

Енергетичні характеристики металевої наноплівки в діелектричному оточенні

А.В. Коротун *, Я.В. Карандась

Запорізький національний технічний університет, вул. Гоголя 64, 69063 Запоріжжя, Україна

(Одержано 19.03.2015; опубліковано online 10.06.2015)

Теоретично досліджено вплив діелектрика на осциляції енергії Фермі нанометрових металевих плівок. В рамках моделі прямокутної асиметричної потенціальної ями скінченної глибини показано, що наявність діелектрика з одного боку від плівки призводить до зменшення максимумів і зсуву піків ліворуч на розмірній залежності енергії Фермі на відміну від ідеалізованого випадку гіпотетичної плівки у вакуумі. Розрахунки проведено для плівок Au, Al та Cu на SiO₂ та Al₂O₃.

Роботу виконано за підтримки Міністерства освіти і науки України (проект №04313).

Ключові слова: Енергія Фермі, Металева плівка, Діелектрик, Робота виходу.

PACS numbers: 68.35. – p, 73.20.At, 73.30. + y

1. ВСТУП

Вивчення тонких металевих плівок, нанесених на підкладки з різних матеріалів, представляє інтерес як із фундаментальної точки зору, так і з точки зору їх застосування в приладах наноелектроніки [1-3]. Як з'ясувалося, в подібних системах макроскопічні енергетичні характеристики залежать від товщини шару, і мають осцилюючий характер. У більшості робіт, в яких вивчалися осциляційні залежності характеристик металевої плівки від її товщини, осциляції пов'язують з ефектами розмірного квантування [4-12]. Проте розрахунки енергетичних характеристик зазвичай виконують для випадку гіпотетичних плівок, що контактують з вакуумом по обидві боки від поверхні. В той час, як наявність діелектрика з одного боку плівки призводить до „деформації“ електронного спектра [13].

Метою даною роботи є дослідження впливу діелектрика на розмірні осциляції енергії Фермі ультратонких металевих плівок в моделі асиметричної прямокутної потенціальної ями. Врахування особливостей розмірної поведінки енергетичних характеристик плівок у контакті з діелектриками є важливим, зокрема, при дослідженні їх оптичних характеристик [14-15].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянемо тонку металеву плівку товщиною L (порядку фермівської довжини хвилі електрона λ_F^0) і направимо вісь x перпендикулярно до поверхні плівки.

Профіль потенціальної енергії електронів такої системи спрощено можна представити у вигляді асиметричного потенціального ящика глибиною $-U_0$ – відносно вакуумного рівня, $-U_d$ – з боку діелектрика та шириною L (рис. 1). В подальшому скористаємось позначеннями: $\hbar^2 k_{01}^2 = 2m_e U_0$; $\hbar^2 k_{02}^2 = 2m_e U_d$, де m_e – маса електрона; $-\chi$ – глибина залягання дна зони провідності діелектрика відносно вакуум-

ного рівня (χ – електронна спорідненість), що враховує наявність діелектрика з одного боку від плівки.

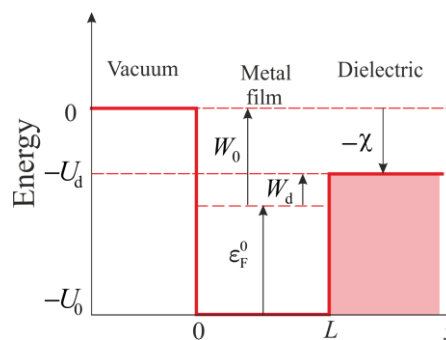


Рис. 1 – Енергетична діаграма металевої плівки в моделі асиметричної потенціальної ями

Внаслідок того, що поздовжні розміри плівки $a, b \gg L$ спектр можна записати у вигляді

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{\parallel}^2 + k_{xm}^2),$$

де k_{\parallel} – хвильове число електронів у площині плівки. Величина поперечної компоненти імпульсу $\hbar k_{xm}$ ($m = 1, 2, 3, \dots$) визначається граничними умовами для хвильової функції електронів у даній системі та розв'язком рівняння

$$k_{xm} L = \pi m - \arcsin \frac{k_{xm}}{k_{01}} - \arcsin \frac{k_{xm}}{k_{02}}. \quad (1)$$

В \mathbf{k} -просторі стан електрона позначається точкою з координатами $\{k_x, k_y, k_z\}$. Заповнення станів електронами починається з точки $\{k_{x1}, 0, 0\}$ і здійснюється в порядку зростання енергії станів. У результаті виявляється, що всі зайняті електронами стани знаходяться в області \mathbf{k} -простору, обмеженої площиною $k_x = k_{xm}$ та напівсферою радіусом

* andko@zntu.edu.ua

$k_F = \sqrt{2m_e \epsilon_F} / \hbar$. Для знаходження повного числа зайнятих станів потрібно проінтегрувати густину станів двомірного електронного газу в площині плівки та прирівняти числу електронів провідності. В результаті отримуємо рівняння для визначення розмірно-залежної енергії Фермі ϵ_F [13, 15]:

$$k_F^2 = \frac{1}{m_F} \left(2\pi \bar{n} L + \sum_{m=1}^{m_F} k_{xm}^2 \right), \quad (2)$$

де $\hbar^2 k_F^2 = 2m_e \epsilon_F$; \bar{n} - концентрація електронів провідності у 3D-металі; m_F - номер останньої зайнятої або частково зайнятої підзони.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для наноплівок Al, Cu та Au з концентрацією електронів $\bar{n} = 3/4\pi r_s^3$ із відповідними значеннями $r_s = 2,07a_0$, $2,11a_0$ та $3,01a_0$ (a_0 - борівський радіус), нанесених на SiO₂ ($\chi = 1,1$ eV, $\epsilon = 4$, де ϵ - діелектрична проникність) та Al₂O₃ ($\chi = 1,35$ eV, $\epsilon = 9$) [16].

Врахування зонної структури діелектрика [13] потребує перевизначення роботи виходу електронів із плівки, а, отже, і значення глибини ями. Так, на відміну від випадку плівки у вакуумі, де

$$U_0 = \epsilon_F^0 + W_0, \quad (3)$$

наявність діелектрика призводить до зменшення роботи виходу та глибини ями U_d з боку діелектрика:

$$U_d = \epsilon_F^0 + W_d, \quad (4)$$

де величина W_d представляє собою бар'єр Шоттки (висоту потенціального бар'єра на межі метал - діелектрик).

Існує два підходи до визначення W_d : I - робота виходу в діелектрик визначається як $W_d = W_0 - \chi$, де W_0 - робота виходу напівнескінченний метал - вакуум, а χ - глибина залягання дна зони провідності діелектрика по відношенню до вакуумного рівня (електронна спорідненість); II - значення W_d береться з результатів самоузгоджених розрахунків (табл. 1).

Таблиця 1 - Результати самоузгоджених розрахунків для напівнеобмежених систем Me/Al₂O₃ та Me/SiO₂ [17]

Метал	Al		Cu		Au	
	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Al ₂ O ₃	SiO ₂
W_d , eV	1,29	1,84	1,49	1,89	1,41	1,79

Результати розрахунків розмірних залежностей енергії Фермі, що ілюструють застосування підходів I та II в порівнянні з випадком плівки у вакуумі для

наноплівок Au в контакті з Al₂O₃ та SiO₂ наведені на рис. 2, а та 2, б відповідно. Вертикальні пунктирні лінії відповідають товщині плівки в моношарах (ML). Крива 1 представляє собою результати розрахунків для гіпотетичної плівки Au у вакуумі. При розрахунку кривих 2 для визначення роботи виходу в діелектрик використовувався підхід I. Більш строгий підхід II до визначення W_d представлений кривими 3, де використані результати самоузгоджених розрахунків для напівнескінчених систем Au/Al₂O₃ та Au/SiO₂. У всьому діапазоні розмірів дотримується нерівність $\epsilon_F / \epsilon_F^0 > 1$. Зубці на розмірній залежності (тобто стрибки похідної $d\epsilon_F / dL$) розташовані регулярно з приблизно постійним періодом $\Delta L \approx \pi / k_F^0$ ($k_F^0 = \sqrt{2m_e \epsilon_F^0}$). Зі збільшенням товщини плівки $L \rightarrow \infty$ амплітуда осциляцій прагне до нуля, а їх „період“ ΔL - до нескінченності.

Як видно з даного рисунку, врахування діелектричного оточення призводить до зменшення енергії Фермі порівняно з випадком плівки у вакуумі (крива 1) при збереженні загального характеру залежності. Більш коректне врахування діелектричного оточення при визначенні роботи виходу (попередні самоузгоджені розрахунки - підхід II) зумовлює ще більш значне зменшення мінімумів і зсув піків ліворуч.

В роботі [18] показано, що наявність діелектрика призводить до зміни метал-вакуумного інтерфейсу - залежності роботи виходу від середнього значення діелектричних постійних оточуючих середовищ $\langle \epsilon \rangle = (\epsilon_1 + \epsilon_r) / 2$ (ϵ_1 та ϵ_r - значення діелектричних сталих середовищ ліворуч і праворуч від плівки відповідно) і зменшенню висоти потенціального бар'єра з боку вакууму. Тому на рис. 3 наведені результати розрахунків, де замість значення роботи виходу у вакуум W_0 були взяті значення $W = 2,87$ eV (рис. 2, а) і $W = 3,07$ eV (рис. 3, б) для діелектрика з $\langle \epsilon \rangle$ [17]. Тоді криві 1 - 3 відповідають кривим 1 - 3 на рис. 2, а і рис. 2, б, відповідно. Як видно, криві 2 і 3 для обох систем практично співпадають. Це свідчить про те, що метод, запропонований у даній роботі, дає результати близькі до результатів самоузгоджених розрахунків. Проте, на відміну від результатів, представлених на рис. 2, в даному випадку має місце більш значне зменшення енергії Фермі (криві 2 і 3) порівняно з випадком плівки у вакуумі (крива 1). Причиною подібної поведінки є те, що наявність діелектрика, крім зниження рівня Фермі призводить ще і до підйому дна потенціальної ями. Причому підйом дна ями є більш істотним за зниження рівня Фермі, що і призводить в результаті до більш значного зменшення рівня Фермі порівняно з випадком, наведеним на рис. 2. Крім того, на рис. 3 зображені криві 4, що з'єднують точки перетину кривої 3 з вертикальними прямими, які відповідають числу моношарів у плівці Au. Вказані точки близькі (а у випадку $L = 7, 8$ і 9 ML співпадають) до точок максимумів і мінімумів на кривій 3, що описує розмірні осциляції енергії Фермі.

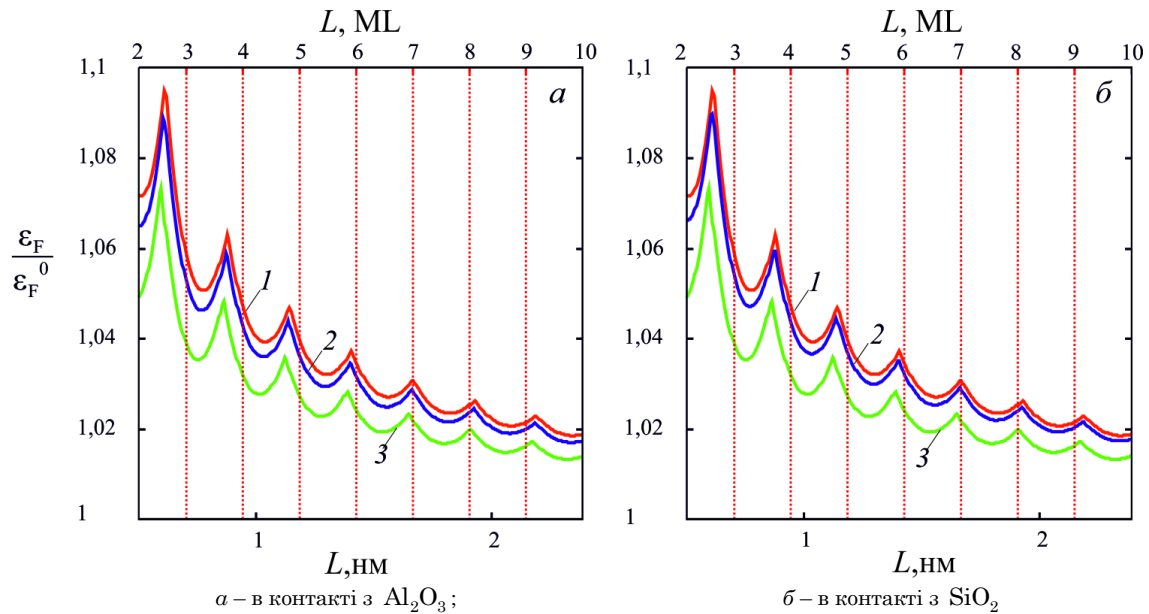


Рис. 2 – Розмірна залежність енергії Фермі наноплівки Au із різними інтерфейсами для $W_0 = 4,105$ еВ: 1– плівка у вакуумі; 2 – підхід I; 3 – підхід II

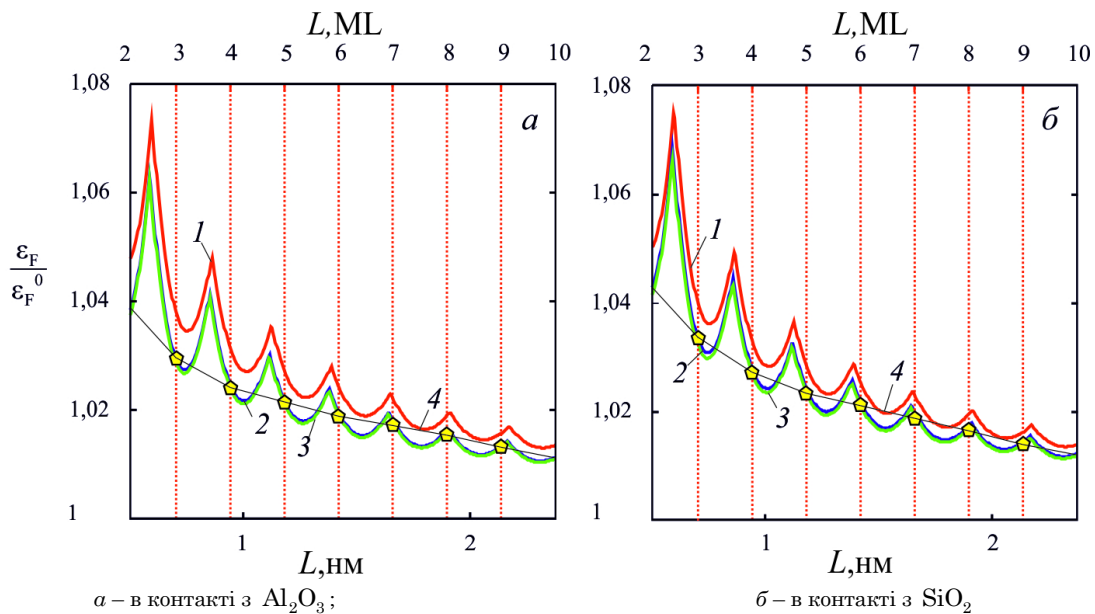


Рис. 3 – Розмірна залежність енергії Фермі наноплівки Au із різними інтерфейсами з урахуванням підйому дна ями: 1– плівка у вакуумі; 2 – підхід I; 3 – підхід II

Особливості розмірної залежності енергії Фермі плівок різних металів демонструє рис. 4. В обох випадках криві $\epsilon_F(L)$ для різних металів якісно співпадають, проте амплітуди і періоди відрізняються. Відмінності в періодах осциляцій пояснюються виключно різними значеннями k_F^0 . Так, для плівок Al порівняно з плівками Au масштаб осциляцій ΔL дрібніший, оскільки більше величина k_F^0 , амплітуда осциляцій і згладжене значення $\epsilon_F / \epsilon_F^0$ менше. Плівки Cu в цьому відношенні займають проміжне положення між Al та Au.

На рис. 5 розглянуто вплив величини діелектричної проникності на величину енергії Фермі ультра-

тонких металевих плівок (у відносних одиницях $\epsilon_F / \epsilon_F^0$, де

$$\epsilon_F^0 = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m_e}$$

– енергія Фермі однорідного електронного газу) для плівок алюмінію та золота товщиною $L = 2$ нм.

В обох випадках має місце невелике монотонне зменшення відносної енергії Фермі зі збільшенням ϵ . Це зумовлене тим, що зі збільшенням діелектрич-

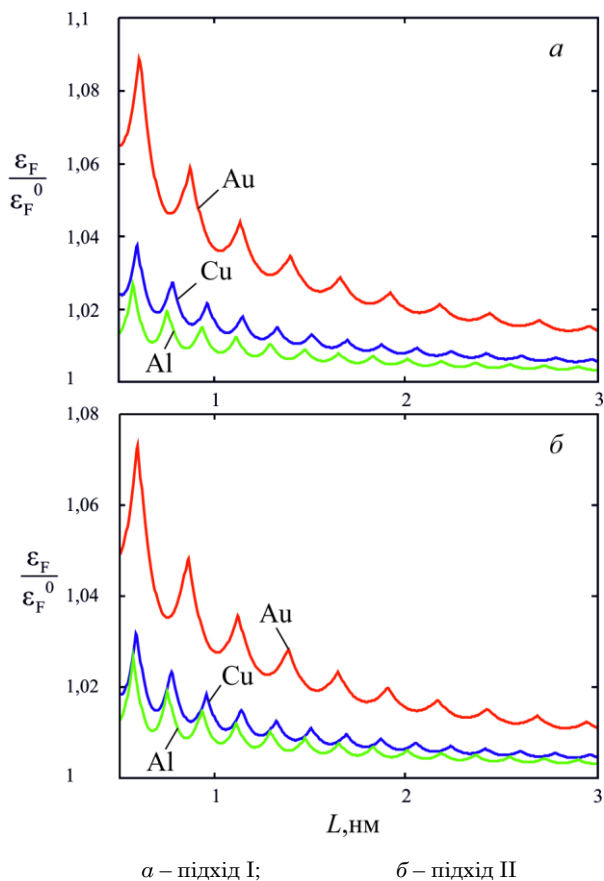


Рис. 4 – Розмірна залежність енергії Фермі плівок різних металів у контактi з Al_2O_3

ної проникності величина роботи виходу з напівнескінченного металу в діелектрик W_d зменшується [17]. Проте, внаслідок того, що в нашій моделі має місце опосередковане врахування діелектрика підстановкою значень $W_d(\epsilon)$, попередньо отриманих із самоузгоджених розрахунків, „фактичний“ вплив діелектричної проникності на розмірні осциляції енергії Фермі буде незначним.

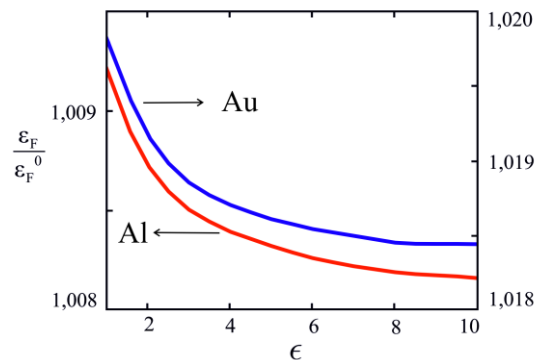


Рис. 5 – Залежність $\epsilon_F / \epsilon_F^0 = f(\epsilon)$ плівок Al та Au товщиною $L = 2$ нм

4. ВИСНОВКИ

Розраховано енергетичний спектр електронів ультратонких металевих плівок на діелектричній підкладці. З використанням моделі прямокутної асиметричної потенційної ями шляхом підрахунку числа зайнятих електронних станів у плівці отримано вираз для визначення розмірно-залежної енергії Фермі наноплівки з урахуванням діелектрика.

Досліджено вплив діелектричної проникності підкладки на величину енергії Фермі. Показано, що врахування діелектричного оточення призводить до зсуву значень енергії Фермі при збереженні загального характеру розмірних залежностей.

Залежність енергії Фермі від товщини плівки, вираженої в моношарах (яка може бути отримана експериментально), свідчить про необхідність врахування впливу діелектричної підкладки на енергетичні характеристики ультратонких металевих плівок.

Встановлено, що поведінка розмірних осциляцій енергії Фермі плівок різних металів визначається значеннями електронної густини. Так, для металів із більшою концентрацією період, амплітуда осциляцій та згладжені значення енергії Фермі менші.

Аналіз результатів розрахунків вказує на необхідність врахування зменшення глибини ями з боку вакууму для метал-діелектричного інтерфейсу.

Энергетические характеристики металлической нанопленки в диэлектрическом окружении

А.В. Коротун, Я.В. Карандась

Запорожский национальный технический университет, ул. Гоголя 64, 69063 Запорожье, Украина

Теоретически исследовано влияние диэлектрика на осциляции энергии Ферми нанометровых металлических пленок. В рамках модели прямоугольной асимметричной потенциальной ямы конечной глубины показано, что наличие диэлектрика с одной стороны от пленки приводит к уменьшению максимумов и смещения пиков слева на размерной зависимости энергии Ферми в отличие от идеализированного случая гипотетической пленки в вакууме. Расчеты проведены для пленок Au, Al и Cu на SiO_2 и Al_2O_3 .

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Украины (проект № 04313).

Ключевые слова: Энергия Ферми, Металлическая пленка, Диэлектрик, Работа выхода.

Energy Characteristics of Metal Nanofilms in the Dielectric Environment

A.V. Korotun, Ya.V. Karandas

Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol Str., 69063 Zaporizhzhya, Ukraine

The influence of a dielectric on the oscillations of the Fermi energy of nanometer metal films has been theoretically investigated. It has been shown within the model of rectangular finite-depth asymmetric potential well that the presence of a dielectric from one side of the film leads to the reduction of the maxima and displacement of the peaks on the left side of the size dependence of the Fermi energy, in contrast to the idealized case of a hypothetical film in vacuum. The calculations have been carried out for Au, Al and Cu films on SiO₂ and Al₂O₃.

This work was supported by the Ministry of Education and Science (project №04313).

Keywords: Fermi energy, Metal film, Dielectric, Work function.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Г. Хасса, Р.Э. Туна, *Физика тонких пленок. Современное состояние исследований и технические применения* (Москва: Мир: 1967) (G. Khassa, R.E. Tuna, *Fizika tonkikh plenok. Sovremennoye sostoyaniye issledovaniy i tekhnicheskkiye primeneniya* (Moskva: Mir: 1967)).
2. В.В. Погосов, Ю.А. Куницький, А.В. Бабич, А.В. Коротун, *Елементи фізики поверхні, нано-структур і технологій* (Запоріжжя: ЗНТУ: 2010) (V.V. Pohosov, Yu.A. Kunits'kyu, A.V. Babych, A.V. Korotun, *Elementy fizyky poverkhni, nano- struktur i tekhnolohiy* (Zaporizhzhya: ZNTU: 2010)).
3. А.М. Шикин, *Формирование, электронная структура и свойства низкоразмерных структур на основе металлов* (Санкт-Петербург: ВВМ: 2011) (A.M. Shikin, *Formirovaniye, elektronnaya struktura i svoystva nizkorazmernykh struktur na osnove metallov* (Sankt-Peterburg: VVM: 2011)).
4. В.Б. Сандомирский, *ЖЭТФ* **52**, 158 (1967) (V.B. Sandomirskii, *J. Exp. Theor. Phys.* **25** No1, 101 (1967)).
5. М.И. Каганов, С.С. Недорезов, А.Н. Рустамова, *ФТТ* **12**, 2277 (1970) (M.I. Kaganov, S.S. Nedorezov, A.N. Rustamova, *Phys. Solid State* **12**, 2277 (1970)).
6. F.K. Schulte, *Surf. Sci.* **55**, 427 (1976).
7. P.J. Feibelman, D.R. Hamann, *Phys. Rev. B* **29**, 6463 (1984).
8. J.C. Boettger, *Phys. Rev. B* **53**, 13133 (1996).
9. J.J. Paggel, C.M. Wei, M.Y. Chou, D.-A. Luh, T. Miller, T.-C. Chiang, *Phys. Rev. B* **66**, 233403 (2002).
10. В.П. Курбацкий, В.В. Погосов, *ФТТ* **46**, 526 (2004) (V.P. Kurbatsky, V.V. Pogosov, *Phys. Solid State* **46**, 543 (2004)).
11. Н.А. Виноградов, Д.Е. Марченко, А.М. Шикин, В.К. Адамчук, О. Радер, *ФТТ* **51**, 168 (2009) (N.A. Vinogradov, D.E. Marchenko, A.M. Shikin, V.K. Adamchuk, O. Rader, *Phys. Solid State* **51**, 179 (2009)).
12. В.Д. Дымников, *ФТТ* **53**, 847 (2011) (V.D. Dymnikov, *Phys. Solid State* **53**, 901 (2011)).
13. А.В. Бабич, В.В. Погосов, *ФТТ* **55**, 177 (2013) (A.V. Babich, V.V. Pogosov, *Phys. Solid State* **55**, 196 (2013)).
14. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов, Е.В. Васютин, *ФТТ* **50**, 909 (2008) (V.P. Kurbatsky, A.V. Korotun, V.V. Pogosov, E.V. Vasyutin, *Phys. Solid State* **50**, 949 (2008)).
15. В.П. Курбацкий, А.В. Коротун, В.В. Погосов, *УФЖ* **53**, 569 (2008) (V.P. Kurbatsky, A.V. Korotun, V.V. Pogosov, *Ukr. J. Phys.* **53** No6, 569 (2008)).
16. Э.Х. Родерик, *Контакты металл – полупроводник* (Москва: Радио и связь: 1982) (E.Kh. Roderik, *Kontakty metall – poluprovodnik* (Moskva: Radio i svyaz': 1982)).
17. В.В. Погосов, А.В. Бабич, *ЖТФ* **78**, 116 (2008) (V.V. Pogosov, A.V. Babich, *Tech. Phys.* **53** 1074 (2008)).
18. В.В. Погосов, А.В. Бабич, П.В. Вакула, *ФТТ* **55**, 2004 (2013) (V.V. Pogosov, A.V. Babich, P.V. Vakula, *Phys. Solid State*, **55** 2120 (2013)).