

autor: mgr inż. Artur Działo
promotor: dr hab. prof. AGH Antoni Paja

Przewodnictwo elektryczne nanostruktur metalicznych

Streszczenie

Tematem pracy doktorskiej jest przewodnictwo elektryczne nanostruktur metalicznych. Jej celem są obliczenia teoretyczne przewodności elektrycznej w cienkich warstwach metalicznych o grubościach od pojedynczej monowarstwy atomowej do około 100 nm z uwzględnieniem efektów kwantowych. W pracy posługujemy się modelem elektronów swobodnych, który świetnie sprawdza się w opisie właściwości optycznych, elektrycznych, magnetycznych i termicznych metali litych. Kwantowy charakter zjawisk zachodzących w tak małej skali wymaga zastosowania formalizmu mechaniki kwantowej. Punktem startowym jest równanie Schrodingera, którego postać i narzucone warunki brzegowe zależą od rozpatrywanego problemu. Najprostszym możliwym sposobem opisu elektronów w silnie ograniczonych układach jest prostokątna, nieskończenie głęboka studnia potencjału. Natomiast do opisu transportu elektronów w kierunkach swobodnych posługiwać się będziemy równaniem Boltzmanna w przybliżeniu czasu relaksacji. Zagadnienia te są tematem pierwszych trzech rozdziałów pracy, które stanowią prezentację podstawowych narzędzi i modeli wykorzystanych w rozprawie.

Kolejne rozdziały stanowią część właściwą pracy. Na początku staramy się opisać wpływ oddziaływania elektronów z drganiami termicznymi sieci na elektryczny opór właściwy cienkiej warstwy. W materiale litym zależność ta opisana jest równaniem Blocha-Gruneisena, którą spodziewamy się odtworzyć dla dostatecznie grubych warstw. Pierwszym zaproponowanym modelem jest prosty model nieskończonej, dwuwymiarowej płaszczyzny. Pokazujemy, że w tak uproszczonym modelu zależność oporu właściwego od temperatury różni się diametralnie od tego w materiałach litych. Następnie przechodzimy do bardziej realistycznego modelu bardzo cienkiej warstwy zamodelowanej przez nieskończenie głęboką studnię kwantową. Otrzymana zależność oporu od grubości warstwy ma oczekiwany charakter oscylacyjny związany z oscylacjami gęstości stanów na poziomie Fermiego. Za to dla odpowiednio grubych warstw otrzymany opór elektryczny jest mniejszy w niskich i większy w wysokich temperaturach w porównaniu do tego dla materiału litego.

Rozpraszanie elektronów na domieszkach opisujemy przy pomocy równania Lippmanna-Schwingera, gdzie wykorzystujemy techniki funkcji Greena z odpowiednimi warunkami brzegowymi opisanymi wcześniej. Przedstawiamy różnice w opisie amplitudy rozpraszania w naszym układzie i w układach dwu i trójwymiarowych. Badamy jej wpływ na opór właściwy cienkiej warstwy przy pomocy równania Boltzmanna i tensora przewodnictwa właściwego. Otrzymana zależność od grubości warstwy jest zgodna z przewidywaniami i dla odpowiednio grubej warstwy opór osiąga wartość charakterystyczną dla materiału litego. Ponadto odtworzona jest kwadratowa zależność oporu od różnicy wartościowości pierwiastków matrycy i domieszki.

W ostatnim rozdziale znajduje się podsumowanie uzyskanych rezultatów oraz dyskusja o wpływie zastosowanych modeli na wyniki.