

УДК 541.64:537.3

© 1992 г. А. М. Ельяшевич, А. В. Ляпцев,
Г. П. Мирошниченко, И. Е. Скляр

МОДЕЛЬ ПРОВОДЯЩЕГО КАНАЛА В ТОНКОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКЕ

Рассчитаны ловушечные энергетические уровни электрона в сферической полости в высокозластичной диэлектрической среде. На основе расчета предложена модель проводящего канала в тонкой полимерной пленке. Определены условия существования и возможный размер проводящих каналов.

Высокую локальную проводимость тонких диэлектрических полимерных пленок, заключенных между металлическими электродами [1—4], обычно объясняют с помощью моделей проводящих каналов различной природы, в образовании которых существенную роль играют имеющиеся в пленке неоднородности [1, 2]. Для полярных эластомеров была предложена модель образования в пленке линейных ферромагнитных или кольцевых диамагнитных многоэлектронных структур, обладающих свойствами сверхпроводимости и называемых суперполяронами [5].

Наиболее простым видом неоднородности является микрополость в диэлектрике, представляющая собой для электрона потенциальную яму особой формы. Эта форма определяется электростатическим взаимодействием электрона и диэлектрической среды вне полости. В работе [6] была предложена модель полого канала, соединяющего два электрода, и для идеализированной формы канала (плоской щели в диэлектрической пленке) было показано, что внутри этой щели может существовать «волноводный» уровень энергии, близкий по величине к уровню Ферми металла электрода. В действительности реальная форма канала сложнее и наиболее адекватно может быть представлена изогнутым цилиндром переменного радиуса. Интересен и случай прямого цилиндрического канала постоянного радиуса, но его расчет сложен. В связи с этим в настоящей работе мы ограничимся расчетом спектра в сфере, а переход к каналу рассмотрим качественно.

Пусть электрон находится внутри сферической полости в диэлектрике (рис. 1). Распределение потенциала в данном случае находится из решения уравнения Пуассона $\Delta U = 0$ при условии непрерывности потенциала и нормальной составляющей напряженности поля на границе полости. В результате для потенциала поляризованного диэлектрика в точке нахождения r заряда получим [7]

$$U(r) = \frac{\epsilon_0 - \epsilon_1}{\epsilon_0 a} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r}{a} \right)^{2n} \frac{n+1}{\epsilon_1(n+1) + \epsilon_0 n},$$

где ϵ_0 и ϵ_1 — диэлектрическая проницаемость вакуума и среды соответственно; a — радиус сферической полости.

Этот потенциал можно аппроксимировать выражением

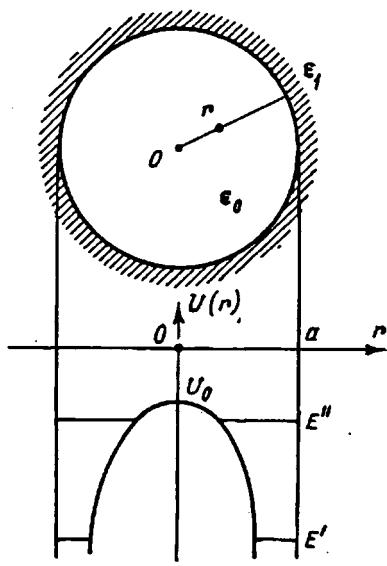


Рис. 1

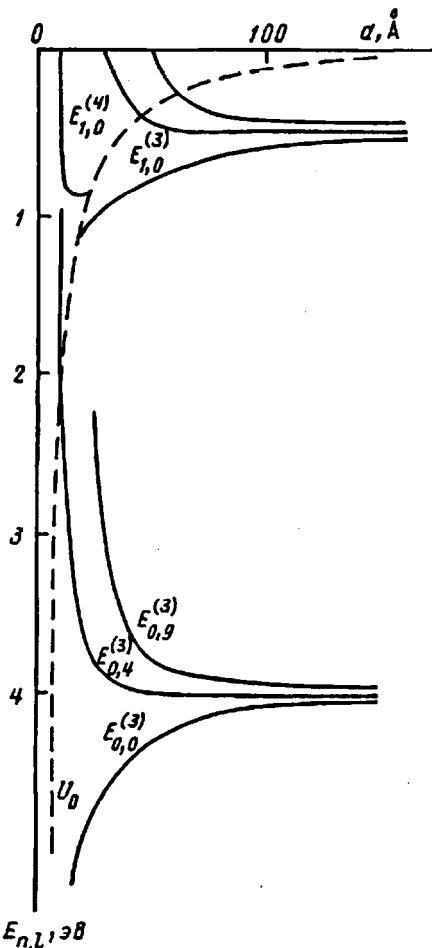


Рис. 2

Рис. 1. Модель ловушки для электрона. $U_0 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} B$ — высота барьера, E' , E'' — квантованные уровни энергии

Рис. 2. Уровни энергии электрона $E_{n,l}$ для $\epsilon = 2.8$. $E_{n,l}^{(3)}$ и $E_{n,l}^{(4)}$ — решения уравнений (3) и (4) соответственно

$$U(r) = B \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} + \frac{1}{1 - (r/a)^2} + \delta \right) \quad (1)$$

Здесь

$$B = \frac{\epsilon_0 - \epsilon_1}{a(\epsilon_0 + \epsilon_1)}$$

$$\delta = \frac{1}{\epsilon_0 + \epsilon_1} \left(-1 - \frac{\ln(-1 - (r/a)^2)}{(r/a)^2} \right)$$

Погрешность аппроксимации составляет не более 5% и уменьшается при увеличении ϵ_1 .

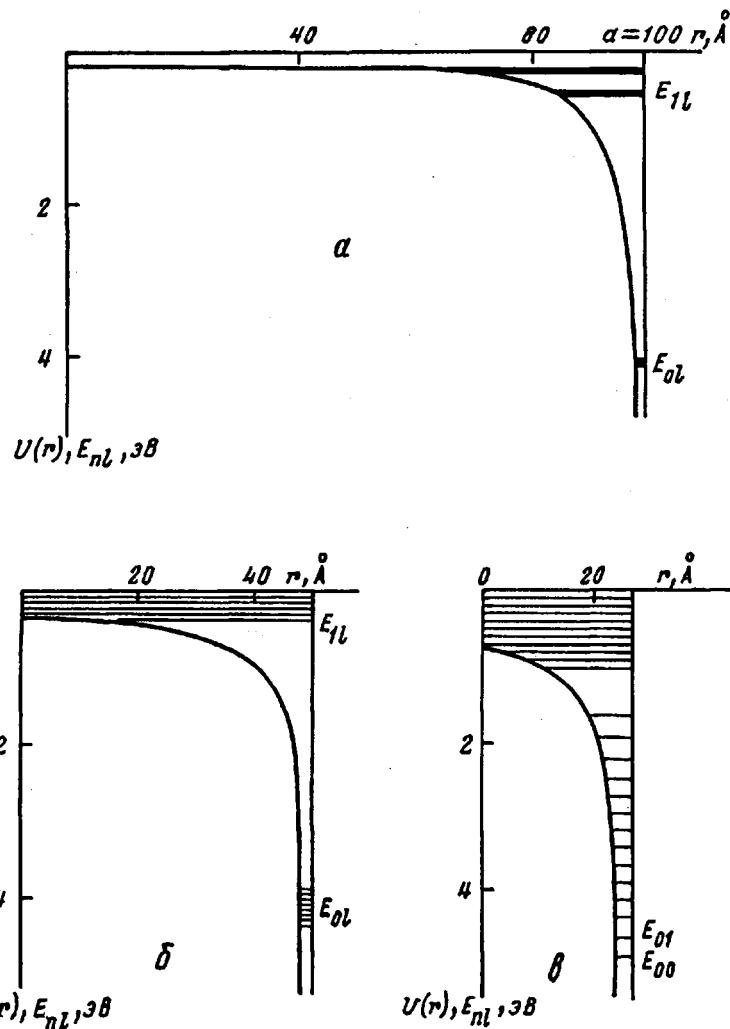


Рис. 3 Характерные виды спектров для $\epsilon = 2,8$. $a = 100$ (а), 50 (б) и 25 \AA (в)

Уровни энергии электрона, находящегося в потенциальной яме формы (1), могут быть получены из решения радиального уравнения Шредингера

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[2(E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad (2)$$

где $R(r)$ — радиальная часть волновой функции; l — азимутальное квантовое число. (Уравнение записано в атомных единицах.)

Подстановкой $\chi = \frac{R(r)}{r}$ уравнение (2) приводится к виду

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + 2(E - U_{eff})\chi = 0$$

$$(U_{eff} = U + \frac{l(l+1)}{2r^2}),$$

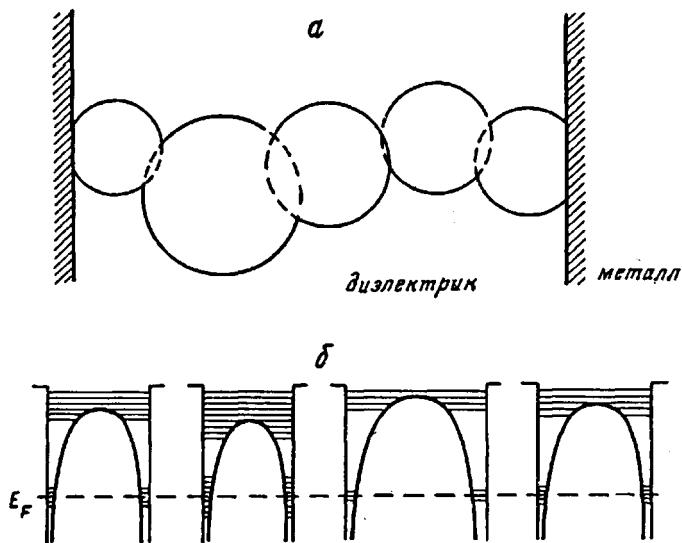


Рис. 4. Конструирование проводящего канала: *а* — модель перекрывающихся сфер; *б* — энергетическая структура ловушек, образующих канал

по форме совпадающему с уравнением Шредингера для одномерного случая. Для его решения используем квазиклассические методы, применимые для размеров полостей, представляющих для нас интерес.

В квазиклассическом приближении условие кваннования для уровней энергии, взятых над барьером, имеет вид

$$I(E) = \int_0^a \sqrt{2(E - U_{eff})} dr = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

где n — радиальное квантовое число.

Для уровней энергии под барьером

$$I(E) = \int_{r_0}^a \sqrt{2(E - U_{eff})} dr = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4)$$

Здесь r_0 — точка поворота, определяемая уравнением

$$U_{eff}(r_0) = 0$$

Решая уравнение (4), находим спектр энергий электрона E_{nl} . Зависимость положений уровней от радиуса сферической полости представлена на рис. 2.

Характерным безразмерным параметром задачи является эффективный боровский радиус электрона, находящегося в вакууме вблизи плоской поверхности диэлектрика [8]

$$r_{eff} = \frac{\epsilon + 1}{\epsilon - 1}$$

Анализ спектров при разных значениях этого параметра (рис. 3) показывает следующее:

- При $a \gg r_{eff}$ ($a \approx 100r_{eff}$) центробежная энергия $\frac{l(l+1)}{2r^2}$ мала в той области ямы, где движется электрон, и энергия уровней не зависит от l , вырождаясь в систему уровней водородоподобного атома с эффективным

зарядом $(e - 1) / (e + 1)$ и совпадая со спектром электрона у плоской границы вакуум — диэлектрик [8].

2. При уменьшении a каждая линия с фиксированным n из спектра водородоподобного атома расщепляется в группу близко расположенных уровней, соответствующих разным значениям l , причем в области значений a от 30 r_{eff} до 100 r_{eff} энергия этих уровней изменяется медленно при изменении a (уменьшение a в 2 раза приводит к повышению уровня $n = 0$, $l = 10$ на 5% при $\epsilon = 2,8$).

3. Дальнейшее уменьшение a до значения 30 r_{eff} вызывает сильное расхождение уровней, относящихся к одному и тому же n . При этом энергии уровней меняются очень быстро при изменении a (изменение a в 2 раза, от значения 15 r_{eff} до 30 r_{eff} , приводит к углублению уровня $n = 0$, $l = 7$ в 5 раз при $\epsilon = 2,8$).

Располагая информацией о спектре энергии электрона внутри отдельной сферической полости, можно сделать качественные заключения о том, какой вид будет иметь волновая функция электрона, если несколько сферических полостей, вероятно, разных диаметров, образуют цепочку, замыкающую электроды (рис. 4, а).

Обычно одномерная неупорядоченная система потенциальных ям дает локализацию волновой функции электрона [9]. Однако если в цепочку соединены сферы с размерами из области значений, указанной в п. 2, т. е. с примерно одинаковыми зоноподобными спектрами, то разрешенные зоны будут совпадать для соседних ям, несмотря на их, возможно, разные диаметры, в результате чего можно получить общую для всего канала зону с делокализованными волновыми функциями (рис. 4, б). Помимо этого наличие полостей облегчает проникновение электронов из металла в диэлектрик, поскольку при соответствующем подборе ϵ и работы выхода металла энергия уровня в полости и энергия Ферми в металле могут оказаться близки. Так, для полимеров со средством к электрону 1,5 — 2 эВ и диэлектрической проницаемостью порядка 8—10 (часто диэлектрическая проницаемость увеличивается в результате обработки полимера, например при окислении [3]), уровень Ферми металлического электрода (~4 эВ) попадает в область первой возбужденной зоны для диаметров сфер 100 — 200 Å. Эта величина не противоречит экспериментальной оценке диаметра канала, полученной в работах [3, 4].

Предложенная модель не объясняет магнитных свойств, обнаруженных для тонких пленок окисленного полипропилена [3], но она показывает, что каналы такой природы могут играть определенную роль в возникновении локальной высокой проводимости в тонких полимерных пленках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hogarth C. A., Iqbal T. // Phys. Stat. Sol. A. 1981. V. 65. № 1. P. 11.
2. Pagnia H., Sotnic N. // Phys. Stat. Sol. A. 1988. V. 108. № 1. P. 11.
3. Григоров Л. Н., Смирнова С. Г. М., 1988. 45 с. — Деп. в ВИНТИ 28.03.88, № 2381.
4. Архангельский В. М., Гук Е. П., Ельяшевич А. М., Ионов А. Н., Тучкович В. М., Шлимак И. С. // Докл. АН СССР. 1989. Т. 309. № 3. С. 634.
5. Grigorov L. N., Andreev V. M., Smirnova S. G. // Makromol. Chem., Macromol. Symp. 1990. V. 37. P. 177.
6. Elyashevich A. M., Kiselev A. A., Lyaptsev A. V., Miroshnichenko G. P. // Phys. Lett. A. 1991. V. 156. № 1/2. P. 111.
7. Смайт В. Электростатика и электродинамика. М., 1954. С. 210.
8. Эдельман В. С. // Успехи физ. наук. 1980. Т. 130. № 4. С. 675.
9. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических материалах. М., 1979.

Институт высокомолекулярных соединений
Российской академии наук,
Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
11.11.91

**A. M. Yel'yashevich, A. V. Lyaptsev, G. P. Miroshnichenko,
I. Ye. Sklyar**

CONDUCTING CHANNEL MODEL IN THE THIN POLYMER FILM

S u m m a r y

The trapping energetic levels of the electron in the spheric hole in hign-elastic dielectrical medium have been calculated. On the base of calculation the conducting channel model for the thin polymer film is proposed. The conditions of existence and possible size of conducting channels are determined.