برحسب ثابت دی الکتریک محیط در شعاع‌های متفاوت برای نانوسیم InAs.

شکل ۴ نیز مانند شکل ۳ ولی برای نانوسیم InAs محاسبه و رسم شده است. مقایسه شکل‌های ۳ و ۴ نشان می‌دهد که روند تغییر قدرت استتار برحسب ثابت دی الکتریک محیط در شعاع‌های متفاوت برای هر دو نانوسیم به یک صورت است. با این تفاوت که قدرت استتار برای ZnO، کمی بیشتر از InAs است. این نتایج مشابه داده‌های مرجع [۱۰] می‌باشد.

چگالی حامل‌ها در میزان تأثیر ثابت دی الکتریک محیط بر استتار نقش دارد. در شکل ۵ نمودار تغییرات تابع دی الکتریک برحسب چگالی حامل‌ها، برای نانوسیم ZnO رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد برای نانوسیم پوشش داده شده با  $\epsilon_p > \epsilon_s$ ، استتار

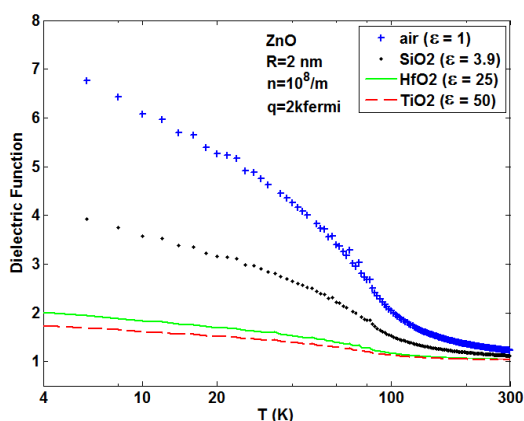
نانوسیم پوشیده شده با محیطی با ثابت دی الکتریک بالا، اختلال کولنی درون نانوسیم، استتار را نسبت به نانوسیم بدون پوشش ضعیف می‌کند.



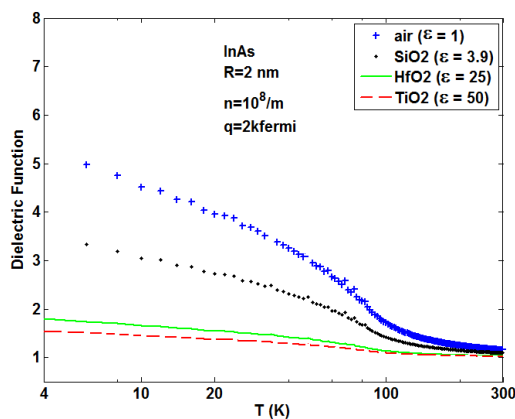
شکل ۲. تابع دی الکتریک در دمای  $4/2$  K برحسب شعاع برای نانوسیم‌های متفاوت در محیط دی الکتریک  $TiO_2$ .

جهت مقایسه این تغییرات در نانوسیم‌های متفاوت، تابع استتار در  $q = 2k_F$  برحسب ثابت دی الکتریک محیط در شعاع‌های متفاوت را برای نانوسیم‌های ZnO و InAs نیز رسم کرده‌ایم. در شکل ۳ تابع دی الکتریک در دمای بسیار پایین برحسب ثابت دی الکتریک محیط در شعاع‌های متفاوت برای نانوسیم ZnO را نشان می‌دهد. استتار در اطراف یک نانوسیم پوشیده شده با ثابت دی الکتریک پایین، قوی خواهد بود. اثر استتار حامل‌های آزاد برای نانوسیم پوشیده شده با ثابت دی الکتریک بالا به دلیل جمع شدن خطوط میدان، ناچیز است. همان‌طور که انتظار می‌رود برای نانوسیم با شعاع بزرگ اثر عدم تطابق دی الکتریک اثر ضعیفی روی استتار دارد (شکل ۳ را ببینید).

تابع دی‌الکتریک بررسی می‌کنیم. در شکل ۷ منحنی تغییرات تابع دی‌الکتریک نانوسیم ZnO برحسب دما در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت محاسبه و رسم شده‌اند. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش دما، نوسانات گرمایی، استتار الکترون آزاد درون نانوسیم را کاهش می‌دهند و در دماهای بالا تأثیر محیط دی‌الکتریک بر روی تابع دی‌الکتریک تا حدودی از بین می‌رود. شکل ۸ نیز شبیه شکل ۷ ولی برای نانوسیم InAs محاسبه و رسم شده است. از مقایسه شکل‌های ۷ و ۸ مشاهده می‌شود که قدرت استتار برای ZnO بیشتر از InAs است. این تفاوت، زمانی که نانوسیم‌ها در محیط‌هایی با ثابت دی‌الکتریک پایین قرار گرفته‌اند بیشتر است.

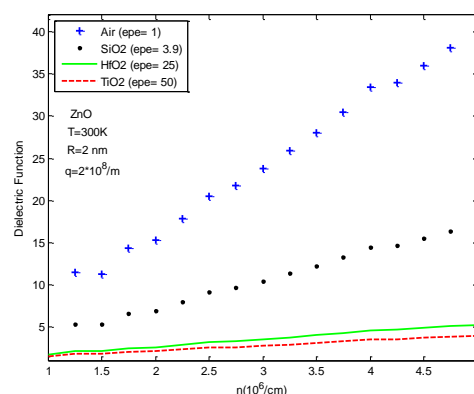


شکل ۷. تابع دی‌الکتریک نانوسیم ZnO برحسب دما در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت.



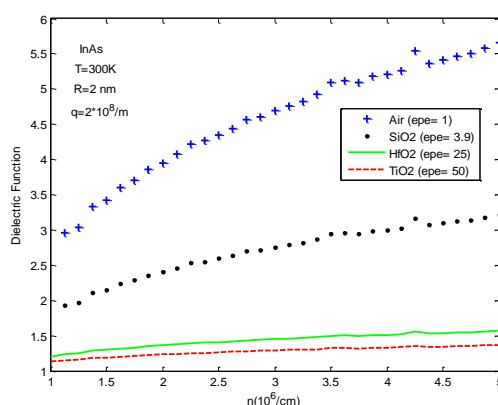
شکل ۸. تابع دی‌الکتریک نانوسیم InAs برحسب دما در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت.

دی‌الکتریک قویاً کاهش می‌یابد. با افزایش چگالی حامل‌ها، استتار دی‌الکتریک درون نانوسیم افزایش می‌یابد. در واقع در چگالی حامل‌های بزرگتر، حامل‌ها، بیش از یک زیرنوار را اشغال می‌کنند و برای توصیف کامل استتار بارهای آزاد درون نانوسیم، باید سهم نوار داخلی را نیز به حساب آورد.



شکل ۵. تابع دی‌الکتریک نانوسیم ZnO برحسب چگالی حامل‌ها در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت.

شکل ۶ نیز مانند شکل ۵ ولی برای نانوسیم InAs رسم شده است. همان‌طور که از این دو شکل ملاحظه می‌شود، از مقایسه شکل‌های ۵ و ۶ چنین برمی‌آید که قدرت تابع استتار برحسب تغییر چگالی حامل‌ها در هر چهار محیط، برای ZnO بسیار بیشتر از InAs است.



شکل ۶. تابع دی‌الکتریک نانوسیم InAs برحسب چگالی حامل‌ها در محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت.

تا اینجا، تابع دی‌الکتریک را در دمای پایین ( $T = 4, 2K$ ) مورد مطالعه قرار داده‌ایم. حال اثر دما را بر

سیستم‌های بس‌ذره‌ای، دوره ۱ شماره ۱ تابستان و پاییز ۱۳۹۰، ۸-۱.

[5] G. Ansari pour, The effect of hot phonons on the hole drift velocity in a p-type Si/SiGe modulation doped eterostructure, *Thin Solid Films* 517 21 (2009) 6105-6108.

[6] Y. Cui, Z.H. Zhong, D.L. Wang, W.U. Wang, C.M. Lieber, High performance silicon nanowire field effect transistors, *Nano Letters* 3 2 (2003) 149-152.

[7] G. Ansari pour, Mobility of holes in a Si/SiGe metal oxide semiconductor field effect transistor, *Thin Solid Films* 518 19 (2010) 5599-5603.

[8] S. Kaya, Y-P Zhao, J.R. Watling, A. Asenov, J.R. Barker, G. Ansari pour, G. Braithwaite, T.E. Whall, E.H.C. Parker, Indication of velocity overshoot in strained SiGe p-channel MOSFETS, *Semiconductor Science Technology* 15 6 (2000) 573.

[9] G. Ansari pour, G. Braithwaite, M. Myronov, O. A. Mironov, E.H.C. Parker, T.E. Whall, Energy loss rates of two-dimensional hole gases in inverted Si/SiGe heterostructures, *Applied Physics Letters* 76 9 (2000) 1140-1142.

[10] A. Konar, D. Jena, Tailoring the carrier mobility of semiconductor nanowires by remote dielectrics, *Journal of Applied Physics* 102 (2007) 123705.

[11] A. Konar, T. Fang, D. Jena, Dielectric-environment renormalization of many-body effects in a one-dimensional electron gas, *Physical Review B* 84 (2011) 085422.

[12] D. Jena, A. Konar, Enhancement of carrier mobility in semiconductor nanostructures by dielectric engineering, *Physical Review Letters* 98 (2007) 136805.

[13] F. Maldague, Many-body correction to the polarizability of the tow-dimensional electron gas, *Surface Science* 73 1 (1978) 296-302.

[14] G. Fishman, Mobility in a quasi-one-dimensional semiconductor: An analytical approach, *Physical Review B* 34, (1986) 2394.

[15] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, Jonathan Bird, Transport in Nano Structures, Cambridge University Press NY, USA (2009).

به‌طور خلاصه در این مقاله با استفاده از روش تقریب فاز تصادفی تابع دی‌الکتریک گاز الکترونی درون نانوسیمی با روکش دی‌الکتریک را در حالت ایستا برای دمای صفر مطلق بررسی کرده، رفتار آن را برای نانوسیم‌های InAs و ZnO در  $T = 4.2$  K برحسب شعاع و ثابت دی‌الکتریک محیط مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین اثر پوشش دی‌الکتریک با محیط‌های دی‌الکتریک متفاوت بر ترابرد بار درون نانوسیم‌های فوق در گستره دماهای ۳۰۰-۴ کلوین را محاسبه و رسم شده‌اند. برای پوششی با  $\epsilon_e$  بالا در اطراف یک نانو سیم باریک، خطوط میدان به اطراف پخش می‌شوند و در نتیجه استتار حامل‌های آزاد بی‌اثر شده و برای نانوسیم‌هایی با شعاع بزرگ، عدم تطابق دی‌الکتریک، تأثیر کمی روی استتار داشته و به‌عبارت دیگر، با افزایش شعاع، به‌دلیل نزدیک شدن نانوسیم به یک سیستم کپه‌ای، اثر عدم تطابق دی‌الکتریک بر روی تابع دی‌الکتریک کم خواهد شد.

## مرجع‌ها

[1] H. Sakaki, Scattering suppression and high-mobility effect of size quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures, *Japanese Journal of Applied Physics* 19 12 (1980) 735-738.

[۲] ق. انصاری پور، ز. باقری، بررسی خواص گرمایی گرافین چند بلوری، مجله فیزیک کاربردی دانشگاه الزهراء (س)، سال ۵ شماره ۲ پاییز و زمستان ۱۳۹۴، ۳۹-۲۳.

[۳] و. رفیعی، ا. رمضان، ص. صلواتی فرد، مطالعه اثر برهمکنش‌های کوتاه برد الکترونی و پهنای چاه کوانتومی بر تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های نیم‌رسانا، مجله پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای، دوره ۴ شماره ۷ تابستان ۱۳۹۳، ۱۱-۱۸.

[۴] ق. انصاری پور، محاسبه پتانسیل سطحی و جریان زیرآستانه در ماسفت‌های کانال کوتاه، مجله پژوهش

## **Quantum screening of one dimensional electron gas of ZnO and InAs nanowires in dielectric environment**

**Ghassem Ansaripour<sup>1,\*</sup>, Bahareh Shayeghy<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran

### **Abstract**

In this study, using a self-consistent model and considering the random phase approximation, we have calculated the screening function of semiconducting zinc oxide (ZnO) and indium arsenide (InAs) nanowires coated by dielectric environment. We show that when these nanowires are coated by high dielectric media (larger than nanowire dielectric) the dielectric function of free charge is reduced inside the nanostructure. However, in a low dielectric media (lower than semiconductor dielectric) the dielectric function is increased. Moreover, the behavior of dielectric function versus the variation of radius, carrier density of nanowire and dielectric media is investigated in liquid helium temperature and in the temperature range of 4-300 K.

**Keywords:** Screening, Electron gas, Nanowire, Dielectric function