

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 73.22.Pr, 73.23.Ad, 84.32.Ff, 85.35.-p

УЗАГАЛЬНЕНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ В МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОНІЦІ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха*

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, E-mail: quantumnet@yandex.ua

* Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України

пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

УЗАГАЛЬНЕНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ В МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОНІЦІ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У методичній статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, викладено узагальнену модель транспорту електронів у режимі лінійного відгуку, яку було розвинуто Р.Ландауером, С.Датта та М.Лундстромом (модель ЛДЛ). Цю модель може бути застосовано до провідника будь-якої розмірності, будь-якого масштабу і з довільним законом дисперсії, а також для опису транспорту в балістичному, квазі-балістичному або дифузійному режимі. У рамках моделі ЛДЛ обчислено провідність резисторів будь-якої розмірності, будь-якого масштабу і за довільного закону дисперсії, що працюють у балістичному або дифузійному режимі як поблизу $0^\circ K$, так і при вищих температурах. Також обговорюються поняття рухливості електронів, дисипація тепла і падіння напруги в балістичних резисторах.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, транспорт електронів, дисипація тепла

GENERALIZED ELECTRON TRANSPORT MODEL FOR MICRO- AND NANOELECTRONICS

Yu. A. Kruglyak, M.V.Strikha

Abstract. Generalized model of electron transport in the linear response regime developed by R. Landauer, S. Datta, and M. Lundstrom with application to the resistors of any dimension, any size and arbitrary dispersion working in ballistic, quasi-ballistic or diffusion regime is summarized in a tutorial article for the reseachers, university teachers and students. The LDL transport model is used to calculate conductivity of resistors of any dimension and scale and of an arbitrary dispersion working in the ballistic or diffusion regime as near $0^{\circ} K$ and at higher temperatures. The concept of electron mobility, as well as the dissipation of heat and the voltage drop in the ballistic resistors are also under consideration.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, electron transport, heat dissipation

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В методической статье, рассчитанной на исследователей, преподавателей и студентов высшей школы, излагается обобщенная модель транспорта электронов в режиме линейного отклика, развитая Р. Ландауэром, С. Датта и М. Лундстромом применительно к проводникам любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом, квази-баллистическом или диффузионном режиме. В рамках транспортной модели ЛДЛ рассматривается вычисление проводимости резисторов любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом либо диффузионном режиме как вблизи $0^{\circ} K$, так и при более высоких температурах. Обсуждаются понятие подвижности электронов, а также диссипация тепла и падение напряжения в баллистических резисторах.

Ключевые слова: нанофизика, наноэлектроника, транспорт электронов, диссипация тепла

1. Вступ

У серії навчально-оглядових статей, які друкувалися в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології», починаючи з №4 за 2012 рік, автори у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№4, 2012), термоелектричні явища (№1, 2013), основи спінтроники (№2, 2013) та застосування методу нерівноважної функції Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3, 4, 2013), класичний та квантовий ефекти Холла (№1, 2014), спіновий ефект Холла (№2, 2014), роль квантової інтерференції та дефазування (№3, 2014), роль електростатики і кон-

тактів (№4, 2014), рівноважну термодинаміку провідника зі струмом (№ 2, 2015).

Продовжуючи знайомити вітчизняних викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, із сучасною концепцією викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), сформульованої в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і до певної міри альтернативної традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках, ми розглянемо у цій статті модель електронного транспорту – доволі просту, але водночас на диво корисну. Адже ця модель Ландауера-

Датти-Лундстрома (ЛДЛ) вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту не тільки в режимі лінійного відгуку, але й у високовольтному режимі гарячих електронів, для нелокального і квантового транспорту, транспорту в неупорядкованих і наноструктурованих матеріалах, у резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних. Основи цієї моделі було закладено в працях Ландауера [1–3], продовжених Даттою [4–6] і розвинутих Лундстромом щодо найрізноманітніших матеріалів [7, 8].

Центральне місце в типовому сучасному електронному пристрої відіграє канал провідності, який характеризується густиною станів $D(E - U)$, де E – енергія станів провідника, а U – самоузгоджений електростатичний потенціал затвору, що дозволяє зміщувати стани вниз або вгору за шкалою енергії (рис. 1).

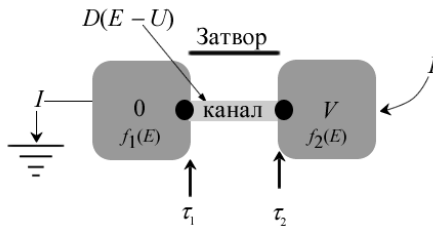


Рис. 1. Типовий електронний пристрій з контактами, що характеризуються часами прольоту τ .

Надалі ми розглядатимемо двохтермінальний пристрій ($U = 0$). Канал провідності перебуває між двома «ідеальними» контактами (виток і сток), які здатні до швидкого відновлення рівноваги в процесі електронного транспорту, і які характеризуються фермівськими функціями

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{F1})/kT} + 1} \quad (1a)$$

та

$$f_2(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{F2})/kT} + 1} \quad (1b)$$

з відповідними електрохімічними потенціалами E_{F1} і E_{F2} . При прикладенні напруги V на стік електрохімічний потенціал E_{F2} знижується щодо потенціалу E_{F1} на величину qV .

Зв'язок контактів з каналом провідності характеризується часами прольоту τ , які дають уявлення про те, як швидко електрони можуть залишати контакт або провідник. Для нанорозмірних резисторів, наприклад, молекул, часи τ контролюються контактами. Для довгих резисторів із добрими контактами, як ми пересвідчимося пізніше, часи τ стають зіставними з часом прольоту всієї довжини каналу провідника. В загальному випадку якість двох контактів може бути різною, що призводить до різних значень τ_1 і τ_2 . Інколи час τ наочніше зображати в енергетичних одиницях $\gamma = \hbar/\tau$. Якщо каналом провідності є одна молекула, величина γ набуває простого фізичного змісту розширення енергетичних рівнів молекули за рахунок скінченності часу життя електронів на молекулярних рівнях.

2. Число електронів і струм у провіднику

Перейдімо до побудови математичної моделі транспорту ЛДЛ в концепції «знизу – вгору». Розпочати слід зі знаходження залежності концентрації електронів і струму в провіднику від електрохімічних потенціалів.

Вважаємо, що канал має зонну структуру, описувану законом дисперсії $E(k)$. Ця вимога, однак, не є обов'язковою [5]. Обговорення обмежень і застосовності моделі ЛДЛ можна знайти в [4–7].

Нехай спочатку тільки лівий контакт 1 зв'язаний з каналом провідності. Він прагне наповнити провідник електронами в силу свого електрохімічного потенціалу E_{F1} . Рівновага між контактом і каналом провідності встановиться тоді, коли число електронів з енергіями в проміжку від E до $E + dE$ по обидва боки від межі поділу контакт – провідник зрівняється:

$$N'_{01}(E)dE = D(E)dE f_1(E), \quad (2)$$

де N'_{01} – рівноважне число електронів у каналі, $D(E)$ – густина станів з енергією E (у ній вже враховано спінове виродження 2), а $f_1(E)$ – рівноважна фермівська функція контакту 1.

Процес встановлення рівноваги між контактом 1 і каналом описується простим кінетичним рівнянням

$$F_1 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_1 = \frac{N'_{01}(E) - N'(E)}{\tau_1(E)}, \quad (3)$$

де швидкість подачі електронів у канал dN'/dt додатна, якщо число електронів у каналі N' менше від його рівноважного значення N'_{01} , і від'ємна в протилежному випадку. Якщо канал спочатку був порожній, то він заповнюється електронами аж до досягнення їх рівноважного числа; якщо ж канал переповнений електронами, то він спустошується доти, доки в каналі не залишиться те ж саме їхнє рівноважне число.

Якщо ж канал провідності пов'язаний тільки з контактом 2, аналогічні міркування приводять до подальшої пари рівнянь:

$$N'_{02}(E)dE = D(E)dE f_2(E), \quad (4)$$

$$F_2 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_2 = \frac{N'_{02}(E) - N'(E)}{\tau_2(E)}. \quad (5)$$

Якщо ж канал провідності зв'язаний одночасно з двома контактами й вони обидва одночасно або наповнюють його електронами, або спорожняють, одержуємо:

$$\left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_{1+2} = F_1 + F_2 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_1 + \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_2. \quad (6)$$

У стані динамічної рівноваги доданки в лівій частині кінетичного рівняння (6) дорівнюють нулеві. Тому, прирівнюючи нулеві й праву частину (6) й підставляючи вирази для швидкостей на обох контактах 1 і 2 з виразів (3) і (5), для числа електронів у каналі провідності одержимо:

$$N'(E) = \frac{(1/\tau_1)}{(1/\tau_1) + (1/\tau_2)} N'_{01}(E) + \frac{(1/\tau_2)}{(1/\tau_1) + (1/\tau_2)} N'_{02}(E). \quad (7)$$

Задля простоти вважатимемо, що $\tau_1 = \tau_2$, й підставимо рівноважні значення чисел електронів N'_{01} і N'_{02} з виразів (2) и (4). Тоді для числа електронів у каналі у стані динамічної рівноваги у диференціальній формі одержуємо:

$$N'(E)dE = \frac{D(E)dE}{2} f_1(E) + \frac{D(E)dE}{2} f_2(E). \quad (8)$$

Залишається проінтегрувати по всьому спектру енергій – і ми отримаємо число електронів у каналі провідності в стані динамічної рівноваги двох контактів з електрохімічними потенціалами E_{F1} і E_{F2} , різниця між якими пропорційна напрузі, прикладеній до кінців провідника:

$$N = \int N'(E)dE = \int \left[\frac{D(E)}{2} f_1(E) + \frac{D(E)}{2} f_2(E) \right] dE. \quad (9)$$

Таким чином, ми отримали концентрацію електронів (яка визначає число електронів у провіднику з певними геометричними розмірами) як функцію густини станів провідника і фермівських функцій розподілу на контактах. Коли електронний пристрій (рис. 1) перебуває в рівновазі ($f_1 = f_2 \equiv f_0$), отримуємо стандартний вираз для рівноважного числа електронів у провіднику [9]:

$$N_0 = \int D(E) f_0(E) dE, \quad (10)$$

На відміну від (10), вираз (9) можна застосовувати як для рівноважного стану пристрою, зображеного на рис. 1, так і для випадку, коли цей пристрій виведено далеко за межі рівноваги.

Нагадаємо, що для 1D-, 2D- і 3D-провідників густина станів пропорційна, відповідно, довжині провідника L , площі його перерізу A і об'єму провідника Ω :

$$D(E) \sim \{L, A, \Omega\}, \quad (11)$$

а концентрація електронів визначається, відповідно, як

$$n_L = N/L, \quad n_S = N/A, \quad n = N/\Omega. \quad (12)$$

Перейдімо до обчислення струму в стані динамічної рівноваги. У цьому стані один з контактів наповнює канал провідності електронами, а другий спустошує його. Якщо

$E_{F1} > E_{F2}$, контакт 1 інжектує електрони, а контакт 2 поглинає їх, і навпаки, контакт 1 поглинає, а контакт 2 інжектує, якщо $E_{F1} < E_{F2}$.

Швидкості, з якими контакти 1 і 2 інжектують чи поглинають електрони, визначаються виразами (3) і (5). У стані динамічної рівноваги

$$F_1 + F_2 = 0. \quad (13)$$

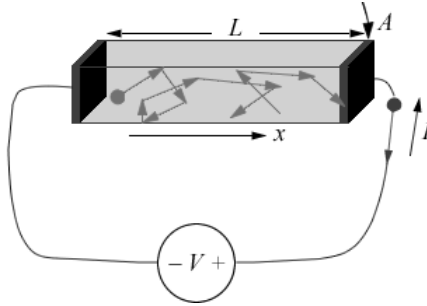


Рис. 2. Електронний транспорт у режимі дифузії через провідник з довжиною L і перерізом A . Ми використовуємо традиційне визначення: струм I і напрям руху електронів протилежні.

За домовленістю, яка бере початок ще у 18 столітті (коли матеріальним носієм струму вважали особливу невагому й невидиму рідину), струм вважають додатним, якщо він входить у контакт 2 з боку зовнішнього кола (рис. 2). Отже, цей напрям струму протилежний напрямку реального руху електронів. Звідси, з визначення струму як заряду, що проходить через одиничний переріз за одиницю часу, з урахуванням (13) маємо два тотожні записи

$$I' = qF_1 = -qF_2. \quad (14)$$

У кінцевому варіанті запишемо струм як середнє арифметичне двох тотожних струмів у (14):

$$I' = \frac{q}{2}(F_1 - F_2). \quad (15)$$

Тепер підставмо значення швидкостей з (3) і (5) в припущенні однаковості контактів ($\tau_1 = \tau_2 \equiv \tau$), а потім використаємо (2) і (4). Внаслідок цих операцій одержимо:

$$I'(E) = \frac{q}{2\tau(E)}(N'_{01} - N'_{02}) = \frac{2q}{h} \frac{\gamma(E)}{2} \pi D(E)(f_1 - f_2), \quad (16)$$

де характеристичний час прольоту τ записано в енергетичних одиницях, а саме:

$$\gamma \equiv \frac{\hbar}{\tau(E)}. \quad (17)$$

Інтегруючи (16) по всьому спектру енергій, остаточно для струму в стані динамічної рівноваги отримаємо:

$$I = \int I'(E)dE = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2}(f_1 - f_2)dE. \quad (18)$$

Згідно з (18), струм виникає тільки тоді, коли фермівські розподіли на контактах різні, чи то через різницю хімпотенціалів, чи то через різницю температур, чи то з обох причин разом. Ситуацію за наявності різниці хімпотенціалів ми розглядаємо в цій статті. Ситуацію різниці температур буде розглянуто в наступній публікації.

Тож підіб'ємо підсумок. Ми одержали два основні рівняння транспортної моделі ЛДЛ:

$$N = \int \frac{D(E)}{2}(f_1 + f_2)dE, \quad (19)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2}(f_1 - f_2)dE. \quad (20)$$

Перше з них виражає число електронів у провіднику в стані динамічної рівноваги через густину станів напівпровідника і фермівські функції контактів, а друге визначає струм через ці ж характеристики плюс характеристичний час прольоту. Дальша побудова моделі ЛДЛ фактично зводиться до використання й розвитку цих двох основних рівнянь.

3. Моді провідності

Як і слід було очікувати, струм виявився пропорційний до різниці фермівських функцій контактів. Пізніше ми переконаємося, що комбінація фундаментальних констант $2q^2/h$ відіграє у виразі для струму (20) роль кванта провідності. А який фізичний зміст має добуток $\gamma\pi D/2$?

Параметр γ (17) має розмірність енергії, а розмірність густини станів D - це обернена енергія, тож добуток $\gamma\pi D/2$ безрозмірний. Звернімо увагу на те, що в нашій статті ми

оперуємо поняттям числа електронів (19), а не електронної концентрації (12), як це роблять у фізиці напівпровідників. Тому густина станів у нас має розмірність (енергія)⁻¹, а не (енергія·об'єм)⁻¹, як цю величину зазвичай вводять для 3D-зразку.

Зараз ми переконаємося, що добуток $\gamma\pi D/2 = M(E)$ має фізичний зміст числа мод (чи інакше, каналів) провідності резистора.

Розглянемо 2D балістичний резистор, витягнутий вздовж осі x , з довжиною L , меншою від середньої довжини вільного пробігу λ , і з шириною W уздовж осі y . Повна густина станів у ньому дорівнює:

$$D(E) = D_{2D}(E) L \cdot W, \quad (21)$$

$$D_{2D}(E) = g_v \frac{m^*}{\pi \hbar^2}, \quad (22)$$

де D_{2D} – густина станів на одиницю площі, отримана для параболічного спектру електро-

нів $E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ з ефективною масою m^*

і долинним виродженням g_v [9].

Визначимо характеристичний час τ . З (8) та (16) маємо:

$$\frac{qN'(E)dE}{I'(E)dE} = \frac{\hbar(f_1 + f_2)}{\gamma(f_1 - f_2)}. \quad (23)$$

Прикладемо до кінців провідника достатньо велику напругу, таку, щоб мали місце нерівності $E_{F2} \ll E_{F1}$, і, як наслідок, $f_2 \ll f_1$. Тоді з (23) одержуємо:

$$\frac{qN'(E)dE}{I'(E)dE} = \frac{\text{Накопичений заряд}}{\text{Струм}} = \frac{\hbar}{\gamma} = \tau(E). \quad (24)$$

Число електронів у каналі становить:

$$N'(E) = n'_S(E) L \cdot W, \quad (25)$$

де n'_S – електронна концентрація на одиницю площі, а струм, за визначенням, дорівнює:

$$I'(E) = qWn'_S(E) \langle v_x^+(E) \rangle. \quad (26)$$

Тому з (24) ми одержуємо:

$$\tau(E) = \frac{L}{\langle v_x^+(E) \rangle}, \quad (27)$$

що є просто середнім часом прольоту електрона через усю довжину пружного резистора.

Для оцінки τ потрібно обчислити середню швидкість прольоту від контакту 1 до контакту 2 в напрямку $+x$ (рис. 2). Ця швидкість у випадку балістичного транспорту, тобто без зміни напрямку руху, дорівнює:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = v(E) \langle \cos \theta \rangle, \quad (28)$$

де кут θ відраховано від додатного напрямку осі x . Оскільки в нашому випадку

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \theta d\theta}{\pi} = \frac{2}{\pi}, \quad (29)$$

то для середньої швидкості у випадку параболічного дисперсійного співвідношення та ізоотропії швидкості маємо:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi} v = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2(E - E_C)}{m^*}}. \quad (30)$$

Визначаючи число мод провідності як

$$M(E) = \gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2} \quad (31)$$

і використовуючи визначення γ з (17) і густини станів для 2D провідника з (21), для числа мод 2D провідника остаточно одержуємо

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E). \quad (32)$$

Аналогічні викладки для 1D та 3D провідників дають вирази для всіх трьох випадків, які нас цікавлять:

$$M(E) = M_{1D}(E) = \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{1D}(E),$$

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (33)$$

$$M(E) = AM_{3D}(E) = A \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E).$$

Звернімо увагу, що у випадку 2D провідника число мод провідності пропорційне ширині провідника W , а для 3D провідника – площі поперечного перерізу A .

Заслужує на увагу фізичний зміст отриманих результатів (33). Так, для 2D провідника з урахуванням (30) і (22) число мод провідності

$$WM_{2D}(E) = g_v W \frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi \hbar}. \quad (34)$$

Для часткового випадку параболічного закону дисперсії

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (35)$$

записуючи хвильовий вектор через де-Бройлівську довжину хвилі

$$\lambda_B = 2\pi/k, \quad (36)$$

перепишемо (34) як:

$$WM_{2D}(E) = g_v \frac{Wk}{\pi} = g_v \frac{W}{\lambda_B(E)/2}. \quad (37)$$

З цього виразу стає зрозумілим фізичний зміст: число мод провідності 2D провідника (з урахуванням долинного виродження) показує, скільки пів-довжин де-Бройлівської хвилі, що відповідає енергії E , вкладається на ширині 2D провідника. Цілочисельність числа мод забезпечується крайовими умовами, згідно з якими хвильові функції електронів на обох краях 2D провідника повинні перетворюватися на нуль. Сам термін «моди» запозичено з теорії хвилеводів.

Тепер ми можемо базові рівняння моделі ЛДЛ (19) і (20) переписати в вигляді

$$N = \int \frac{D(E)}{2} (f_1 + f_2) dE, \quad (38)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE.$$

Таким чином, для обчислення числа електронів і струму в провіднику, окрім фермівських функцій контактів, потрібно знати густину станів $D(E)$ і число мод $M(E)$ провідника.

Для параболічного закону дисперсії (35) вирази для густини станів добре відомі [9]:

$$D_{1D}(E)L = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_C}} H(E - E_C), \quad (39)$$

$$D_{2D}(E)A = A \frac{m^*}{\pi \hbar^2} H(E - E_C), \quad (40)$$

$$D_{3D}(E)\Omega = \Omega \frac{m^* \sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi^2 \hbar^3} H(E - E_C), \quad (41)$$

де $H(E - E_C)$ – східчаста функція Хевісайда, а відповідні моди провідності записуються як:

$$M_{1D}(E) = H(E - E_C), \quad (42)$$

$$M_{2D}(E) = g_v \frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi \hbar} H(E - E_C), \quad (43)$$

$$M_{3D}(E) = g_v \frac{m^*(E - E_C)}{2\pi \hbar^2} H(E - E_C). \quad (44)$$

Поведінку густини станів $D(E)$ і числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- і 3D-провідників з параболічною дисперсією якісно зображено на рис. 3.

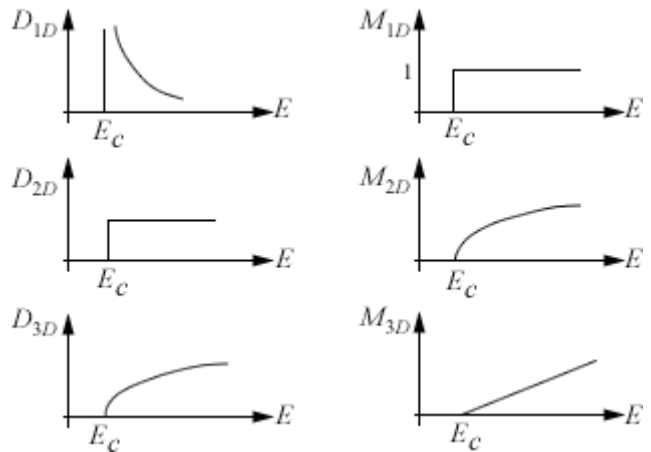


Рис. 3. Густина станів $D(E)$ і число мод $M(E)$ для 1D-, 2D- і 3D-провідників з параболічною дисперсією (35).

Густина станів для 1D провідника обернено пропорційна \sqrt{E} , для 2D провідника вона стала, для 3D – прямо пропорційна \sqrt{E} . Щодо мод провідності, то 1D провідник характеризується єдиною модою провідності, яка дорівнює функції Хевісайда, що дозволяє визначити її калібрування для використання її у формулах (39) – (44). Число ж мод 2D провідника прямо пропорційне \sqrt{E} , а 3D провідника – зростає з енергією лінійно.

На закінчення підіб'ємо певні підсумки:

1. Для обчислення концентрації носіїв струму слід знати густину станів $D(E)$.

2. Для обчислення струму слід знати число мод $M(E)$.

3. Число мод $M(E)$ пропорційне середній швидкості носіїв струму в напрямку їх руху, помноженій на густину станів $D(E)$.

4. Число мод $M(E)$ залежить від зонної структури й розмірності провідника.

Хоча вище ми розглядали провідники з параболічним законом дисперсії, формули (33) мають загальний характер. Ми використаємо їх пізніше, розглянувши в моделі ЛДЛ графен, який має лінійну дисперсію. Натомість для довільної залежності $E(k)$ розроблено кількісні методи обчислення числа мод провідності [10].

4. Коефіцієнт проходження

Досі ми розглядали балістичний транспорт. Перейдімо до розгляду дифузійного транспорту, коли $L \gg \lambda$. Електрони, інжектовані контактами 1 і 2, здійснюють випадкові блукання. Деякі з них приводять носіїв в кінцевому підсумку на контакт 1, інші – на контакт 2. Якщо до контакту 2 прикладено позитивний потенціал, то переважна частина електронних блукань закінчуватиметься саме на цьому контакті.

Ключовим параметром у моделі ЛДЛ є величина $\gamma\pi D(E)/2$, яка в випадку балістичного транспорту виявляється рівною числу мод провідності $M(E)$. Розширення γ і час прольоту τ пов'язані між собою: $\gamma = \hbar/\tau$. У режимі дифузійного транспорту природно очікувати збільшення часу τ , що тягне за собою зменшення величини $\gamma\pi D(E)/2$. Далі ми покажемо, що у випадку дифузійного транспорту $\gamma\pi D(E)/2 = M(E) \cdot T(E)$, де $T(E) \leq 1$ отримав назву коефіцієнта проходження (transmission coefficient).

У режимі балістичного транспорту електрони інжектуються в провідник під різними кутами, внаслідок чого час прольоту описується деякою функцією розподілу. Величину γ ми оцінювали через середній час прольоту

$$\gamma(E) = \frac{\hbar}{\langle \tau(E) \rangle}, \quad (45)$$

де

$$\langle \tau(E) \rangle = \frac{L}{\langle v_x^+(E) \rangle} = \frac{L}{v(E) \langle \cos \vartheta \rangle} = \frac{L}{v(E) (2/\pi)}. \quad (46)$$

Наше завдання зараз – оцінити $\langle \tau(E) \rangle$ у режимі дифузійного транспорту.

Скористаємося першим законом дифузії Фіка до потоку електронів у 2D провіднику:

$$J = q\bar{D} \frac{dn_s}{dx}, \quad (47)$$

де густина струму J пропорційна градієнтові концентрації електронів з коефіцієнтом дифузії \bar{D} як коефіцієнтом пропорційності.

Нехай електрони у провідник постачає тільки контакт 1, тобто $f_1 \approx 1$, а $f_2 \approx 0$. На лівому кінці провідника ($x = 0$) є ненульова концентрація електронів $\Delta n_s(0)$ (рис. 4).

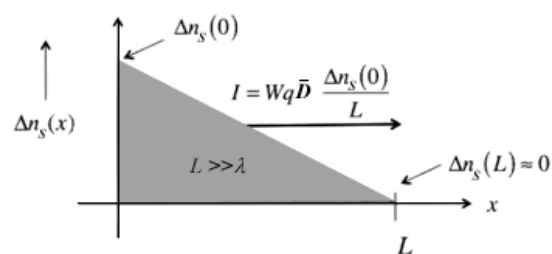


Рис. 4. До виведення часу прольоту τ_D в дифузійному режимі.

Оскільки ми не враховуємо процеси рекомбінації/генерації носіїв струму, то профіль концентрації електронів на всій довжині провідника буде лінійним з практично нульовим значенням концентрації на правому кінці провідника: $\Delta n_s \rightarrow 0$ за рахунок $f_2 \approx 0$. Час прольоту, згідно з (24), є відношенням накопиченого у провіднику заряду до струму:

$$\tau_D = \frac{qN}{I} = \frac{Wq\Delta n_s(0)L/2}{Wq\bar{D}\Delta n_s(0)/L} = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (48)$$

де накопичений у провіднику заряд qN є половина площі прямокутника (рис. 4), побудованого для 2D провідника з довжиною L й шириною W , а струм $I = J \cdot W$ і, згідно з (47), $dn_s/dx = \Delta n_s(0)/L$. Таким чином, час прольоту в дифузійному режимі

$$\tau_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (49)$$

тоді як у балістичному режимі

$$\tau_B = \frac{L}{\langle v_x^+ \rangle}. \quad (50)$$

Збираючи все разом, маємо:

$$\gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_D} \pi \frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_B} \pi \frac{D(E)}{2} \frac{\tau_B}{\tau_D} \equiv M(E)T(E), \quad (51)$$

де коефіцієнт проходження є співвідношення двох часів прольоту – в балістичному режимі й у дифузійному:

$$T(E) = \frac{\tau_B}{\tau_D}. \quad (52)$$

Іншими словами, за наявності розсіяння число мод $M(E)$ слід замінити на добуток $M(E) \cdot T(E)$.

Для оцінки $T(E)$ використаємо визначення коефіцієнту проходження (52) і вирази (49), (50). Тоді одержуємо:

$$T(E) = \frac{2\bar{D}}{L \langle v_x^+ \rangle}. \quad (53)$$

Спираючись на теорію випадкових блукань [11], можна показати, що коефіцієнт дифузії записується як

$$\bar{D} = \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2}, \quad (54)$$

що разом з (53) дає простий вираз для коефіцієнту проходження

$$T(E) = \frac{\lambda}{L} \ll 1. \quad (55)$$

Як і слід було очікувати, коефіцієнт проходження в дифузійному режимі різко зменшується.

Вираз (55) справедливий для дифузійного режиму. Можна показати, що в загальному випадку коефіцієнт проходження

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}. \quad (56)$$

Цей вираз справедливий як для дифузійного режиму ($L \gg \lambda$), так і для балістичного ($L \ll \lambda$, тоді він прямує до одиниці), а також для проміжних випадків.

Тож у загальному випадку має місце співвідношення:

$$\gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} = M(E)T(E), \quad (57)$$

в якому число мод визначається загальними виразами (33), а коефіцієнт проходження може відповідати трьом різним експериментальним режимам:

$$\begin{aligned} \text{Дифузійний:} & \quad L \gg \lambda; \quad T = \lambda/L \ll 1, \\ \text{Балістичний:} & \quad L \ll \lambda; \quad T \rightarrow 1, \\ \text{Квазі-балістичний:} & \quad L \approx \lambda; \quad T < 1. \end{aligned} \quad (58)$$

Важливо, що порівняно просту транспортну модель ЛДЛ можна застосувати до всіх трьох режимів.

5. Режим лінійного відгуку

Для струму в моделі ЛДЛ отримано два вирази:

$$\begin{aligned} I &= \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE, \\ I &= \frac{2q}{h} \int T(E)M(E) (f_1 - f_2) dE. \end{aligned} \quad (59)$$

Слід пам'ятати: при виведенні (59) ми фактично використовували наближення не надто високих напруг. Адже, якщо подати на провідник напругу, вищу від певного критичного значення, то внаслідок появи великої кількості непружних зіткнень у режимі гарячих електронів застосована нами модель незалежних мод провідності перестав працювати. Надалі ми запишемо вирази моделі ЛДЛ для режиму лінійного відгуку, що дозволить суттєво спростити їх порівняно з (59).

У режимі лінійного відгуку, або ж лінійного транспорту чи майже рівноважного транспорту (near-equilibrium transport), для фермівських функцій контактів (1а) і (1б) і рівноважної функції Фермі

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{F0})/kT} + 1} \quad (60)$$

має місце співвідношення:

$$f_1(E) > f_2(E), \quad (61)$$

і обидві функції $f_1(E)$ і $f_2(E)$ мало відрізня-

ються від рівноважної функції (60). При цьому вважаємо, що напруга, яка подається на контакти,

$$V = \Delta E_F / q = (E_{F1} - E_{F2}) / q. \quad (62)$$

настільки невелика, що фермівську функцію контакту 2 можна розкласти в ряд Тейлора за величиною ΔE_F , обмежившись лінійним членом розкладу:

$$f_2 = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} \Delta E_F = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} qV. \quad (63)$$

Враховуючи очевидну властивість фермівської функції

$$\left(\frac{\partial f}{\partial E_F} \right)_{E_F=E_{F0}} = \left(- \frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E_F=E_{F0}},$$

а також співвідношення (61), остаточно для різниці фермівських функцій контактів у режимі лінійного відгуку маємо:

$$f_1 - f_2 = \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV. \quad (64)$$

Звідси для струму (59) і провідності в режимі лінійного відгуку одержуємо:

$$I = \left[\frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \right] V = GV, \quad (65)$$

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (66)$$

де другий вираз відомий як формула Ландауера для провідності.

Отже, ми отримали вираз для провідності, де її зв'язано з властивостями матеріалу провідника. Вирази (65) і (66) справедливі для 1D-, 2D- і 3D-провідників як у балістичному режимі, так і в дифузійному, якщо використати відповідні формули для числа мод (33).

6. Транспорт у масивних провідниках

Модель ЛДЛ придатна як для коротких, нанорозмірних, так і для довгих, масивних провідників. Коли канал провідності достатньо довгий, роль контактів нехтовно мала й провідність визначається властивостями матеріа-

лу провідника. Вираз для струму в масивному провіднику в режимі лінійного відгуку можна отримати з кожного із загальних співвідношень (59). Використаємо перше з них.

Перепишемо різницю фермівських функцій (64) як

$$f_1 - f_2 \approx - \frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}} \Delta E_F. \quad (67)$$

Тоді для струму маємо:

$$I = \frac{2q}{h} \int \left[\gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2} \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}} \right) \Delta E_F \right] dE. \quad (68)$$

У масивних провідниках завжди реалізується дифузійний режим, тож

$$\gamma(E) = \frac{\hbar}{\tau(E)} = \frac{\hbar}{L^2 / 2D(E)}. \quad (69)$$

Розгляньмо 2D провідник. Для нього, згідно з (40),

$$D(E) = WLD_{2D}(E). \quad (70)$$

Підставляючи (69) і (70) до (68), для густини струму одержуємо

$$J_x = I/W = \left[\int qD(E)D_{2D}(E) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}} \right) dE \right] \frac{\Delta E_F}{L}. \quad (71)$$

Оскільки масивний провідник перебуває в режимі лінійного відгуку і майже рівноважного транспорту по всій довжині провідника, ми можемо припустити, що електрохімічний потенціал падає від контакту 1 до контакту 2 лінійно, і тому $\Delta E_F/L$ є градієнтом фермівської функції dE_F/dx , а (71) можна відтак переписати в вигляді:

$$J_x = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F)}{dx}, \quad (72)$$

де введено питому провідність

$$\sigma = \int q^2 D(E)D_{2D}(E) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (73)$$

Обидва рівняння (72) і (73) є стандартним результатом, який отримують зазвичай у термодинаміці незворотних процесів, або ж шляхом розв'язання транспортного рівняння Больцмана. Ми ж отримали ці стандартні ре-

зультати для масивних провідників, припустивши в моделі ЛДЛ тільки те, що довжина провідника набагато перевищує довжину вільного пробігу.

Рівняння (72) можна переписати в іншому вигляді. Для невідроджених 2D n -напівпровідників можемо записати [9]:

$$n_s = N_{2D} \exp[(E_F - E_C)/kT],$$

$$N_{2D} = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2},$$

$$E_F = E_C + kT \ln \frac{N_{2D}}{n_s},$$

$$\sigma = nq\mu.$$

Для цього випадку рівняння для густини струму (72) можна переписати як:

$$J_x = n_s q \mu E_x + q \bar{D} \frac{dn_s}{dx}, \quad (74)$$

де

$$\frac{\bar{D}}{\mu} = \frac{kT}{q} \quad (75)$$

– це співвідношення Ейнштейна між коефіцієнтом дифузії електронів і їх рухливості μ .

Рівняння (74), яке включає дрейфовий і дифузійний доданки, добре відоме в фізиці напівпровідників і зазвичай є початковим наближенням при аналізі різних напівпровідникових пристроїв [9]. Воно застосовне для невідроджених напівпровідників у наближенні сталої температури вздовж напівпровідника й передбачає, як ми бачили, майже рівноважний транспорт.

Досі йшлося тільки про транспорт електронів. Якщо ж ітисеться про транспорт «дірок», то в моделі ЛДЛ слід лишень пам'ятати, що «дірки» описуються своїм електрохімічним потенціалом $E_F^{(p)}$, відмінним від хімпотенціалу електронів E_F , для якого ми просто опускали верхній індекс (n) через його очевидність. Це пов'язано з тим, що в рівновазі перебувають окремо носії у зоні провідності, й окремо – у валентній зоні, оскільки процеси генерації/рекомбінації носіїв струму, які пов'язують заселеності в цих зонах, перебігають значно по-

вільніше, аніж процеси розсіювання, які встановлюють рівновагу в кожній з цих зон.

Для електронів у зоні провідності маємо рівняння (72), (73) і (61). Рівняння (72) і (73) було виведено без урахування природи носіїв струму. Тому для «дірок» у валентній зоні ці рівняння потрібно просто переписати з «дірковим» електрохімічним потенціалом, а саме:

$$J_x^{(p)} = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F^{(p)})}{dx},$$

$$\sigma_p = \int q^2 D_p(E) D_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0^{(p)}}{\partial E} \right) dE,$$

$$f_0^{(p)}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F0}^{(p)}}{kT}\right) + 1}.$$

При цьому повний струм є сумою струмів у кожній із зон.

Залишилося підвести підсумки. Формула Ландауера для провідності (66) описує електронний транспорт у провіднику з загальних позицій. Провідність пропорційна наборові фундаментальних констант ($G \approx 2q^2/h$), які визначають квант провідності, асоційований з контактами, як ми переконаємося далі. Провідність залежить від числа мод провідності $M(E)$ і від коефіцієнту проходження $T(E)$, який визначає ймовірність того, що електрон з енергією E , інжектований контактом 1, досягне контакту 2. Повну провідність знаходимо шляхом інтегрування вкладів від усіх мод провідності. Вираз (66) справедливий для 1D-, 2D- і 3D-провідників, потрібно тільки коректно вирахувати число мод провідності за (33). Справедливий він як для балістичних нанорезисторів, так і для масивних резисторів, а також коректно описує проміжні ситуації. Далі ми, спираючись на вираз Ландауера, обчислимо провідність для 1D-, 2D- і 3D-провідників, які працюють у балістичному, дифузійному чи проміжному режимі. При цьому електронний транспорт ми розглядаємо в ізотермічних умовах. Термоелектричні явища з позицій транспортної моделі ЛДЛ ми розглянемо в окремій статті.

7. Від балістичної провідності до дифузійної в моделі ЛДЛ

Розгляньмо електричну провідність у моделі ЛДЛ для 1D-, 2D- і 3D-провідників, починаючи з дуже коротких балістичних резисторів, потім перейдемо до звичайних резисторів, які працюють у дифузійному режимі, а надалі зупинимось на проміжних режимах. В 1D провіднику («нанодріт») завдовжки L електрони можуть квазікласично переміщуватися тільки вздовж однієї осі, в 2D провіднику («нанояма») завширшки W – вздовж двох осей, у 3D провіднику з площею перерізу A – електрони квазікласично рухаються вздовж усіх трьох декартових осей.

Згідно із загальноприйнятою домовленістю [9], опір R і його питоме значення ρ для провідників усіх трьох вимірностей запишемо так:

$$R_{1D} = \rho_{1D}L; \quad \rho_{1D} = \frac{1}{n_L q \mu}, \quad (76)$$

$$R_{2D} = \rho_{2D} \frac{L}{W}; \quad \rho_{2D} = \frac{1}{n_S q \mu}, \quad (77)$$

$$R_{3D} = \rho_{3D} \frac{L}{A}; \quad \rho_{3D} = \frac{1}{n q \mu}, \quad (78)$$

де μ – рухливість електронів, а n_L , n_S і n – концентрація електронів для провідників розмірності 1D, 2D і 3D, співвіднесена до їх довжини, площі й об'єму відповідно. Тому питомий опір має різну розмірність залежно від розмірності провідника. Такий запис фізично цілком коректний: у всіх випадках опір пропорційний довжині провідника, а для 2D і 3D провідників – ще й обернено пропорційний, відповідно, ширині W і площі A поперечного перерізу провідника, оскільки збільшення W та A фізично еквівалентне паралельному з'єднанню провідників. І, разом із цим, ми побачимо, що вирази (76) – (78) не завжди коректні: несподіванки зустрічаються навіть у таких простих на позір пристроях, якими є резистори різної вимірності.

Формула Ландауера для провідності

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (79)$$

буде для нас вихідною точкою; вона справед-

лива для провідників будь-якої вимірності, якщо тільки використано коректні вирази для числа мод провідності $M(E)$.

Розгляньмо 2D провідник, провідність якого запишемо в вигляді

$$G = \frac{1}{\rho_{2D}} \frac{W}{L} = \sigma_S \frac{W}{L}. \quad (80)$$

Пізніше ми пересвідчимося, що в масивних і довгих 2D провідниках, які працюють у дифузійному режимі, питома поверхнева провідність σ_S не залежить від ширини W і довжини L провідника, натомість для коротких провідників σ_S починає залежати від довжини провідника, а для вузьких провідників провідність зростає зі збільшенням їхньої ширини східчасто.

Основну увагу ми приділимо 2D провідникам, хоч схожі міркування й викладки можна провести й для 1D та 3D провідників (для них ми наведемо лишень кінцеві формули). Щодо формули Ландауера (79) нагадаємо, що множник $(-\partial f_0 / \partial E)$ є наслідком розкладу в ряд Тейлора різниці функцій розподілу на контактах провідника у припущенні, що температура обох контактів однакова.

7.1. 2D балістичні резистори

У балістичних 2D резисторах коефіцієнт проходження $T(E) = 1$, а число мод провідності в (79), згідно до (33), $M(E) = WM_{2D}(E)$. Розгляньмо докладніше множник $(-\partial f_0 / \partial E)$ у формулі Ландауера, який отримав назву «фермівського вікна провідності».

На рис. 5 якісно зображено графік функції Фермі $f_0(E)$ і функції $(-\partial f_0 / \partial E)$ в залежності від енергії E .

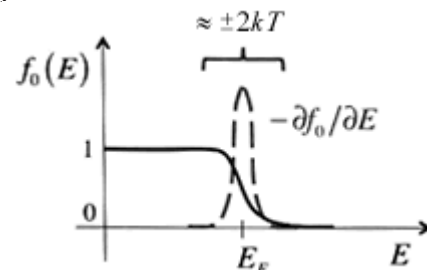


Рис. 5 – Фермівське вікно провідності.

Ми бачимо, що функція $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$ суттєво відмінна від нуля тільки в околі $\sim \pm 2 kT$ поблизу енергії Фермі E_F . Площа під цією кривою дорівнює одиниці, тож для низьких температур фермівське вікно провідності можна записати через дельта-функцію:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx \delta(E - E_F). \quad (81)$$

Використовуючи (81) і $T(E) = 1$, з формули Ландауера (79) отримаємо вираз для балістичної провідності

$$G^{ball} = \frac{2q^2}{h} M(E_F), \quad (82)$$

який є загальним і справедливим для резисторів будь-якої вимірності. Якщо число мод невелике, то його можна встановити з експериментальних вимірювань, і тоді провідність і, відповідно, опір не можуть набувати довільних значень, а квантуються згідно з

$$R^{ball} = \frac{h}{2q^2} \frac{1}{M(E_F)} = \frac{12.9}{M(E_F)} [кОм]. \quad (83)$$

Величину $R = \frac{h}{q^2} = 25,812807572 \text{ к}\Omega$ називають сталою Клітцинга на честь ученого, який, відкривши 1980 р. цілочисельний квантовий ефект Холла, вперше виявив можливість квантування опору. У 1998 році саме це значення було оголошено Міжнародним консультативним комітетом еталонним для визначення електричного опору. Наголосімо на важливій обставині: опір у балістичному режимі не залежить від довжини провідника. Це є фізично очікуваним результатом: лінійна залежність опору від L у виразах (76) – (78) є наслідком припущення про дифузійний характер руху електронів, яке було використано «за умовчанням», і за якого довший провідник означає більшу міру розсіяння. Натомість балістичний резистор електрон проходить без розсіяння взагалі.

Той факт, що опір квантується, надійно встановлено експериментально [12, 13]. В екс-

периментах ширина резистора W (2D каналу провідності у квантовій ямі $\text{AlAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) контролювалася електростатичною напругою на затворі V_G (достатньо велика негативна напруга на затворі взагалі «закриває» канал для електронів, і провідність стає рівною нулеві). Балістичний режим транспорту забезпечувався низькою температурою. Зі зменшенням негативної напруги на затворі й відповідним збільшенням ширини резистора провідність зростає сходишками (рис. 6) у відповідності до формули (82).

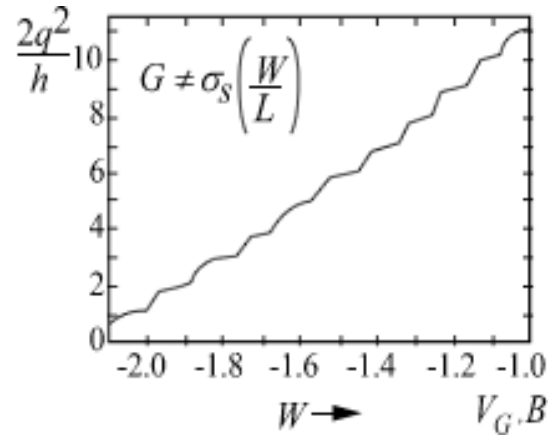


Рис. 6 – Квантування провідності електронного газу в інтерфейсі $\text{AlAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [12, 13].

Відзначмо, що східчастий характер провідності в сучасних експериментах спостерігається навіть при кімнатних температурах завдяки проведенню вимірювань на нанорезисторах, де балістичний режим транспорту зумовлений вже не низькою температурою, а малими лінійними розмірами резистора між контактами 1 і 2.

7.1.1. Широки 2D балістичні резистори при $T = 0^\circ \text{K}$

Ширина W резистора може стати настільки великою, що на ній вкладається дуже велике число півдовжин де бройлівських хвиль, і тому число мод провідності експериментально визначити вже неможливо. В цьому випадку, наприклад, для параболічного закону дисперсії з формул (34) і (43) маємо:

$$M(E_F) = WM_{2D}(E_F) = g_v W \frac{\sqrt{2m^*(E_F - E_C)}}{\pi \hbar}. \quad (84)$$

Число мод M_{2D} зручно пов'язати з поверхневою концентрацією електронів n_s , яку зазвичай можна надійно визначити експериментально. Всі стани з хвильовими векторами $k < k_F$ при $T = 0^\circ K$ зайнято електронами. Для поверхневої концентрації маємо:

$$n_s = g_v \frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2} \times 2 = g_v \frac{k_F^2}{2\pi}, \quad (85)$$

де двійка враховує спінове виродження, а g_v – долинне виродження. Звідси знаходимо k_F через поверхневу концентрацію і підставляємо в (37), тож остаточно

$$M_{2D}(E_F) = \sqrt{2g_v \frac{n_s}{\pi}}. \quad (86)$$

Рівняння (86) пов'язує число мод при енергії, що дорівнює енергії Фермі, з поверхневою густиною електронів 2D балістичного провідника. Звернімо увагу на те, що цей результат не передбачає якогось певного закону дисперсії, важливо лишень, що зонна структура ізотропна. А ось зв'язок k_F і E_F вже потребує конкретного закону дисперсії. Наприклад, для параболічної дисперсії хвильовий вектор k_F визначається з

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = E_F - E_C. \quad (87)$$

7.1.2. Широкі 2D балістичні резистори при $T > 0^\circ K$

Наближення (81) добре працює при низьких температурах. При вищих, або ж кімнатних температурах інтеграл у формулі Ландауера (79) слід ретельно обраховувати. Скориставшись виразом для фермівської функції, для балістичної 2D провідності ($T = 1$) маємо:

$$G_{2D}^{ball} = \frac{2q^2}{h} \int WM_{2D}(E) \left(-\frac{\partial}{\partial E} \right) \frac{1}{\exp(E - E_F/kT) + 1} dE. \quad (88)$$

Такі інтеграли часто зустрічаються в фізиці напівпровідників. Розглянемо інтеграл у (88) докладніше.

Фермівська функція f має корисну властивість:

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = \left(+\frac{\partial f}{\partial E_F} \right), \quad (89)$$

яка дозволяє похідну в формулі (88) винести з-під знаку інтегралу. Тоді замість (88) з урахуванням (34) одержимо:

$$G_{2D}^{ball} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^*}}{\pi \hbar} \left(\frac{\partial}{\partial E_F} \right) \int_0^\infty \frac{\sqrt{E - E_C}}{\exp(E - E_F/kT) + 1} dE. \quad (90)$$

Далі введемо нові змінні:

$$\eta \equiv (E - E_C) / kT; \quad \eta_F \equiv (E_F - E_C) / kT, \quad (91)$$

що дозволяє перетворити інтеграл (90) до вигляду

$$G_{2D}^{ball} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \eta_F} \right) \int_0^\infty \frac{\sqrt{\eta}}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta. \quad (92)$$

Інтеграли цього типу аналітично не обчислюються. Вони часто зустрічаються в фізиці напівпровідників і отримали назву інтегралів Фермі – Дірака. До виразу (92) входить інтеграл

$$\mathfrak{S}_{1/2}(\eta_F) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2}}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta, \quad (93)$$

який називається інтегралом Фермі – Дірака порядку одна друга.

При диференціюванні інтегралу Фермі – Дірака по його параметру порядок інтегралу знижується на одиницю:

$$\frac{dF_j(\eta_F)}{d\eta_F} = F_{j-1}(\eta_F). \quad (94)$$

Використаємо цю властивість і перепишемо вираз (92) так:

$$G_{2D}^{ball} = \frac{2q^2}{h} \frac{g_v W \sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathfrak{S}_{-1/2}(\eta_F) = \frac{2q^2}{h} \langle WM_{2D} \rangle, \quad (95)$$

де

$$\langle M \rangle = \langle WM_{2D} \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} WM_{2D}(kT) \mathfrak{S}_{-1/2}(\eta_F), \quad (96)$$

а $WM_{2D}(kT)$ – це $WM_{2D}(E - E_C)$, обчислене при енергії $E - E_C = kT$. Порівнюючи (95) з (82), ми бачимо, що провідність 2D балістич-

них резисторів при скінченних температурах має той самий вигляд, що й при $T = 0^\circ K$: потрібно тільки замінити число мод $M(E_F)$ на $\langle M \rangle$ згідно з (96). Величина $\langle M \rangle$ – це число мод провідності 2D балістичного резистора при скінченних температурах у фермівському вікні провідності $-\partial f_0 / \partial E$.

При опрацюванні експериментальних даних для 2D провідників частіше легше визначити поверхневу концентрацію електронів n_S , аніж енергію рівня Фермі E_F , проте, вони пов'язані між собою і, знаючи n_S , можна знайти E_F . Для параболічної дисперсії цей зв'язок дається таким виразом:

$$n_S = \int_0^\infty D_{2D}(E) f_0(E) dE = g_v \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \mathfrak{Z}_0(\eta_F) = N_{2D} \mathfrak{Z}_0(\eta_F). \quad (97)$$

Ми розглянули тільки один приклад 2D резистора з параболічним законом дисперсії. Аналогічні інтеграли Фермі – Дірака різного порядку часто зустрічаються в задачах про провідники різної розмірності з різною зонною структурою. Тому корисно зупинитися на властивостях інтегралів Фермі – Дірака докладніше.

7.1.3. Інтеграл Фермі – Дірака

Інтеграл Фермі – Дірака порядку j в загальному вигляді записується як

$$\mathfrak{Z}_j(\eta_F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\eta^j}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta, \quad (98)$$

де гамма-функція при n цілому додатному дорівнює:

$$\Gamma(n) = (n-1)!; \quad (99)$$

у загальному випадку

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p) \quad (100)$$

і

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}. \quad (101)$$

Важливою властивістю інтегралу Фермі – Дірака є пониження його порядку при диференціюванні інтегралу за його параметром (94). Наприклад, існує очевидний аналітичний вираз для інтегралу нульового порядку [14]:

$$\mathfrak{Z}_0(\eta_F) = \log(1 + e^{\eta_F}). \quad (102)$$

Тоді для інтегралу мінус першого порядку маємо:

$$\mathfrak{Z}_{-1}(\eta_F) = \frac{d\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{d\eta_F} = \frac{1}{e^{-\eta_F} + 1}. \quad (103)$$

Діючи таким чином далі, можемо отримати аналітичні поліноміальні вирази для будь-якого цілого від'ємного порядку [14 – 16].

Для невідроджених напівпровідників носії описуються статистикою Максвелла – Больцмана,

$$\eta_F = (E_F - E_C) / kT \ll 0, \quad (104)$$

і тому для них інтеграл Фермі – Дірака будь-якого порядку зводяться до експонент:

$$\mathfrak{Z}_j(\eta_F) \rightarrow e^{\eta_F}. \quad (\eta_F \ll 0) \quad (105)$$

Докладну інформацію про роль інтегралів Фермі – Дірака в фізиці напівпровідників, асимптотичні й наближені вирази для них, методи й алгоритми високоточних і наближених методів їх розрахунку можна знайти в [16].

7.1.4. 2D дифузійні резистори

Перейдімо від розгляду балістичного транспорту з коефіцієнтом проходження $T(E) = 1$, до дифузійного транспорту з $T(E) = \lambda(E)/L$. Модель ЛДЛ застосовна до провідників будь-якої вимірності, однак, ми як і раніше зосередимося на 2D резисторах, а пізніше наведемо остаточні результати для 1D і 3D резисторів.

Формулу Ландауера (79) перепишемо з урахуванням (33) для 2D резистора в дифузійному режимі, а саме:

$$G_{2D}^{diff} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (106)$$

Поява множника W/L узгоджується з традиційним визначенням (77) опору 2D провідника. В моделі ЛДЛ пропорційність провідності ширині резистора W пояснюється тим, що число мод провідності 2D провідника має бути пропорційне його ширині, а обернена пропорційність довжині провідника L спричинена дифузійним режимом.

7.1.5. Широки 2D дифузійні резистори при $T = 0^\circ \text{K}$

Для низьких температур вираз (106) суттєво спрощується за рахунок звуження фермівського вікна провідності (81), тож можна відразу записати

$$G_{2D}^{diff} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} M_{2D}(E_F) \lambda(E_F) = \frac{\lambda(E_F)}{L} G_{2D}^{ball}, \quad (107)$$

де балістична провідність визначається виразом (82). Якщо відома довжина вільного пробігу λ , то провідність у дифузійному режимі можна вирахувати через її значення в балістичному режимі.

Вище ми обговорили провідність в області низьких температур окремо для балістичного, й окремо для дифузійного режиму. Однак можна розглянути весь спектр режимів при переході від балістичного до дифузійного. Використаємо загальний вираз для коефіцієнту проходження (56)

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}, \quad (108)$$

тоді

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} W M_{2D}(E_F) \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} = \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} G_{2D}^{ball}, \quad (109)$$

а для опору маємо:

$$R_{2D} = \left(1 + \frac{L}{\lambda(E_F)} \right) R_{2D}^{ball}. \quad (110)$$

Отриманий результат свідчить, що при низьких температурах опір 2D резистора в дифузійному режимі пропорційний довжині провідника, а в балістичному режимі - від довжини провідника не залежить.

7.1.6. Широки 2D дифузійні резистори при $T > 0^\circ \text{K}$

При ненульових температурах інтеграл (106) потрібно вираховувати. Діятимемо далі так: помноживши й розділивши його на

$$\langle M_{2D} \rangle \equiv \int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (111)$$

перепишемо (106) як:

$$G_{2D}^{diff} = \frac{2q^2}{h} \langle WM_{2D} \rangle \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} = \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} G_{2D}^{ball}, \quad (112)$$

де $\langle WM_{2D} \rangle$ визначається виразом (96), а усереднене значення довжини вільного пробігу визначається як

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{\int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} = \frac{\langle M \lambda \rangle}{\langle M \rangle}. \quad (113)$$

Вираз (112) за формою такий самий, як і (107). При низьких температурах ми $\langle M \rangle$ замінимо на $M(E_F)$, а $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ на $\lambda(E_F)$. Одиничні й подвійні кутові дужки вказують тільки на те, як здійснюється усереднення.

Щоб реально оцінити усереднене значення довжини вільного пробігу, потрібно знати дисперсійне співвідношення й вираз для залежності $\lambda(E)$. У випадку найбільш розповсюджених механізмів розсіяння $\lambda(E)$ може бути апроксимоване степеневим виразом [17]

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r, \quad (114)$$

де значення показника степені r визначається вибором конкретного механізму розсіювання, а константа λ_0 в типових випадках ще й залежить від температури. Наприклад, при розсіянні електронів на акустичних фонах у 3D провіднику $r = 0$, а на заряджених домішках $r = 2$, що зумовлено різним виглядом інтегралу взаємодії електрона в одному випадку – з фононом, у другому – з кулонівським потенціалом іонізованої домішки [17].

Обидва інтеграли в (113) записуються через інтеграли Фермі – Дірака таким чином:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0 \times \left(\frac{\Gamma(r + 3/2)}{\Gamma(3/2)} \right) \times \left(\frac{\mathfrak{F}_{r-1/2}(\eta_F)}{\mathfrak{F}_{-1/2}(\eta_F)} \right). \quad (115)$$

Якщо $r = 0$, то середня довжина вільного пробігу не залежить від енергії, і $\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0$.

Ми не розглядатимемо весь спектр переходу від балістичного режиму до дифузійного. Відзначимо тільки, що, коли середня довжи-

на вільного пробігу не залежить від енергії, то опір резистора дорівнює

$$R = \left(1 + \frac{L}{\lambda_0}\right) R^{ball}, \quad (116)$$

що дуже схоже на вже відомий результат (110).

Далі ми обговоримо з позицій транспортної моделі ЛДЛ деякі загальні питання електронного транспорту, такі, як поняття рухливості носіїв струму, способи запису виразів для поверхонь 2D провідності, дисипацію потужності й падіння напруги в балістичному резисторі, й наведемо основні результати для 1D і 3D провідників.

8. Поняття рухливості

Традиційно обговорення опору провідників починають з визначень (76) – (78), які, однак, не можна застосувати до резисторів, які працюють у балістичному, чи квазібалістичному режимі. У цих режимах не зовсім зрозуміло, що означає рухливість носіїв струму. Транспортна модель ЛДЛ має за відправний пункт формулу Ландауера (79), й тому вона застосовна для всіх транспортних режимів, від балістичного до дифузійного, включаючи всі проміжні випадки. В рамках моделі ЛДЛ взагалі немає потреби звертатися до поняття рухливості. Проте це поняття й донині широко застосовують, попри те, що в окремих випадках воно призводить до непорозумінь. Так, вирази (76) – (78) стверджують, що провідність пропорційна добутковій концентрації електронів і рухливості, тоді як, згідно з формулою Ландауера (79), провідність визначають тільки ті електрони, енергія яких потрапляє в фермів-

ське вікно провідності $(-\partial f_0 / \partial E)$. Для напівпровідників *n*-типу це можуть бути всі електрони в зоні провідності (випадок невідроджених напівпровідників), а може бути й тільки мала їх частина (вироджені напівпровідники). Тому слід обговорити межі застосовності поняття рухливості в рамках концепції ЛДЛ.

Прирівняємо провідність за формулою Ландауера (79) і провідність 2D провідника за виразом (77):

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} \int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE \equiv n_s q \mu \frac{W}{L}. \quad (117)$$

Звідси формальну рухливість для 2D резистора можна записати як:

$$\mu_{2D}^{app} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int T(E) L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (118)$$

Цей вираз ми візьмемо як визначення рухливості, яке, таким чином, сильно відрізняється від того визначення, яке виникає в моделі Друде [18]

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*}, \quad (119)$$

де τ – середній час розсіяння, або інакше, час релаксації імпульсу. Ми називаємо рухливість (118) формальною, бо це визначення (118) застосовне як для балістичної рухливості, так і для дифузійної. Наприклад, поклавши коефіцієнт проходження $T(E) = 1$, для балістичної рухливості одержуємо:

$$\mu_{2D}^{ball} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE; \quad (120)$$

аналогічно, поклавши $T(E) = \lambda(E)/L$, отримаємо вираз для дифузійної рухливості:

$$\mu_{2D}^{diff} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (121)$$

Концепцію балістичної рухливості ввів у обіг Шур [19]; вона виявилася корисною для аналізу різних електронних пристроїв [20]. Порівнюючи вирази (120) і (121), ми бачимо, що дифузійна рухливість відрізняється від балістичної тільки заміною середньої довжини вільного пробігу на просто довжину балістичного резистора. Така заміна фізично виглядає цілком умотивовано. Адже рівновага в контактах досягається швидко за рахунок інтенсивних процесів розсіяння. Електрон, інжектований у балістичний канал витоком, брав участь у розсіянні у витоку, а наступного разу розсіявся, вже потрапивши у стік. Відстань між цими подіями – якраз і є довжиною резистора L , що й відіграє роль довжини вільного пробігу електрона. А в дифузійному випадку такою довжиною очевидно є $\lambda(E)$.

Проблеми в наноелектроніці виникають в області, проміжній між балістичним і дифузійним граничними режимами. В цій області коефіцієнт проходження визначається виразом (108) і можна показати [20], що для формальної рухливості має місце таке співвідношення:

$$\frac{1}{\mu^{app}} = \frac{1}{\mu^{diff}} + \frac{1}{\mu^{ball}}. \quad (122)$$

Воно схоже на традиційне правило Матіссена [17, 21], що відбиває фундаментальну фізичну обставину: сумарна обернена довжина вільного пробігу електрона дорівнює сумі обернених довжин вільного пробігу щодо всіх можливих механізмів розсіяння. Тому по-інакшому можемо запровадити в (121) формальну довжину вільного пробігу як:

$$\frac{1}{\lambda^{app}} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{L}. \quad (123)$$

Отже, в граничних випадках формальна довжина вільного пробігу переходить або в реальну середню довжину вільного пробігу (дифузійний режим), або ж у довжину резистора (балістичний режим).

Вважаючи, що закон дисперсії параболічний, навіть у найзагальнішому випадку можемо записати рухливість через інтеграли Фермі – Дірака. Для початку розглянемо найпростіший випадок, коли $T = 0^\circ K$. Концентрація електронів у зоні провідності 2D-провідника дорівнює:

$$n_s = g_v \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_C) = D_{2D} (E_F - E_C), \quad (124)$$

а з формули (33) випливає, що

$$M_{2D} = \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+ \rangle D_{2D}, \quad (125)$$

де швидкість

$$\langle v_x^+ \rangle = \frac{2}{\pi} v_F \quad (126)$$

записується через фермівську швидкість v_F .

Використовуючи (120) і (121) разом із (124) і (125), знаходимо, що

$$\mu_{2D}^{ball} = \frac{\bar{D}_{2D}^{ball}}{(E_F - E_C)/q}, \quad (127)$$

$$\mu_{2D}^{diff} = \frac{\bar{D}_{2D}^{diff}}{(E_F - E_C)/q}, \quad (128)$$

де коефіцієнти дифузії визначаються виразами:

$$\bar{D}_{2D}^{ball} = \langle v_x^+ \rangle \frac{L}{2}, \quad (129)$$

$$\bar{D}_{2D}^{diff} = \langle v_x^+ \rangle \frac{\lambda(E_F)}{2}. \quad (130)$$

Рівняння (127) і (128) нагадують співвідношення Ейнштейна між рухливістю і коефіцієнтом дифузії (75), де роль kT відіграє різниця $E_F - E_C$, бо ми розглядаємо випадок, коли $T = 0^\circ K$.

Рівняння (130) дає звичне визначення коефіцієнта дифузії, а ось (129) запроваджує нове поняття «балістичного коефіцієнта дифузії».

9. Способи запису 2D провідності

Згідно з виразом (107), питома дифузійна провідність, або ж інакше поверхнева провідність, при $T = 0^\circ K$ визначається формулою:

$$\sigma_s = \frac{2q^2}{h} M_{2D}(E_F) \lambda(E_F). \quad (131)$$

Однак вирази для поверхневої провідності зустрічаються в різних формах запису. Тому розглянемо ті з них, які зустрічаються найчастіше.

Нам уже відомий вираз для $M_{2D}(E)$ з (33), а саме:

$$M_{2D}(E) = \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (132)$$

де для середньої швидкості у випадку параболічного закону дисперсії та ізотропної швидкості маємо рівняння (30), а саме:

$$\langle v_x^+ \rangle = \frac{2}{\pi} v. \quad (133)$$

Далі при розгляді загальних питань розсіяння при електронному транспорті для середньої довжини вільного пробігу в (131) ми одержимо

$$\lambda(E) = \frac{\pi}{2} v(E) \tau(E), \quad (134)$$

де τ – час імпульсної релаксації, тобто, час між двома послідовними актами розсіяння. Використовуючи (133) і (134), для поверхневої провідності (131) отримаємо широко використовуваний вираз:

$$\sigma_S = q^2 D_{2D}(E_F) \frac{v^2(E_F) \tau(E_F)}{2}. \quad (135)$$

Визначаючи електронний коефіцієнт дифузії як:

$$\bar{D}(E_F) = \frac{v^2(E_F) \tau(E_F)}{2}, \quad (136)$$

перепишемо (135) ще в одній формі:

$$\sigma_S = q^2 D_{2D}(E_F) \bar{D}(E_F). \quad (137)$$

Нарешті, для параболічного закону дисперсії

$$\frac{1}{2} m^* v^2(E_F) = E_F - E_C, \quad (138)$$

використавши (124), перепишемо (135) як

$$\sigma_S = n_S q \mu, \quad (139)$$

де рухливість має відомий з теорії Друде вигляд

$$\mu = \frac{q \tau(E_F)}{m^*}. \quad (140)$$

Вираз (140) добре відомий і дуже часто використовується, однак він не може бути базовим для аналізу роботи певного електронного пристрою. Типовим прикладом його незастосовності є графен, де зонний спектр є не параболічним, а лінійним, і формально ефективна маса носіїв дорівнює нулеві. Проте вихідні вирази (135) і (137) добре працюють і для графену.

Підіб'ємо підсумки. Ми отримали чотири різні способи запису питомої 2D провідності при $T = 0^\circ \text{ K}$. Це вирази (131), (135), (137) і пара виразів (139)–(140). Усі ці вирази еквівалентні, але можуть застосовуватися в різних випадках. Формула (131) пов'язує питому провідність із числом мод провідності. Для користування формулами (135) і (137) потрібно знати густину станів резистора і швидкість носіїв

(або їх коефіцієнт дифузії) для енергії Фермі. Вираз (139) пов'язує питому провідність із поверхневою концентрацією електронів. Звичайно, роль фермівського вікна провідності $(-\partial f_0 / \partial E)$ залишається колишньою: провідність визначають тільки ті електрони, енергія яких потрапляє у вікно $\sim \pm 2 kT$ в околі енергії E_F .

При ненульових температурах замість виразу (131) маємо:

$$\sigma_S = \frac{2q^2}{h} \int M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (141)$$

Зручно ввести питому поверхневу провідність у диференціальній формі $\sigma'_S(E)$, а саме:

$$\sigma_S = \int \sigma'_S(E) dE, \quad (142)$$

де

$$\sigma'_S(E) = \frac{2q^2}{h} M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (143)$$

Повну провідність (142) одержуємо підсумовуванням провідностей за всіма модами резистора. Формулу (143) для випадку ненульових температур можна записати по-різному так само, як це було показано вище для $T = 0^\circ \text{ K}$.

10. Дисипація потужності в балістичних резисторах

Будь-який провідник, на який подано напругу V , розсіює потужність $P = VI = V^2/R$. Дисипація потужності зазвичай відбувається внаслідок електрон-фононої взаємодії, енергія якої передається гратці провідника й провідник через це гріється. В балістичних резисторах транспорт електронів відбувається без розсіяння, однак розсіювана потужність далі дорівнює V^2/R . Де ж ця потужність розсіюється? Оскільки дисипація потужності не може відбуватися в каналі провідності, то відповідь єдина – на контактах, де відбуваються інтенсивні процеси розсіяння, скеровані на швидке відновлення рівноважних значень електрохімічних потенціалів.

Дисипація потужності в балістичному резисторі ілюструється на рис. 7.

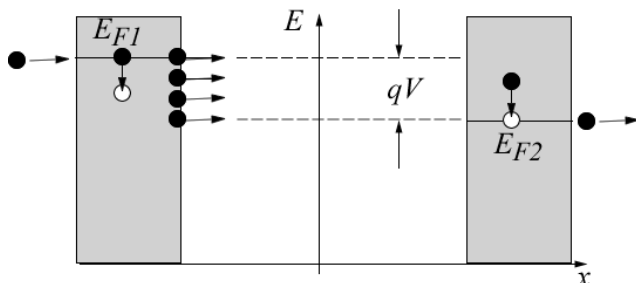


Рис. 7 – Дисипація потужності в балістичному каналі відбувається на контактах.

Струм виникає в фермівському вікні, створеному різницею фермівських функцій $f_1 - f_2$, відмінною від нуля, і, відповідно, різницею електрохімічних потенціалів $E_{F1} - E_{F2} = qV$. Як схематично зображено на рис. 7, коли електрон залишає контакт 1, у спектрі цього контакту утворюється незаповнений стан («дірка»). Досягнувши без розсіювання (балістично) контакту 2 з надлишком енергії порівняно з хімпотенціалом E_{F2} , електрон втрачає цей надлишок шляхом непружного розсіювання на контакті 2. Якщо електрон має енергію посередині вікна $E_{F1} - E_{F2} = qV$, то втрата енергії на контакті 2 складатиме $qV/2$ (половина потужності розсіюється на контакті 2). Зарядова нейтральність контакту 2 відновлюється тоді, коли електрон залишить контакт 2 і через зовнішнє коло досягне контакту 1. Електрон входить у контакт 1 з енергією E_{F1} , втрачає енергію непружно, заповнюючи собою «дірку», і розсіюючи потужність $qV/2$ на контакті 1.

Легко узагальнюючи ці міркування на будь-яку енергію електрона у вікні $E_{F1} - E_{F2} = qV$, доходимо висновку, що при транспорті електрона в балістичному каналі в режимі лінійного відгуку на двох контактах розсіюється сумарна потужність IV .

11. Падіння напруги в балістичних резисторах

В дифузійному режимі роботи однорідного резистора напруга падає лінійно вздовж його довжини. А як падає напруга в балістичному резисторі? Відповідь очікувана – на контактах (рис. 8).

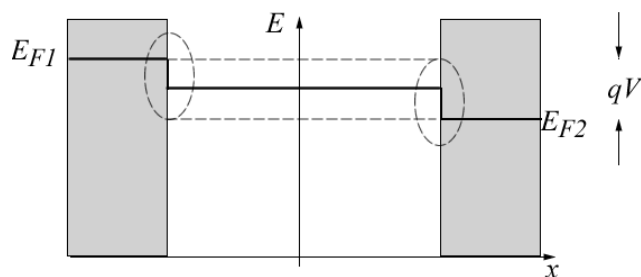


Рис. 8 – В балістичному резисторі з рівноправними контактами падіння напруги $V = (E_{F1} - E_{F2})/q$ розподіляється на контактах порівну.

В контакті 1 існує один визначений рівень Фермі E_{F1} , аналогічно і в контакті 2 існує теж один рівень E_{F2} . Всередині ж усього пристрою рівнів Фермі два. Частина електронних станів резистора заповнюється витоком. Оскільки вони перебувають у рівновазі з ним, то заповнені вони відповідно до фермівської функції контакту 1. Аналогічна ситуація має місце з боку стоку. Відповідні стани заповнюються згідно з фермівською функцією контакту 2. Розрахунок середнього значення електрохімічного потенціалу всередині балістичного резистора [5] дає результат, зображений на рис. 8. Коли контакти рівноправні, половина падіння електрохімічного потенціалу відбувається на витоку, половина – на стоці. Тому балістичний опір у 12.9 кОм називають ще квантом контактного опору.

12. 1D і 3D резистори

Формула Ландауера для провідності (79) справедлива для резисторів будь-якої вимірності, потрібно тільки коректно вирахувати число мод провідності $M(E)$. Повернімося до 2D провідника. Він довший у напрямку руху електронів і має скінченну ширину W . Рух електронів у перпендикулярному до довжини й ширини напрямку обмежений потенціальною ямою, їхня енергія квантується і визначається для нескінченно глибокої ями виразом:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} n^2, \quad (144)$$

де a – ширина потенціальної ями, n – ціле квантове число, яке перераховує рівні енергії

(«підзони»), з котрих заповнено електронами ті, що розташовані нижче від рівня Фермі. Кожна з підзон є модою (каналом) провідності для струму. Якщо ширина резистора W достатньо велика, то енергії нижчих підзон близькі одна до одної, і багато цих підзон заселено електронами. В цьому випадку число підзон пропорційне ширині резистора W , а для числа мод провідності маємо:

$$M(E) = WM_{2D}(E) = \sum_{n=1}^N W g_v \frac{\sqrt{2m^*(E - \varepsilon_n)}}{\pi \hbar}, \quad (145)$$

де сума береться за всіма підзонами.

Тепер розгляньмо 1D провідник. Його можна уявити як гранично вузький 2D резистор. Якщо його ширина стає такою ж малою, як і товщина уздовж осі z , то всі підзони розташовані далеко одна від одної за енергією, і їх можна легко полічити, так що згідно з (33)

$$M(E) = M_{1D}(E) = \text{Число підзон з енергією, меншою від } E. \quad (146)$$

Нарешті, якщо й товщина, й ширина великі, значно більші від де бройлівської довжини хвилі, то ми маємо об'ємний 3D провідник, де всі підзони розташовані близько одна від одної і число мод провідності згідно з (33) дорівнює:

$$M(E) = AM_{3D}(E) = A g_v \frac{m^*(E - E_C)}{2\pi \hbar^2}, \quad (147)$$

де A – площа поперечного перерізу 3D провідника.

Для 1D резистора має місце суворе квантове обмеження руху в двох вимірах і число мод провідності дається простим виразом (146). Для 2D резистора суворе квантове обмеження залишається для руху вздовж тільки однієї осі, і число мод визначається виразом (145). Для 3D резистора квантових обмежень немає і число мод дається виразом (147). Ще раз нагадаємо, що формули (145) і (147) записано для параболічної дисперсії. Але їх неважко переписати для будь-якої аналітично визначеної дисперсії, наприклад, для лінійної, як це має місце в графені, якому ми присвятимо окрему статтю у рамках викладу концепції «знизу – вгору» транспортної моделі ЛДЛ. Якщо дисперсія задається емпірично, то залишається

застосувати чисельні методи. Щойно число мод оцінене, інтеграл у формулі Ландауера для провідності (79) також неважко оцінити для провідників будь-якої вимірності.

Вираз Ландауера (79) часом зручніше записати в іншому вигляді, а саме:

$$G = \frac{2q^2}{h} \langle\langle T \rangle\rangle \langle M \rangle, \quad \langle M \rangle = \int M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE, \quad (148)$$

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

Скористаємося загальним виразом для коефіцієнту проходження (108) і для простоти припустімо, що середня довжина вільного пробігу стала і дорівнює λ_0 . Тоді для провідності маємо:

$$G = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} \langle M \rangle. \quad (149)$$

У випадку параболічного закону дисперсії для 1D резистора запишемо:

$$\langle M_{1D} \rangle = \sum_i \mathfrak{Z}_{-1}(\eta_{Fi}), \quad (150)$$

де

$$\eta_{Fi} = \frac{E_F - \varepsilon_i}{kT}. \quad (151)$$

і підсумовування в (150) ведеться за підзонами.

При $T = 0^\circ \text{K}$ провідність 1D резистора спрощується до

$$G_{1D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} \times \text{Число підзон з енергією, меншою від } E_F. \quad (152)$$

У випадку статистики Максвелла – Больцмана

$$G_{1D} = q n_L \mu^{app} \frac{1}{L}, \quad (153)$$

де

$$\mu^{app} = \frac{\bar{D}}{(kT/q)}, \quad (154)$$

$$\bar{D} = \frac{v_T \lambda^{app}}{2}, \quad (155)$$

$$v_T = \sqrt{2kT / \pi m^*}, \quad (156)$$

$$\frac{1}{\lambda^{app}} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{L}. \quad (157)$$

Для 2D резистора одержуємо:

$$\langle M \rangle = W \langle M_{2D} \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} W M_{2D}(kT) \sum_i \mathfrak{F}_{-1/2}(\eta_{Fi}), \quad (158)$$

де для параболічного закону дисперсії

$$M_{2D}(kT) = g_v \frac{\sqrt{2m^* kT}}{\pi \hbar}. \quad (159)$$

При $T = 0^\circ K$ вираз (149) для 2D резистора спроститься до

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} W M_{2D}(E_F). \quad (160)$$

У випадку статистики Максвелла – Больцмана одержуємо:

$$G_{2D} = qn_s \mu^{app} \frac{W}{L}. \quad (161)$$

Нарешті, для 3D резистора маємо

$$\langle M \rangle = A \langle M_{3D} \rangle = A M_{3D}(kT) \mathfrak{F}_0(\eta_F), \quad (162)$$

де

$$M_{3D}(kT) = g_v \frac{m^* kT}{2\pi \hbar^2} \quad (163)$$

і

$$\eta_F = \frac{E_F - E_C}{kT}. \quad (164)$$

При $T = 0^\circ K$ вираз (149) для 3D резистора спрощується до

$$G_{3D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} A M_{3D}(E_F). \quad (165)$$

У випадку статистики Максвелла – Больцмана

$$G_{3D} = qn \mu^{app} \frac{A}{L}. \quad (166)$$

На завершення як приклад наведемо результат аналізу експериментальної вольт-амперної характеристики (ВАХ) вуглецевих нанотрубок. Це майже ідеальні 1D провідники. Експериментальні ВАХ одностінкових вуглецевих нанотрубок у металічному режимі завдовжки 1 мкм при $T = 4, 100, 200^\circ K$ у широкому діа-

пазоні напруг, отримані в [22], зображені на рис. 9.

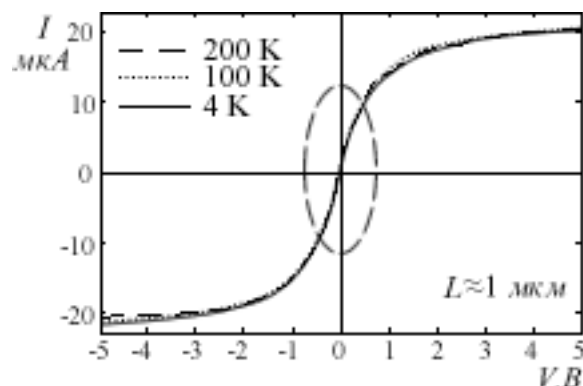


Рис. 9 – Вольт-амперна характеристика одностінкових вуглецевих нанотрубок у металічному режимі при трьох різних температурах [22]. Обведено ділянку лінійного відгуку.

З ділянки лінійного відгуку ВАХ отримуємо значення провідності 22 мкСм. Для таких вуглецевих нанотрубок наближення $T = 0^\circ K$ добре працює навіть для кімнатних температур, оскільки відстань між квантовими рівнями велика, і навіть при $T = 300^\circ K$ заселений електронами лише один найнижчий з-поміж них. Тому ми можемо використовувати вираз для провідності (152). Долинне виродження для вуглецевих нанотрубок дорівнює двійці. В припущенні, що заповнена лише одна підзона, для балістичної провідності одержуємо $G^{ball} = 154$ мкСм. Оцінка середнього шляху вільного пробігу з формули (152) дає $\lambda_0 = 167$ нм, що набагато менше від довжини використаних в експерименті нанотрубок (1 мкм), тому транспорт у таких нанотрубках дифузійний.

У цій статті ми прагнули продемонструвати, як використовувати формулу Ландауера для провідності за відсутності перепаду температур на кінцях провідника. Основні одержані результати можна коротко сформулювати так:

1. Усі провідники мають сталий опір навіть за відсутності розсіяння електронів. Балістичний опір – це нижня межа опору, яка вже не залежить від розмірів провідника. Для сучасних нанопристроїв цю межу можна ви-

явити навіть у експериментах при кімнатній температурі.

2. Балістичний опір квантується, квантом опору є величина $h/2q^2$.

3. Область переходу від балістичного транспорту до дифузійного стандартно описують у моделі ЛДЛ з допомогою коефіцієнту проходження.

4. Резистори усіх вимірностей 1D, 2D і 3D трактують у моделі ЛДЛ на один спосіб, а саме трактування припускає будь-який вигляд закону дисперсії.

5. При вивченні електричних властивостей будь-якого нового матеріалу, включаючи наносистеми, починати слід не від стандартних визначень (76) – (78), а з формули Ландауера (79).

На завершення наголосімо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications», прочитаних он-лайн в 2011 році проф. Марком Лундстромом (Mark Lundstrom), а також «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts», прочитаних он-лайн в 2012 і 2015 роках проф. Супріє Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Автори щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

1. R.Landauer, Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // IBM J. Res. Dev., 1, 3: 223 – 231 (1957).
2. R.Landauer, Electrical resistance of disordered one dimensional lattices// Philos. Mag., 21: 863 – 867 (1970).
3. R.Landauer, Spatial variation of currents and fields due to localized scat-

terers in metallic conduction // J.Math. Phys., 37, 10: 5259 (1996).

4. S.Datta, Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013: 2012, www.nanohub.org/courses/FoN1; 2015, www.edx.org/school/purdue).
5. S.Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems (Cambridge: Cambridge University Press: 2001).
6. S.Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor (Cambridge: Cambridge University Press: 2005).
7. M.Lundstrom, C.Jeong, Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763).
8. M.Lundstrom, Nanoscales Transistors (www.nanohub.org/courses/NT).
9. R.F.Pierret, Semiconductor Device Fundamentals (Reading, MA: Addison-Wesley: 1996).
10. C.Jeong, R.Kim, M.Luisier, S.Datta, M.Lundstrom. On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients, J.Appl.Phys., 107: 023707 (2010).
11. Howard C.Berg, Random walks in biology (Princeton: Princeton University Press: 1993).
12. B.J.van Wees, H.van Houten, C.W.J.Benakker, J.G.Williamson, L.P.Kouwenhoven, D.van der Marel, C.T.Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas, Phys. Rev. Lett., 60: 848 (1988).
13. D.F.Holcomb. Quantum Electrical Transport in samples of limited dimensions, Amer. J. Phys., 67, 4: 278 (1999).
14. D.Cvijovic. Fermi – Dirac and Bose – Einstein functions of negative integer order, Theoret. Math. Phys., 161, 3: 163 (2009).
15. R.Dingle. The Fermi – Dirac Integrals, Appl. Scientific Res., 6, 1: 225 (1957).
16. R.Kim, M.S.Lundstrom. Notes

- on Fermi – Dirac Integrals, www.nanohub.org/resources/5475.
17. Lundstrom Mark. Fundamentals of Carrier Transport, 2nd Ed. (Cambridge: Cambridge Univ. Press: 2000).
 18. Peter Yu, Manuel Cardona. Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties (Berlin: Springer: 2010).
 19. M.S.Shur. Low Ballistic Mobility in GaAs HEMTs, IEEE Electron Dev. Lett., 23, 9: 511 (2002).
 20. Jing Wang, Mark Lundstrom. Ballistic Transport in High Electron Mobility Transistors, IEEE Trans. Electron Dev., 50, 7: 1604 (2003).
 21. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, Физика твердого тела (М: Мир:1979).
 22. Zhen Yao, C.L.Kane, C.Dekker. High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes, Phys. Rev. Lett. 84, 13: 2941 (2000).

Стаття надійшла до редакції 30.06.2015 р.