

Universitatea Bucuresti
– Facultatea de Fizica –



**Particularitati ale tranzitiei
metal-semiconductor
in sisteme dezordonate q-2D**

Autor: Cristina S. Besleaga

Coordonatori:

Conf. Dr. Ion Lucian

Prof. Dr. Stefan Antohe

Dr. CS. II Magdalena Nistor

- Iunie 2010 -

Cuprins

1. Introducere.....	5
2. Notiuni teoretice	7
2.1 Localizarea Anderson. Prag de mobilitate.....	7
2.2 Teoria de scala a localizării	13
2.3 Localizarea slaba (WL).....	18
2.4 Corectia de localizare slaba	20
2.5 Lungimea de cutoff	29
3. Rezultate experimentale si discutii.....	31
3.1 Proprietatile fizice ale oxidului de zinc	31
3.2 Transport in camp electric mic	32
3.3 Metoda de depunere	35
3.4 Metode de investigare	37
3.4.1. Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS)	37
3.4.2. Difractie de raze X (XRD).....	39
3.4.3. Masuratori electrice	44
4. Concluzii.....	51
5. Bibliografie.....	52

Mulumiri

Pe parcursul realizarii acestei lucrari am beneficiat de sprijinul permanent al domnului Conf.Dr. Ion Lucian, conducatorul stiintific principal al tezei mele de dizertatie.

Doresc sa ii aduc pe aceasta cale sincere multumiri pentru ajutorul si sprijinul acordat, si mai ales pentru atentie, implicarea si indrumarea oferita in definirea modului logic de documentare, organizare si constructie specific studiului stiintific.

Domnului Prof.Dr. Stefan Antohe ii multumesc pentru increderea, atentie, dedicatia si sprijinul acordat atat in realizarea prezentei lucrari de dizertatie cat si in dezvoltarea mea profesional-stiintifica de pana acum.

Multe multumiri doamnei Dr. Magdalena Nistor pentru sprijinul oferit pe parcursul elaborarii acestei lucrari de dizertatie.

1. Introducere

Nevoia de a reduce dimensiunea componentelor electronice a condus la fabricarea unor dispozitive de scala mezoscopica, introducand astfel fizica cuantica in domeniul electronicii aplicate. Fizica mezoscopica este domeniul ce studiaza sisteme cu dimensiuni intermediare, intre microscopic si macroscopic. Sistemele mezoscopice au un comportament strict legat de efectul cuantic de interferenta, lungimea de scala relevanta in astfel de sisteme fiind lungimea de coerenta de faza. Acesta este distanta de-a lungul careia purtatorii de sarcina pastreaza informatia despre propria lor faza cuantica. Astfel, fenomene mezoscopice pot fi observate intr-un domeniu larg de dimensiuni, de la nanometrii pana la microni- in cazul structurilor semiconductoare cu o mobilitate foarte mare.

O serie de fenomene legate de sistemele mezoscopice au fost descoperite de-a lungul timpului cum sunt cuantificarea conductantei sau localizarea slaba.

Acesta teza isi propune studiul fenomenelor de transport in sisteme dezordonate, in particular, in sisteme quasi-bidimensionale (q-2D) dezordonate.

In prima parte a lucrarii sunt dezvoltate probleme precum localizarea Anderson, consecinte ale dimensionalitatii sistemelor, teoria de transport Landauer, localizarea slaba, corectia conductivitatii pentru localizarea slaba, efectul campului magnetic asupra proprietatilor de transport ale sistemului. Teza nu se rezuma doar la notiuni teoretice ci, contine si o parte experimentală in care au fost puse in evidenta proprietatile de transport ale unor straturi subtiri de oxid de zinc obtinute prin metoda de depunere cu fascicul pulsant (PED).

Pentru a studia transportul in sisteme dezordonate, diferite metode teoretice au fost elaborate de-a lungul timpului, incepand cu cea de tip tight-binding.

Dintre rezultatele obtinute, doua sunt foarte importante pentru subiectul acestei lucrari

1. Interactia electron-electron duce la despicarea benzii in care nivelele ocupate si cele libere devin separate de o banda interzisa (tranzitia Mott).
2. Interactia electron-electron duce la despicarea benzii in care nivelele ocupate si cele libere devin separate de o banda interzisa (tranzitia Mott).
3. Fluctuatia potentialul centrilor de impuritati conduce la localizarea starilor electronice din apropierea acestora (tranzitia Anderson).

Trebuie subliniat ca principala diferenta dintre modelul Mott si cel propus de Anderson este aceea ca in cazul Anderson tranzitia este indusa de dezordinea sistemului iar in cazul Mott

aceasta are loc chiar si intr-o structura periodica perfecta. Acelasi efect rezulta si din dezordinea spatiala a configuratiei centrilor (modelul Lifshitz).

O importanta deosebita in tratarea proprietatilor de transport ale unui sistem o are stabilirea lungimilor de scala pertinente.

1. Cea mai evidenta dintre ele este dimensiunea probei, L , unde L_x, L_y, L_z pot avea valori diferite.

2. Lungimea de unda Fermi. $\lambda_F = \frac{h}{\sqrt{2mE_F}}$ (ec. 1)

3. Drumul liber mediu, l_m . Este distanta medie pe care un electron o parcurge pana a suferii un proces de imprastiere. Intr-un sistem perfect, nedeordonat, $l_m=L$. Timpul

intre doua imprastieri este numit timp de relaxare, τ_e , unde $\tau_e = \frac{l_e}{v_F}$ (ec. 2)

4. Lungimea de coerenta de faza, l_ϕ . Este distanta pe care un electron o parcurge inainte de a i se schimba faza. Aceasta lungime de scala este extrem de importanta in descrierea fenomenelor de interferenta.

In functie de raportul dintre lungimile de scala putem defini mai multe regimuri de transport:

- Transport Balistic, $L \ll l_m, l_\phi$
 - nu exista imprastieri;
 - cand $\lambda_F \sim L$: efecte de cuantificare
- Regim difuziv, $L > l_m$
 - au loc procese de imprastiere elastica
- o Transport adiabatic, $l_m \ll l_\phi \ll L$
 - la temperaturi joase, $R \sim \exp(L)$ datorita interferentelor cuantice
- Regim clasic (incoerent)
 - rezistenta ohmica

2. Notiuni teoretice

2.1 Localizarea Anderson. Prag de mobilitate.

Un sistem dezordonat este traditional descris cu ajutorul undelor Bloch si imprastirea acestora pe impuritati. In metale, aceasta duce la ecuatia lui Boltzmann pentru cvasiparticule; la temperaturi joase poate fi scris:

$$\rho(T) = \rho_0 + AT^n \quad \text{si} \quad \sigma(T) = \sigma_0 - A\sigma_0^2 T^n \quad (\text{ec. 3})$$

Unde σ_0 este conductivitatea datorata imprastierii pe impuritati. Numarul imprastierilor creste odata cu temperatura datorita excitatiei fononilor sau a ciocnirilor electron-electron, deci A este pozitiv iar n este un intreg pozitiv, de obicei, $n \geq 2$ ($n=2$ daca imprastierile electron-electron predomina). Pe de alta parte, daca dezordinea este puternica atomii proprii sistemului si impuritatile vor ocupa aleatoriu pozitiile retelei. In acest caz, se impune o periodicitate medie si apoi se aplica conceptele familiare pentru sisteme ordonate. Aproximatia potentialului coerent (CPA) (Elliott, Krumhansl, and Leath, 1974) este un exemplu pentru acest tip de abordare.

Astazi stim ecuatia 3 nu se aplica in cazul sistemelor dezordonate. Empiric s-a constatat ca A poate fi atat pozitiv cat si negativ, iar n este de obicei 1/2 pentru sistemele tridimensionale.

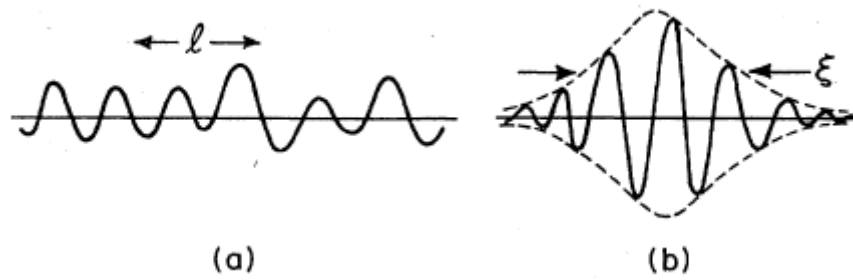
Anderson a fost printre primii ce au incercat sa formuleze o teorie cu ajutorul careia sa se poata explica transportul in sisteme dezordonate.

Din punctul de vedere clasic, intr-un sistem dezordonat, din cauza imprastierilor, undele Bloch isi pierd coerenta de faza dupa ce parcurg o distanta data ramanand extinse in sistem. Acest distanta este numita drum liber mediu.

In 1958, Anderson a demonstrat ca intr-un sistem puternic dezordonat functiile de unda pot devenii localizate, anvelopa acestora scazand exponential cu cat se departeaza de centrul imprastietor.

$$|\Psi(r)| \approx \exp(-|r - r_0|/\xi) \quad (\text{ec. 4})$$

unde ξ este lungimea de localizare



Figură 1. a) drumul liber mediu (stari extinse); b) lungimea de localizare (stari localizate).

Deși, de-a lungul timpului, un volum mare de munca a fost depus în jurul acestei teorii încă nu există o bună descriere matematică a ei.

Modelul Anderson subliniază următoarele idei:

1. În descrierea de ordinul zero, funcțiile de undă pot fi localizate datorită fluctuațiilor mari ale potențialului.
2. Suprapunerea orbitalilor este exponențial mică datorită diferenței energetice mari, deci, într-un astfel de sistem nu va exista o stare extinsă creată printr-o combinație liniară de infinit de mulți orbitali localizați.
3. În cazul unui cristal cu o concentrație dată de impurități similare se poate vorbi despre „banda de impurități”. Aceasta diferă de banda unui cristal prin aceea că funcția de undă a electronului din apropierea unui centru de impuritate rămâne localizată.

Presupunem că impuritățile sunt așezate într-o rețea regulată însă energia din fiecare poziție este alta (fig. 2).



Figură 2. Modelul Anderson. Gropile de potențial.

Hamiltonianul sistemului descris va fi:

$$H = \sum_j \varepsilon_j a_j^+ a_j + \sum_{j,m \neq 0} t_{j,m} a_j^+ a_{j+m} \quad (\text{ec. 5})$$

Unde ε_j este deviatia nivelului electronic, in pozitia j , de la valoarea medie; $t_{j,m}$ este functia de transmisie/tranzitie, $t_{j,m} = I \cdot \delta_{i,j+1}$ unde I este integrala de suprapunere. Operatorii a_j si a_{j+} descriu anihilarea, respectiv crearea unei particule pe nodul j .

$$\Psi(r + r_j) = \Psi(r) e^{ikr_j} \quad (\text{ec. 6})$$

$$a_j = \tilde{N}^{-1/2} \exp(ikr_j) \quad (\text{ec. 7})$$

unde \tilde{N} este numarul total de locuri a retelei de impuritati.

$$a_j = \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} a_k$$

$$a_j^+ = \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} a_k^+$$

$$t_{j,m} = I \cdot \delta_{i,j+1} \quad (\text{ec. 8})$$

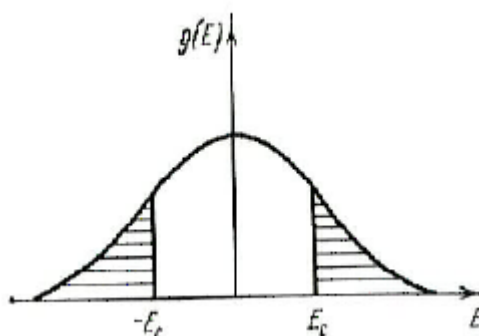
$$e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_i} = N \delta_i$$

$$\sum_j \varepsilon_j a_j^+ a_j = \sum_j \varepsilon_j \sum_{k_1 k_2} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_j} a_{k_2}^+ a_{k_1} = \sum_{k_1 k_2} a_{k_2}^+ a_{k_1} \sum_j \varepsilon_{at} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_j} = \sum_{k_1} N \varepsilon_{at} a_{k_2}^+ a_{k_1}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j,m \neq 0} t_{j,m} a_j^+ a_{j+m} &= \sum_{j,m \neq 0} t_{j,m} \sum_{k_1} e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{R}_j} a_{k_1}^+ \sum_{k_2} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{R}_{j+m}} a_{k_2} = \sum_{k_1 k_2} a_{k_2}^+ a_{k_1} \sum_{j,m \neq 0} t_{j,m} e^{i(\vec{k}_2 \cdot \vec{R}_m - \vec{k}_1 \cdot \vec{R}_j)} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{R}_j} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{R}_j} \\ &= \sum_{k_1 k_2} a_{k_2}^+ a_{k_1} \sum_{j,m \neq 0} t_{j,m} e^{i\vec{k}_2 \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_j)} e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{R}_j} = \sum_{\vec{k}_j} a_{\vec{k}_j}^+ a_{\vec{k}_j} \sum_{\vec{\Delta}} t_{j,m} e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{\Delta}} \end{aligned}$$

$$H = \sum_{\vec{k}_j} (\varepsilon_{at} + \sum_{\vec{\Delta}} t_{j,m} e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{\Delta}}) \cdot a_{\vec{k}_j}^+ a_{\vec{k}_j} \quad (\text{ec. 9})$$

Modelul Anderson aduce un parametru definitiv pentru descrierea fenomenelor legate de dezordinea in sistem; acesta este W/I unde W este un interval in care energia este uniform distribuita.



Figură 3. Distribuția densității de stări în funcție de energie.

Se poate observa că există o valoare critică a raportului W/I de la care încep să apară stări extinse în mijlocul benzii. Zonele hășurate din figura 3 corespund regiunilor localizate. Acestea sunt date de centrul împrăștiilor cu fluctuații mari de energie foarte departate unul față de celălalt. Prezența acestor mici densități de stări la marginea benzii favorizează localizarea electronilor în această regiune.

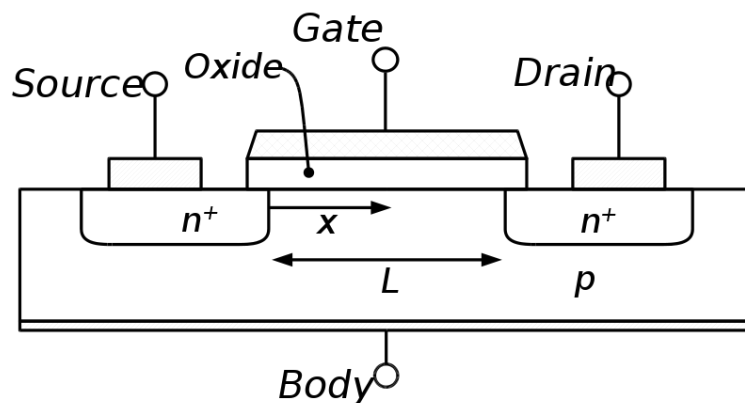
Pentru valori mai mari ale raportului W/I față de valoarea critică, $(W/I)_C$, toate stările sunt localizate. La valori mici decât $(W/I)_C$ stările delocalizate devin predominante, ocupând aproape întreaga bandă. E_C și $-E_C$ sunt energii critice asociate pragului de mobilitate.

Dacă nivelul Fermi este în regiunea localizată transportul de sarcină, la temperaturi joase, are loc fie datorită activării termice, fie datorită saltului (hopping) de pe o stare ocupată pe una neocupată de energie apropiată. La temperaturi mici, ambele mecanisme conduc la o dependență exponențială a conductivității electrice de temperatură (energia de activare scade cu temperatura). Dacă stările nu sunt strict localizate, mișcarea electronilor în câmp electric aplicat poate fi posibilă fără activare termică. La temperaturi suficient de joase acest mecanism de transport este favorabil, iar conductivitatea electrică nu va mai depinde de temperatură.

Pentru semiconductorii puternic dopați, la $T \rightarrow 0$, conductivitatea nu este zero, ci tinde la o limită finită. Acest tip de conducție este denumită metalică. Trebuie menționat că conductivitatea electrică a unui semiconductor dopat este cu ordine de mărime mai mică decât cea a unui metal obișnuit, termenul „metalic” reflectând doar limita finită a conductivității când $T \rightarrow 0$.

Tranziția de la transport activat termic la o conducție metalică este numită tranziție Mott-Anderson.

Modelul Anderson poate fi în mod convenabil testat în cazul structurilor semiconductoare-metal-izolator (MIS). Acest tip de structuri multistrat pot fi realizate dintr-un film de dioxid de siliciu (izolator) așezat între un strat de siliciu (semiconductor) și un electrod metalic. Potentialul electrostatic al metalului conduce la o redistribuire a sarcinii în semiconductor astfel încât pe suprafața semiconductorului apare un strat încărcat cu purtători de semn opus majorității din materialul bulk. Concentrația de purtători din stratul de inversie poate fi variată cu aplicarea unui câmp electric, astfel fiind variată, într-un domeniu foarte larg, conductivitatea stratului de la suprafața. Una din aplicațiile acestui efect este tranzistorul cu efect de câmp (FET).



Figură 4. MOSFET de tip n (Metal-Oxid-Semiconductor-Tranzistor cu efect de câmp) în secțiune.

Stratul de inversie este un sistem bidimensional într-un potențial fluctuant datorat impuritatilor din stratul dielectric. Acest tip de potențial produce localizarea purtătorilor de sarcină (localizare tip Anderson). La concentrații mici de purtători în stratul de inversie conductivitatea este activată termic. În acest caz nivelul Fermi este în regiunea localizată, transportul de sarcină realizându-se prin salt (hopping). Dacă concentrația de purtători crește, nivelul Fermi se deplasează într-o regiune cu stări delocalizate (sau slab localizate), iar conductivitatea devine slab dependentă de temperatură.

Când nivelul Fermi trece dintr-o regiune delocalizată într-una localizată conductivitatea la $T=0$ trebuie să dispară. Trecerea la o conductivitate nulă (în sistemele bi- și tri-dimensionale) se face abrupt sau gradual?

În 1960, Ioffe și Regel au evidențiat că drumul liber mediu nu poate fi mai mic decât lungimea de undă Broglie. Mott a dezvoltat conceptul de conductivitate metalică.

Dacă dezordinea în sistem este mică, conductivitatea poate fi descrisă prin formula lui Drude (considerăm un sistem tridimensional degenerat):

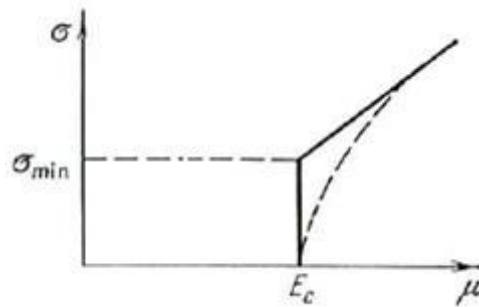
$$\sigma = \frac{e^2 k_F^2 l}{3\pi^2 \hbar} \quad (\text{ec. 10})$$

Unde l este drumul liber mediu care scade odata cu cresterea dezordinii in sistem inasa nu poate fi mai mic decat lungimea de unda Broglie. Astfel, conductivitatea nu poate fi mai mica decat o conductivitate minima ce poate fi estimata substituind $k_F l \approx 1$ in ecuatiile 10.

$$\sigma_{\min}^{3D} = C_3 \frac{e^2}{\hbar l_{\min}} \quad (\text{ec. 11})$$

Unde l_{\min} este cel mai scurt drum liber mediu posibil. In modelul Anderson cu jumătate de banda plina l_{\min} coincide cu a , constanta de retea, in timp ce in modelul Mott pentru semiconductorii dopati, l_{\min} reprezinta distanta medie dintre impuritati. Mott a estimat ca C_3 poate lua valori intre 0.025 si 0.05, deci $\sigma_{\min} = 610/l_{\min} (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$.

Mott afirma ca la $T=0$ conductivitatea trebuie sa fie fie mai mare decat σ_{\min} , fie sa fie egala cu zero.



Figură 5. Ilustrarea schematică a pragului de mobilitate, E_c , ce separa stările localizate de cele delocalizate.

Conceptul conductivității minime a fost extins pentru două dimensiuni, unde:

$$\sigma_{\min}^{2D} \approx 0.1 \frac{e^2}{\hbar} \quad (\text{ec. 12})$$

Se poate observa că parametrul de lungime a este absent din ultima relație, fiind astfel de așteptat că valoarea lui σ_{\min} pentru sisteme 2D să fie universală.

În 1976, Mott a ajuns la concluzia că teoria din spatele tranziției discontinue a conductivității poate fi greșită deoarece nu s-a luat în calcul influența fluctuațiilor potențialului asupra sistemului electronic. În 1979 noi studii teoretice ce pun sub semnul întrebării teoria conductivității metalice minime au apărut.

Teoria de scală a localizării este una dintre acestea, urmând a fi detaliată în secțiunea următoare. Aceasta teorie prezice că la $T=0\text{K}$, tranziția metal-izolator este continuă în

sistemele tridimensionale si ca toate starile sunt localizate in sistemele bidimensionale oricat de putin dezordonate ar fi.

Wegner (1976) a dezvoltat teoria de scala a localizarii folosind notiunea de punct critic. El a constatat ca teoria de scala descrisa de Thouless [11] este reala doar daca tranziția metal-izolator este continua, astfel incat:

$$\sigma(T = 0) = (E - E_c)^\mu \quad (\text{ec. 13})$$

unde E_c este pragul de mobilitate si μ este exponentul critic.

De asemenea, este evident ca $d=2$ este o dimensiune marginala pentru ca in cazul bidimensional conductivitatea are aceeași dimensiune ca si conductanța. Aceste idei au fost dezvoltate in continuare cu ajutorul teoriei de perturbație (Abrahams, Anderson, Licciardello si Ramakrishnan, 1979).

2.2 Teoria de scala a localizării

La mijlocul anilor șaptezeci, Thouless si colaboratorii săi au formulat intr-o serie de lucrări stiicifice problema localizării electronilor [11].

Noua teorie sustine ca nu conductivitatea, ci conductanta sistemului, g , este aceea ce are o valoare critica. Conductanta, g , este o masura a dezordinii din sistem fiind mica daca dezordinea este mare si invers. $G = g \cdot \frac{e^2}{\hbar}$ (ec. 14)

Daca dimensiunea liniara a sistemului este suficient de mare, conductanta poate fi legata de conductivitate prin expresia urmatoare: $G = L^{d-2} \sigma$ (ec. 15)

Unde L este latura unui hipercub si $d=1,2,3$ exprima dimensionalitatea sistemului.

Teoria de scala are la baza urmatorul postulat: daca construim un hipercub cu latura $2L$ din hipercuburi cu dimensiunea L , atunci $g(2L)$ este unic determinata de $g(L)$.

Pare rezonabil că natura funcțiilor de unda ale probei $(2L)^d$ va dictată de natura stărilor din proba L^d , insa se pune intrebarea „la cati parametri ne putem rezuma pentru descrierea sistemului? „

I este de ordinul energiei siftate datorita schimbarii conditiilor de margine pentru cubul initial. In continuare vom estima I pentru starile delocalizate, precum si pentru cele a caror raza de localizare este mai mare decat L. Un electron acopera distanta L intr-un timp τ , unde

$$\tau = \frac{L^2}{D} \quad (\text{ec. 16})$$

$$D \text{ este coeficientul de difuzie, } D = \frac{\sigma}{e^2 d_s} \quad (\text{ec. 17})$$

$$I \approx \frac{\hbar}{\tau} \approx \frac{\hbar D}{L^2} \quad (\text{ec. 18})$$

W este de ordinul $(N_0 L^d)^{-1}$ unde N_0 este densitatea de stari.

Astfel, parametrul unic cu ajutorul caruia se poate descrie natura funcțiilor de unda, I/W, capata forma:

$$\frac{I}{W} \approx \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2} \quad (\text{ec. 19})$$

Dupa cum se poate observa din ecuatia 19, marimea masurabila fizic, $G/(e^2/\hbar)$, este liniar dependenta de I/W.

Teoria de scala încearcă sa explice fenomenul localizarii prin asocierea comportamentului conductanței, g, cu lungimea de scala a sistemului, L.

Daca starile din apropierea nivelului Fermi sunt localizate transportul electronic are loc datorita fenomenului de salt (hopping) de pe o stare ocupata pe una neocupata de energie apropiata. Insa, asa cum am mai mentionat, distanta dintre doua starile localizate de energii egale sau aproximativ egale este foarte mare, astfel incat elementul de matrice corespunzator hoppingului este exponential mic, iar paramentru de scala relevant devine lungimea de localizare, ξ .

Atunci cand lungimea de localizare este mai mare decat drumul liber mediu, pentru $L \gg \xi$:

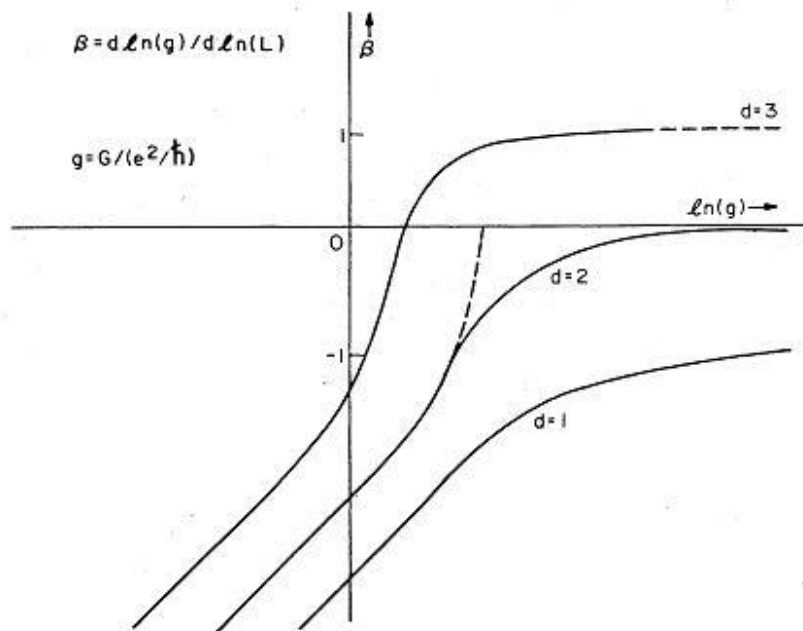
$$g(L) \approx \exp(-L/\xi) \quad (\text{ec. 20})$$

In sisteme unidimensionale toate starile sunt localizate, cu o lungime de localizare de ordinul drumului liber mediu (Mott si Twose, 1961).

Funcția de scala

Abrahams, Anderson, Licciardello și Ramakrishnan (1979) au argumentat că funcția de scala, $\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} = \frac{L}{g} \frac{dg}{dL}$ este unic determinată de g . $\beta(g)$ descrie cum conductanța unui sistem finit evoluează în funcție de dimensiunea de scala.

Funcția de scala, $\beta(g)$, pentru cazurile $d=1,2,3$ este reprezentată în funcție de conductanța g , în fig de mai jos:



Figură 6. Funcția de scala.

a. 3D (sistem tridimensional)

Din reprezentarea grafică a funcției de scala se poate observa că sistemul tridimensional poate trece prin două regimuri de transport diferite. Punctul prin care $\beta(g)$ trece prin zero este un punct critic instabil.

Punctul critic este definit prin $\beta(g)=0$, $g_0=g_3$.

a. conductanța mare $g \gg g_c$; $I/W \gg 1$.

unde g_c este conductanța adimensională caracteristică de ordinul π^2 . În acest regim legea lui Ohm (ec.3) este valabilă. Aceasta duce la forma asimptotică

$\beta(g) = (d-2)$ pentru $g \gg g_c$.

b. conductanța mică $g \ll g_c$; $I/W \ll 1$.

Stările electronice sunt localizate deci dependența de scala este descrisă de ecuația 20. Astfel:

$\beta(g)=\ln(g/g_c)$. Atunci cand $\beta(g)$ este negativa g descreste cu cresterea lungimii de scala.

g_0 este conductanta unui sistem in care electronii sunt transportati cu energia Fermi, E_F .

Daca dezordinea este mentinuta constanta si se variaza energia Fermi, g_0 se modifica usor si pentru $E_F=E_c$ (energia pragului de mobilitate).

$(g_0-g_3)=(E_F-E_c)g_0'$, unde $g_0'=(dg_0/dE_F)$ la $E_F=E_c$

Astfel, pentru a studia comportamentul critic din regiunea pragului de mobilitate trebuie sa aplicam teoria de scalare pentru valori ale lui g_0 apropiate de g_3 .

Presupunem ca $\beta(g)$ are o panta $(1/\nu)$ in apropierea punctului $\beta(g)=0$:

$$\beta(g) = \frac{1}{\nu} \left(\frac{g - g_3}{g_3} \right) = \frac{\delta g}{\nu} \quad \text{pentru } \delta g \ll 1, \text{ unde } \delta g \text{ este abaterea lui } g \text{ fata de } g_3.$$

Pentru $\delta g > 0$

$g(L) = \sigma L$ unde

$$\sigma = (A g_3 / l) (\delta g)^\nu \quad (\text{ec. 21})$$

Unde A este o constanta iar ν este exponentul critic al conductivitatii. ν poate fi calculat cu ajutorul teoriei perturbative ce este corecta pentru dimensiuni spatiale $(2+\epsilon)$ cu ϵ mic iar $\nu = \epsilon^{-1}$.

Pentru $\delta g > 0$

Lungimea de corelatie ξ (raza de localizare) poate fi extrasa din ultima ecuatie:

$$\sigma = g_3 / \xi \quad \text{unde } \xi = \left(\frac{1}{A} \right) (\delta g)^{-\nu} \quad (\text{ec. 22})$$

Conductia este non-Ohmica pentru L mai mic decat ξ si Ohmica cu $\sigma = g_3 / \xi$ (ec. 23)

pentru L mai mare decat ξ .

Pentru $\beta(g) < 0$, δg are valori negative mici, trecem in regimul localizat unde:

$$g(L) = g_3 \exp(-B |\delta g|^\nu L / l) \quad (\text{ec. 24})$$

unde B este o constanta.

$$\xi = \left(\frac{1}{B} \right) (\delta g)^{-\nu} \quad (\text{ec. 25})$$

b. 2D (sistem bidimensional)

Asa cum rezulta din teoria de scala, $\lim_{L \rightarrow \infty} G = 0$. Pentru sistemele bidimensionale fara interactii, la $T=0K$, intotdeauna $\beta(g) < 0$ deci va exista doar regim localizat.

Teoria prezice ca in sistemele 2D nu exista stari extinse indiferent cat de mare este lungimea de scala, chiar si pentru sisteme cu o dezordine microscopica foarte mica.

$$(d \ln g / d \ln L) = -a/g$$

$$g(L) = g_0 - \frac{e^2}{\hbar\pi^2} \ln\left(\frac{L}{l}\right) \quad (\text{ec. 26})$$

Lungimea de localizare estimata este:

$$\xi_{loc}^{(2)} \approx l \exp(k\pi^2 g_0 / e^2) = l \exp\left(\frac{\pi}{2} k_F l\right) \quad (\text{ec. 27})$$

Lungimea de localizare depinde exponential de drumul liber mediu, astfel efectele localizarii sunt dificil de observat experimental in cazul unei dezordini slabe.

O consecinta a ecuatiei 3 este ca pentru orice lungime de scala sistemele bidimensionale au un comportament non-Ohmic.

Daca materialul studiat are conductanta, G_D , calculata cu ajutorul formulei lui Drude, mai mare decat unitatea (ceea ce implica un drum liber mediu, l , mare) atunci, pentru valori nu foarte mari ale lui L putem trata dezordinea perturbativ. Astfel:

$$G = G_D - \alpha \ln \frac{L}{l} \quad (\text{ec. 28})$$

Unde α este un coeficient numeric, iar $G_D = k_F l / \pi$. Ecuatia 4 poate fi aplicata doar daca al doilea termen este mai mic decat primul. Acesta este cazul in care materialul studiat este un foarte bun metal, efectul localizarii in sisteme bidimensionale fiind realizabil doar pentru un L foarte mare al filmului, $L \approx l \exp(G_D \alpha)$. Daca masuram conductivitatea intr-un camp ac de frecventa ω , atunci pentru o proba infinita conductanta va avea forma:

$$G = G_D - \alpha \ln \frac{1}{\omega\tau} \quad (\text{ec. 29})$$

Unde τ este timpul de relaxare. Deci, conductanta scade exponential la frecvente mici, $\omega \approx \tau^{-1} \exp(-G_D / \alpha)$. Astfel, pentru structurile bidimensionale realizate din metale foarte bune putem vorbi doar despre o localizare slaba (WL). Fizic, in sistemele bidimensionale localizarea apare datorita interferentei undelor in urma mecanismelor de imprastiere.

In cazul unei dezordini slabe, $k_F l \ll 1$, este posibil sa se aduca o corectie la teoria de transport Boltzmann pentru σ folosind teoria de perturbatie diagramatica.

$$\beta(g) = (d-2) - a/g \quad (\text{ec. 30})$$

Pentru un gaz de electroni (gaz Fermi) $a = g_c = (\pi^2)$. Deci $\beta(g)$ va fi intotdeauna mai mica decat in legea lui Ohm, astfel conductia in sisteme dezordonate nu este niciodata pur Ohm-ica.

Este important de precizat ca interferenta undelor poate fi transformata intr-una distructiva cu ajutorul unui camp magnetic slab. Semnatura acestui fenomen este magnetorezistenta negativa.

c. 1D (sistem unidimensional)

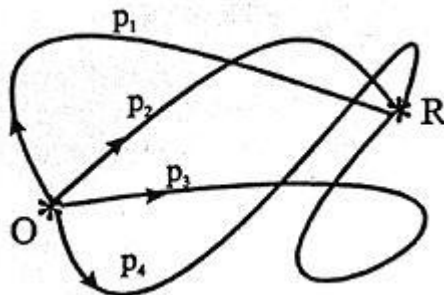
In acest caz, $d \ln G / d \ln L < 0$ pentru orice G . Pentru $L \rightarrow \infty$ atat conductanta cat si conductivitatea unui sistem unidimensional dezordonat scad exponential.

2.3 Localizarea slaba (WL)

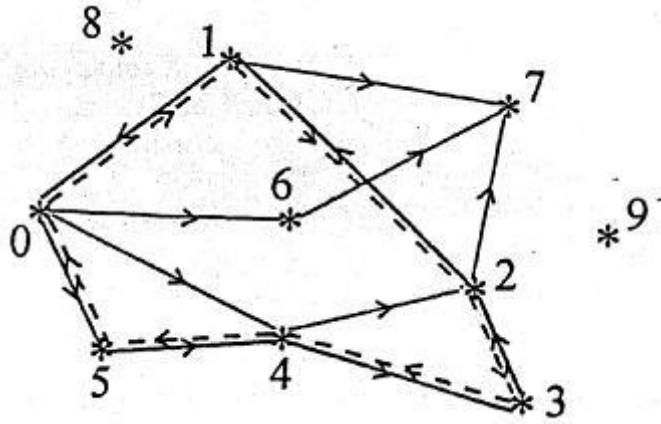
Un electron este slab localizat atunci cand in urma unei succesiuni de evenimente de imprastiere probabilitatea lui de a se intoarce in pozitia initiala este foarte mare.

Transportul unui electron printr-un mediu difuziv din pozitia 1 in pozitia 2 este descrisa de coeficientul de transmisie. Conductanta este direct proportionala cu probabilitatea electronilor de a interfera constructiv sau distructiv, deci, direct proportionala cu probabilitatea de transmisie.

Unda electronului pleaca din pozitia 1, este impartita intr-un numar de unde partiale, ψ_j , ce traverseaza mediul de-a lungul unor drumuri diferite, p_j , si sufera un numar mare de imprastieri elastice inainte de a ajunge la punctul 2. Precizam ca s-a plecat de la premiza ca electronul poate parcurge un drum bine definit si ca de-a lungul acestuia nu va foarte tare imprastiat. Daca aceste conditii nu sunt indeplinite vom vorbi de o localizare puternica, fenomen ce necesita o descriere complet diferita.



Figură 7. Unda electronului ce trece printr-un mediu dezordonat ce contine centri de imprastiere elastica. Unda unui singur electron din pozitia O este impartita intr-un numar de unde partiale ψ_j , fiecare urmand un drum bine definit, p_j , ajung in pozitia R cu un coeficient de transmisie t_j . Faza ϕ_j cu care electronul ajunge in punctual R depinde de lungimea drumului efectuat ce difera de oricare alt drum.



Figură 8. Unda unui electron ce porneste din punctual 0 si unde sale partiale. Linia continua reprezinta drumul din punctual 0 in punctual final 7. Linia intrerupta indica drumul ce permite electronului sa se intoarca in pozitia sa initiala, 0.

Unda electronului are ca pozitie de start punctul 0. Drumurile $\{0,1,7\}$, $\{0,4,2,7\}$, $\{0,5,4,3,2,7\}$, $\{0,4,2,4,2,7\}$ etc. contribuie la amplitudinea totala a undei din punctul 7, deci:

$$\Psi(7) = \sum_j \Psi_j = \sum_j t_j \exp(i\varphi_j)$$

De aici rezulta ca probabilitatea totala ca electronul sa ajunga in pozitia 7 este:

$$P(7) \equiv |\Psi(7)|^2 = \sum_j t_j^2 + \sum_{j \neq k} t_j t_k \cos(\varphi_j - \varphi_k)$$

Insa cel de-al doilea termen are o contributie foarte mica si astfel:

$$P \approx \sum_j t_j^2$$

(ec. 31)

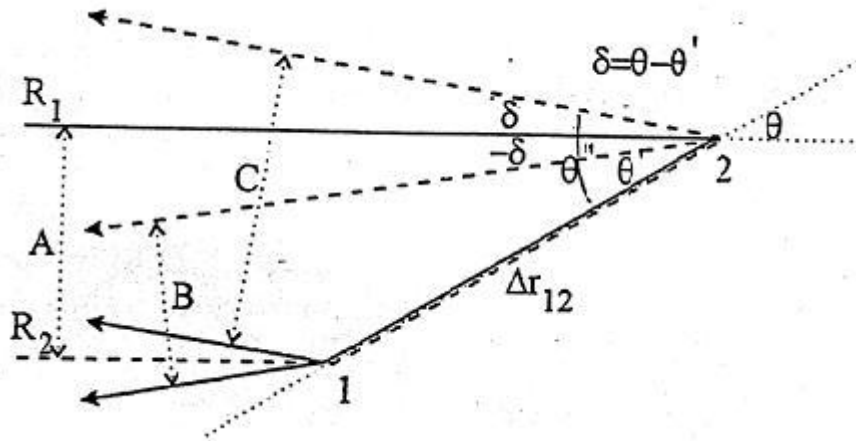
Probabilitatea ca un electron sa se intoarca in pozitia din care a plecat este data de expresia:

$$P_j(0 \rightarrow 0) = t_{j+}^2 t_{j-}^2 + t_{j+} t_{j-} \cos(\varphi_j - \varphi_j) + t_{j-} t_{j+} \cos(\varphi_j - \varphi_j) = 4t_j^2 \text{ unde } t_{j+} = t_{j-} = t_j \text{ rezulta ca:}$$

$$P(0 \rightarrow 0) = \sum_j P_j(0 \rightarrow 0) = 4 \sum_j t_j^2$$

Sa consideram acum, doua fascicole R1 si R2. Fascicolul R1 pleaca din punctul 2, sufera o imprastiere in punctul 1 si se intoarce sub unghiul δ . Fascicolul R2 pleaca din punctul 1 si este imprastiat tot sub unghiul δ . Diferenta de drum, $\Delta l_{12}(\delta)$ dintre cele doua fascicole este:

$$\Delta l_{12}(\delta) = a - a' = \Delta r_{12}(\cos(\theta) - \cos(\theta')) \text{ unde } \theta' = \theta + \delta$$



Figură 9. Unda plana a unui electron retroimprastiata coerent. A-punctul incident. 1 si 2 imprastieri elastic. In punctual B frontul de unda pleaca in urma imprastierii sub unghiul $-\delta$ fata de fasciculul incident; similar, frontul de unda pleaca sub unghiul $+\delta$ din punctul C.

Pentru δ mic

$$\Delta\varphi_{12}(\pm\delta) = 2\pi \frac{\Delta l_{12}(\pm\delta)}{\lambda_F} \approx 2\pi \frac{\Delta r_{12}}{\lambda_F} \left[-\frac{1}{2} \delta^2 \cos(\theta) \pm \delta \sin(\theta) \right]$$

(ec. 32)

Cele doua raze interfere constructiv daca diferenta de faza dintre ele nu este mai mare decat $\sim \pi/2$.

$-\pi/2 < \theta < \pi/2$, l_e este drumul liber intre doua imprastieri elastice.

$$\langle \Delta r_{12} \cos(\theta) \rangle \approx \Delta r_{12} / 2 \approx l_e / 2$$

$$\lambda_F \ll l_e; \Delta r_{12} \sim l_e$$

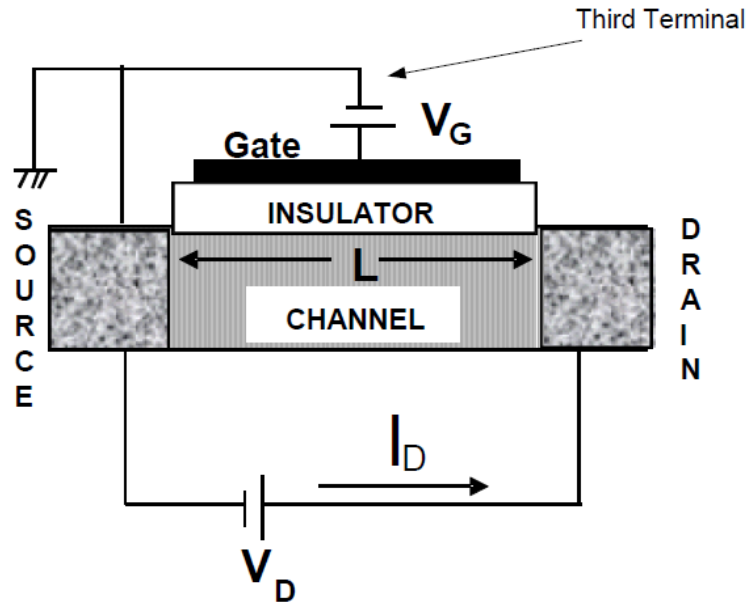
$$\delta_{\max} \approx \sqrt{\lambda_F / l_e}; \delta_{\max} \ll 1.$$

Deci, in urma unei imprastieri, unda este reflectata sub un unghi foarte mic, asadar retro-imprastiata coerent.

2.4 Corectia de localizare slaba

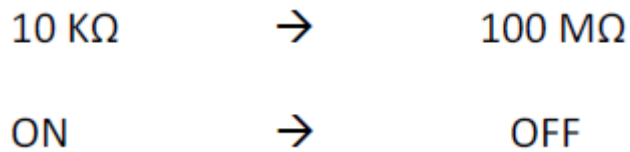
In aceasta parte a lucrarii voi readuce in discutie unul dintre cele mai folosite dispozitive in electronica, FET-ul si voi dezvolta ultima afirmatie facuta in sectiunea „Localizarea slaba”: “Conductanta este direct proportionala cu probabilitatea electronilor de a interfere constructiv sau distructiv, deci, direct proportionala cu probabilitatea de transmisie”.

Cel mai comun dispozitiv din micro/nano-electronica este tranzistorul cu efect de camp (FET). Un laptop contine aproximativ un miliard de dispozitive FET.

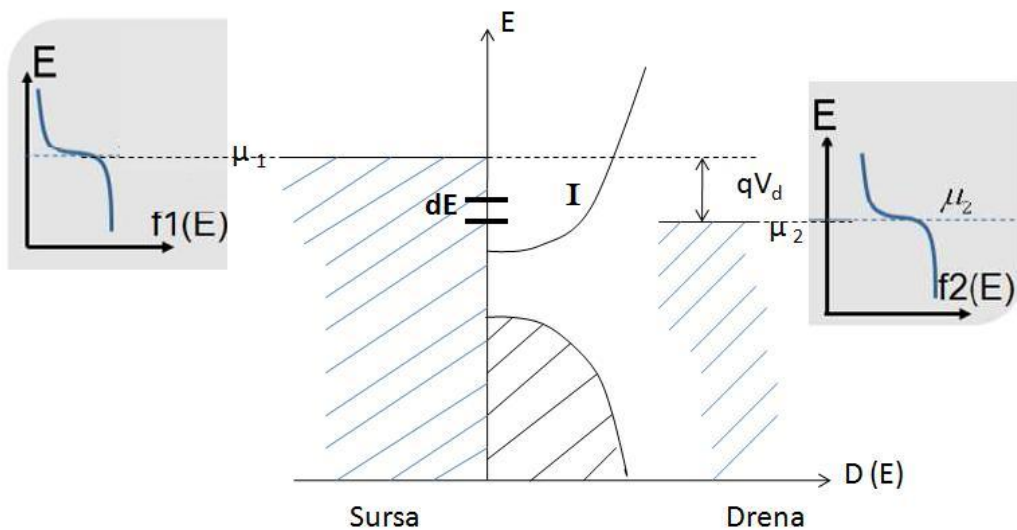


Figură 10. Tranzistor cu efect de camp.

Un tranzistor poate fi echivalat cu o rezistenta controlata prin al treilea terminal.



Lungimea tranzistorului este in general de zece ori mai mare decat lungimea canalului si poate avea dimensiuni cuprinse intre 10 mm si 0.1 nm. Daca acum 20-30 de ani existau dispozitive cu $L \sim 10\text{-}20\mu\text{m}$, astazi se fabrica industrial FET-uri cu L cuprins intre 10nm si 1nm. Iar in stadiu de cercetare sunt dispozitive cu $1\text{\AA} < L < 1\text{nm}$.



Figură 11. Schita tranzistor.

Prin aceasta structura va curge curent doar daca starile din zona I (intre cele doua potentiale) sunt ocupate. Aplicand o tensiune pozitiva, potentialul electrochimic va cobora si vice versa pentru un potential negativ. Starile de sub μ_1 si μ_2 sunt ocupate si nu contribuie la producerea curentului electric. Curentul este strans legat de usurinta cu care electronii ies din contacte, adica de parametrul γ/\hbar , unde γ are dimensiune de energie.

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp^{(E-\mu_1)/kT} - 1} \quad (\text{ec. 33})$$

Curentul de trece prin dE se scrie sub forma:

$$\delta I = q \int dE \cdot D(E) \frac{\gamma}{2\hbar} (f_1(E) - f_2(E)) \quad (\text{ec. 34})$$

$$f_1 - f_2 = \frac{\partial f}{\partial \mu} (\mu_1 - \mu_2) = -\frac{\partial f}{\partial E} (\mu_1 - \mu_2)$$

$$\mu_1 - \mu_2 = qV$$

$$\delta I = \frac{q}{h} \int dE \cdot \bar{T}(E) \frac{\partial f}{\partial E} \cdot qV \quad (\text{ec. 35})$$

$$G = \frac{\delta I}{(\mu_1 - \mu_2)/q} = \frac{2q^2}{h} \int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE \quad (\text{ec. 36})$$

Ecuatia 36 este supranumita formula raspunsului liniar (temperatura diferita de zero)

Unde $T(E)$ este functia de transmisie ce descrie probabilitatea electronilor de ajunge de la un contact la altul.

Pentru temperaturi joase se poate scrie:

$$\frac{\partial f}{\partial E} \approx \delta(E_F - E) \quad (\text{ec. 37})$$

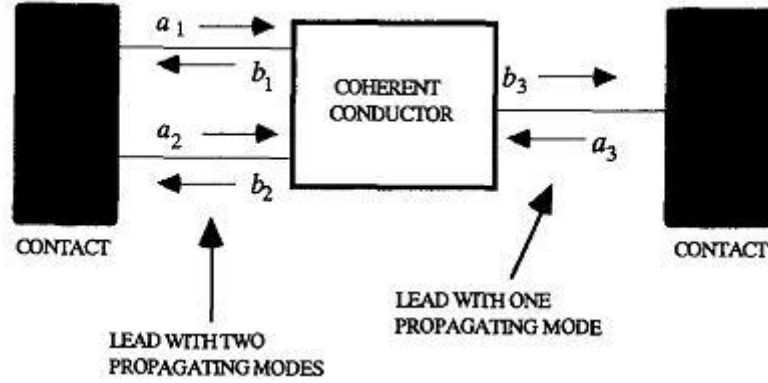
Deci cand $T \rightarrow 0$

$$G = \frac{2q^2}{h} \bar{T}(E_F) \quad (\text{ec. 38})$$

- Cum se calculeaza functia de transmisie pentru sisteme mezoscopice reale?

Daca marimea sistemului, L , este mai mic decat lungimea de faza atunci transportul este coerent iar functia de transmisie poate fi calculata pornind de la ecuatia lui Schrodinger. In acest caz functia de transmisie este strans legata de matricea de imprastiere, matricea S . Un conductor coerent poate fi descris la orice energie de o matrice S . Aceasta leaga amplitudinile undelor ce vin si pleaca din cele doua contacte. Daca numarul total de moduri din contacte este trei atunci putem scrie:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad (\text{ec. 39})$$



Figură 12. Un dispozitiv cu transport coerent poate fi caracterizat cu ajutorul unei matrici de imprastiere.

Numarul total de moduri este obtinut prin insumarea numarului de moduri din fiecare contact:

$$M_T(E) = \sum_p M_p(E)$$

$$T_{mn} = |S_{mn}|^2; \quad \bar{T}_{pq} = \sum_{m \in q} \sum_{n \in p} T_{mn} \quad (\text{ec. 40})$$

Unde T_{mn} este probabilitatea de transmisie, \bar{T}_{pq} este functia de transmisie, m sunt modurile din contactul q iar n sunt modurile din contactul p .

Pentru a nu incalca legea de conservare a curentului matricea S trebuie sa fie unitara, deci:

$$[S]^+ [S] = I = [S][S]^+ \quad (\text{ec. 41})$$

$$\sum_{m=1}^{M_T} |S_{mn}|^2 = 1 = \sum_{m=1}^{M_T} |S_{mn}|^2$$

$$\sum_q \bar{T}_{qp} = \sum_{n \in p} \sum_{m=1}^{M_T} T_{mn} = \sum_{n \in p} 1 = M_p$$

$$\sum_q \bar{T}_{pq} = \sum_{n \in p} \sum_{m=1}^{M_T} T_{nm} = \sum_{n \in p} 1 = M_p$$

$$\sum_q \bar{T}_{pq}(E) = \sum_q \bar{T}_{qp}(E) = M_p(E) \quad (\text{ec. 42})$$

Rezulta:

$$\sum_q G_{pq} = \sum_q G_{qp} = \frac{2q^2}{h} \int M_p(E) \left(-\frac{v_f}{vE} \right) dE \quad (\text{ec. 43})$$

Atunci cand dimensiunea conductorilor este mare decat lungimea de coerenta de faza, incercam sa impartim L in mai multe sectiuni al caror $L' < l_\phi$. Considerand ca transportul in fiecare sectiune este coerent, putem determina individual matricea S. Segmentele sunt apoi legate intre ele incoerent. Acest tip de abordare ofera o descriere satisfacatoare a transportului incoerent fara a face uz de concepte avansate necesare teoriei microscopice de transport incoerent.

Functia Green, $G^R(r,r')$ poate fi privita ca o matrice S generalizata cu ajutorul careia putem descrie raspunsul in orice punct (din interiorul sau exteriorul conductorului), r, unei excitatii din punctul r' . Functia Green este de un real folos atunci cand dorim sa includem in calcul si efectele interactiilor electron-electron sau electron-fonon.

Functia Green poate fi definita ca:

$$R = D_{op}^{-1} S = GS \quad \text{unde} \quad G \equiv D_{op}^{-1} \quad (\text{ec. 44})$$

Atunci cand raspunsul R, este legat de excitarea S, printr-un operator diferential D_{op} :

$$D_{op} R = S$$

$$\left[E - H_{op} \right] \Psi = S \quad G = \left[EI - H_{op} - \Sigma^R \right]^{-1} \quad (\text{ec. 45})$$

Atunci cand includem in calcul si interferentele cuantice, rezistenta nu depinde doar de numarul de imprastieri, deci de L, ci depinde de lungimea de unda a electronilor si de configuratia de imprastiere.

Cand $L > l_\phi$ un conductor poate fi privit ca un ansamblu de unitati cu coerenta de faza, fiecare avand distributia ei de impuritati si, deci, un potential de imprastiere diferit, $U(r)$. Teoria perturbatiei diagramatice ofera un mod elegant de a trata un astfel de ansamblu.

In cele ce urmeaza voi calcula corectia datorata efectului de localizare slaba pentru conductanta unui sistem bidimensional.

La $T = 0K$, $E = E_F$

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2}{h} \frac{\hbar^2}{L^d} \sum_{k,k'} v_x(k) v_x(k') \left\langle \left| G^R(k,k') \right|^2 \right\rangle \quad (\text{ec. 46})$$

$$G^R = \left[EI - H_c - \Sigma^R \right]^{-1} \quad (\text{ec. 47})$$

Unde I este operatorul identitate, H_c este Hamiltonianul conductorului, Σ este termenul de self-energie. Introducem un termen energetic imaginar,

$$G^R = [(E + i\eta_\varphi)I - H_c]^{-1} \quad (\text{ec. 48})$$

Unde η_φ este asociat pierderii coerentei.

$$H(k', k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{k',k} + U(k', k) \quad \text{unde } U(k', k) \text{ este reprezentarea matriciala a}$$

potentialului de imprastiere.

$$U(k', k) = \langle k' | U | k \rangle = \int U(r) \exp[-i(k'-k)r] \frac{dr}{L^2} \quad (\text{ec. 49})$$

Consideram un conductor bidimensional (patrat cu latura L):

$$k_{x,y} = n_{x,y} (2\pi / L)$$

In calculele ce vor urma suma \sum_k va fi echivalata cu $L^2 \int \frac{dk}{4\pi^2}$

Se poate observa ca daca $U = 0$ atunci functia Green, G_0 , este pur diagonala.

$$G_0(k', k) = \delta_{k',k} \frac{1}{E - (\hbar^2 k^2 / 2m) + i\eta_\varphi} \quad (\text{ec. 50})$$

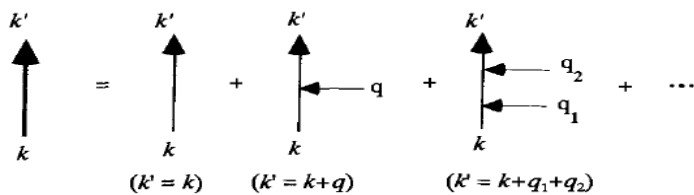
In prezenta unui potential de imprastiere:

$$[G^R] = [G_0^{-1} - U]^{-1} \quad (\text{ec. 51})$$

Functia Green se poate extinde intr-o serie perturbativa:

$$G^R = [G_0^{-1} [I - G_0 U]]^{-1} = [I - G_0 U]^{-1} G_0 = [I + G_0 U + G_0 U G_0 U + \dots] G_0 = \\ = G_0 + G_0 U G_0 + G_0 U G_0 U G_0 + \dots \quad (\text{ec. 52})$$

Acesta serie poate fi echivalata prin urmatoare reprezentare geometrica:



$$U_q \equiv U(k', k) \text{ unde } q = k' - k$$

$$G^R(k', k) = \delta_{k',k} G_0(k) + G_0(k') U_q G_0(k) + G_0(k') U_{q_2} G_0(k + q_1) U_{q_1} G_0(k) + \dots \quad (\text{ec. 53})$$

Admitand ca media potentialului de imprastiere, $\langle U(r) \rangle$, este zero si ca functia de corelatie spatiala este data de:

$$\langle U(r) U(r') \rangle = \bar{U}^2 \delta(r - r')$$

$$\bar{U}(k, k') = \int U(r) \exp[-i(k'-k)r] \frac{dr}{L^2}$$

rezulta :

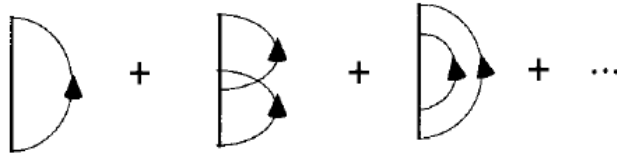
$$\langle U_q U_{q'} \rangle = \frac{\bar{U}^2}{L^2} \delta_{q, -q'} \quad (\text{ec. 54})$$

Funcția Green a ansamblului poate fi calculată prin medierea fiecărui termen din seria perturbativă. Astfel:

$$\langle G_0(k') U_q G_0(k) \rangle = 0$$

$$\langle G_0(k') U_{q_2} G_0(k+q_1) U_{q_1} G_0(k) \rangle = \frac{\bar{U}^2}{L^2} G_0(k') G_0(k+q_1) G_0(k) \quad (\text{ec. 55})$$

Dupa mediere diagramele vor fi de forma:



$$\begin{aligned} \langle G^R \rangle &= G_0 + G_0 \Sigma G_0 + G_0 \Sigma G_0 \Sigma G_0 + \dots \\ &= G_0 [I + G_0 \Sigma + \Sigma G_0 \Sigma G_0 + \dots] \\ &= G_0 [I - \Sigma G_0]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{ec. 56})$$

Ecuatia 56 este numita Dyson.

$$\langle G^R \rangle^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma \quad (\text{ec. 57})$$

$$\sigma = \frac{2e^2 \hbar^2}{h L^d} \sum_{k, k'} v_x(k) v_x(k') \langle |G^R(k, k')|^2 \rangle \quad (\text{ec. 58})$$

$$\sigma_o = \frac{2e^2 \hbar^2}{h L^d} \sum_{k, k'} v_x(k) v_x(k') \langle |G^R(k, k')| \rangle^2$$

$$\begin{aligned} \sigma_o &= \frac{2e^2 \hbar^2}{h L^2} \sum_k \left(\frac{\hbar k_x}{m} \right) \frac{1}{(E - \Sigma(k) - \sigma(k))^2 + \eta^2(k)} \\ &= \frac{e^2 \hbar^3}{\pi n^2} \int \frac{k}{4\pi^2 \eta} k^2 \cos^2 \theta \frac{\eta}{(E - \Sigma(k) - \sigma(k))^2 + \eta^2(k)} d\theta dk \end{aligned} \quad (\text{ec. 59})$$

Aproximam:

$$\frac{\eta}{(E - \Sigma(k))^2 + \eta^2} \cong \pi \delta(E - \Sigma(k))$$

$$\sigma_0 = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi m^2} \int \frac{k}{4\pi^2 \eta} k^2 \cos^2 \theta \pi \delta(E - \Sigma(k)) d\theta dk = \frac{e^2 E}{2\pi \hbar \eta} \quad (\text{ec. 60})$$

$$E = E_F = \frac{n_s}{m / \pi \hbar^2}$$

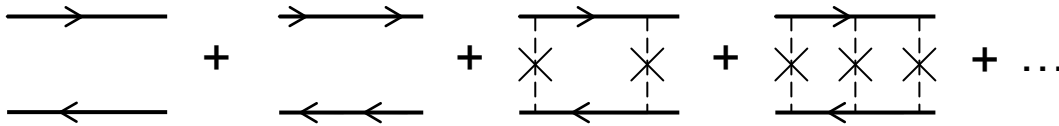
Rezulta:
$$\sigma_0 = \frac{n_s e^2 \tau}{n} \quad (\text{ec. 61})$$

σ_0 este conductivitatea Drude.

$$\frac{\Delta\sigma}{2e^2/h} = \frac{\hbar^2}{L^2} \sum_{k,k'} v_x(k) v_x(k') \left[\left\langle |G^R(k,k')|^2 \right\rangle - \left| \langle G^R(k,k') \rangle \right|^2 \right]$$

$$\frac{\Delta\sigma}{2e^2/h} = \frac{\hbar^2}{L^2} \sum_{k,k'} v_x(k) v_x(k') |G(k)|^2 |G(k')|^2 \Gamma(k,k') \quad (\text{ec. 62})$$

Corectia de localizare slaba este data de diagramele scara („ladder”). Principala proprietate a acestor diagrame este ca pot fi insumate pana la infinit.



$$\Gamma(k,k') = \left(\frac{\bar{U}^2}{L^2} \right)^2 \sum_q G(k-q) G(k'+q)^* \Leftrightarrow \Gamma(k,k') = \left(\frac{\bar{U}^2}{L^2} \right) \Lambda(k,k') \quad (\text{ec. 63})$$

$$\Lambda(k,k') = \left(\frac{\bar{U}^2}{L^2} \right) \sum_q G(k-q) G(k'+q)^* \quad (\text{ec. 64})$$

$$\beta = k + k' ; \quad k_1 = k - q$$

$$\Lambda(k,k') = \left(\frac{\bar{U}^2}{L^2} \right) \sum_{k_1} G(k_1) G(\beta - k_1)^* = \bar{U}^2 \int \frac{1}{E - \Sigma(k_1) + i\eta} \frac{1}{E - \Sigma(\beta - k_1) - i\eta} \frac{k_1 dk_1 d\theta}{4\pi^2}$$

$$\Lambda(k,k') = \frac{m \bar{U}^2}{4\pi^2 \hbar^2} \int_0^{2\pi} (2\pi i) \left[\frac{1}{\Sigma(k_1) - E - (\hbar^2 k_1 \beta \cos \theta / m) + (\hbar^2 \beta^2 / 2m) + i\eta} \right]$$

$$\Lambda(k,k') = \frac{\eta_{el}}{\eta} \int_0^{2\pi} \frac{1}{1 + i(\hbar v \beta \cos \theta / 2\eta)} \frac{d\theta}{2\pi} \quad (\text{ec. 65})$$

Cum localizarea slaba se datoreaza unui unghi mic in jurul directiei de retroimprastiere putem scrie ca $\beta=0$. Pentru a calcula corectia de localizare scala este sufficient sa evaluam $\Lambda(k,k')$ pentru unghiuri mici, deci β mici:

$$\Lambda(k, k') \approx \frac{\eta_{el}}{\eta} \int \left\{ 1 - \frac{i\hbar v \beta \cos \theta}{2\eta} - \frac{\hbar^2 v^2 \beta^2 \cos^2 \theta}{4\eta^2} \right\} \frac{d\theta}{2\pi} = \frac{\eta_{el}}{\eta} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2 v^2 \beta^2}{8\eta^2} \right\} \quad (\text{ec. 66})$$

cum $\eta = \frac{\hbar}{2\tau}$ si $D = \frac{v^2 \tau}{2}$ rezulta :

$$\Lambda(k, k') \cong \frac{\eta_{el}}{\eta} (1 - D\tau\beta^2) \quad (\text{ec. 67})$$

Din ecuatia 63 si 67 rezulta:

$$\Gamma(k, k') = \frac{U^2}{L^2} C(\beta) \quad (\text{ec. 68})$$

$$\text{Unde } C(\beta) \approx \frac{1/D\tau}{(1/D\tau_\phi) + \beta^2} ; \quad \tau_{el} \ll \tau_\phi \quad (\text{ec. 69})$$

$$\frac{\Delta\sigma}{2e^2/h} = \frac{\hbar^2}{L^2} \sum_{k, k'} v_x(k) v_x(k') |G(k)|^2 |G(k')|^2 \Gamma(k', k) \quad (\text{ec. 70})$$

$$\frac{\Delta\sigma}{2e/h} = -2D\tau \cdot \frac{1}{L^2} \sum_{\beta} C(\beta) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{(D\tau)^{-1}} \frac{d(\beta^2)}{\beta^2 + (1/D\tau_\phi)}$$

$$\Delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi h} \ln \frac{\tau_\phi}{\tau} \quad (\text{ec. 71})$$

Unde $\Delta\sigma$ reprezinta corectia conductivitatii

Pentru a distinge intre conductanta Drude si efectul localizarii slabe se aplica asupra sistemului un camp magnetic. Campul magnetic conduce la interferenta distructiva a undelor suprimand astfel efectul localizarii slabe.

$$\Delta\varphi_{1 \rightarrow 2} = 2\pi \frac{m}{h} \int_l^2 \vec{v}_F \cdot d\vec{l} - 2\pi \frac{e}{h} \int_l^2 \vec{A} \cdot d\vec{l} = \Delta_V \varphi_{1 \rightarrow 2} + \Delta_A \varphi_{1 \rightarrow 2} \quad (\text{ec. 72})$$

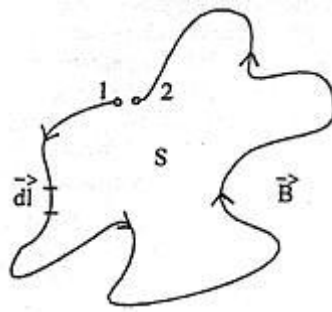
Unde $\Delta\varphi_{1 \rightarrow 2}$ este faza unui electron cu energia Fermi ce parcurge drumul \vec{l} dintre positiile 1 si 2. Influenta campului magnetic este introdus in cel de-al doilea termen al ecuatiei via vectorului de potential, \vec{A} .

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}; \quad \vec{p} = \hbar k = m\vec{v} + q\vec{A} = m\vec{v} - e\vec{A}$$

$$\Delta\varphi_{1 \rightarrow 2} = k_F L - 2\pi \frac{e}{h} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = k_F L - 2\pi \frac{e}{h} \oiint \vec{B} \cdot d\vec{S} = k_F L - 2\pi \frac{e}{h} \Phi \quad (\text{ec. 73})$$

Unde Φ este fluxul $B \cdot S$; $\Phi_0 = h/e$ este fluxul cuantic.

$$\Delta\varphi = k_F L - 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$$



Figură 13. Traietorie tipica ce contribuie la efectul de localizare slaba permitand electronului sa se intoarca in pozitia sa initiala

Efectul localizarii slabe este descris de o multime de traiectorii (fiecare cu forma si marimea ei) ce inchid o arie S_j . La un camp dat, siftarea fazei depinde liniar de aria, S_j asociata fiecărei traiectorii, p_j . Drumurile cele mai lungi ce pot contribui la localizarea slaba sunt acelea care au dimensiunea apropiata lungimii de coerenta de faza, $L_{\max} \sim l_\varphi$, cu $S_{l_\varphi} \approx \pi(l_\varphi / 2\pi)^2$.

Localizarea slaba incepe sa fie distrusa atunci cand:

$$\Delta\varphi \approx \frac{\pi}{2} \approx \frac{2\pi}{\Phi_0} S_{l_\varphi} B_C = \frac{2\pi}{\Phi_0} \pi \left(\frac{l_\varphi}{2\pi} \right)^2 B_C \quad (\text{ec. 74})$$

Disparitia efectului de localizare slaba incepe atunci cand ecuatia 75 este indeplinita.

$$B_C \approx \frac{\Phi_0}{l_\varphi^2} = \frac{h}{el_\varphi^2} \quad (\text{ec. 75})$$

In concluzie, localizarea slaba poate fi suprimata prin aplicarea unui camp magnetic. Aceasta proprietate este folosita pentru a studia experimental efectul de localizare slaba.

2.5 Lungimea de taiere

Teoria de scala a localizarii este aplicabila pentru sisteme fara interactie si la $T=0K$. Thouless (1977) a argumentat ca imprastierile inelastice induc o randomizare a fazei electronilor ceea ce conduce la o scadere a efectului de localizare slaba din sistem. Daca $\tau_{in} \gg \tau$, inainte de a suferi o imprastiere inelastica, electronul parcurge distanta $L_{Th} = (D\tau_{in})^{1/2}$ (ec. 76)

Unde $D = (v_F^2 \tau / d)$ este constanta de difuzie. Efectul de localizare slaba este dispere dupa o anumita valoare a L_{Th} numita lungime de taiere. Astfel, cu ajutorul teoriei de scala la $T=0$ si a lungimii de taiere, L_{Th} , se poate descrie un sistem dezordonat la temperatura diferita de zero.

Timpul de imprastiere inelastica creste cu cat temperatura descreste; $\tau_i \propto T^{-p}$ (ec. 77)

unde p este un coeficient ce depinde de mecanismul de imprastiere, de dimensionalitatea sistemului etc.

$$L_{Th} = aT^{-p/2} \quad (\text{ec. 78})$$

Conform ecuatiei 78 efectul dependentii de scala este mai evident la temperature joase.

Introducand L_{Th} in expresia conductivitatii gasim:

$$\sigma_{3D}(T) = \sigma_0 + \frac{e^2}{\hbar\pi^3} \frac{1}{a} T^{p/2} \quad (\text{ec. 79})$$

$$\sigma_{2D}(T) = \sigma_0 + \frac{p}{2} \frac{e^2}{\hbar\pi^2} \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (\text{ec. 80})$$

$$\sigma_{1D}(T) = \sigma_0 - \frac{ae^2}{\hbar\pi} T^{-p/2} \quad (\text{ec. 81})$$

3. Rezultate experimentale si discutii

In vederea transpunerii notiunilor teoretice enuntate mai sus au fost analizate structuri subtiri de oxid de zinc.

Oxidul de zinc a captat atentia cercetatorilor datorita proprietatilor sale fizice. ZnO este un semiconductor extrem de promitator in domeniul optoelectronicii datorita caracteristicilor sale, precum largimea benzii interzise : $E_g \sim 3.3$ eV la $T=300$ K dar si transmitanta straturilor subtiri bde peste 90% in domeniul vizibil. Un semiconductor cu o largime de banda asemanatoare, folosit in producerea LED-urilor ce emit lumina verde, albastru-ultravioleta si alba, este GaN. Energia mare de legatura intre electroni si goluri (~ 60 meV), dar si posibilitatea de a fi crescut, prin metode ieftine si simple, reprezinta avantajele principale pe care ZnO le are fata de GaN.

3.1 Proprietatile fizice ale oxidului de zinc

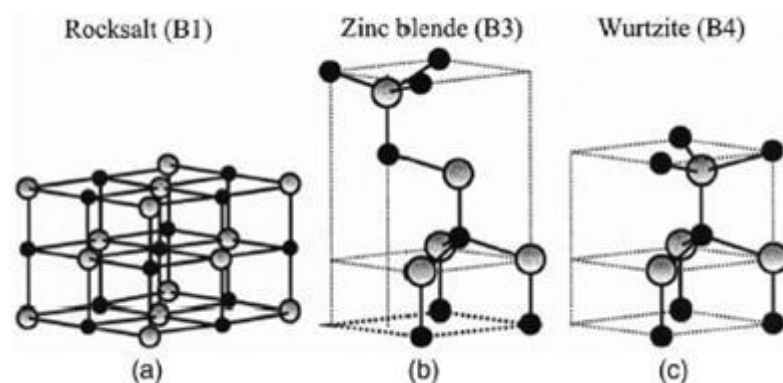
a. Structura

In general, semiconductorii din grupa II-VI cristalizeaza fie in structura blenda de zinc, fie in structura hexagonala, unde fiecare anion este inconjurat de patru cationi asezati in colturile unui tetragon, si vice versa. Acest tip de asezare, tetraedrica, este specifica legaturilor covalente sp^3 insa aceste materiale au si un pronuntat caracter ionic.

ZnO este un semiconductor II-VI al caracter ionic il situeaza chiar la granita dintre semiconductorii covalenti si cei ionici.

Structurile cristaline pe care le poate avea oxidul de zinc sunt:

1. Würtzite (B4);
2. Blenda de zinc (B3);
3. Cubic cu fete centrate (NaCl) (B1)



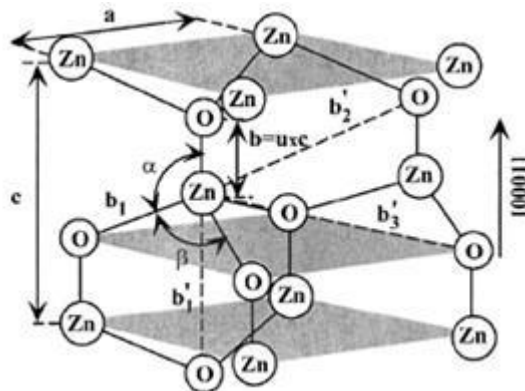
Figură 14. (a) structura cubica NaCl, (b) blenda de zinc, (c) wurtzite (B4); sferele gri reprezinta atomii de Zn, sferele negre reprezinta atomii de oxigen.

La temperatura camerei, faza stabila termodinamic este cea de tip wurtzit. Blenda de zinc poate fi stabilizata doar daca oxidul de zinc este crescut pe un substrat cu structura cubica; structura cubica poate fi obtinuta doar la presiuni mari (zeci de GPa).

In cazul wurtzitului celula unitate este un hexagon cu parametrii de retea, a si c , unde:

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.63.$$

Structura wurtzit apartine grupului C_{6v}^4 sau $P6_3mc$. (fig.3) iar parametrii de retea variaza intre 3.2475Å si 3.2501Å pentru a si intre 5.2042Å si 5.2075Å pentru c .



Figură 15. Reprezentare schematica a unei structuri de ZnO wurtzit.

3.2 Transport in camp electric mic

Masurarea tensiunii Hall este cea mai folosita tehnica pentru investigarea proprietatilor de transport. In acest fel se poate calcula concentratia de purtatori, tipul lor (electroni sau goluri) si valoarea mobilitatii. Altfel spus, masuratorile de efect Hall, intr-un domeniu larg de temperaturi (4-300K), furnizeaza informatii despre impuritati, uniformitatea structurii, mecanismul de imprastiere, etc.

$$R_H = \frac{r_H}{ne}, \mu_H = \frac{R_H}{\rho} \quad (\text{ec. 82})$$

Unde constanta Hall, R_H , si rezistivitatea, ρ , sunt determinate experimental; r_H este factorul de imprastiere Hall care este dependent de mecanismul de imprastiere, n este concentratia de electroni liberi, e este sarcina electrica.

In drumul lor prin sistem, purtatorii de sarcina sufera imprastieri, aceste procese fiind descrise de timpul de relaxare, τ , unde:

$$\mu = \frac{q \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (\text{ec. 83})$$

Unde q este sarcina electronica, m^* este masa efectiva a electronului si $\langle \tau \rangle$ este valoarea medie (peste distributia de energie) a timpului de relaxare. Timpul total de relaxare este dat de expresia lui Matthiessen:

$$\frac{1}{\tau_T} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (\text{ec. 84})$$

Unde τ_i este timpul de relaxare corespunzator fiecarui mecanism de imprastiere.

Principalele mecanisme de imprastiere ce influenteaza transportul electronic in semiconductorii sunt listate mai jos:

1. Imprastiere pe impuritati ionizate – Existenta defectelor sau impuritatilor dopante in material conduce la aparitia unor centrii incarcate electric/ centrii imprastiitori datorita interactiei Coulombiene dintre electronii liberi din sistem si acestia.

Filmele TCO (contacte oxidice transparente) contin o multitudine de defecte punctuale. Aceste defecte sunt in general vacante de oxigen sau atomi metalici in exces (in filme nedopate) sau dopanti externi (filme dopate). In sistemele electronice degenerate, doar electronii din apropierea nivelului Fermi au un rol in conductie. Conform cu formula Conwell-Weisskoff cand purtatorii de sarcina sunt imprastiati pe impuritati ionizate atunci dependenta energiei de mobilitate este:

$$\mu_i = \frac{e}{m^*} \tau_i(E_F) = \left(\frac{2}{m^*} \right)^{1/2} \frac{\varepsilon^{1/2} E_F^{3/2}}{\pi e^3 N_i Z^2} \frac{1}{\ln \left(1 + \frac{\varepsilon E_F}{N_i^{1/3} Z e^2} \right)^2} \quad (\text{ec. 85})$$

unde $\tau_i(E_F)$ este timpul de relaxare, ε este constanta dielectrica, N_i este concentratia centrilor imprastiitori. Cum se poate observa din formula de mai sus mecanismul de imprastiere pe impuritati ionizate conduce la independenta mobilitatii de temperature pentru semiconductori degenerate. In contrast cu cele afirmate anterior, Agnihotry si colabloratorii au estimate theoretic o dependenta a mobilitatii de temperature pentru imprastieri pe impuritati ionizate: $\mu \propto T^{3/2}$ [14]

2. Imprastiere cauzata de interactia electronilor cu un camp electric asociat unei polarizari electrice ce este indusa de vibratia retelei (fononilor). Acest proces este strans legat de natura ionica a legaturilor chimice din semiconductor.

Cu cat temperatura creste cu atat imprastierile pe fononi devin mai importante.

$$\frac{1}{\tau(E_F)} = \frac{e^2 k_{av}^2 m^* k_B T_L}{2\pi\epsilon} \quad (\text{ec. 86})$$

unde T_L este temperatura bii de fononi, iar k_{av}^2 este media coeficientului de cuplaj electro-mecanic.

$$\text{Deci: } \mu \propto \frac{1}{T}$$

Pentru un film TCO degenerat:

$$\rho(T) = \frac{AT^5}{M\Theta_D^6} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (\text{ec. 87})$$

unde A este o constanta caracteristica metalului si Θ_D este temperatura Debye.

La temperaturi ridicate mecanismul de imprastiere dominant pot fi imprastierile pe fononi unde $\rho(T) \propto T$

3. Imprastiere pe defecte – intr-un semiconductor dislocatiile/defectele sunt numeroase. Acestea sunt incarcate pozitiv capturand electronii din banda de conductie (cazul semiconductorilor de tip n). Astfel, in jurul defectelor, se formeaza o regiune incarcata negativ ce imprastie electronii ce traversează defectul, reducand in acest fel mobilitatea.
4. Imprastierea de la interfata graunților cristalni.

Filmul policristalin de ZnO este compus dintr-o multitudine de cristalite cu orientari diferite lipite intre ele. Regiunea de granita dintre cristalite prezinta defecte de retea ce induc stari de captare/trapping pentru electroni. O bariera de potential se formeaza de-a lungul zonei de tranzitie impiedicand trecerea electronilor de la un cristalit la altul.

Acest tip de imprastiere devine semnificativa daca marimea zonei de interfata este comparabila cu marimea cristalitelor sistemului.

Petritz a creat un model in care a determinat cantitativ influenta imprastierii la interfata graunților cristalini asupra mobilitatii:

$$\mu_g = AT^{-1/2} \exp[-(eV_B / kT)] \quad (\text{ec. 88})$$

Unde V_B este potentialul barierei dintre cristalite,

$$A = \frac{el}{(2\pi m^* k)^{1/2}} \quad (\text{ec. 89})$$

Pentru filme de oxid foarte rezistive, mecanismul principal de imprastiere este cel de la interfata cristalitelor, unde, V_B ia valori foarte mari (0,6-1,2 eV).

Pentru semiconductorii degenerati, valoarea V_B este calculata utilizand si expresia urmatoare (statistica Fermi-Dirac se aplica):

$$\mu_g = BT^{-1} \exp\left(-\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (\text{ec. 90})$$

Unde V_a este energia de activare, $V_a = V_B - (E_F - E_c)$ [14]

3.3 Metoda de depunere

Straturile subtiri de oxid de zinc au fost obtinute prin tehnica de depunere cu fascicul pulsant de electroni (PED - Pulsed Electron Beam Deposition).

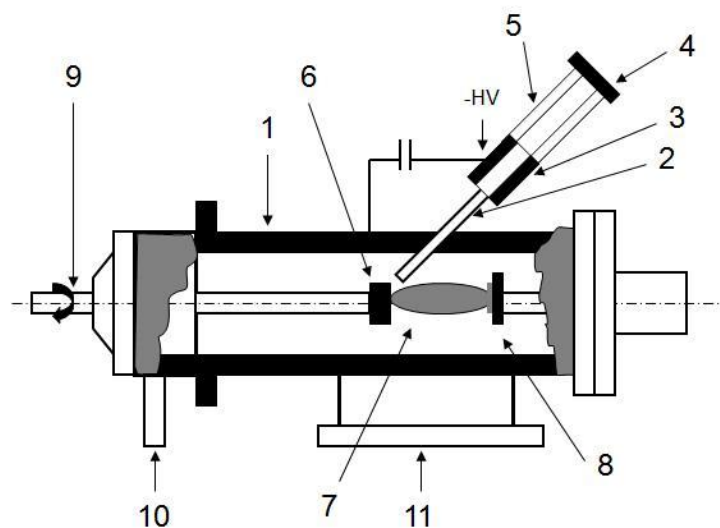
Filme de ZnO pot fi depuse prin mai multe metode : depunere chimica, magnetron, sol-gel, evaporare in vid, sol-gel, etc. Aceste tehnici necesita fie o temperatura ridicata a substratului (300 -500 °C) in timpul depunerii, fie un tratament termic postdepunere la 400-700 °C. Ablatia cu fascicul pulsant (laser ns sau fascicul de electroni) prezinta un numar de avantaje in raport cu tehnicile de depunere mentionate anterior. Filmele subtiri obtinute prin ablatie pot cristaliza la temperaturi ale substratului mai mici datorita energiei cinetice relativ mari (10-100 eV) [3] a speciilor ionizate sau neutre din plasma de ablatie.

Fasciculul pulsant de electroni are o durata de aproximativ 100 ns, un curent de fascicul de electroni de ~ 1000 A si o tensiune de descarcare de ~ 15keV. Distanța de patrundere in tinta a fascicolului de electroni este de unul sau mai multi micrometri, in functie de materialul tinteii. In urma acestei interactiei electroni-tinta, materialul din tinta se evaporaza rapid fiind transformat in plasma, structurile subtiri formandu-se in urma condensarii speciilor din plasma pe substrat [1-3]. Timpul foarte scurt de interactie faciliteaza obtinerea unor filme cu o compozitie stoichiometrica.

In contrast cu tehnicile de depunere conventionale precum evaporarea cu fascicul continuu de electroni, sistemele pulsate (fascicul laser ns sau de electroni) au ca principal avantaj capacitatea de a genera o densitate foarte mare de putere, de aproximativ 10^8W/cm^2 , pe suprafata tinteii. Ca rezultat, procesul de evaporare devine independent de proprietatile termodinamice ale materialului component tinteii, precum punctul de topire si caldura specifica. Acest lucru este in particular avantajos in cazul materialelor stoichiometrie complexa (cu doua sau mai multe componente; ex. YBCO, $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{O}_3$).

Spre deosebire de metoda depunerii cu fascicul laser pulsant (PLD), unde procesul de ablatie depinde critic de coeficientul de absorbtie al materialului din tinta, fiind dificil de ablat materiale cu banda interzisa mare sau transparente la radiatia laser, in cazul metodei de depunere PED, natura interactiei cu tinta este diferita, ablatia depinzand doar de adancimea de patrundere a electronilor in tinta. De asemenea, ablatia cu fascicul pulsant de electroni prezinta un alt avantaj important in raport cu ablatia cu fascicul pulsant laser, lipsa particulelor de ordinul micronilor-zecilor de microni de la suprafata filmelor subtiri chiar in cazul materialelor transparente si conductoare, cu banda interzisa mare [3].

Instalatia de depunere PED este descrisa in figura de mai jos:



Figură 16. Instalatia PED; 1- camera de ablatie ; 2- tub capilar; 3- catod; 4, 5- sistem de electrod auxiliar; 6- tinta; 7- plasma de ablatie; 8- substrat; 9- suportul rotitor al tinte; 10- introducerea gaz de lucru; 11- flansa catre sistemului de vid/pompare

Filmele de ZnO au fost depuse pe substrat transparent de safir (Al_2O_3) monocristalin taiat pe directia c. Temperatura substratului in situ a fost 250 °C, 350 °C, 450 °C si 500 °C. Substratul de Al_2O_3 a fost asezat la aproximativ 4 cm de tinta, paralel cu aceasta. Tinta de ZnO a fost rotita pentru a obtine o erodare uniforma a suprafetei acesteia. Gazul de lucru a fost argon, la o presiune de lucru de 10^{-2} mbar (echivalent cu aprox 10^{-5} presiune in oxigen). Tensiunea de descarcare a fost de 15 kV cu frecventa de repetitie de 1Hz.

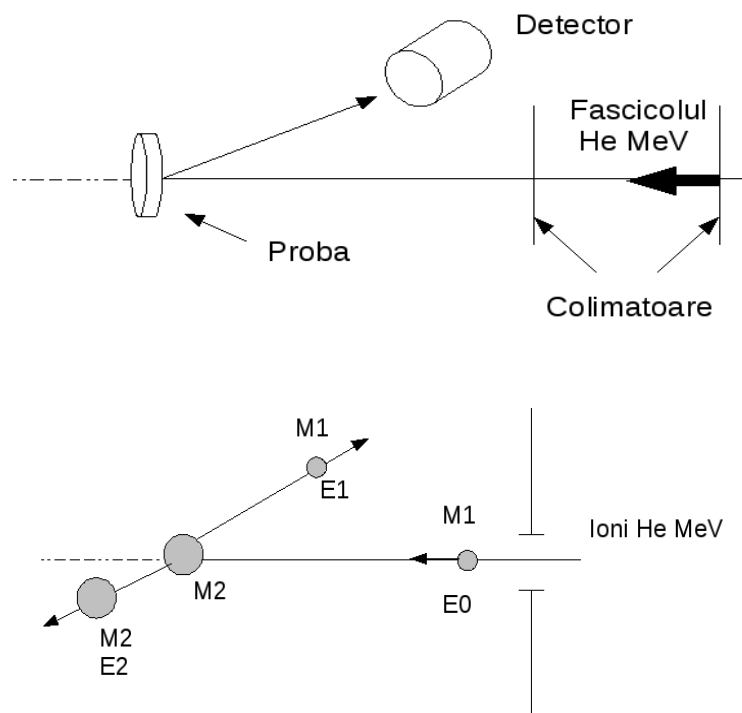
3.4 Metode de investigare

3.4.1. Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS)

Filmele de ZnO obtinute prin depunere cu fascicol pulsant de electroni au fost analizate cu ajutorul unui accelerator 2MeV Van de Graaff de la “*Institut des Nanoscience de Paris (Université Paris 6)*”.

Folosind tehnica RBS am putut obtine informatii despre grosimea, rugozitatea si stoichiometria structurilor depuse cat si despre interfata substrat-film.

Metoda de analiza RBS se bazeaza pe procesul clasic de imprastiere in camp de forte centrale. Investigarea filmelor subtiri se face cu ajutorul unui fascicul de particule monoenergetice (ioni de He cu energii de ordinul MeV) care in urma interactiei (guvernata de repulsia Coulombiana) cu atomii materialului studiat sunt retroimprastiatii si apoi detectati de un sistem ce poate masura energia fiecarei particule retroimprastiate. In procesul de ciocnire, o parte din energia particulei incidente este transferata atomului tinta; fractiunea de energie pierduta depinde de masa atomului tinta; in acest mod se pot indentifica tipul si numarul atomilor din filmul studiat.



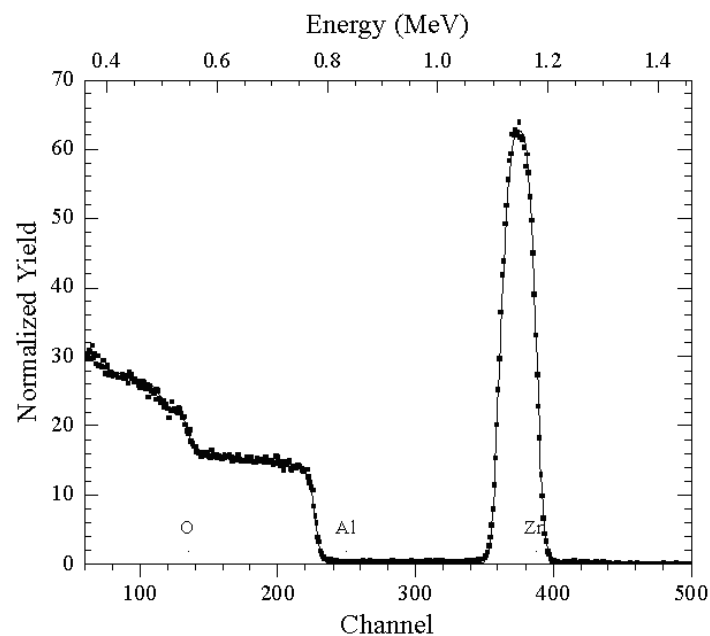
Figură 17. Principiul investigării RBS.

$$\frac{1}{2} M_1 v^2 = \frac{1}{2} M_1 v_1^2 + \frac{1}{2} M_2 v_2^2$$

Posibilitatea de a distinge între atomi cu mase similare depinde doar de rezoluția specifică sistemului de detecție. Detectorii de particule nucleare funcționează prin colectarea perechilor electron-gol create de particulele incidente. Semnalul de la detector este transformat în pulsuri de tensiune. Intensitatea pulsurilor este proporțională cu energia particulelor incidente.

Folosind particule de ^4He cu 2.0 MeV se pot identifica isotopi cu mase de aproximativ 40. Pentru atomi-tintă cu mase apropiate de 200 rezoluția de masă este aproximativ 20 ceea ce înseamnă că această metodă nu poate distinge între ^{181}Ta și ^{201}Hg .

Pentru investigarea structurilor de ZnO s-a folosit un fascicol de ioni de 4He^{++} cu energia de 1.8 MeV și 100 nA. Prelucrarea datelor s-a făcut cu ajutorul unui programului "RUMP".



Figură 18. Spectrul RBS pentru proba ZnO depusă la 350 °C.

În urma analizei spectrului RBS au fost identificate compoziția și grosimea filmelor depuse. S-a observat că toate filmele depuse sunt cvasi-stoichiometrice având grosimea de 110 nm, respectiv 90 nm.

Tabel 1 Rezultatele analizei spectrelor de RBS

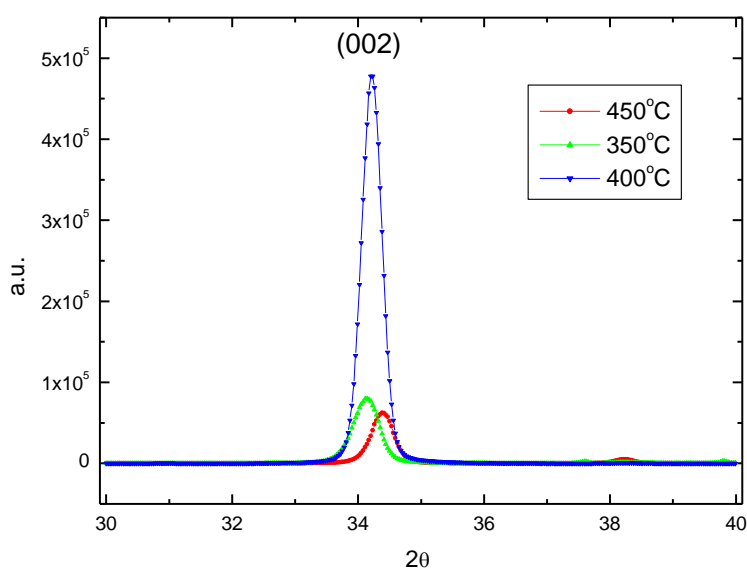
Nr. crt	Temperatura depunere	Material	Grosime
1	250°C	ZnO	110 nm
2	350°C	ZnO	90 nm

3.4.2. Difractie de raze X (XRD)

Pentru filmele de ZnO/safir depuse la la 350 °C, 400 °C, 450 °C si 500 °C s-a facut o analiza Williamson-Hall. Acest tip de plotare a fost introdusa pentru a distinge intre efectele de dimensiune si cele datorate tensiunilor prezente in structura analizata. Largirea picurilor de difractie datorata tensiunii din reseaua cristalina, e , variaza liniar cu $S_0 = \frac{1}{d}$ unde d este distanta interplanara. Largimea picurilor cauzata de lungimea de coerenta cristalina este constanta, fiind egala cu ε^{-1} , unde ε este lungimea de coerenta cristalina pe directia S_0 . Considerand ca profilul liniilor datorate tensiunii in retea si lungimii de coerenta este Lorentzian si ca largimile picurilor sunt exprimate 2θ , atunci:

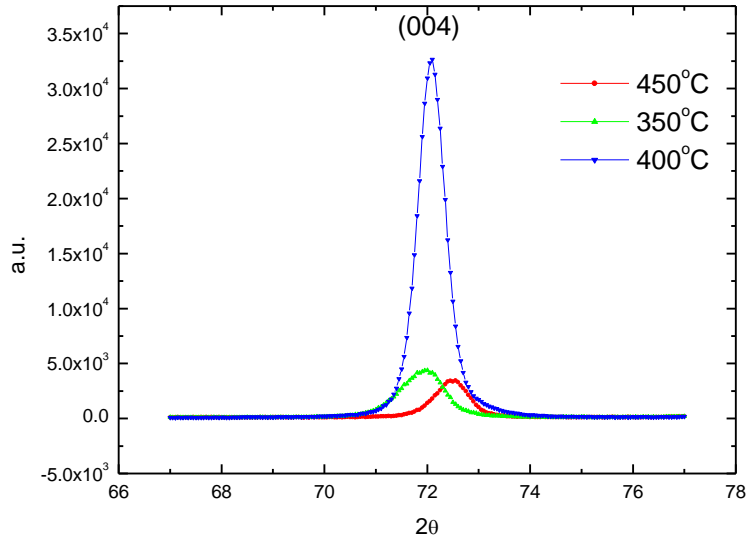
$$\beta \cos(\theta) = \lambda / \varepsilon + 4\sqrt{\pi / 2} e \sin(\theta) \quad (\text{ec. 91})$$

Unde β este largimea intergala corectata de largimea instrumentala iar λ este lungimea de unda pentru Cu-K $_{\alpha 1}$.



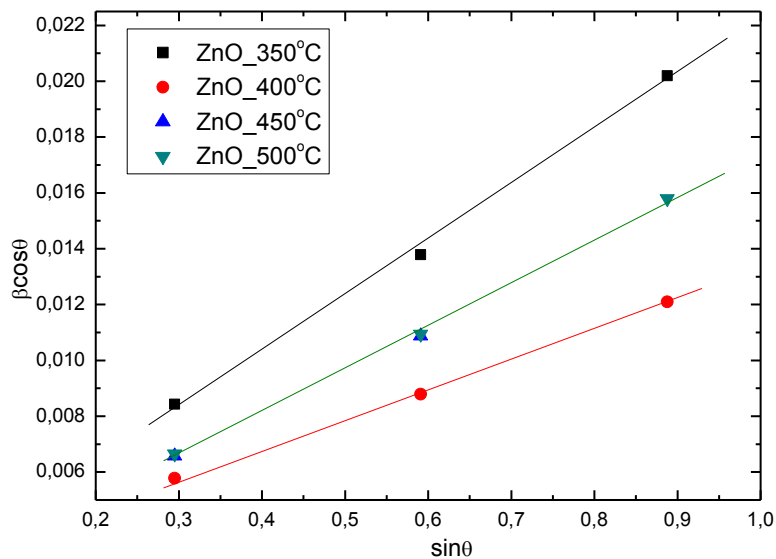
Figură 19. Picul (002) pentru filmele de ZnO depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C.

Picul (002) in cristalul de ZnO masiv apare la 34.422 grade (2theta). La acest unghi este prezent picul (002) al filmului depus la 450 °C. Cum se poate observa din figura 10 picurile (002) corespunzatoare filmelor depuse la 350 °C si 400 °C sunt deviate cu 0.3 grade respectiv 0.2 grade inspre unghiuri mai mici. Acest lucru este datorat tensiunilor din film ce apar in timpul depunerii.



Figură 20. Picul (004) pentru filmele de ZnO depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C.

Acelasi lucru poate fi observat si in cazul picului (004). Acesta apare la 72.56 grade in cristalul oxid de zinc masiv. In acest caz picurile (004) pentru probele obtinute la 350 °C si 400 °C sunt deviate cu 0.6 grade respectiv 0.4 grade spre unghiuri mai mici. Tensiunea din filmele depuse a fost calculata prin metoda Williamson-Hall, valorile acesteia fiind prezentate in tabelul de mai jos.

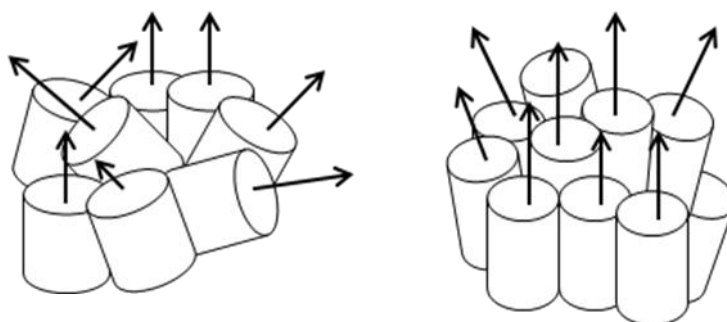


Figură 21. Analiza Williamson-Hall.

Tabel 2 Rezultatele analizei Williamson-Hall

Temperatura de depunere	Lungimea medie de coerența cristalină	Tensiunea
350 °C	642 Å	0.00395
400 °C	597 Å	0.00213
450 °C	770 Å	0.00279
500 °C	774 Å	0.00307

Cum proprietățile filmelor sunt strâns legate de gradul de texturarea lor, este important ca aceasta să fie analizată. În acest scop există mai multe tehnici de investigare cum ar fi „curba rocking” și figurile de pol. Prima metodă nu necesită un echipament foarte sofisticat și este rapidă și ușor de efectuat. În schimb, figurile de pol necesită un echipament sofisticat, un timp de achiziție îndelungat însă furnizează informații complete despre textura materialului studiat. Figura de pol este o proiecție bidimensională a unei sfere ipotetice ce înconjoară cristalul (proiecție stereografică). Figurile de pole sunt reprezentări grafice ale variației intensității fascicului de raze X în funcție de direcțiile din probă.



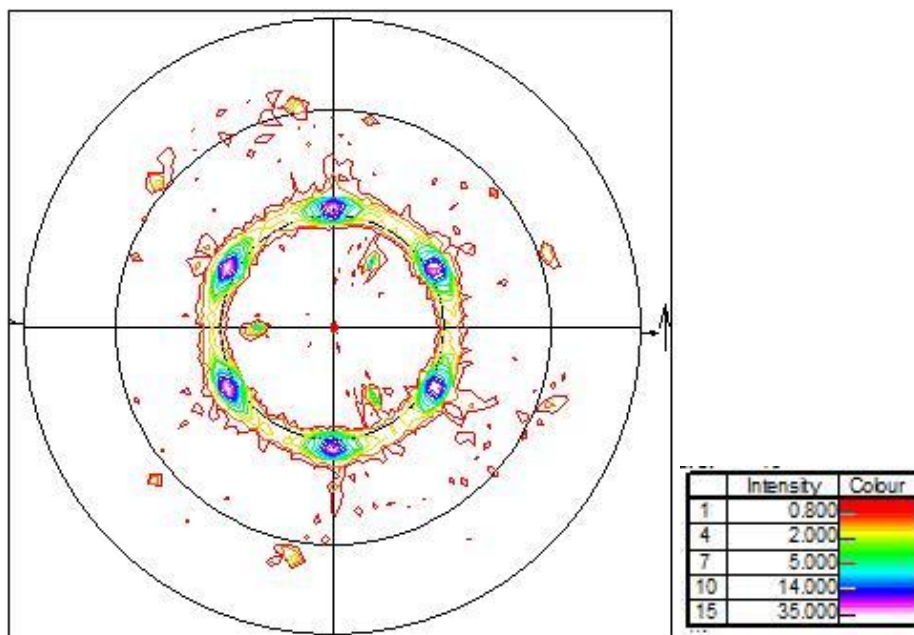
Figură 22. Ilustrare schematică pentru orientarea preferențială. Săgețile indică direcțiile hkl alese.

Unghiul θ este menținut constant, se variază unghiurile ϕ și ψ . Pentru fiecare pas ψ se execută o rotație ϕ de 360 grade.

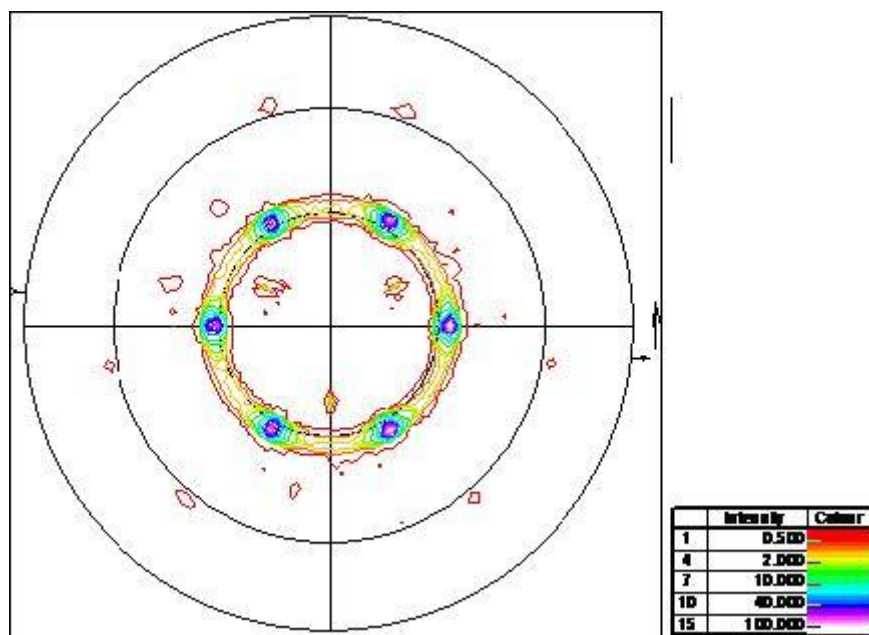
Tabel 3 Parametri de obținere a figurilor de pol

	Psi	Phi
Prima valoare	0	0
Ultima valoare	90	380
Pas	30	90

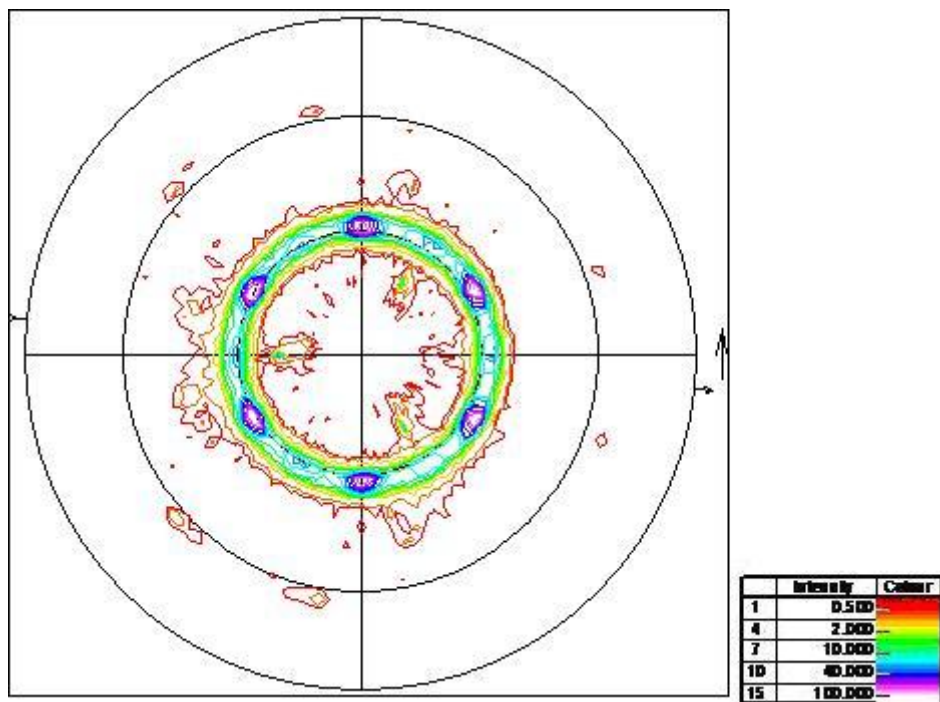
In Fig. 23-26 sunt prezentate figurile de pol ale planului (002), $2\theta=34.42$ pentru filmele de oxid de zinc depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C si 500 °C. Se pot observa sase poli bine definiti corespunzatori stratului subtire de ZnO, iar in centrul figurilor apar trei poli ce corespunzatori planului (101) al substratului de safir.



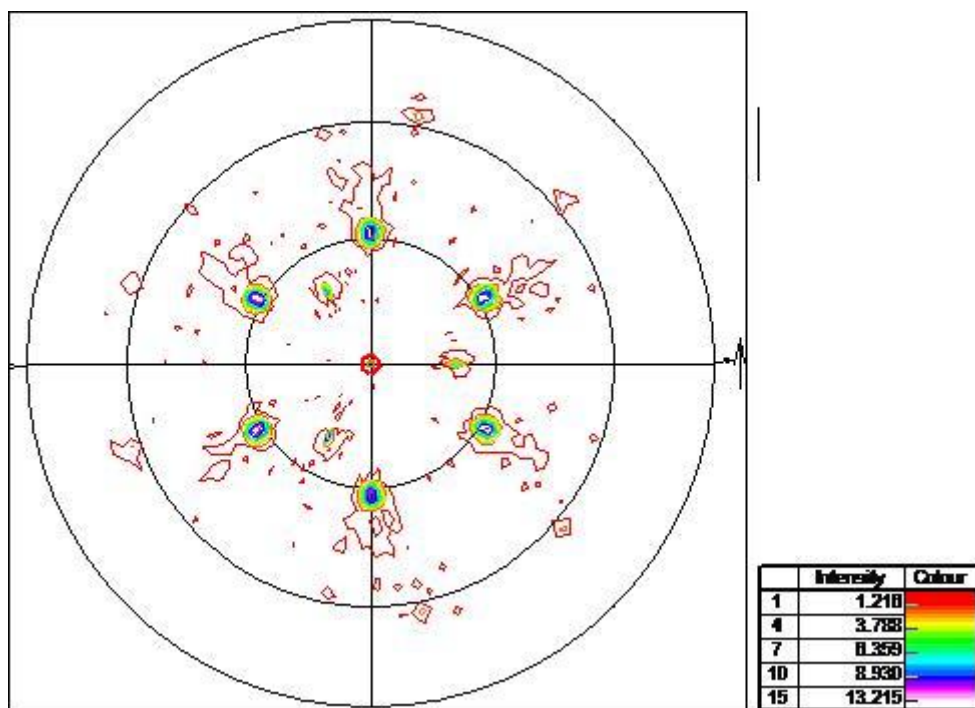
Figură 23. Figura de pol al planului (002) pentru filmul ZnO depus la 350 °C.



Figură 24. Figura de pol al planului (002) pentru filmul ZnO depus la 400 °C.



Figură 25. Figura de pol al planului (002) pentru filmul ZnO depus la 450 °C.

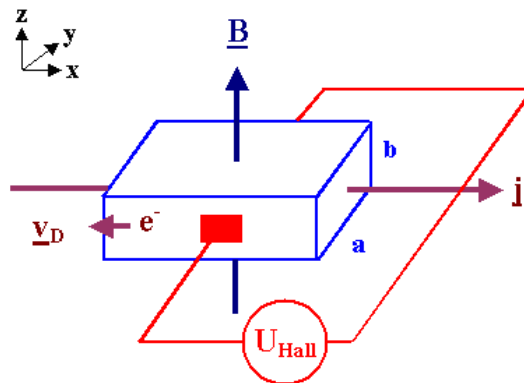


Figură 26. Figura de pol al planului (002) pentru filmul ZnO depus la 500 °C.

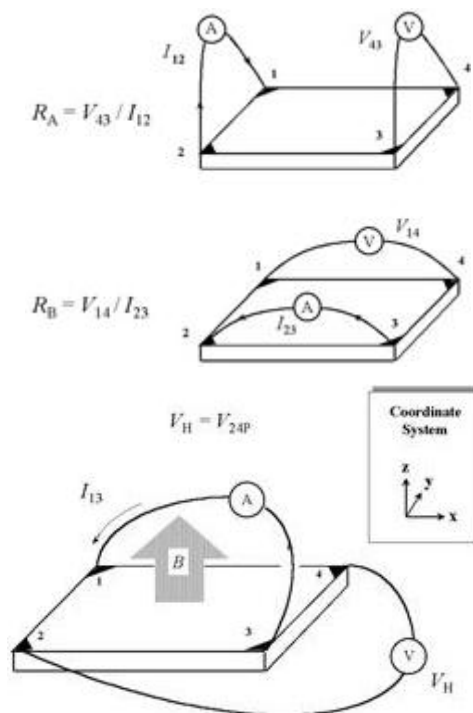
Poli bine definiti indica ca filmele de ZnO depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C si 500 °C prezinta un grad ridicat de cristalinitate fiind epitaxiale.

3.4.3. Masuratori electrice

Structurile subtiri de oxid de zinc au fost analizate si din punct de vedere electric. Au fost inregistrate pentru probele depuse la temperatura camerei, 250 °C, 350 °C si 500 °C spectre de rezistivitate in functie de temperature. De asemenea, au fost efectuate masuratori de effect Hall in urma carora au fost indentificate concentratia de purtatori, tipul acestora si mobilitatea. Domeniul de temperaturi in care s-au facut masuratorile a fost de 4 K – 300 K.

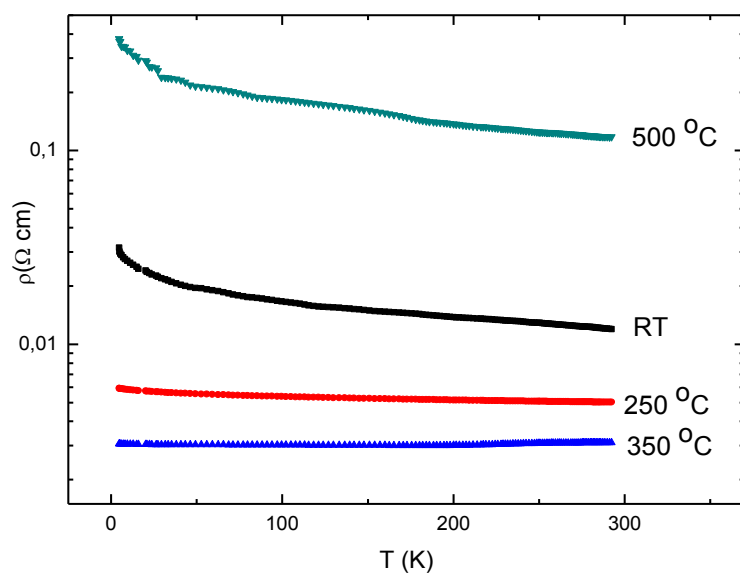


Figură 27 .Efectul Hall.

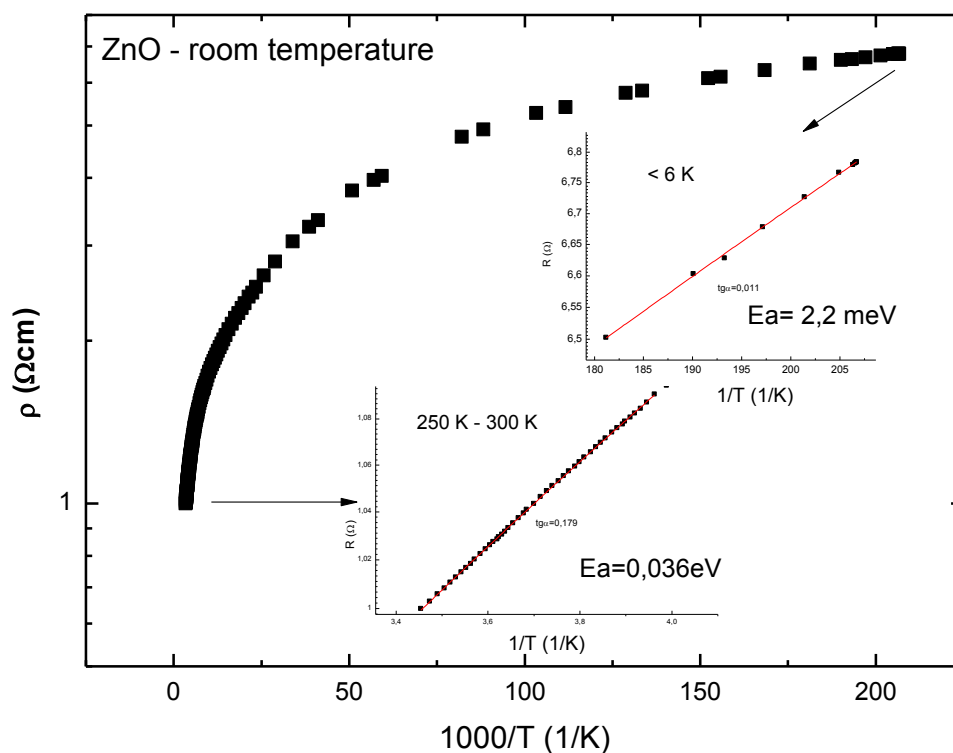


Figură 28. Metoda van der Pauw.

Asa cum poate fi observat din figura de mai jos, filmele depuse la temperatura camerei si la 500 °C au un comportament de tip semiconductor in timp ce probele depuse la 250°C, respective 350 °C au un comportamen de tip metalic.



Figură 29. Spectrele $\rho(T)$ pentru probele ZnO-temperatura camerei, 250°C , 350°C , 500°C .



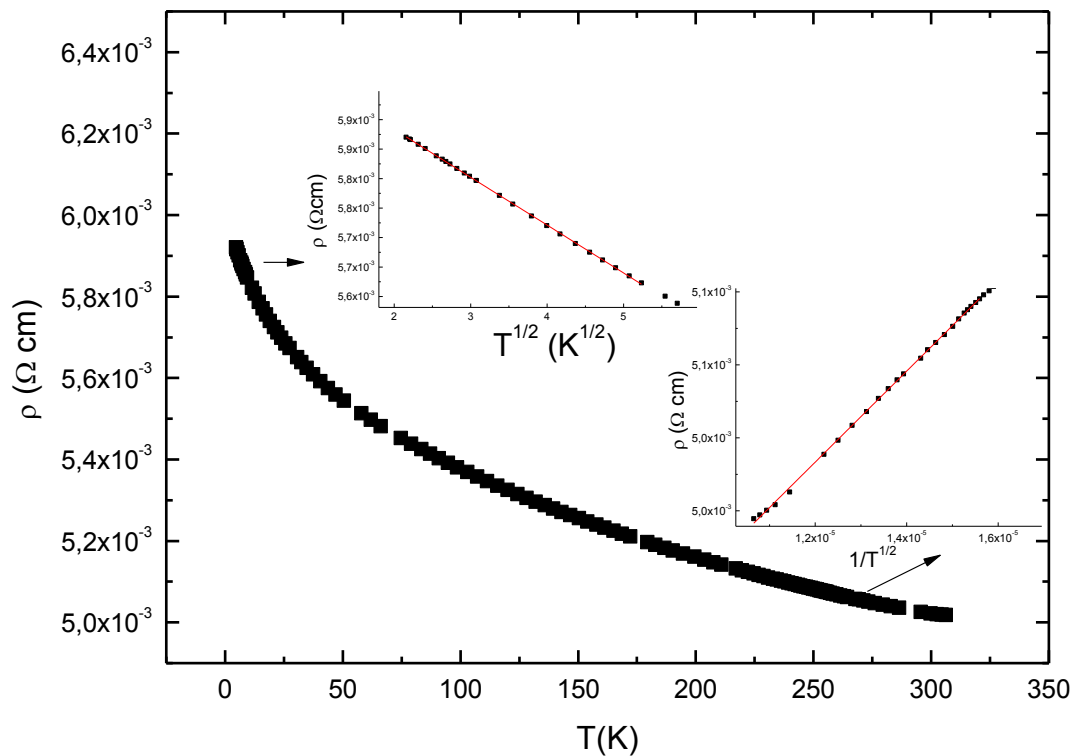
Figură 30. Dependenta resistivitatii de temperatura pentru proba ZnO depusa la temperatura camerei.

Dupa cum se poate observa din spectrul $\rho(T)$ (figura 30), resistivitatea filmului depus la

temperatura camerei este activata termic cu $R = R_0 e^{\frac{E_a}{k_B T}}$. (ec. 92)

La temperaturi mai mici de 20 K transportul este dominat de mecanismul de hopping intre stari ocupate pe stari neocupate cu energii apropiate, energia de activare fiind 2.2 meV. La temperaturi mai mari de 250 K se poate observa ca in aceasta proba exista un singur nivel donor asociat vacantelor de oxigen, energia de activare fiind de 0,036 eV.

In figura 31 este prezentata dependenta rezistivitatii de temperatura pentru proba ZnO depusa la 250 °C. Desi dependenta rezistivitatii de temperatura a filmului depus la 250 °C are un aspect de tip semiconductor, aceasta proba nu prezinta un transport de tip activat avand un comportament de tip metalic. Acesta caracteristica poate fi confirmata si prin dependenta concentratiei numarului de purtatori de temperatura din figura 32. Concentratia de electroni variaza pe un domeniu foarte ingust fiind practic constanta in functie de temperatura.



Figură 31. Dependenta rezistivitatii de temperatura pentru proba ZnO depusa la 250 °C.

Dezordinea sistemului este evidentiata prin valoarea produsului $k_F l = 1.17$.

$$r_s = \frac{E_e}{E_F} = \frac{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r n^{-1/3}}}{\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}} = 0.6 \quad (\text{ec. 93})$$

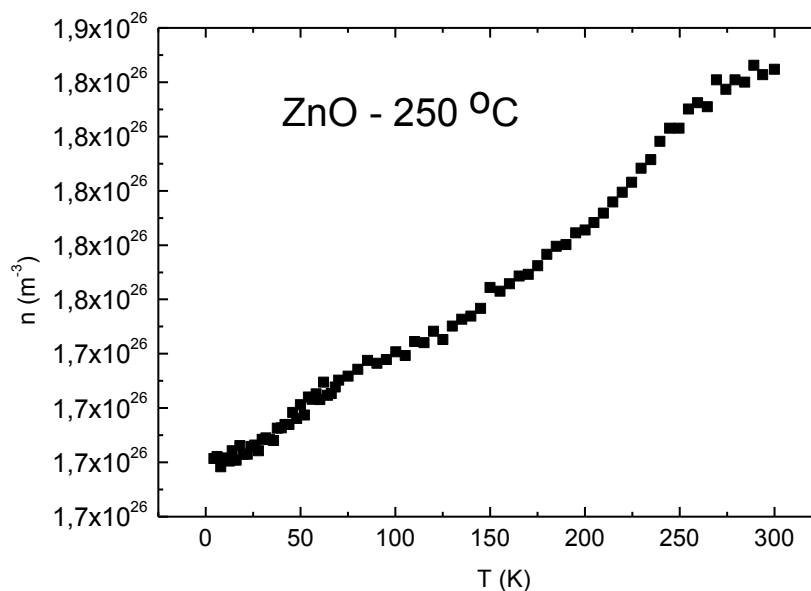
Unde ϵ este constanta dielectrica.

Valoarea raportului dintre energia interactiei electron-electron, E_e , si energia Fermi indica faptul ca interactia electron-electron este importanta in acest sistem, conferindu-i un pronuntat caracter de lichid Fermi.

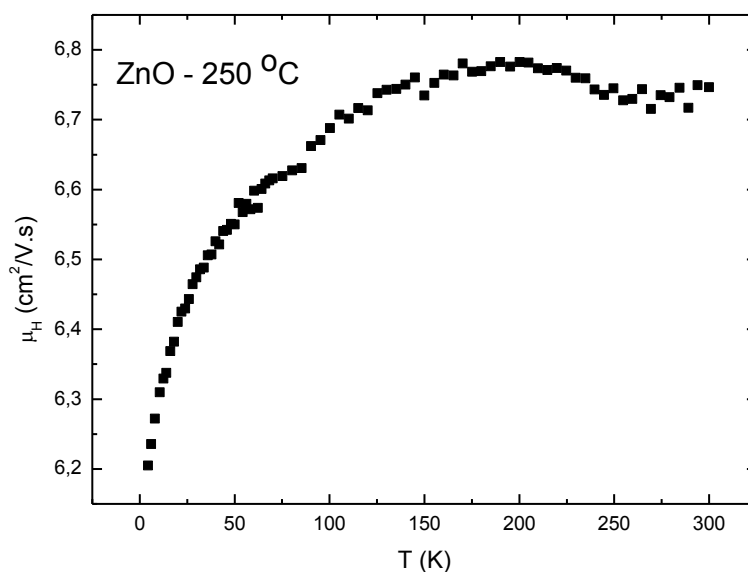
Lichidul Fermi descrie sisteme ce se supun statisticii Fermi in care fiecare electron este inconjurat de un nor de ecranare format din alti electroni, astfel devenind o cvasiparticula cu o masa efectiva m^* .

$$N_m = \frac{3}{4\pi a_B^*{}^3} = 9.2 \cdot 10^{26} m^{-3} \quad (\text{ec. 95})$$

N_m este concentratia de purtatori, estimata de Mott, de la care sistemul trece intr-un comportament metallic. Se poate observa ca acest parametru este de acelasi ordin de marime cu concentratia de electroni masurata experimental.



Figură 32. Concentratia de purtatori de sarcina in functie de temperature; ZnO_250 °C.



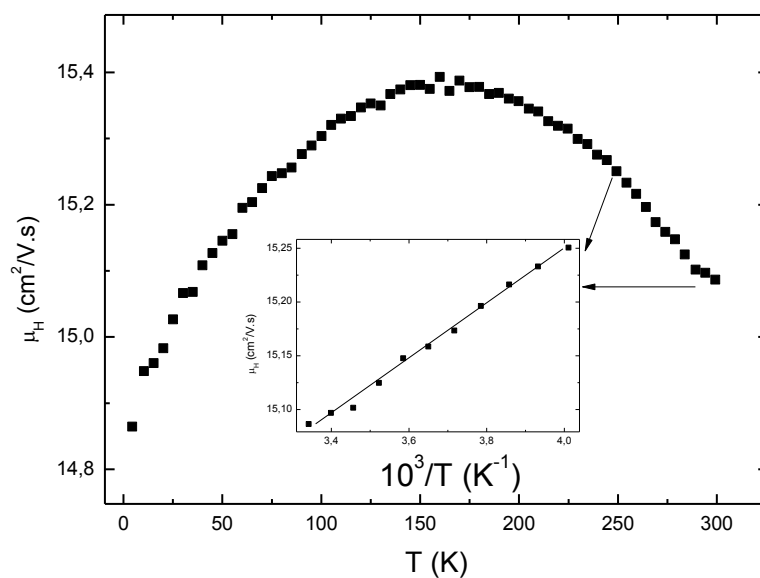
Figură 33. Mobilitatea in functie de temperatura ; ZnO_250 °C.

Mobilitatea in domeniul de temperature 4 K- 300 K are valori cuprinse intre 6.2 – 6.8 cm²/Vs, consecinta a numarului mare de electroni ce participa la conductie. O mare parte din purtatorii de sarcina sunt datorati vacantelor de oxigen prezente in structura filmului.

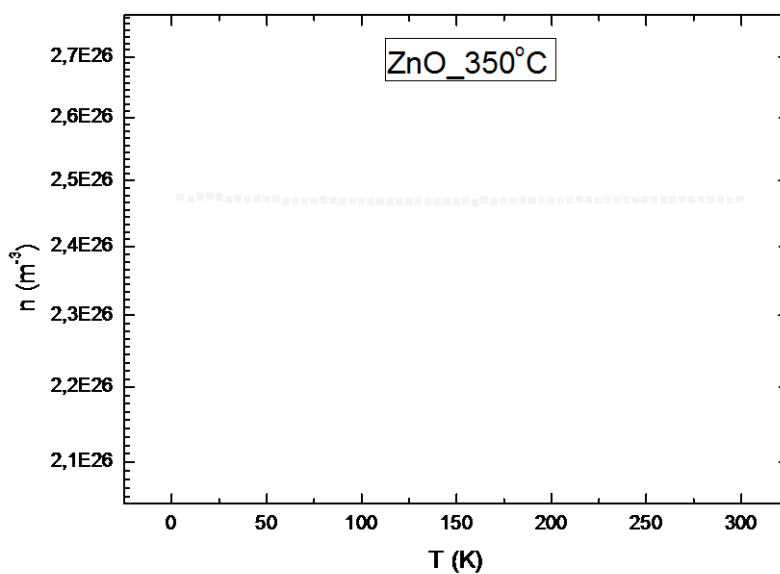
Se poate observa din figura 31 ca filmul de ZnO la temperaturi mai mici decat 10 K

are un comportament de tip $\sigma = \sigma_0 + \left(\frac{e^2}{\pi\hbar}\right) \cdot C \cdot T^{\frac{1}{2}}$ datorat combinatiei dintre interferentele cuantice si interactiile electron-electron in lichide Fermi dezordonate. [4,5,6,7,8,9].

In figura 34 este reprezentata mobilitatea in functie de temperatura pentru filmul de ZnO de la 350 °C. Se poate observa ca la temperature mai mari decat 250 K $\mu \sim 1/T$. Astfel putem afirma ca la temperature mari imprastierea pe fononi acustici este mecanismul de imprastiere dominant.

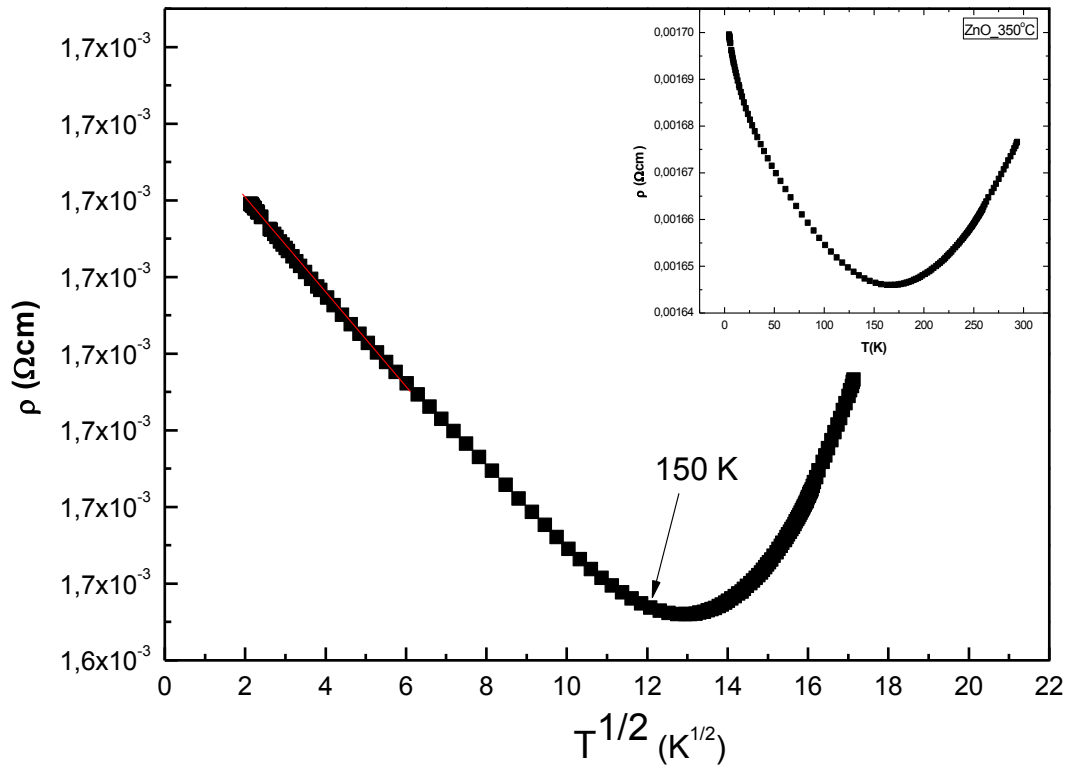


Figură 34. Mobilitate in functie de temperature pentru filmul ZnO depus la 350 °C.



Figură 35. Concentratia de purtatori in functie de temperature pentru filmul de ZnO depus la 350 °C.

Ca și în cazul filmului depus la 250 °C, concentrația de electroni este de același ordin de mărime cu N_m . Dependenta concentrației de electroni de temperatura prezentată în figura 35 poate evidenția un comportament metalic al sistemului.



Figură 36. Dependenta resistivitatii in functie de temperature pentru proba ZnO depusa la 350 °C.

In cazul probei depuse la 350 °C raportul $k_{Fl} = 3.55$ indicand ca acest film este mai putin dezordonat decat cel depus la 250 °C. De asemenea, valoarea parametrului r_s evidentiaza faptul ca si in aceasta structura o foarte mare importanta o au interactiile electron-electron. Acestea pot fi interpretate ca difractia unei unde electronice datorita oscilatiilor potentialului electrostatic generat de ceilalti electroni.

$$r_s = \frac{E_e}{E_F} = \frac{e^2}{\frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r n^{-1/3}}{\hbar^2 k_F^2}} = 0.54 \quad (\text{ec.96})$$

$$N_m = \frac{3}{4\pi a_B^3} = 8.9 \cdot 10^{26} m^{-3} \quad (\text{ec.97})$$

Din figura 36 se poate observa ca pentru temperaturi mai mici decat 150 K dependenta conductivitatii de temperatura respecta urmatoarea forma:

$$\rho \approx T^{1/2} \quad (\text{ec.98})$$

Acest tip de dependenta poate fi asociata mecanismului de imprastiere electron-electron.

4. Concluzii

Rezultatele teoretice si experimentale din ultimul deceniu indica posibilitatea existentei unei tranzitii metal – semiconductor in sisteme electronice q-2D. Ingredientele esentiale unei astfel de tranzitii sunt dezordinea si interactia electron-electron.

Au fost obtinute cu succes filme de oxid de zinc prin metoda de depunere cu fascicul pulsant de electroni.

In urma analizei rezultatelor experimentale obtinute in urma masuratorilor $R(T)$ si efect Hall a fost evidentiata influenta temperaturii de depunere asupra proprietatilor de transport a structurilor studiate. Filmele depuse la temperatura camerei si la 500°C au un caracter de tip semiconductor, in timp ce structurile obtinute la 250°C , respectiv la 350°C au un comportament metalic. La temperaturi joase pentru probele depuse la 250°C si 350°C interactia electron-electron este mecanismul predominant, transportul fiind de tip lichid Fermi metalic.

5. Bibliografie

- [1] G. Müller, M. Konijnenberg, G. Krafft and C. Schultheiss, in: F.C. Matocotta, G. Ottaviani (Eds.), Science and Technology of Thin Films, World Scientific Publ. Co. PET. LTD (1995)
- [2] R.J. Choudhary, S.B. Ogale, S.R. Shinde, V.N. Kulkarni, T. Venkatesan, K.S. Harshavardhan, M. Strikovski and B. Hannoyer, Appl. Phys. Lett. 84 (2004) 1483.
- [3] M. Nistor, N.B. Mandache, J. Perrière, J. Phys. D: Appl. Phys. 41 (2008) 165205.
- [4] Al'tshuler, B.L., Aronov, A.G., Gershenson, M.E. & Sharvin, Yu.V. *Quantum effects in disordered metal films*. Sov. Sci. Rev. A Phys. **9**, 223-354 (1987).
- [5] Lee, P.A. & Ramakrishnan, T.V. *Disordered electron systems*. Rev. Mod. Phys. **57**, 287-337 (1985).
- [6] DiTusa, J.F. et al., *Metal-insulator transitions in the Kondo insulator FeSi and classic semiconductors are similar*. Phys. Rev. Lett. **78**, 2831-2834 (1997).
- [7] DiTusa, J.F. et al., *Heavy fermion metal Kondo insulator transition in FeSi_{1-x}Al_x*. Phys. Rev. B. **58**, 10288-102301 (1998).
- [8] Manyala, N. et al. *Magnetoresistance from quantum interference effects in ferromagnets*. Nature 404, 581-584 (2000).
- [9] Rosenbaum, T.F., et al., *Metal-insulator transition in a doped semiconductor*. Phys. Rev. B. **27**, 7509-7523 (1983).
- [10] B.I. Shklovskii, A.L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo 1984.
- [11] D.J. Thouless, *Electrons in disordered systems and theory of localization*, Physics Reports, Vol. 13, issue 3, pg. 93-142, 1974
- [12] Suprino Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, 1995
- [13] U.Ozgur, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M.A. Reshchikov, S. Dogan, V. Avrutin, S. J. Cho, H. Morkoc, *A comprehensive review of ZnO materials and devices*, Journal of Applied Physics 98, 041301, 2005
- [14] D.H.Zhang, H.L. Ma, *Scattering mechanism of charge carriers in transparent conducting oxide films*, J.Appl. Phys. A 62, 487-492, 1996

Lista Figuri:

Figură 1 a) drumul liber mediu (stari extinse); b) lungimea de localizare (stari localizate).....	8
Figură 2 Modelul Anderson. Gropile de potential.....	8
Figură 3 Distributia desitatii de stari in functie de energie.	10
Figură 4 MOSFET de tip n (Metal-Oxid-Semiconductor-Tranzistor cu efect de camp) in sectiune.....	11
Figură 5 Ilustrarea schematica a pragului de mobilitate, E_c , ce separa starile localizate de cele delocalizate.	12
Figură 6 Functia de scala.....	15
Figură 7 Unda electronului ce trece printr-un mediu dezordonat ce contine centri de imprastiere elastica. Unda unui singur electron din pozitia O este impartita intr-un numar de unde partiale ψ_j , fiecare urmand un drum bine definit, p_j , ajung in pozitia R cu un coeficient de transmisie t_j . Faza ϕ_j cu care electronul ajunge in punctual R depinde de lungimea drumului efectuat ce difera de oricare alt drum.	18
Figură 8 Unda unui electron ce porneste din punctual O si undele sale partiale. Linia continua reprezinta drumul din punctual O in punctual final 7. Linia intrerupta indica drumul ce permite electronului sa se intoarca in pozitia sa initiala, O.	19
Figură 9 Unda plana a unui electron retroimprastiata coerent. A-punctul incident. 1 si 2 imprastieri elastic. In punctual B frontul de unda pleaca in urma imprastierii sub unghiul $-\delta$ fata de fasciculus incident; similar, frontul de unda pleaca sub unghiul $+\delta$ din punctual C.....	20
Figură 10 Tranzistor cu effect de camp.....	21
Figură 11 Schita tranzistor.....	21
Figură 12 Un dispozitiv cu transport coerent poate fi caracterizat cu ajutorul unei matrici de imprastiere.	23
Figură 13 Traiectorie tipica ce contribuie la efectul de localizare slaba permitand electronului sa se intoarca in pozitia sa initiala.....	29
Figură 14 (a) structura cubica NaCl, (b) blenda de zinc, (c) wurtzite (B4); sferile gri reprezinta atomii de Zn, sferile negre reprezinta atomii de oxigen.....	31
Figură 15 Reprezentare schematica a unei structure de ZnO wurtzit.....	32
Figură 16 Instalatia PED; 1- camera de ablatie ; 2- tub capilar; 3- catod; 4, 5- sistem de electrod auxiliar; 6- tinta; 7- plasma de ablatie; 8- substrat; 9- suportul rotitor al tinte; 10- introducerea gaz de lucru; 11- flansa catre sistemului de vid/pompare.....	36
Figură 17 Principiul investigarii RBS.....	37
Figură 18 Spectrul RBS pentru proba ZnO depusa la 350 °C.....	38
Figură 19 Picul (002) pentru filmele de ZnO depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C.....	39
Figură 20 Picul (004) pentru filmele de ZnO depuse la 350 °C, 400 °C, 450 °C.....	40
Figură 21 Analiza Williamson-Hall.....	40
Figură 22 Ilustrare schematica pentru orientarea preferential. Sagetile indica directiile hkl alese.....	41
Figură 24 Figura de pol pentru filmul ZnO depus la 400 °C.....	42
Figură 23 Figura de pol pentru filmul ZnO depus la 350 °C.....	42
Figură 25 Figura de pol pentru filmul ZnO depus la 400 °C.....	43
Figură 26 Figura de pol pentru filmul ZnO depus la 500 °C.....	43
Figură 27 Efectul Hall.....	44
Figură 28 Metoda van der Pauw.....	44
Figură 30 Dependenta resistivitatii de temperatura pentru proba ZnO depusa la temperatura camerei.....	45
Figură 29 Spectrele $\rho(T)$ pentru probele ZnO-temperatura camerei, 250 °C, 350 °C, 500 °C.....	45
Figură 31 Dependenta resistivitatii de temperatura pentru proba ZnO depusa la 250 °C.....	46
Figură 32 Concentratia de purtatori de sarcina in functie de temperature; ZnO_250 °C.....	47
Figură 33 Mobilitatea in functie de temperatura ; ZnO_250 °C.....	48
Figură 34 Mobilitate in functie de temperature pentru filmul ZnO depus la 350 °C.....	49
Figură 35 Concentratia de purtatori in functie de temperature pentru filmul de ZnO depus la 350 °C.....	49
Figură 36 Dependenta resistivitatii in functie de temperature pentru proba ZnO depusa la 350 °C.....	50

Lista Tabele:

Tabel 1 Rezultatele analizei spectrelor de RBS.....	38
Tabel 2 Rezultatele analizei Williamson-Hall.....	41
Tabel 3 Parametri de obtinere a figurilor de pol.....	41