

PACS numbers: 71.15.Mb, 71.20.-b, 72.10.Bg, 73.22.Dj, 73.23.Ad, 73.63.-b, 85.35.-p

От баллистической проводимости к диффузионной в транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрома

Ю. А. Кругляк

*Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15,
65016 Одесса, Украина*

В рамках транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрома рассмотрено вычисление проводимости резисторов любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом или диффузионном режимах, как вблизи 0 К, так и при более высоких температурах. Обсуждены и поныне широко используемые понятия мобильности, диссипации тепла и падения напряжения в баллистических резисторах.

У межах транспортної моделі Ландауєра–Датти–Лундстрома розглянуто обчислення провідності резисторів будь-якої вимірності, будь-якого масштабу і довільної дисперсії, що працюють у балістичному або дифузійному режимах поблизу 0 К та при більш високих температурах. Також обговорено і донині широко використовувані поняття мобільності, дисипації тепла та спаду напруги в балістичних резисторах.

The Landauer–Datta–Lundstrom transport model is used to calculate conductivity of resistors of any dimension and scale as well as of an arbitrary dispersion, which are working in the ballistic or diffusion regimes near 0 K and at the higher temperatures. Still widely used concepts of mobility, heat dissipation, and the voltage drop in the ballistic resistors are also discussed.

Ключевые слова: наноэлектроника, электропроводность, баллистический режим, диффузионный режим, плотность электронных состояний.

(Получено 17 ноября 2013 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Продолжим изложение модели электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрома (ЛДЛ), начатое в первой части настоящего

обзора [1]. Во второй части рассмотрим электрическую проводимость в модели ЛДЛ. Рассмотрим 1D-, 2D- и 3D-проводники, начиная с очень коротких баллистических резисторов, затем перейдём к обычным резисторам, работающим в диффузионном режиме, и рассмотрим также промежуточные режимы. В 1D-проводнике («нано-провода») длины L электроны могут перемещаться лишь в одном измерении, в 2D-проводнике («нанояма») ширины W — в двух измерениях, в 3D-проводнике с площадью поперечного сечения A все три измерения доступны электронам.

Согласно общепринятой договорённости [2], сопротивление R и его удельное значение ρ для проводников всех трёх размерностей запишем следующим образом (см. (9) в [1] для 3D-проводника):

$$R_{1D} = \rho_{1D} L, \quad \rho_{1D} = \frac{1}{n_L q \mu}, \quad (1)$$

$$R_{2D} = \rho_{2D} \frac{L}{W}, \quad \rho_{2D} = \frac{1}{n_S q \mu}, \quad (2)$$

$$R_{3D} = \rho_{3D} \frac{L}{A}, \quad \rho_{3D} = \frac{1}{n q \mu}, \quad (3)$$

где μ — подвижность электронов, а n_L , n_S и n есть плотность электронов для проводников размерности 1D, 2D и 3D соответственно (см. (42) в [1]), удельное сопротивление которых измеряется в разных единицах в зависимости от размерности проводника. Подобная запись сопротивления для проводников разной размерности физически вполне корректна: во всех случаях сопротивление пропорционально длине проводника, а для 2D- и 3D-проводников ещё и обратно пропорционально, соответственно, ширине W и площади A поперечного сечения проводника, поскольку увеличение W и A физически эквивалентно параллельному соединению проводников. Вместе с тем мы увидим, что уравнения (1)–(3) не всегда корректны: удивительное встречается даже в таких, казалось бы, простых устройствах, какими нам представляются проводники разной размерности.

Уравнение Ландауэра (96) из [1] для проводимости

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (4)$$

послужит нам отправным пунктом; оно справедливо для проводников любой размерности, если только используются корректные выражения для числа мод проводимости $M(E)$ [1].

Рассмотрим 2D-проводник, проводимость которого запишем в виде:

$$G = \frac{1}{\rho_{2D}} \frac{W}{L} = \sigma_s \frac{W}{L}. \quad (5)$$

Мы позже убедимся в том, что у массивных и длинных $2D$ -проводников, работающих в диффузионном режиме, удельная поверхностная проводимость σ_s не зависит от ширины W и длины L проводника. Для коротких же проводников σ_s становится зависящей от длины проводника, а для узких проводников проводимость увеличивается с ростом их ширины ступенчато.

Основное внимание мы уделим $2D$ -проводникам, хотя похожие рассуждения и выкладки могут быть проведены и для $1D$ - и $3D$ -проводников, для которых мы приведём только окончательные результаты. В отношении формулы Ландауэра (4) напомним, что множитель $(-\partial f_0/\partial E)$ происходит из разложения в ряд Тейлора разности электрохимических потенциалов на контактах проводника $f_1 - f_2$ [1] в предположении, что температура обоих контактов одинакова. Термоэлектрические явления в модели ЛДЛ будут рассмотрены отдельно.

2. $2D$ -БАЛЛИСТИЧЕСКИЕ РЕЗИСТОРЫ

У баллистических $2D$ -резисторов коэффициент прохождения $T(E) = 1$, а число мод проводимости в (4) $M(E) = WM_{2D}(E)$ [1], где общие выражения для мод проводимости для любых дисперсионных соотношений даются формулами (63), а для параболических дисперсий — формулами (72)–(74). Рассмотрим подробнее множитель $(-\partial f_0/\partial E)$ в уравнении (4), который получил название «фермиевское окно» проводимости.

На рисунке 1 качественно показан график функции Ферми $f_0(E)$ и функции $(-\partial f_0/\partial E)$ в зависимости от энергии E . Более подробное и количественное обсуждение можно найти в [1].

Мы видим, что функция $(-\partial f_0/\partial E)$ существенна лишь в окрестности $\cong \pm 2kT$ вокруг энергии Ферми E_F . В [1] показано, что площадь под этой кривой равна единице, так что для низких температур фермиевское окно проводимости можно записать через дельта-функцию Кронекера:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx \delta(E - E_F). \quad (6)$$

Используя (6) и $T(E) = 1$, из уравнения Ландауэра (4) получаем выражение для баллистической проводимости

$$G^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} M(E_F), \quad (7)$$

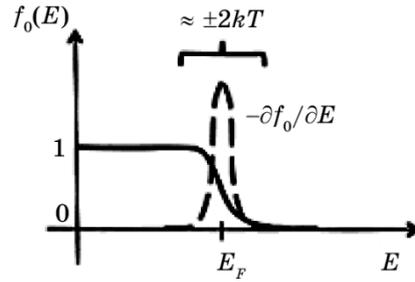


Рис. 1. Фермиевское окно проводимости.

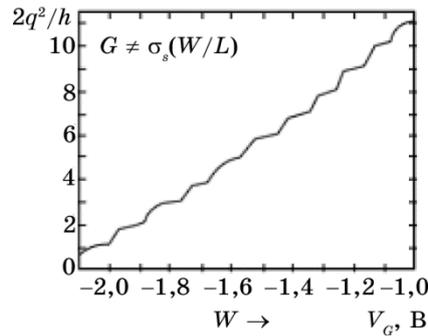


Рис. 2. Квантование проводимости электронного газа в интерфейсе AlGaAs/GaAs [3, 4].

которое является общим и справедливым для резисторов любой размерности.

Если число мод невелико, его можно вычислить из экспериментальных измерений. Тогда проводимость и соответственно сопротивление не может принимать произвольные значения, а квантуется согласно

$$R^{\text{ball}} = \frac{h}{2q^2} \frac{1}{M(E_F)} = \frac{12,9}{M(E_F)} \text{ [кОм]}. \quad (8)$$

Обратим внимание, что сопротивление в баллистическом режиме не зависит от длины проводника, как и ожидалось для режима баллистического транспорта.

Тот факт, что сопротивление квантуется, надёжно установлен экспериментально [3, 4]. В экспериментах ширина резистора W контролировалась электростатически напряжением на затворе V_G . Баллистический режим транспорта обеспечивался низкой температурой. По мере роста ширины резистора проводимость растёт ступенчато (рис. 2) в соответствии с уравнением (7).

Отметим, что ступенчатый характер проводимости в современных экспериментах наблюдается даже при комнатных температурах благодаря выполнению измерений на нанорезисторах.

2.1. Широкие 2D-баллистические резисторы при $T = 0$ К

Ширина W резистора может стать столь значительной, что на ней укладывается большое число дебройлевских полуволн, и число мод [1] измерить экспериментально становится затруднительно. В этом случае, например, для параболической дисперсии из уравнений (64) и (73) в [1] имеем:

$$M(E_F) = WM_{2D}(E_F) = g_v W \frac{\sqrt{2m^*(E_F - E_C)}}{\pi\hbar}. \quad (9)$$

Число мод M_{2D} удобно связать с поверхностной плотностью электронов n_S , которая обычно известна из экспериментов. Все состояния с волновым вектором $k < k_F$ заняты при $T = 0$ К. Для поверхностной плотности имеем:

$$n_S = g_v \frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2} \times 2 = g_v \frac{k_F^2}{2\pi}, \quad (10)$$

где двойка учитывает спиновое вырождение, а g_v — долиное вырождение. Отсюда находим k_F через поверхностную плотность и подставляем в (67) из [1], так что окончательно

$$M_{2D}(E_F) = \sqrt{2g_v \frac{n_S}{\pi}}. \quad (11)$$

Уравнение (11) связывает число мод при энергии, равной энергии Ферми, с поверхностной плотностью электронов 2D-баллистического проводника. Обратим внимание на то, что этот результат не предполагает задание какой-либо конкретной зонной структуры. Важно лишь, чтобы она была изотропной. А вот увязка k_F и E_F уже требует задания конкретной дисперсии. Например, для параболической дисперсии волновой вектор k_F находим из

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = E_F - E_C. \quad (12)$$

2.2. Широкие 2D-баллистические резисторы при $T > 0$ К

Приближение (6) хорошо работает при низких температурах. При комнатных температурах и выше интеграл Ландауэра (4) нужно

добросовестно вычислять. Пользуясь записью фермиевской функции (14) в [1], для баллистической $2D$ -проводимости ($T = 1$) имеем:

$$G_{2D}^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} \int W M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{\exp((E - E_F)/(kT)) + 1} \right) dE. \quad (13)$$

Подобные интегралы часто встречаются в физике полупроводников. Разберёмся в качестве примера с этим интегралом.

Фермиевская функция обладает полезным свойством [1]:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial E} \right) = \left(+\frac{\partial}{\partial E_F} \right), \quad (14)$$

которое позволяет производную в уравнении (13) вынести из-под знака интеграла. Тогда вместо (13) с учётом (64) из [1] получим:

$$G_{2D}^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^*}}{\pi \hbar} \left(\frac{\partial}{\partial E_F} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E - E_C}}{\exp(E - E_F/kT) + 1} dE \right). \quad (15)$$

Далее введём новые переменные:

$$\eta \equiv (E - E_C) / (kT), \quad \eta_F \equiv (E_F - E_C) / (kT), \quad (16)$$

что позволяет интеграл (15) преобразовать к виду

$$G_{2D}^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \eta_F} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\eta}}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta \right). \quad (17)$$

Интегралы этого типа не берутся аналитически. Они часто встречаются в физике полупроводников и получили название интегралов Ферми–Дирака. В нашем случае интеграл (17) пропорционален интегралу

$$\mathfrak{S}_{1/2}(\eta_F) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2}}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta, \quad (18)$$

называемому интегралом Ферми–Дирака порядка одна вторая.

При дифференцировании интеграла Ферми–Дирака по его параметру порядок интеграла понижается на единицу:

$$\frac{d\mathfrak{S}_j(\eta_F)}{d\eta_F} = \mathfrak{S}_{j-1}(\eta_F). \quad (19)$$

Воспользуемся этим свойством и перепишем выражение (17) следующим образом:

$$G_{2D}^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F) = \frac{2q^2}{h} \langle WM_{2D} \rangle, \quad (20)$$

где

$$\langle M \rangle = \langle WM_{2D} \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} WM_{2D}(kT) \mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F), \quad (21)$$

а $WM_{2D}(kT)$ есть $WM_{2D}(E - E_C)$, вычисленное при энергии $E - E_C = kT$. Сравнивая (20) с (7), мы видим, что проводимость $2D$ баллистических резисторов при конечных температурах имеет тот же вид, что и при $T = 0$ К: нужно лишь заменить число мод $M(E_F)$ на $\langle M \rangle$ по (21). Величина $\langle M \rangle$ есть число мод проводимости $2D$ -баллистического резистора при конечных температурах в фермиевском окне проводимости $-\partial f_0 / \partial E$.

При обработке экспериментальных данных для $2D$ -проводников чаще легче определить поверхностную плотность электронов n_S , чем энергию уровня Ферми E_F . Однако они связаны между собой, и зная n_S , можно найти E_F . Для параболической дисперсии эта связь даётся следующим выражением:

$$n_S = \int_0^{\infty} D_{2D}(E) f_0(E) dE = g_v \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \mathfrak{Z}_0(\eta_F) = N_{2D} \mathfrak{Z}_0(\eta_F). \quad (22)$$

Мы рассмотрели только один пример $2D$ -резистора с параболической дисперсией. Аналогичные интегралы Ферми–Дирака разного порядка часто встречаются в задачах о проводниках разной размерности и различной зонной структуры. Полезно рассмотреть интегралы Ферми–Дирака более подробно.

2.3. Интегралы Ферми–Дирака

Интеграл Ферми–Дирака порядка j

$$\mathfrak{Z}_j(\eta_F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{\eta^j}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta, \quad (23)$$

где гамма-функция при целом положительном n

$$\Gamma(n) = (n-1)!; \quad (24)$$

при этом

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p), \quad (25)$$

а

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}. \quad (26)$$

Важным свойством интеграла Ферми–Дирака является понижение его порядка при дифференцировании интеграла по его параметру (19). Например, известно аналитическое выражение для интеграла нулевого порядка [5]:

$$\mathfrak{Z}_0(\eta_F) = \log(1 + e^{\eta_F}). \quad (27)$$

Тогда для интеграла минус первого порядка имеем:

$$\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) = \frac{d\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{d\eta_F} = \frac{1}{e^{-\eta_F} + 1}. \quad (28)$$

Продолжая таким же образом далее, можно получить аналитические полиномиальные выражения для любых целых отрицательных порядков [5–7].

Для невырожденных полупроводников

$$\eta_F = (E_F - E_C) / (kT) \ll 0, \quad (29)$$

в связи с чем для них интегралы Ферми–Дирака любого порядка сводятся к экспонентам:

$$\mathfrak{Z}_j(\eta_F) \rightarrow e^{\eta_F} \quad (\eta_F \ll 0). \quad (30)$$

Роль интегралов Ферми–Дирака в физике полупроводников, производные интегралов, асимптотические и приближенные выражения для них, методы и алгоритмы высокоточных и приближенных методов их расчёта можно найти в [7].

2.4. 2D-диффузионные резисторы

Перейдём от рассмотрения баллистического транспорта с коэффициентом прохождения всегда равным единице, $T(E) = 1$, к диффузионному транспорту с $T(E) = \lambda(E)/L$. Модель ЛДЛ успешно применяется к проводникам любой размерности, однако, мы по-прежнему сосредоточимся на 2D-резисторах, а позже приведём окончательные результаты для 1D- и 3D-резисторов.

Уравнение Ландауэра (4) перепишем с учётом (63) из [1] для 2D-резистора в диффузионном режиме, а именно:

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (31)$$

Появление множителя W/L согласуется с традиционным определением (2) сопротивления $2D$ -проводника. В модели же ЛДЛ пропорциональность проводимости ширине резистора W объясняется тем, что число мод проводимости $2D$ -проводника должно быть пропорционально его ширине, а обратная пропорциональность длине проводника L вызвана диффузионным режимом.

2.5. Широкие $2D$ -диффузионные резисторы при $T = 0$ К

Выражение (31) для низких T существенно упрощается за счёт сужения фермиевского окна проводимости (6), и можно записать

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} M_{2D}(E_F) \lambda(E_F) = \frac{\lambda(E_F)}{L} G_{2D}^{\text{ball}}, \quad (32)$$

где баллистическая проводимость даётся выражением (7). Если определена длина свободного пробега λ , проводимость в диффузионном режиме можно вычислить через её значение в баллистическом режиме.

Мы уже обсудили проводимость отдельно в баллистическом и в диффузионном режимах при низких температурах. Однако можно рассмотреть весь спектр режимов при переходе от баллистического режима к диффузионному. Воспользуемся общим выражением для коэффициента прохождения (86) из [1]

$$T(E) = \lambda(E) \{ \lambda(E) + L \}^{-1}; \quad (33)$$

тогда

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} W M_{2D}(E_F) \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} = \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} G_{2D}^{\text{ball}}, \quad (34)$$

а для сопротивления имеем:

$$R_{2D} = \left(1 + \frac{L}{\lambda(E_F)} \right) R_{2D}^{\text{ball}}. \quad (35)$$

Полученный результат свидетельствует, что при низких температурах сопротивление $2D$ -резистора в диффузионном режиме пропорционально длине проводника, а в баллистическом режиме от длины проводника не зависит.

2.6. Широкие $2D$ -диффузионные резисторы при $T > 0$ К

При конечных температурах интеграл (31) нужно вычислять. По-

ступим следующим образом. Умножая и деля его на

$$\langle M_{2D} \rangle \equiv \int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (36)$$

переписываем (31) следующим образом:

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \langle WM_{2D} \rangle \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} = \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} G_{2D}^{\text{ball}}, \quad (37)$$

где $\langle WM_{2D} \rangle$ даётся выражением (21), а усреднённое значение длины свободного пробега определяется как

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{\int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} = \frac{\langle M\lambda \rangle}{\langle M \rangle}. \quad (38)$$

Уравнение (37) по форме такое же, как и уравнение (32). При низких температурах мы заменяем $\langle M \rangle$ на $M(E_F)$, а $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ — на $\lambda(E_F)$. Одиночные и двойные угловые скобки указывают лишь на то, как производится усреднение.

Чтобы реально оценить усреднённое значение средней длины свободного пробега, нужно задаться дисперсионным соотношением и выражением для $\lambda(E)$. В случае обычных и наиболее распространённых механизмов рассеяния простейший путь записать выражение для $\lambda(E)$ — это воспользоваться степенным законом в форме [8]

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r, \quad (39)$$

где значение показателя степени r определяется выбором того или иного механизма рассеяния, а константа λ_0 в типичных случаях ещё и температурно-зависимая. Например, при рассеянии электронов на акустических фононах в 3D-проводнике $r = 0$, а на заряженных примесях $r = 2$.

Оба интеграла в (38) выражаются через интегралы Ферми–Дирака следующим образом:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0 \left(\frac{\Gamma\left(r + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \right) \left(\frac{\mathfrak{F}_{r-1/2}(\eta_F)}{\mathfrak{F}_{-1/2}(\eta_F)} \right). \quad (40)$$

Если $r = 0$, средняя длина свободного пробега не зависит от энер-

гии, и $\langle\langle\lambda\rangle\rangle = \lambda_0$.

Не будем рассматривать весь спектр перехода от баллистического режима к диффузионному; это вывело бы нас далеко за пределы выбранной темы обзора. Заметим лишь, что при независимой от энергии средней длине свободного пробега сопротивление резистора

$$R = \left(1 + \frac{L}{\lambda_0}\right) R^{\text{ball}}, \quad (41)$$

что очень похоже на уже известный результат (35).

Далее мы обсудим с позиций транспортной модели ЛДЛ некоторые общие вопросы электронного транспорта, такие как понятие мобильности носителей тока, способы записи выражений для поверхностной $2D$ -проводимости, диссипацию мощности и падение напряжения в баллистическом резисторе. Приведём, наконец, сводку основных результатов для $1D$ - и $3D$ -проводников.

3. О ПОНЯТИИ МОБИЛЬНОСТИ

Традиционно обсуждение сопротивления проводников начинается с определений (1)–(3), которые, однако, не применимы к проводникам, работающим в баллистическом или квазibalлистическом режимах. В этих режимах не совсем ясно, как оценить мобильность носителей тока. Транспортная модель ЛДЛ начинается с уравнения Ландауэра (4) и пригодна для любых транспортных режимов, от баллистического до диффузионного и во всем спектре режимов между ними. В рамках модели ЛДЛ вообще нет нужды обращаться к понятию мобильности. Вместе с тем, понятие мобильности и поныне широко используется, несмотря на то, что в отдельных случаях оно приводит к недоразумениям. Так, уравнения (1)–(3) утверждают, что проводимость пропорциональна произведению плотности неких электронов и мобильности. Тогда как согласно уравнению Ландауэра (4) проводимость обеспечивается только теми электронами, энергия которых попадает в фермиевское окно проводимости $(-\partial f_0/\partial E)$. Для полупроводников n -типа это могут быть все электроны в зоне проводимости (невыврожденные полупроводники), а может быть только малая их доля (выврожденные полупроводники). Поскольку понятие мобильности и поныне широко используется, следует обсудить его в рамках концепции ЛДЛ.

Лучше всего опять начать с уравнения Ландауэра (4) и приравнять его проводимости $2D$ -проводника по уравнению (2), а именно:

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE \equiv n_s q \mu \frac{W}{L}, \quad (42)$$

откуда кажущаяся мобильность для $2D$ -резистора

$$\mu_{2D}^{\text{app}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int T(E) L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (43)$$

берётся нами за определение мобильности, в отличие от определения мобильности по модели Друде [9]

$$\mu = q\tau/m^*, \quad (44)$$

где τ — среднее время рассеяния, иначе, время импульсной релаксации. Мы называем мобильность по (43) кажущейся, поскольку определение (43) пригодно как для баллистической мобильности, так и для диффузионной. Например, положив время прохождения $T(E) = 1$, для баллистической мобильности имеем:

$$\mu_{2D}^{\text{ball}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE; \quad (45)$$

аналогично, выбрав $T(E) = \lambda(E)/L$, получим выражение для диффузионной мобильности:

$$\mu_{2D}^{\text{diff}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (46)$$

Концепция баллистической мобильности была введена в обращение Шуром [10] и оказалась полезной при анализе различных устройств [11]. Сравнивая выражения (45) и (46), видим, что диффузионная мобильность отличается от баллистической только заменой средней длины свободного пробега на длину баллистического резистора. Эта замена выглядит вполне физически приемлемой. Вспомним, что в контактах равновесие быстро достигается за счёт интенсивных процессов рассеяния. Электрон, инжектированный в баллистический канал истоком, участвовал в рассеянии в контакте с истоком, а затем следующий раз участвовал в рассеянии лишь в контакте со стоком. Расстояние между этими двумя событиями есть как раз длина баллистического резистора, которая и играет роль средней длины свободного пробега в диффузионном канале.

Проблемы в нанoeлектронике возникают в области промежуточной между баллистическим и диффузионным предельными режимами. В этой области коэффициент прохождения определяется выражением (33), и можно показать [11], что для кажущейся мобильности имеет место следующее соотношение

$$\frac{1}{\mu^{\text{app}}} = \frac{1}{\mu^{\text{diff}}} + \frac{1}{\mu^{\text{ball}}}, \quad (47)$$

которое выглядит как традиционное правило Матиссена [8, 12]. По-другому в этой переходной области можно поступить, если в (46) среднюю длину свободного пробега заменить на её кажущееся значение, а именно:

$$\frac{1}{\lambda^{\text{app}}} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{L}. \quad (48)$$

Кажущуюся длину свободного пробега можно интерпретировать либо как реальную среднюю длину свободного пробега в условиях диффузионного режима, либо как длину резистора в зависимости от того, какая из этих длин меньше.

Предполагая параболическую зонную структуру, мобильность даже в самом общем случае можно выразить через интегралы Ферми–Дирака. Для примера рассмотрим более простой случай, когда $T = 0$ К. Плотность электронов в зоне проводимости

$$n_S = g_v \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_C) = D_{2D} (E_F - E_C), \quad (49)$$

а также из формулы (63) работы [1] следует, что

$$M_{2D} = \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+ \rangle D_{2D}, \quad (50)$$

где скорость

$$\langle v_x^+ \rangle = \frac{2}{\pi} v_F \quad (51)$$

выражается через фермиевскую скорость v_F .

Используя (45) и (46) вместе с (49) и (50), находим, что

$$\mu_{2D}^{\text{ball}} = \frac{\bar{D}_{2D}^{\text{ball}}}{(E_F - E_C) / q}, \quad (52)$$

$$\mu_{2D}^{\text{diff}} = \frac{\bar{D}_{2D}^{\text{diff}}}{(E_F - E_C) / q}, \quad (53)$$

где коэффициенты диффузии даются выражениями:

$$\bar{D}_{2D}^{\text{ball}} = \langle v_x^+ \rangle \frac{L}{2}, \quad (54)$$

$$\bar{D}_{2D}^{\text{diff}} = \langle v_x^+ \rangle \frac{\lambda(E_F)}{2}. \quad (55)$$

Уравнения (52) и (53) напоминают соотношение Эйнштейна меж-

ду мобильностью и коэффициентом диффузии (105) из [1] с разностью $E_F - E_C$, играющей роль kT , поскольку с самого начала предполагалось, что $T = 0$ К.

Уравнение (55) даёт привычное определение коэффициента диффузии, а вот (54) вводит новое понятие «баллистического коэффициента диффузии».

4. СПОСОБЫ ЗАПИСИ 2D-ПРОВОДИМОСТИ

Согласно уравнению (32), удельная диффузионная проводимость, иначе поверхностная проводимость, при $T = 0$ К даётся выражением

$$\sigma_S = \frac{2q^2}{h} M_{2D}(E_F) \lambda(E_F). \quad (56)$$

Выражения для поверхностной проводимости встречаются в различных формах записи. Полезно рассмотреть наиболее часто встречающиеся.

Нам уже известно выражение $M_{2D}(E)$ из (63) в [1], а именно:

$$M_{2D}(E) = \frac{h}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (57)$$

где для средней скорости, в случае параболической дисперсии и изотропии скорости, имеем уравнение (60) из [1], а именно:

$$\langle v_x^+ \rangle = \frac{2}{\pi} v. \quad (58)$$

Позже при рассмотрении общих вопросов рассеяния при электронном транспорте для средней длины свободного пробега в (56) мы получим

$$\lambda(E) = \frac{\pi}{2} v(E) \tau(E), \quad (59)$$

где τ есть время импульсной релаксации, иначе, время между двумя соседними актами рассеяния. Используя (58) и (59), для поверхностной проводимости (56) получаем типичное выражение:

$$\sigma_S = q^2 D_{2D}(E_F) \frac{v^2(E_F) \tau(E_F)}{2}. \quad (60)$$

Определяя электронный коэффициент диффузии

$$\bar{D}(E_F) = \frac{v^2(E_F) \tau(E_F)}{2}, \quad (61)$$

переписываем (60) в более привычном виде:

$$\sigma_S = q^2 D_{2D}(E_F) \bar{D}(E_F). \quad (62)$$

Приведём ещё один способ записи поверхностной проводимости. Для параболической дисперсии

$$\frac{1}{2} m^* v^2(E_F) = E_F - E_C. \quad (63)$$

Используя это выражение и (49), переписываем (60) в виде

$$\sigma_S = n_S q \mu, \quad (64)$$

где мобильность

$$\mu = \frac{q \tau(E_F)}{m^*}. \quad (65)$$

Уравнение (65) хорошо известно, но его нельзя назвать удачным в качестве базового уравнения для анализа работы электронного устройства в целом. Типичным примером может служить ситуация, когда не работает предположение о параболической зонной структуре, порождающее понятие эффективной массы носителя тока.

Подведём итоги.

Получены четыре разных способа записи удельной $2D$ -проводимости при $T = 0$ К. Это уравнения (56), (60), (62) и пара уравнений (64)–(65). Все уравнения эквивалентны, но обладают они разными возможностями. Уравнение (56) увязывает удельную проводимость с числом мод проводимости. По уравнениям (60) и (62) нужно знать плотность состояний резистора и скорость или коэффициент диффузии при энергии, равной фермиевскому значению. Уравнение (64) связывает удельную проводимость с поверхностной плотностью электронов. Конечно, роль фермиевского окна проводимости $(-\partial f_0 / \partial E)$ остаётся прежней: проводимость обеспечивают лишь те электроны, энергия которых попадает в окно $\cong \pm 2kT$, охватывающее фермиевскую энергию E_F .

При конечных температурах вместо уравнения (56) имеем:

$$\sigma_S = \frac{2q^2}{h} \int M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (66)$$

Удобно ввести удельную поверхностную проводимость в дифференциальной форме $\sigma'_S(E)$, а именно,

$$\sigma_S = \int \sigma'_S(E) dE, \quad (67)$$

где

$$\sigma'_S(E) = \frac{2q^2}{h} M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (68)$$

Полную проводимость (67) получаем суммированием проводимостей по всем модам резистора. Уравнение (68) при конечных температурах можно записать по-разному так же, как это было показано выше для $T = 0$ К.

5. ДИССИПАЦИЯ МОЩНОСТИ В БАЛЛИСТИЧЕСКИХ РЕЗИСТОРАХ

Любой проводник, на который подано напряжение V , диссипирует мощность $P = VI = V^2/R$. Мощность обычно диссипирует в результате электрон-фононного взаимодействия, энергия которого передаётся решётке проводника, и проводник греется. В баллистических резисторах перенос электронов происходит без рассеяния, однако, диссипация мощности по-прежнему равна V^2/R . Где же эта мощность диссипирует? Поскольку диссипация мощности не может происходить в канале проводимости, то есть единственный ответ — на контактах, где происходят интенсивные процессы рассеяния, направленные на быстрое восстановление равновесных значений электрохимических потенциалов.

Диссипация мощности в баллистическом резисторе иллюстрируется на рис. 3.

Ток возникает в фермиевском окне, созданном разностью фермиевских функций $f_1 - f_2$, отличной от нуля, и, следовательно, разностью электрохимических потенциалов $E_{F1} - E_{F2} = qV$. Как схематически показано на рис. 3, когда электрон покидает контакт 1, образуются незаполненные состояния в спектре контакта 1 («дырка»).

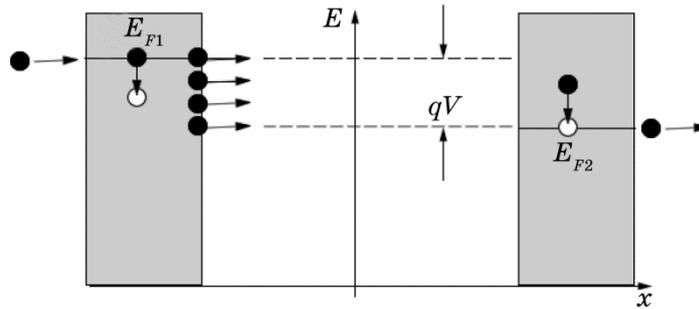


Рис. 3. Диссипация мощности в баллистическом канале происходит на контактах.

Достигнув баллистически контакта 2 с избытком энергии, по сравнению с химпотенциалом E_{F2} («горячий электрон»), он теряет этот избыток в результате неупругого рассеяния на контакте 2. При равноправии контактов потеря энергии на контакте 2 составит $qV/2$, так что половина мощности диссипирует на контакте 2. Зарядовая нейтральность контакта 2 восстанавливается после того, как электрон покинет контакт 2 и по внешней цепи достигнет контакта 1. Электрон входит в контакт 1 с энергией E_{F1} , неупруго теряет энергию, заполняя собой «дырку» и диссипируя мощность $qV/2$ на контакте 1.

Итак, в баллистическом канале в режиме линейного отклика на каждом контакте диссипирует примерно половина мощности VI .

6. ПАДЕНИЕ НАПРЯЖЕНИЯ В БАЛЛИСТИЧЕСКИХ РЕЗИСТОРАХ

В диффузионном режиме работы однородного резистора напряжение падает линейно вдоль его длины. А как падает напряжение в баллистическом резисторе? Ответ, наверное, ожидаемый — на контактах (рис. 4).

Внутри контакта 1 есть один хорошо определённый уровень Ферми E_{F1} , аналогично и в контакте 2 есть один уровень E_{F2} . Внутри же всего устройства уровней Ферми два. Часть электронных состояний резистора заполняется истоком. Поскольку они находятся в равновесии с ним, то заполнены они в соответствии с фермиевской функцией контакта 1. Аналогичная ситуация имеет место со стороны стока. Состояния заполняются в соответствии с фермиевской функцией контакта 2. Расчёт среднего значения электрохимического потенциала внутри баллистического резистора [13] приводит к результату, показанному на рис. 4. При равноправии контактов

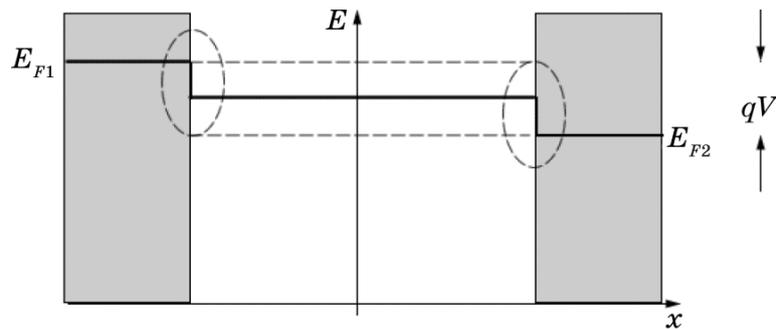


Рис. 4. В баллистическом резисторе при равноправии контактов напряжение $V = (E_{F1} - E_{F2})/q$ падает на контактах поровну.

половина падения электрохимического потенциала происходит на истоке, а вторая половина — на стоке. По этой причине баллистическое сопротивление в 12,9 кОм называют квантом контактного сопротивления.

7. 1D- И 3D-РЕЗИСТОРЫ

Уравнение Ландауэра для проводимости (4) справедливо для резисторов любой размерности, если только корректно учесть число мод проводимости $M(E)$. Вернёмся к 2D-проводнику. Он удлинен в направлении движения электронов и имеет конечную ширину W . Движение электронов ограничено потенциальной ямой, их энергия квантуется, а именно,

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} n^2, \quad (69)$$

где a — ширина потенциальной ямы, n — целое квантовое число, перечисляющее уровни энергии («подзоны»), которые заселяются в соответствии с положением уровня Ферми, и каждая из подзон есть мода (канал) проводимости для тока. При достаточно большой ширине резистора W энергии нижних подзон близки друг к другу, и многие из этих подзон заселены электронами. В этом случае число подзон пропорционально ширине резистора W , и для числа мод проводимости имеем:

$$M(E) = WM_{2D}(E) = \sum_{n=1}^N W g_v \frac{\sqrt{2m^*(E - \varepsilon_n)}}{\pi \hbar}, \quad (70)$$

где сумма берётся по всем подзонам.

Теперь рассмотрим 1D-проводник. Он похож на очень узкий 2D-резистор. Если его ширина и толщина малы, то все подзоны далеко расположены друг от друга по энергии, и их можно легко пересчитать, так что (формула (63) в [1])

$$M(E) = M_{1D}(E) = \text{Число подзон энергии } E. \quad (71)$$

Наконец, если ширина и толщина резистора велики, то мы имеем фактически 3D-проводник, все подзоны близко расположены друг по отношению к другу по энергии и число мод проводимости (формула (63) в [1])

$$M(E) = AM_{3D}(E) = g_v \frac{m^*(E - E_c)}{2\pi \hbar^2}, \quad (72)$$

где A — площадь поперечного сечения 3D-проводника.

Для $1D$ -резистора имеет место строгое квантовое ограничение в двух измерениях, и число мод проводимости даётся простым выражением (71). Для $2D$ -резистора строгое квантовое ограничение имеет место в одном измерении, и число мод даётся выражением (70). Для $3D$ -резистора квантовых ограничений нет, и число мод даётся выражением (72). Из (70) и (72) видно, что эти формулы выписаны для параболической дисперсии. С таким же успехом их можно выписать для любой аналитически заданной дисперсии, например, для линейной, как в графене, которому мы намерены посвятить отдельную публикацию в концепции «снизу–вверх» транспортной модели ЛДЛ [1]. Если дисперсия задаётся эмпирически, то остаётся прибегнуть только к численным методам. Как только число мод выявлено, интеграл Ландауэра для проводимости (4) нетрудно оценить для проводников любой размерности.

Уравнение Ландауэра (4) бывает удобнее переписать в другом виде, а именно,

$$G = \frac{2q^2}{h} \langle\langle T \rangle\rangle \langle M \rangle,$$

$$\langle M \rangle = \int M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (73)$$

$$\langle\langle T \rangle\rangle = \frac{\int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}.$$

Воспользуемся общим выражением для коэффициента прохождения (33). Для простоты предположим, что средняя длина свободного пробега постоянна и равна λ_0 . Тогда для проводимости имеем:

$$G = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} \langle M \rangle. \quad (74)$$

В случае параболической дисперсии для $1D$ -резистора

$$\langle M_{1D} \rangle = \sum_i \mathfrak{S}_{-1}(\eta_{Fi}), \quad (75)$$

где

$$\eta_{Fi} = \frac{E_F - \varepsilon_i}{kT}, \quad (76)$$

и суммирование в (75) проводится по подзонам.

При $T = 0$ К проводимость $1D$ -резистора упрощается до

$$G_{1D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} \times \text{Число подзон энергии } E_F. \quad (77)$$

В случае статистики Максвелла–Больцмана

$$G_{1D} = q n_L \mu^{\text{app}} \frac{1}{L}, \quad (78)$$

где

$$\mu^{\text{app}} = \frac{\bar{D}}{(kT/q)}, \quad (79)$$

$$\bar{D} = \frac{v_T \lambda^{\text{app}}}{2}, \quad (80)$$

$$v_T = \sqrt{2kT / (\pi m^*)}, \quad (81)$$

$$\frac{1}{\lambda^{\text{app}}} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{L}. \quad (82)$$

Для 2D-резистора имеем:

$$\langle M \rangle = W \langle M_{2D} \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} W M_{2D}(kT) \sum_i \mathfrak{F}_{-1/2}(\eta_{Fi}), \quad (83)$$

где для параболической дисперсии

$$M_{2D}(kT) = g_v \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar}. \quad (84)$$

При $T = 0$ К выражение (74) для 2D-резистора упрощается до

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} W M_{2D}(E_F). \quad (85)$$

В случае статистики Максвелла–Больцмана

$$G_{2D} = q n_s \mu^{\text{app}} \frac{W}{L}. \quad (86)$$

Наконец, для 3D-резистора

$$\langle M \rangle = A \langle M_{3D} \rangle = A M_{3D}(kT) \mathfrak{F}_0(\eta_F), \quad (87)$$

где

$$M_{3D}(kT) = g_v \frac{m^* kT}{2\pi \hbar^2} \quad (88)$$

и

$$\eta_F = \frac{E_F - E_C}{kT}. \quad (89)$$

При $T = 0$ К выражение (74) для 3D-резистора упрощается до

$$G_{3D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} AM_{3D}(E_F). \quad (90)$$

В случае статистики Максвелла–Больцмана

$$G_{3D} = qn\mu^{\text{app}} \frac{A}{L}. \quad (91)$$

В заключение в качестве примера приведём результаты анализа экспериментальной вольт-амперной характеристики (ВАХ) углеродных нанотрубок. Это почти идеальные 1D-проводники. Экспериментальные ВАХ одностенных углеродных нанотрубок в металлическом режиме длиной 1 мкм при $T = 4, 100, 200$ К в широком диапазоне напряжений воспроизведены из [14] на рис. 5.

Из линейного участка ВАХ для проводимости получается 22 мкСм. Для таких углеродных нанотрубок приближение при $T = 0$ К хорошо работает даже при весьма высоких температурах. Так что можно пользоваться выражением для проводимости (77). Долинное вырождение для углеродных нанотрубок равно двойке. В предположении, что заполнена одна подзона, для баллистической проводимости получается $G^{\text{ball}} = 154$ мкСм. Оценка среднего пути свободного пробега из уравнения (77) даёт $\lambda_0 = 167$ нм, что намного меньше физической длины использованных в эксперименте нанотрубок в 1 мкм, так что транспорт в таких нанотрубках диффузионный.

Мы видели перед собой задачу в этом обзоре показать, как поль-

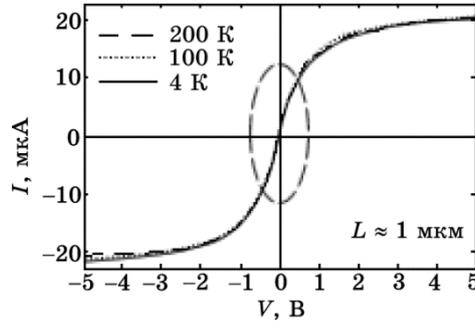


Рис. 5. Вольт-амперная характеристика одностенных углеродных нанотрубок в металлическом режиме при трёх разных температурах [14]. Обведён участок линейного отклика.

зоваться уравнением проводимости Ландауэра при отсутствии перепада температур на концах проводника. Основные результаты можно было бы сформулировать коротко следующим образом.

Все проводники обладают постоянным сопротивлением даже при отсутствии рассеяния электронов. Баллистическое сопротивление есть нижний предел сопротивления независимо от того, насколько мал проводник. Этот баллистический предел сопротивления становится важным даже при работе электронных устройств при комнатной температуре.

Баллистическое сопротивление квантуется, и квантом сопротивления является величина $h/(2q^2)$.

Вся область перехода от баллистического транспорта к диффузионному стандартно трактуется в модели ЛДЛ с помощью коэффициента прохождения.

Резисторы всех размерностей (1D, 2D и 3D) трактуются в формализме ЛДЛ единообразно, а сама трактовка допускает любой вид дисперсии.

При изучении электрических свойств любого нового материала, включая наносистемы, начинать следует не с договорённостей (1)–(3), а с уравнения Ландауэра (4).

Благодарю проф. Марка Лундстрема за возможность прослушать его курс лекций (частично положенный в основу при написании настоящего обзора) на тему ‘Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications’ [15], прочитанный в 2011 году в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

Я также благодарен Н. Е. Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, № 3: 519 (2013).
2. R. F. Pierret, *Semiconductor Device Fundamentals* (Reading, MA: Addison–Wesley: 1996).
3. B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.*, **60**: 848 (1988).
4. D. F. Holcomb, *Amer. J. Phys.*, **67**, No. 4: 278 (1999).
5. D. Cvijovic, *Theoret. Math. Phys.*, **161**, No. 3: 163 (2009).
6. R. Dingle, *Appl. Scientific Res.*, **6**, No. 1: 225 (1957).
7. R. Kim and M. S. Lundstrom, *Notes on Fermi–Dirac Integrals*, www.nanohub.org/resources/5475.
8. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge: Cambridge Univ. Press: 2000).
9. P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties* (Berlin: Springer: 2010).

10. M. S. Shur, *IEEE Electron Dev. Lett.*, **23**, No. 9: 511 (2002).
11. J. Wang and M. Lundstrom, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **50**, No. 7: 1604 (2003).
12. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела* (Москва: Мир: 1979).
13. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press: 2001).
14. Zh. Yao, C. L. Kane, and C. Dekker, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, No. 13: 2941 (2000).
15. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.