
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

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ВИНИКНЕННЯ СТРУМУ, ФОРМУЛЮВАННЯ ЗАКОНУ ОМА І МОДИ ПРОВІДНОСТІ В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ–ВГОРУ»

Ю. О. Кругляк, Н. Ю.Кругляк, М. В.Стріха***

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

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

* Одеський національний університет ім. І. І.Мечникова

вул. Дворянська, 2, Одеса, Україна

тел. (048) 263-7785, E-mail: krtstudio@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

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ВИНИКНЕННЯ СТРУМУ, ФОРМУЛЮВАННЯ ЗАКОНУ ОМА І МОДИ ПРОВІДНОСТІ В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ–ВГОРУ»

Ю. О. Кругляк, Н. Ю.Кругляк, М. В.Стріха

Анотація. В рамках концепції «знизу–вгору», що широко застосовується в теоретичній і прикладній наноелектроніці, дано огляд загальних питань електронної провідності, причин виникнення струму та ролі електрохімічних потенціалів і фермівських функцій в цьому процесі, моделі пружного резистора, балістичного і дифузійного транспорту, моди провідності, провідників n- і p-типу та графену, обґрунтовано альтернативне формулювання закону Ома.

Ключові слова: наноелектроніка, молекулярна електроніка, знизу-вгору, електричний струм, електрохімічний потенціал, функція Фермі, пружний резистор, моди провідності, закон Ома, провідники n-типу, провідники p-типу, графен

LESSONS OF NANOELECTRONICS: CURRENT GENERATION, OHM'S LAW FORMULATION AND CONDUCTION MODES IN «BOTTOM-UP» APPROACH

Yu. O. Kruglyak, N. E. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. General questions of electronic conductivity, current generation based on the use of electrochemical potentials and Fermi functions, elastic resistor model, ballistic and diffusion transport, conductivity modes, n- and p-conductors and graphene, new formulation of Ohm's law are over-viewed in the frame of «bottom-up» approach, widely applied in modern nanoelectronics.

Keywords: nanoelectronics, molecular electronics, bottom-up, electric current, electrochemical potential, Fermi function, elastic resistor, conductivity modes, Ohm's law, n-type conductors, p-type conductors, graphene

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: ВОЗНИКНОВЕНИЕ ТОКА, ФОРМУЛИРОВКА ЗАКОНА ОМА И МОДЫ ПРОВОДИМОСТИ В КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ-ВВЕРХ»

Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В рамках концепции «снизу-вверх», широко применяемой в теоретической и прикладной нанoeлектронике, дан обзор общих вопросов электронной проводимости, причин возникновения тока и роли электрохимических потенциалов и фермиевских функций в этом процессе, модели упругого резистора, баллистического и диффузионного транспорта, мод проводимости, проводников n- и p-типа и графена и обоснована новая формулировка закона Ома.

Ключевые слова: нанoeлектроника, молекулярная электроника, снизу-вверх, электрический ток, электрохимический потенциал, функция Ферми, упругий резистор, моды проводимости, закон Ома, проводники n-типа, проводники p-типа, графен

Вступ

Бурхливий розвиток нанoeлектроніки протягом останніх 10–15 років призвів не тільки до створення і широкого використання нанотранзисторів та різноманітних інших нанорозмірних пристроїв, але й до глибшого розуміння суті фізичних процесів, що зумовлюють роботу таких пристроїв (виникнення струму, дисипації енергії тощо, див. [1–4]). Це тягне за собою необхідність перегляду змісту багатьох університетських курсів з фізики. Подібна ситуація мала місце півстоліття тому, коли відкриття транзистора й розвиток мікроелектроніки спричинили суттєвий перегляд університетських та інженерних курсів загальної фізики, не говорячи вже про спеціальні курси в галузі електроніки і суміжних дисциплін.

З часів становлення фізики твердого тіла використовувані в електроніці матеріали і речовини описували інтегральними характеристиками, такими, наприклад, як опір (це поняття запровадив німецький фізик Георг Ом ще 1826 року), провідність або коефіцієнт оптичного поглинання. З переходом у наш час до мезо- та наноскопіки нано- й молекулярні транзистори вимагають від самого початку для свого опису і моделювання законів квантової механіки і нерівноважної статистичної термодинаміки.

Згідно до закону Ома для ділянки електричного кола, опір R і провідність G провідника довжини L з площею поперечного перерізу A даються виразами:

$$R \equiv V / I = \rho L / A \quad \text{і} \quad 1 / R \equiv G = \sigma A / L, \quad (1)$$

де питомий опір ρ і обернена до нього питома провідність σ не залежать від геометрії провідника і є характеристиками матеріалу, з якого виготовлений провідник. Закон Ома стверджує, що, коли зменшити довжину провідника у декілька разів, то в це ж число разів зменшиться його опір. Але виникає запитання: якщо зменшити довжину каналу провідності до дуже маленьких розмірів, то чи опір практично «занулюватиметься»?

Класична теорія електропровідності: успіхи й поразки

У звичайних умовах, рухаючись по провіднику від контакту і до контакту, електрон встигає зазнати дуже багатьох актів розсіяння (значення довжин вільного пробігу в реальних провідниках і напівпровідниках при кімнатних температурах субмікронні). Саме в такому наближенні «дифузійного» руху німецький учений Пауль Друзе (1863–1906) побудував класичну електронну теорію електропровідності металів (1900).

Згідно з нею, струм у металі переносять електрони, які поводять себе як класичний ідеальний газ. У проміжках між зіткненнями (середній час вільного пробігу між двома зіткненнями позначимо τ) вони рухаються вільно, пробігаючи деякий шлях l . Зіткнення електронів відбуваються переважно з іонами ґратки, і це приводить до теплової рівноваги між електронним газом і кристалічною ґраткою (в цьому полягає відмінність електронного газу від звичайного, де молекули газу розсіюються одна на одній). Середню швидкість теплового руху електронів можна оцінити як: $\langle u \rangle \sim \sqrt{\frac{kT}{m}}$,

де T – температура, k – стала Больцмана, m – маса електрона. При кімнатній температурі ця швидкість за порядком величин дорівнює 10^7 см/с.

З прикладанням електричного поля E електрони з зарядом q починають рухатися з прискоренням:

$$a = \frac{q}{m} E. \quad (2)$$

Середня швидкість електронів, що переносять струм у полі, становитиме приблизно половину тієї швидкості, яку електрон набуде перед черговим зіткненням:

$$v = \frac{a\tau}{2}. \quad (3)$$

А густину струму з його «електростатичного визначення» (струм – це заряд, що проходить через одиницю перерізу за одиницю часу) легко записати як:

$$j = qnv. \quad (4)$$

Тут n – концентрація електронів (їх число в одиниці об'єму). Підставивши в цей вираз середню швидкість електронів (3), отримаємо:

$$j = \frac{q^2 n \tau}{2m} E. \quad (5)$$

Цей вираз збігається з записом закону Ома для ділянки кола в диференціальній формі:

$$j = \sigma E. \quad (6)$$

Більше того, пояснивши закон Ома, теорія дала й вираз для питомої електропровідності:

$$\sigma = \frac{q^2 n \tau}{2m}. \quad (7)$$

Оскільки концентрація електронів у всіх металах приблизно однакова, залежність провідності від температури й характеристик металу визначається середнім часом вільного пробігу. Більше того, оскільки з підвищенням температури електрони повинні розсіюватися інтенсивніше, середній час життя і провідність мають падати. Так теорія Друзе якісно пояснила добре відоме експериментально збільшення опору металів з температурою (що справедливо для діапазону не надто низьких температур).

Нарешті, на якісному рівні стала зрозуміла й різниця між металами й діелектриками: в перших є багато електронів провідності (це зумовлює їхній характерний «металічний» блиск

– поверхневий заряд добре відбиває світло), у других електронів провідності чомусь немає.

Для підтвердження теорії Друде був поставлений ряд дослідів. Німецький фізик Карл Рікке в 1901 році взяв три циліндри — два мідних і один алюмінієвий — з добре відшліфованими торцями, зважив їх і склав послідовно в коло мідь – алюміній – мідь. Через такий складений провідник протягом року безперервно пропускали постійний струм. За рік через цей провідник пройшов заряд близько 10^3 Кл. Дослідження циліндрів показало, що пропускання струму не вплинуло на вагу циліндрів. Більше того, не було виявлено проникнення одного металу в інший на торцях циліндрів. Таким чином, дослідди показували, що перенесення заряду в металі здійснюється не атомами, а таки електронами.

Проте, як виявилось майже відразу, в окремих металах (свинець, цинк, залізо, кобальт, вольфрам) полярність холлівської напруги протилежна очікуваній; заряд у цих металах переносять якісь позитивно заряджені частинки! Цього теорія Друде пояснити не могла. Не могла вона пояснити і наявності напівпровідників, матеріалів з опорами, вищими ніж у металів, але нижчими, ніж у діелектриків (одним з найперших напівпровідників, який почали активно вивчати, був закис міді Cu_2O , коричнево-червона речовина, що зустрічається в природі у вигляді мінералу куприту). Експериментально було встановлено, що опір напівпровідників зменшується зі зростанням температури й часом на багато порядків. Отже, можна було припустити, що з якихось причин різко збільшується концентрація електронів провідності, проте причини цього були також незрозумілі.

Нарешті, класична теорія електропровідності П. Друде виявилася повністю неспроможна пояснити відкрите в 1911 р. голландським ученим Гайке Камерлінгом-Оннесом (1853–1926) явище надпровідності (повного зникнення опору) металів при низьких температурах.

Відповідь дає квантова механіка

Після створення сучасної квантової механіки (роботи Вернера фон Гейзенберга й Ервіна Шредингера 1925–1927 років) спершу Воль-

фганг Паулі й Енріко Фермі побудували (1927) квантову теорію провідності, яка пояснила причини наявності провідників, напівпровідників і діелектриків, а у 1956 – 57 роках американці Джон Бардін, Леон Купер і Джон Шріффер, і незалежно від них наш земляк Микола Боголюбов побудували мікроскопічну теорію надпровідності (на жаль, Нобелівську премію з фізики 1972 року отримали за це лише американці).

Квантова теорія провідності Паулі – Фермі, розвинута пізніше багатьма іншими вченими, зводиться до кількох принципових положень.

Насамперед, електронні рівні в ізольованому атомі у кристалі розширюються в зони дозволених енергій за рахунок того, що хвильові функції цих близько розташованих атомів у кристалі перекриваються. Кожна з таких зон містить $2N$ електронних станів, де N для кристалу, елементарна комірка якого містить лише один атом, — просто число атомів. При цьому нижні рівні розширюються мало, а верхні, радіуси орбіт яких більші й хвильові функції яких суттєво перекриваються — значно сильніше [3].

Наступним питанням є те, яким чином електрони кристалу заповнюють ці зони дозволених енергій при нульовій температурі. Якщо верхня з зон, де електрони ще є, виявляється заповненою наполовину (тобто в ній є N електронів), то електрони, розташовані в імпульсному просторі поблизу рівня максимально можливої енергії (рівня хімічного потенціалу або ж рівня Фермі), можуть легко набувати енергію, прискорюватися в електричному полі і відтак брати участь у провідності. При цьому теорія зразу пояснює припущення Друде, чому в металі на один атом припадає один електрон провідності. Адже всі інші електрони кристалу щільно заповнюють нижчі енергетичні рівні і не можуть набувати енергії від зовнішнього електричного поля (для них немає вільних енергетичних станів згори в енергетичному інтервалі qEa , де a – величина порядку сталої кристалічної ґратки).

Якщо ж верхня з зон, де є електрони, при нульовій температурі заповнена ними повністю, а вища порожня зона (при цьому говорять про

валентну зону і зону провідності) відокремлена від неї енергетичною щілиною «забороненої зони» E_g , в якій дозволених електронних станів немає, то провідність неможлива. При цьому ми маємо діелектрик чи напівпровідник. Принципової фізичної відмінності між ними немає, різниця полягає лишень у величині щілини E_g . Прийнято вважати, що при $E_g < 3 \text{ eV}$ матеріал є напівпровідником, а при ширшій щілині – діелектриком. Напівпровідники проводять за рахунок того, що при ненульових температурах з'являється певна кількість вільних електронів у зоні провідності (і/або дірок у валентній зоні). Вони з'являються за рахунок термічних або фотопереходів між валентною зоною і зоною провідності, або ж (цей канал істотніший для напівпровідників з достатньо широкою щілиною E_g) переходів між зоною дозволених енергій і рівнями локалізованих станів у щілині. Зрозуміло, що зі збільшенням температури число носіїв струму в напівпровіднику експоненційно зростає.

Нові питання і нові відповіді

Така теорія чудово працювала для металів і напівпровідників упродовж кількох десятиліть. Проте важливо зазначити, що від створення першого транзистора (1947) і до початку 1990-х величина робочої області приладів мікроелектроніки лишалася ще достатньо великою порівняно як з довжиною вільного пробігу, так і з довжиною хвилі де Бройля λ , що відповідає рухові електрона з імпульсом \vec{p} :

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}, \quad (8)$$

де h – квантова стала Планка. Таким чином, все ще можна було користуватися наближенням «дифузійного» й квазікласичного руху носіїв заряду, провідність яких наближено описувалася виразом (7), де m , щоправда, набувало вже змісту ефективної маси електронів чи дірок.

Довжина каналу провідності в сучасних польових транзисторах $\sim 40 \text{ нм}$, що відповідає декільком сотням атомів. Таким чином, ця величина тільки в рази перевищує довжину хвилі де Бройля для «теплових» електронів у найпоширенішому матеріалі сучасної електроніки

– кремнії – при кімнатній температурі. Отже, квазікласичне наближення поки ще працює, але «на межі»; при дальшому зменшенні довжини робочої області слід переходити до цілком квантового опису руху носіїв.

До того ж, доречно задатися питанням: якщо довжина провідника стане меншою від довжини вільного пробігу, і рух електрона стане балістичним (електрон проходить провідник без розсіяння, й зазнає розсіяння хіба що на контактах), то чи опір підкорятиметься закону Ома в звичному записі (1)? А якщо зменшити довжину каналу провідності до декількох атомів? Чи має сенс у цьому випадку говорити про опір як такий? Всі ці питання були предметом гарячих дискусій ще років 15 – 20 тому. Сьогодні відповіді на ці питання дані і надійно підкріплені численними експериментальними результатами. Був виміряний навіть опір молекули водню [5].

Проте вражаючі успіхи експериментальної наноелектроніки практично не вплинули на те, як ми уявляємо і пояснюємо студентам поняття опору, провідності і роботу електронних пристроїв у цілому. І понині, мабуть, з історичних причин домінує звична концепція «згори – вниз», від масивних провідників до молекул. Такий підхід був цілком прийнятний доти, доки не було достатнього масиву експериментальних даних з вимірювання провідності нанорозмірних провідників. Протягом останнього десятиріччя ситуація змінилася. Накопичений великий масив експериментальних даних не лише для великих, але й для гранично малих провідників. Почалася розробка концепції провідності «знизу – вгору» [6 – 8], яка не тільки виявилася комплементарною щодо концепції «зверху – вниз», але і привела до переосмислення принципів роботи звичайних електронних пристроїв.

Нагадаємо, що в квантовій механіці із самого початку домінувала концепція «знизу – вгору»: від атома водню до масивного твердого тіла.

Є ще одне коло задач в наноелектроніці, для розв'язання яких концепція «знизу – вгору» особливо приваблива. Це – транспортні задачі. В звичайній електроніці транспорт частинок

описується законами механіки – класичної або квантової. Транспорт по масивному провіднику супроводжується виділенням тепла, що описується законами термодинаміки – звичайної або статистичної. Процеси в механіці оборотні, а в термодинаміці – необоротні. Розділити ці два процеси – руху і виділення тепла – строго кажучи, неможливо. Зовсім інша ситуація в наноелектроніці. Тут процеси руху електронів і виділення тепла просторово були розділені: електрони рухаються пружно, балістично («пружний резистор»), а виділення тепла відбувається лише на межах контактах провідника з електродами.

Концепція «пружного резистора» була запропонована ще в 1957 році [9–11], задовго до її експериментального підтвердження в нанотранзисторах, американським ученим Рольфом Ландауером (1927–1999), чия родина виїхала 1938 року з Німеччини до США, рятуючись від нацистських переслідувань євреїв. Ця концепція, строго кажучи, є ідеалізацією, але вона була надійно підтверджена численними експериментальними даними для ультрамалих нанотранзисторів. Розвиток концепції «знизу–вгору» [12] призвів до створення єдиної картини транспортних явищ в електронних пристроях, – як нанорозмірних, так і макророзмірних.

Причина виникнення струму

На питання про причину виникнення струму при наявності різниці потенціалів на кінцях провідника звичайно посилаються на зв'язок густини струму j із зовнішнім прикладеним електричним полем E , що задається виразом (6). Іншими словами, причиною виникнення струму фактично називають зовнішнє макроскопічне електричне поле. Така відповідь не враховує квантової природи провідника. Вона цілком ігнорує наявність у ньому надзвичайно сильних внутрішніх мікроскопічних електричних полів, які навіть для масивних структур потрібно обережно усереднювати, аби «занулити» їх і працювати з порівняно слабким зовнішнім полем. Математично строго це можна зробити лише для необмеженого кристалу з трансляційною симетрією, де аналог другого закону Ньютона для квазічастинок містить у правій частині не повну силу, яка діє на квазічастинку, а лишень зовнішню силу; усеред-

нення внутрішніх атомних полів має наслідком перехід до поняття ефективної маси (див. напр. [13]). Вже перехід до обмеженого кристалу (а всі кристали обмежені!) спричиняє суттєві труднощі. А в сучасних експериментах з вимірювання провідності окремих молекул взагалі неможливо з визначеністю вичленувати окремо внутрішні і зовнішні електричні поля. То ж доводиться зважати на урок, піднесений нам сучасною експериментальною наноелектронікою, і наново задатися питанням: чому ж рухаються електрони при підключенні батареї до кінців провідника?

Для відповіді на питання про причину виникнення струму нам будуть потрібні насамперед два поняття: густина станів на одиницю енергії $D(E)$, зайнятих електронами і вільних, і електрохімічний потенціал μ_0 (рис. 1). Задля простоти, що ніяк не позначиться на остаточних висновках, користуватимемося точковою моделлю провідника (каналу перенесення електронів), яка постулює незмінність густини станів $D(E)$ при русі уздовж провідника. Якщо система, що включає електрод витоку (S/Source), провідник M і стічний електрод (D/Drain), перебуває в рівновазі (закорочена), то електрохімічний потенціал μ_0 скрізь однаковий і всі стани з $E < \mu_0$ заповнені електронами, а стани з $E > \mu_0$ порожні (рис. 1).

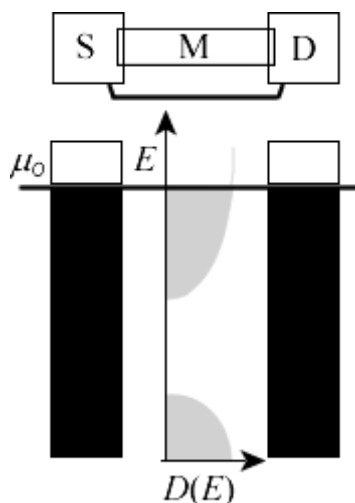


Рис. 1. Першим кроком у поясненні роботи будь-якого електронного пристрою повинне бути визначення густини станів $D(E)$ як функції енергії E усередині провідника M і визначення рівноважного значення електрохімічного потенціалу μ_0 , що відділяє стани, заповнені електронами, від порожніх станів.

При включенні в електричне коло джерела напруги (рис. 2) різниця потенціалів V знижує всі енергії на позитивному електроді D на величину qV , де q – заряд електрона, внаслідок чого на електродах виникає різниця електрохімічних потенціалів

$$\mu_1 - \mu_2 = qV. \quad (9)$$

Так само, як різниця температур приводить до потоку тепла, а відмінність у рівнях рідини веде до її перетікання між посудинами, так і різниця електрохімічних потенціалів є причиною виникнення струму. Як стало ясно після появи класичної роботи Паулі й Фермі (1927),

тільки стани провідника у проміжку $\mu_1 - \mu_2$ (і ті, що лежать на відстанях теплової енергії kT від цього проміжку), дають внесок у потік електронів, тоді як усі стани, що лежать значно вище від μ_1 і значно нижче від μ_2 , на транспорт ніяк не впливають. Причина цього полягає в подальшому.

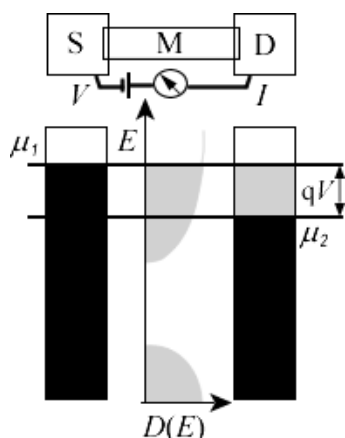


Рис. 2. При прикладенні напруги V на клемі провідника потенціал стоку (аноду) D знижується на величину qV , створюючи різницю електрохімічних потенціалів на кінцях провідника $\mu_1 - \mu_2 = qV$.

Кожний контакт прагне привести струмовий канал в рівновагу з собою шляхом заповнення електронами всіх станів каналу з енергією, меншою від електрохімічного потенціалу μ_1 , і спорожнення станів каналу з енергією, більшою від потенціалу μ_2 . Розгляньмо струмовий канал зі станами, енергія яких менша від μ_1 , але більша від μ_2 . Контакт 1 прагне заповнити ці стани, оскільки їх енергія менша від μ_1 , а контакт 2 прагне спорожнити ці стани, оскільки

ки їх енергія більша від μ_2 , що і призводить до безперервного руху електронів від контакту 1 до контакту 2.

Розгляньмо тепер стани каналу з енергією, більшою від μ_1 і μ_2 . Обидва контакти прагнуть спорожнити ці стани, але вони і так порожні і не дають внеску в електричний струм. Аналогічна ситуація зі станами, енергія яких менша і від μ_1 і від μ_2 . Кожний з контактів прагне заповнити їх електронами, але вони вже заповнені, і внеску в струм дати не можуть (точніше, не можуть, якщо вони розташовані за енергетичною шкалою далі, аніж на декілька kT від ширини «вікна провідності», в чому ми переконаємося пізніше).

Роль функції Фермі

Досі ми вважали, що в рівновазі всі стани з енергією $E < \mu_0$ заповнені електронами, а всі стани з енергією $E > \mu_0$ порожні. Це справедливо тільки в наближенні абсолютного нуля температури. При ненульових температурах перехід від повністю заповнених станів до порожніх відбувається в проміжку $\sim \pm 2kT$, навколо значення $E = \mu_0$. Математично цей перехід описується функцією розподілу Фермі – Дірака (або скорочено просто функцією Фермі):

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (10)$$

Графік функції Фермі показаний на рис. 3 ліворуч, з енергією в безрозмірних одиницях по вертикальній осі, що дозволить нам пізніше при поясненні причини появи струму накласти функцію Фермі на графік густини станів $D(E)$.

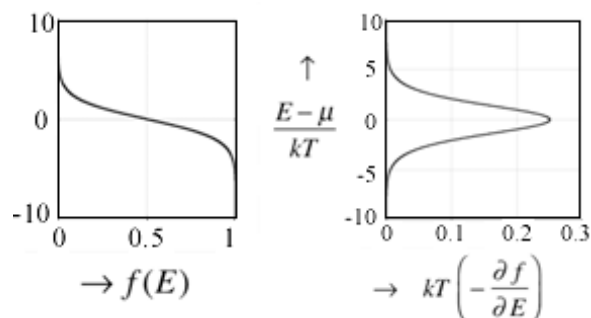


Рис. 3. Графіки функції Фермі і нормованої функції теплового розширення.

Функція Фермі грає ключову роль в статистичній механіці, проте для наших цілей достатньо розуміти, що стани з низькою енергією завжди будуть зайняті ($f = 1$), тоді як стани з високою енергією завжди порожні ($f = 0$), а перехід від $f = 1$ до $f = 0$ відбувається у вузькому інтервалі енергії $\sim \pm 2 kT$ навколо значення $E = \mu$.

Справді, на рис. 3 праворуч показана похідна від функції Фермі, помножена на kT з тим, щоб зробити її безрозмірною:

$$F_T(E, \mu) = kT \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right). \quad (11)$$

Підставляючи в (11) вираз для функції (10), бачимо, що:

$$F_T(E, \mu) = \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}, \quad (12)$$

де $x = (E - \mu)/kT$. З (10) безпосередньо видно, що

$$F_T(E, \mu) = F_T(E - \mu) = F_T(\mu - E), \quad (13)$$

а з (10) і (12) випливає, що:

$$F_T = f(1 - f). \quad (14)$$

Інтегрування (14) у всьому інтервалі зміни енергії дає значення, що дорівнює kT :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE F_T(E, \mu) &= kT \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = \\ &= kT [-f]_{-\infty}^{+\infty} = kT(1 - 0) = kT. \end{aligned} \quad (15)$$

Отже функцію F_T можна наближено уявити у вигляді прямокутного «імпульсу», центрowanego щодо значення $E = \mu$, з одиничною висотою і завширшки $\sim kT$.

Вихід системи з рівноваги

Коли система, зображена на рис. 1, перебуває в рівновазі, електрони розподіляються по наявних станах відповідно до функції Фермі. При виході з рівноваги немає простих правил для обчислення функції розподілу електронів. Все

залежить від конкретної задачі, розв'язувати яку потрібно методами нерівноважної статистичної механіки.

В нашому спеціальному випадку виходу з рівноваги (рис. 2) можна надійно стверджувати, що обидва контакти S і D настільки великі в порівнянні з каналом перенесення електронів, що вони не можуть вийти з рівноваги. Кожний з контактів локально перебуває в рівновазі зі своїм власним електрохімічним потенціалом, породжуючи дві фермівські функції (рис. 4)

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_1}{kT}\right) + 1} \quad (16)$$

$$f_2(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_2}{kT}\right) + 1}. \quad (17)$$

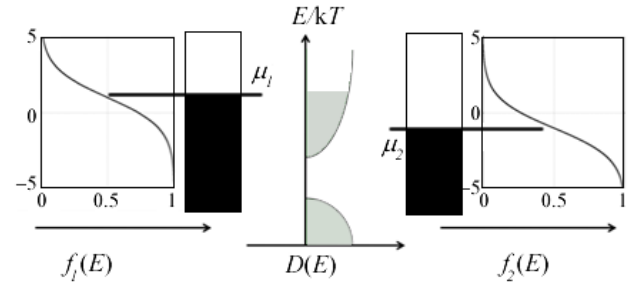


Рис. 4. При виході з рівноваги електрони в контактах заповнюють доступні для них стани відповідно до Фермі-розподілів і значень електрохімічних потенціалів.

Отже, причиною появи струму є відмінність рівноважних станів контактів, що задаються відповідними фермівськими функціями $f_1(E)$ і $f_2(E)$. Якісно це справедливо для будь-яких провідників – і нанорозмірних, і макророзмірних. Проте, для нанорозмірних провідників струм при будь-яких значеннях енергії електронних станів в провіднику пропорційний різниці $I(E) \sim f_1(E) - f_2(E)$ фермівських розподілів в обох контактах. Ця різниця перетворюється на нуль, якщо енергія E більша від μ_1 і μ_2 , оскільки в цьому випадку обидві функції Фермі дорівнюють нулю. Ця різниця також дорівнює нулю, якщо енергія E менша і від μ_1 і від μ_2 , оскільки в цьому випадку обидві фермівські функції

дорівнюють одиниці. Струм виникає лише в енергетичному вікні $\mu_1 - \mu_2$, якщо в цьому вікні є бодай один електронний стан провідника.

Лінійний відгук

Вольт-амперна характеристика звичайно нелінійна, але з неї можна вичленувати ділянку «лінійного відгуку», під яким мають на увазі провідність dI/dV при невеликих $V > 0$. Для цього нам фактично потрібно буде отримати розклад фермівської функції за малими відхиленнями хімпотенціалу від рівноважного значення (тобто при малих додатних напругах, прикладених до аноду).

Побудуємо функцію різниці двох фермівських функцій, нормовану на прикладену напругу:

$$F(E) = \frac{f_1(E) - f_2(E)}{qV/kT}, \quad (18)$$

де

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \mu_0 + (qV/2) \\ \mu_2 &= \mu_0 - (qV/2) \end{aligned} \quad (19)$$

Функція різниці $F(E)$ (18) звужується у міру того, як напруга V , помножена на заряд електрона, стає дедалі меншою від величини kT (рис. 5).

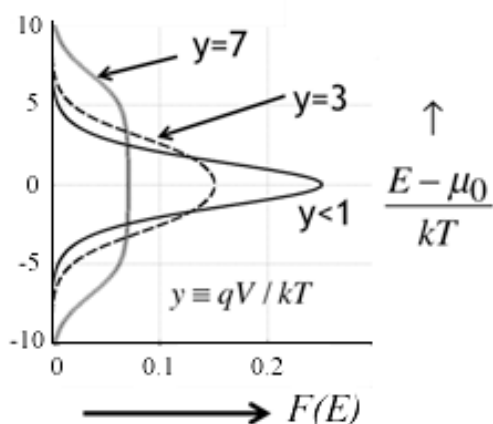


Рис. 5. Графік залежності функції різниці $F(E)$ від значення $(E - \mu_0)/kT$ для різних значень $qV/kT = y$.

Відзначмо також, що по мірі того, як kT починає перевищувати енергію qV , функція $F(E)$ дедалі більше наближається за виглядом до функції теплового розширення (11); причому $F(E) > F_T(E)$ при $qV/kT > 0$, отже з (18) випливає, що:

$$f_1(E) - f_2(E) = \frac{qV}{kT} F_T(E, \mu_0) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV. \quad (20)$$

Вираз (20) застосовний тоді, коли прикладена напруга, помножена на заряд електрона $\mu_1 - \mu_2 = qV$, стає набагато меншою від kT . У (20) рівноважна функція розподілу f_0 описується виразом (10), де $\mu = \mu_0$.

Надалі нам також знадобиться вираз:

$$f(E) - f_0(E) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} (\mu - \mu_0). \quad (21)$$

Його можна отримати подальшим чином: для функції Фермі:

$$f(x) \equiv \frac{1}{e^x + 1}, \quad x \equiv \frac{E - \mu}{kT} \quad (22)$$

маємо:

$$\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial E} = \frac{df}{dx} \frac{1}{kT}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial \mu} = -\frac{df}{dx} \frac{1}{kT}. \quad (23)$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{df}{dx} \frac{E - \mu}{kT^2}$$

Звідси одержуємо:

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = -\frac{\partial f}{\partial E} \quad (24)$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{E - \mu}{T} \frac{\partial f}{\partial E}$$

Рівняння (21) є наслідком розкладу функції Фермі поблизу рівноважного значення хімпотенціалу в ряд Тейлора:

$$f(E, \mu) \cong f(E, \mu_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} (\mu - \mu_0). \quad (25)$$

З виразів (24) випливає

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0} = \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)_{\mu=\mu_0}. \quad (26)$$

Нехай $f(E)$ відповідає $f(E, \mu)$, а $f_0(E)$ відповідає $f(E, \mu_0)$. Тоді з (25) і (26) одержуємо:

$$f(E) \approx f_0(E) + (\mu - \mu_0) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right). \quad (27)$$

Цей вираз тотожний співвідношенню (21), яке, нагадаємо, справедливе при $\mu - \mu_0 \ll kT$.

Підведемо попередні підсумки. Як відомо, провідність діелектрика скла менша від провідності срібла у понад 10^{20} разів, тобто на 20 порядків! Стандартне пояснення такої відмінності полягає в тому, що концентрація «вільних електронів» в цих речовинах істотно відрізняється. Таке пояснення негайно вимагає іншого пояснення, які електрони вільні, а які ні. А при переході до нанорозмірних провідників відмінність між «вільними» і локалізованими електронами робиться взагалі малоочевидною.

Натомість концепція «знизу – вгору» пропонує просту відповідь. Провідність залежить від густини станів у енергетичному вікні шириною декілька kT навколо рівноважного електродхімічного потенціалу μ_0 , що визначається функцією F_T (вираз (18), рис. 5), яка відмінна від нуля тільки в невеликому проміжку шириною декілька kT навколо μ_0 . Отже, ключовим моментом, який відрізняє за провідністю скло від срібла, є не сумарна кількість електронних станів, а саме наявність електронних станів в області рівноважних значень електродхімічного потенціалу μ_0 , які електрони можуть заповнювати (звільняти), рухаючись у просторі.

Цю відповідь було одержано в загальних рисах Паулі й Фермі 85 років тому. Проте виклад теорії провідності в університетських курсах і понині як правило починають з моделі Друде (див. напр. [13]), яка зіграла важливу історичну роль у розумінні природи струму. Натомість уроки експериментальної наноелектроніки чітко показують: провідність каналу (висока або низька) залежить тільки від наявності електронних станів в околі рівноважного хімпотенціалу. До цього висновку звичайно приходять на основі транспортного рівняння

Больцмана [14] або формалізму Кубо [15], але використовувана нами концепція «знизу–вгору» дає наочну й фізично коректну картину виникнення струму.

Модель пружного резистора

Отже, струм породжується різницею фермієвських функцій $f_1(E)$ і $f_2(E)$ двох контактів 1 і 2. Негативному контакту 1 відповідає більше значення електродхімічного потенціалу, а позитивному – менше значення. Негативний контакт прагне «ввести» свої електрони в канал провідності, а позитивний контакт – «витягнути» ці електрони з каналу. Це справедливо для будь-яких провідників – і нанорозмірних і макророзмірних.

Модель «пружного резистора» служить корисною ідеалізацією, що забезпечує фізично коректне пояснення роботи нанорозмірних провідників і відкриває можливості для нової інтерпретації роботи макророзмірних пристроїв. Як уже відзначалося, така концепція була запропонована Рольфом Ландауером [9–11]. Розвиток цієї концепції [6–8, 12] привів до створення єдиної картини транспортних явищ в електронних пристроях будь-якої розмірності.

В моделі пружного резистора електрони проходять канал провідності від контакту витоку S до стоку D пружно, без втрати або набуття енергії (рис. 6).

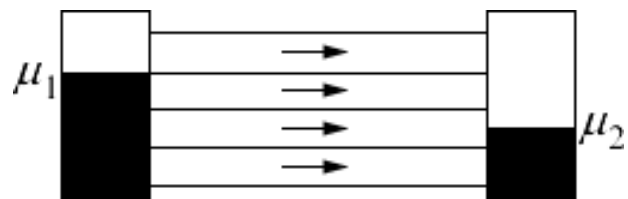


Рис. 6. В пружному резисторі електрони рухаються балістично з постійною енергією.

Оскільки енергія електронів у пружному резисторі стала, то струм у проміжку з енергіями від E до $E+dE$ протікає незалежно від «каналів» з іншими значеннями енергії. Це дає змогу записати для струму в диференціальній формі:

$$dI = dE G(E)(f_1(E) - f_2(E)), \quad (28)$$

де $G(E)$ – провідність «каналу» з енергією E . Після інтегрування (28) отримаємо вираз для повного струму. Підставляючи до нього (20), отримаємо вираз для «низьковольтної» провідності в режимі лінійного відгуку:

$$G \equiv \frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E). \quad (29)$$

У цьому виразі похідну $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)$ можна апроксимувати прямокутним імпульсом, площа якого дорівнює одиниці при ширині $\sim \pm 2 kT$ (рис. 3). Згідно до (29), функція провідності $G(E)$ для пружного резистора, усереднена за інтервалом $\sim \pm 2 kT$ в околі рівноважного значення електрохімічного потенціалу μ_0 , дає експериментально вимірювану провідність G . При низьких температурах для провідності можна просто використовувати значення $G(E)$ при $E = \mu_0$.

Такий енергетичний підхід до провідності в моделі пружного резистора істотно спрощує розуміння причин струму, хоча і звучить парадоксально, оскільки ми традиційно пов'язуємо струм I , який протікає в провіднику-резисторі з опором R , з джоулевым теплом I^2R . Але як можна говорити про опір, якщо електрони, що рухаються в провіднику, не втрачають енергії?

Відповідь на це питання така: втрата енергії має місце на межах провідника з витоковим і стічним контактами, де й відбувається дисипація джоулевого тепла. Інакше кажучи, пружний резистор, що характеризується опором R каналу провідності, розсіює джоулеве тепло I^2R за межами каналу провідності. На це вказують численні експериментальні вимірювання, непрямі й прямі, на нанорозмірних провідниках [3, 4]. Звернімо також увагу на те, що, якби дисипація тепла відбувалася на одиночній молекулі або в наноструктурі з кількох молекул, то це призвело б до негайного «згорання» такої структури. Оскільки ж згорання в реальних експериментах не відбувається, це свідчить, що переважна частина джоулевого тепла гене-

рується на контактах, які достатньо масивні і достатньо легко це тепло розсіюють.

Зазначмо: поняття «пружного резистора» не передбачає обов'язкового проходження електроном по прямолінійній траєкторії від витоку до стоку. Припускається також «дифузійний» рух із зміною вектора імпульсу внаслідок абсолютно пружного розсіяння без зміни енергії.

Модель «пружного резистора» корисна не лише для пояснення роботи нанорозмірних пристроїв. Вона також дозволяє пояснити провідність в макророзмірних провідниках. Саме ця модель робить концепцію «знизу–вгору» [8, 12] ефективною в поясненні транспортних явищ в цілому. Ми ще повернемося до цього твердження пізніше, а зараз отримаємо вираз для провідності пружного резистора.

Провідність пружного резистора

Слідуючи духу концепції «знизу–вгору», розглянемо найпростіший пружний резистор з одним «каналом» з енергією ε , з якою електрон «проскакує» від витоку до стоку (рис. 7).

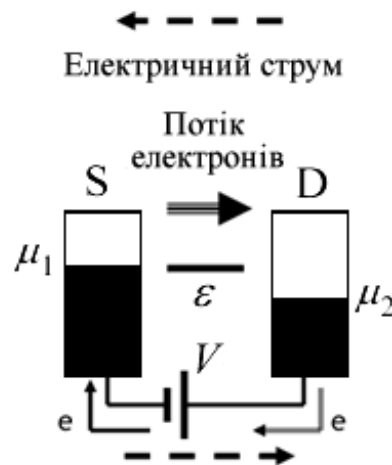


Рис. 7. Однорівнева модель пружного резистора з енергією в «каналі» ε .

Нагадаємо, що внаслідок приписуванню струмові напрямку від позитивного контакту до негативного (це визначення запровадив ще Бенджамін Франклін у середині 18 століття, коли причиною струму вважали перетікання особливої невагомої «електричної рідини», й

змінити його вже неможливо), напрям струму протилежний реальному рухові електронів від витоку S до стоку D. Надалі ми завжди матимемо на увазі струм реальних електронів, а не струм у «франкліновому» визначенні.

Результуючий одноканальний струм дорівнюватиме:

$$I = \frac{q}{t} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)). \quad (30)$$

де t – час, затрачений електроном на проходження від витоку S до стоку D. Тепер вираз (30) можна узагальнити на довільний пружний резистор (рис. 6) з довільною густиною станів $D(E)$, маючи на увазі, що всі енергетичні «канали» в пружному резисторі проводять незалежно один від одного і в паралельному режимі. Випишемо спершу вираз для струму в «каналі» з енергією в проміжку від E до $E+dE$:

$$dI = dE \frac{D(E)q}{2t} (f_1(E) - f_2(E)). \quad (31)$$

Тут враховано, що в каналі є $D(E)dE$ станів, з яких тільки половина дає внесок в струм від витоку S до стоку D. Інтегруючи, отримаємо вираз для повного струму в пружному резисторі:

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) (f_1(E) - f_2(E)), \quad (32)$$

де введено вираз для диференціальної провідності:

$$G(E) = \frac{q^2 D(E)}{2t(E)}. \quad (33)$$

Якщо різниця $\mu_1 - \mu_2 = qV$, що виникає за рахунок напруги на контактах V , набагато менша від kT , ми маємо право скористатися виразом (20) і записати:

$$I = V \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E), \quad (34)$$

що тотожне виразові (29). В загальному випадку:

$$G = \frac{q^2 D}{2t}, \quad (35)$$

проте, потрібно пам'ятати, що густина станів D і час прольоту t в загальному випадку залежать

від енергії і повинні бути усереднені в межах інтервалу $\sim \pm 2kT$ навколо рівноважного електрохімічного потенціалу μ_0 .

Цей вираз легко сприйняти на інтуїтивному рівні. Справді, провідність пропорційна добуткові двох множників, а саме: числа наявних станів (D) і легкості, з якою електрон долає відстань від витоку до стоку ($1/t$). Це – ключовий результат для подальшого обговорення. Зараз же ми перейдемо до більш докладного розгляду дисипації тепла пружним резистором.

Дисипація тепла пружним резистором

Ми вже наголошували: опір R пружного резистора визначається каналом провідності, а відповідне джоулеве тепло $I^2 R$ виділяється поза каналом. Розгляньмо докладніше цю ситуацію на прикладі однорівневої моделі пружного резистора з енергією в каналі ε (рис. 7). Кожного разу, коли електрон з витоку балістично проскакує канал, на стоці він виявляється в стані «гарячого електрона» з енергією, що перевищує електрохімічний потенціал стоку μ_2 (рис. 8).

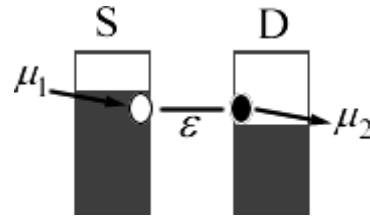


Рис. 8. «Проскакування» електрона з витоку на стік «каналом» з енергією ε , що перевищує електрохімічний потенціал стоку μ_2 .

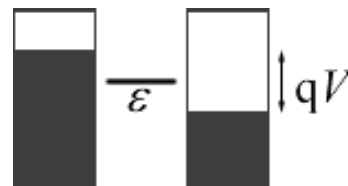


Рис. 9. Після балістичного прольоту електрона з витоку на стік «каналом» з енергією ε на витоку виділяється енергія $\mu_1 - \varepsilon$, а на стоці – енергія $\varepsilon - \mu_2$, і контакти знову перебувають у рівновазі.

Процеси дисипації в стічному контакті швидко розсіюють надлишок енергії $\varepsilon - \mu_2$. Таким самим чином на витоковому контакті «дірка» з енергією ε (яка утворилася після переходу електрона в провідник), заповнюється іншим

електроном, а надлишок енергії $\mu_1 - \varepsilon$ розсіюється на витоку (рис. 9).

Сумарна енергія, що розсіюється на контактах при проходженні одного електрона, дорівнює $\mu_1 - \mu_2 = qV$. Якщо N електронів пролітають з витоку на стік за час t , то на контактах розсіюється потужність:

$$P = V \cdot I = qV \cdot N / t. \quad (36)$$

Таким чином, тепло, що виділяється при проходженні струму по пружному резистору, розсіюється на контактах, чому вже є достатньо експериментальних підтверджень на нано- і мезорозмірних провідниках [16]. Привабливість моделі пружного резистора полягає в тому, що механічні і термодинамічні процеси вперше були просторово розділені.

Модель пружного резистора і макропровідники

Природно поставити питання про застосовність і користь моделі пружного резистора для розуміння фізики явища протікання струму в звичайних макропровідниках, рух електронів у яких очевидно непружний. В макропровідниках непружні процеси існують нарівні з пружними і безладно розподілені по всьому об'ємові провідника (рис. 10).

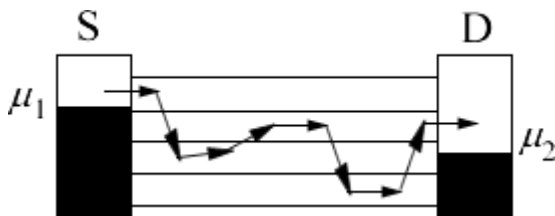


Рис. 10. В макропровідниках непружні процеси співіснують з пружними

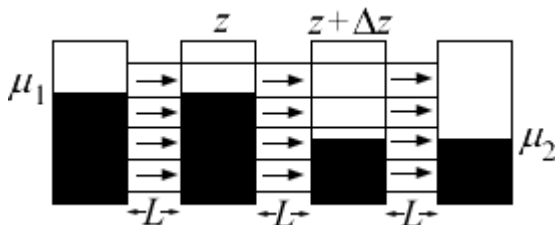


Рис. 11. Уявне розбиття реального макропровідника на послідовність пружних резисторів.

Розіб'ємо в уяві такий макропровідник з безладно розподіленими непружними зіткненнями на послідовність пружних резисторів (рис. 11) з довжиною L , набагато меншою від довжини реального макропровідника і з перепадом напруги між сусідніми пружними резисторами, що складає лише незначну частину від різниці потенціалів на кінцях реального провідника

$\mu_1 - \mu_2 = qV$. При такому розбитті довжини L повинні бути менші від довжини L_{in} , що є середньою довжиною пробігу електрона до чергового непружного зіткнення. Окрім умови $L < L_{in}$, при розбитті має також виконуватися вимога малого падіння напруги на кожному пружному резисторі $\Delta V < kT/q$.

Розбиття масивного провідника на пружні резистори призводить до нестандартного результату. Як буде показано нижче, стандартний вираз для закону Ома для кожного з уявно виділених резисторів слід замінити на:

$$R = \rho(L + \lambda) / A, \quad (37)$$

де A – площа поперечного перерізу провідника, і де додатковий опір $\rho\lambda/A$ не залежить від довжини провідника і може бути інтерпретований як «прикордонний» опір, що виникає на межі канал/контакт. У виразі (37) λ – довжина, близька до середньої довжини вільного пробігу, тому така модифікація закону Ома істотна лише для балістичних провідників ($L \sim \lambda$) і не суттєва для масивних провідників ($L \gg \lambda$). Проте концептуально цей додатковий опір виявиться винятково важливим, якщо користуватися гіпотетичною структурою (рис. 11) для пояснення реальної ситуації (рис. 10). Структура на рис. 11 має багато прикордонних поверхонь поділу, відсутніх в реальній ситуації (рис. 10), тож у кінцевому виразі слід позбутися цих віртуальних меж. Наприклад, якщо кожна секція завдовжки L на рис. 11 характеризується опором (37), то правильним виразом для провідника на рис. 10, наприклад, довжини $3L$ буде

$$R = \rho(3L + \lambda) / A, \quad (38)$$

а не

$$R = \rho(3L + 3\lambda) / A. \quad (39)$$

Таким чином, для отримання коректного виразу для провідності довгого провідника в рамках моделі пружного резистора слід акуратно відділити «прикордонний» опір від опору провідника, залежного від його довжини.

Дифузійний транспорт: провідність

Як ми бачили вище, провідність пружного резистора дається виразом (35)

$$G = q^2 D / 2t .$$

Покажемо, що час прольоту t через резистор довжини L при дифузійному режимі з довжиною вільного пробігу λ пов'язаний з часом прольоту при балістичному режимі t_B співвідношенням:

$$t = t_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right) . \quad (40)$$

Підставимо (40) в (35) і врахуємо, що

$$G_B \equiv q^2 D / 2t_B \quad (41)$$

і остаточно для провідності в дифузійному режимі отримуємо:

$$G = \frac{G_B \lambda}{L + \lambda} . \quad (42)$$

Вводячи опір як обернену величину до провідності (42), для закону Ома в новому формулюванні отримуємо:

$$R = \frac{\rho}{A} (L + \lambda) , \quad (43)$$

де L – загальна довжина провідника, а

$$\frac{\rho}{A} = \frac{1}{\sigma A} = \frac{1}{G_B \lambda} . \quad (44)$$

Це й підтверджує правильність співвідношення (40).

Низьковимірні провідники: провідність і опір

Дотепер йшлося про тривимірний резистор з площею поперечного перерізу A (рис. 12). Відзначмо: реальні провідники завжди тривимірні. Навіть так звані 0-вимірні структури, відомі

під назвою «квантових цяток», все одно складаються з сотень атомів. (Український термін «квантова цятка», як і англійський «quantum dot», значно краще від російського «квантовая точка» передає ту обставину, що ультрамалий об'єкт аж ніяк не є, однак, геометричною точкою, позбавленою лінійних розмірів).

Під терміном «низьковимірна структура» у сучасній фізиці розуміють лишень те, що один, два, або й усі три лінійні розміри об'єкту менші від відповідної довжини де Бройля (8), і, отже, рух електронів у цій структурі за одним, двома, або й трьома напрямками перестає бути квазікласичним і набуває виразно квантового характеру [1–3]. Це призводить до зміни картини енергетичного спектру і вигляду густини станів. Відтак у низьковимірних структурах (квантових ямах, квантових дротах, квантових цятках) виявляється низка нових квантових ефектів – квантовий ефект Холла (цілочисельний і дробовий), квантова блокада, квантування провідності тощо.

Однак при цьому, наприклад, більшість реальних квантових ям мають товщину від кількох до кількох десятків нанометрів, і єдиною «майже ідеальною» 2d структурою є лише графен – вперше отриманий 2004 року моноатомний шар вуглецю, запакованого в гексагональну ґратку [19] (моноатомний шар – найтонша принципово можлива в наноелектроніці структура).

Тому «ідеальні» 2d і 1d структури (рис.12), про які йтиметься далі в цьому параграфі, є не більше ніж математичною абстракцією, яка, однак, дозволяє зрозуміти те, чому питомий опір таких структур має різну розмірність, що відрізняється від розмірності опору звичайних об'ємних матеріалів.

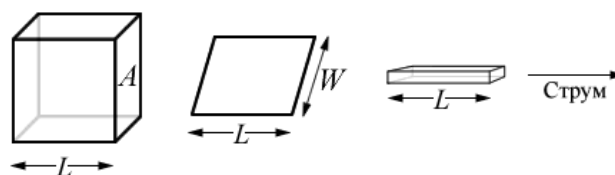


Рис. 12. Провідники розмірності 3d, 2d і 1d.

Надалі уявімо двомірні провідники як ідеально тонкі пластини завширшки W з одновимірним поперечним перерізом. Для таких 2d-резисторів відповідні вирази для «модифікованого» закону Ома мають вигляд:

$$R = \frac{\rho}{W}(L + \lambda), \quad (45)$$

де

$$\frac{\rho}{W} = \frac{1}{\sigma W} = \frac{1}{G_B \lambda}. \quad (46)$$

Нарешті, для одновимірних провідників маємо:

$$R = \rho(L + \lambda), \quad (47)$$

де

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{G_B \lambda}. \quad (48)$$

Використовуючи отримані вище вирази, запишемо закон Ома компактно для провідників усіх трьох розмірностей:

$$R = \rho(L + \lambda) \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (49)$$

де

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = G_B \lambda \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (50)$$

Вираз у фігурних дужках відповідає 1d-, 2d- і 3d-провіднику. Відзначмо, що питомі опір і провідність мають різну розмірність залежно від розмірності провідника, а провідність, як і раніше вимірюється для системи СІ в сименсах (обернених омах).

Стандартний закон Ома стверджує, що опір прямує до нуля при прямуванні довжини провідника до нуля. Ніхто, звичайно, не очікує, що опір перетвориться на нуль, але на рівні «повсякденного досвіду» побутує поширена думка, що опір можна зробити як завгодно малим у міру вдосконалення експериментальної техніки. Однак зараз надійно встановлено численними дослідженнями, що при найдосконаліших контактах найменший спостережуваний опір пов'язаний з каналом провідності і не залежить від контактів [2]. Модифікований закон Ома відображає цю обставину: навіть при наближенні довжини провідника до нуля залишається

залишковий опір, пов'язаний з ефективною довжиною λ . Доречно, проте, запитати себе: який сенс говорити про ненульову довжину λ при нульовій довжині провідника? Відповідь полягає в тому, що для нанорозмірних провідників ні питомий опір, ні довжина λ не мають сенсу порізно, має значення тільки їх добуток.

Балістичний транспорт: провідність

Розгляньмо, як густина станів D і час прольоту t у виразі для провідності (35) співвідносяться з розмірами каналу в масивних провідниках. Щодо густини станів, то це - адитивна властивість. В два рази більший канал містить у два рази більше електронних станів, тому густина станів для масивних провідників повинна бути пропорційною до об'єму провідника $A \cdot L$.

Щодо часу прольоту t , то зазвичай розглядають два транспортні режими: балістичний з $t \sim L$ і дифузійний з $t \sim L^2$. Тому балістична провідність пропорційна площі поперечного перерізу провідника A і, згідно з (35), не залежить від довжини провідника. Таку «неомічну поведінку» справді спостерігають у нанорозмірних провідниках [17]. Що ж до провідників з дифузійним транспортним режимом, то вони демонструють нормальну «омічну поведінку» провідності $G \sim A/L$.

Відмінність у двох транспортних режимах можна пояснити таким чином. У балістичному режимі час прольоту від витоку до стоку:

$$t_B = \frac{L}{\bar{u}}, \quad (51)$$

де

$$\bar{u} = \langle |v_z| \rangle \quad (52)$$

є середнє значення швидкості електронів уздовж осі z , напрямку руху електронів від витоку до стоку.

У разі дифузійного режиму час t залежить від довжини провідника квадратично:

$$t = \frac{L}{\bar{u}} + \frac{L^2}{2D}, \quad (53)$$

де величина \bar{D} в рамках теорії випадкових блукань [18] — це коефіцієнт дифузії:

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle, \quad (54)$$

тут τ — час вільного пробігу.

Використовуючи визначення (51), перепишемо (53) у вигляді:

$$t = t_B \left(1 + \frac{L\bar{u}}{2\bar{D}} \right), \quad (55)$$

що разом з виразом (40) дає для довжини λ значення:

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}}. \quad (56)$$

Для обчислення параметрів \bar{u} з виразу (52) і \bar{D} з виразу (54) треба усереднити швидкість електронів у напрямкові їх руху (вісь z) по всіх кутових змінних залежно від розмірності провідника $d = \{1, 2, 3\}$. Прості обчислення дають для 1d провідника:

$$\langle |v_z| \rangle = v, \quad \langle |v_z^2| \rangle = v^2, \quad (57)$$

для 2d провідника:

$$\langle |v_z| \rangle = 2v/\pi, \quad \langle |v_z^2| \rangle = v^2/2, \quad (58)$$

для 3d провідника:

$$\langle |v_z| \rangle = v/2, \quad \langle |v_z^2| \rangle = v^2/3. \quad (59)$$

Отже, в результаті ми одержуємо:

$$\bar{u} = \langle |v_z| \rangle = v(E) \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}, \quad (60)$$

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle = v^2 \tau(E) \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3} \right\}. \quad (61)$$

Звідси остаточно для довжини середнього вільного пробігу λ маємо:

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}} = v\tau \left\{ 2, \frac{\pi}{2}, \frac{4}{3} \right\}. \quad (62)$$

Підкреслимо, що довжина λ містить, порівняно з її стандартним значенням $\lambda = v\tau$, чисельний множник, залежний від розмірності

провідника. Цей множник навіть для одновимірного провідника дорівнює не одиниці, а двійці. Причину появи такого множника легко зрозуміти. Величина τ — це середній час вільного прольоту до чергового зіткнення. Оскільки розсіяння ми вважаємо ізотропним, то тільки половина актів зіткнень спрямовує електрон у напрямку від витоку до стоку. З урахуванням розсіяння «назад» значення довжини λ для 1d-провідника виявляється рівним $2v\tau$. Відзначмо, що до формулювання закону Ома (49) входить саме довжина λ , визначена як (62).

Тепер отримаємо рівняння для балістичної провідності. З виразів (41) і (51) маємо:

$$G_B \equiv \frac{q^2 D \bar{u}}{2L}. \quad (63)$$

Після підстановки сюди виразу (60) отримаємо:

$$G_B \equiv \frac{q^2 D v}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}. \quad (64)$$

Остаточно, підставляючи в (50) вирази (62) і (64) і враховуючи (61), для питомої провідності отримаємо:

$$\sigma = q^2 \bar{D} \frac{D}{L} \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (65)$$

Отже, на основі загальних виразів для провідності (35) і часів пробігу (51) та (53) були отримані вирази для провідності в балістичному режимі (65) і в дифузійному режимі (42).

Моди провідності

З рівняння (64) видно, що балістична провідність пропорційна густині станів на одиницю довжини провідника D/L . Оскільки густина станів пропорційна об'єму, то можна очікувати, що балістична провідність пропорційна площі поперечного перерізу A 3d-провідника або ширині W 2d-провідника.

Однак у 1980 році німецький учений Клаус фон Клітцинг, досліджуючи ефект Холла в ультратонкому двовимірному кремнії при сильних магнітних полях 18 Tл і $T = 1,5 \text{ K}$, вперше виявив, що холлівський опір за таких умов квантується! За відкриття цілочисельного квантового ефекту Холла вченому було прису-

джено нобелівську премію з фізики 1985 року. 1988 року ван Віз з колегами експериментально показав, що кантується й опір точкового контакту, утвореного в квантовій гетероструктурі AlGaAs/GaAs – цього разу без жодного магнітного поля.

На сьогодні численними експериментами доведено [1 – 3, 17], що для нанорозмірних провідників балістична провідність не змінюється лінійно з їх площею поперечного перерізу, а кратна квантові провідності:

$$G_B \equiv \frac{q^2}{h} M, \quad (66)$$

Іншими словами, реальний провідник можна розглядати як M незалежних мод провідності, що дають в сумі балістичну провідність. Враховуючи (64), для числа мод провідності одержуємо:

$$M \equiv \frac{hDv}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}, \quad (67)$$

а з рівнянь (50) і (66) питома провідність виражається через число мод провідності M і середню довжину вільного пробігу λ :

$$\sigma = \frac{q^2}{h} M \lambda \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (68)$$

Більш детально концепцію мод провідності ми розглянемо нижче.

Фундаментальне співвідношення

Стандартний вираз для питомої провідності σ , що пов'язує її з концентрацією електронів n , ефективною масою m і часом вільного пробігу τ , дається формулою Друде (7), від якої легко перейти до оберненого до неї питомого опору (множник 2 у знаменнику (7) надалі для простоти опускаємо):

$$\sigma \equiv \frac{1}{\rho} = \frac{q^2 n \tau}{m}. \quad (69)$$

Ввівши поняття рухливості (її найчастіше вимірюють у позасистемних одиницях $cm^2/V \cdot s$):

$$\bar{\mu} = \frac{q\tau}{m}, \quad (70)$$

запишемо провідність як:

$$\sigma = qn\bar{\mu}. \quad (71)$$

З другого боку, для питомої провідності в рамках концепції «знизу–вгору» ми отримали два еквівалентні співвідношення, одне з яких виражає провідність через добуток густини станів D і коефіцієнта дифузії \bar{D} (65), а інше — через добуток числа мод M в каналі провідності і середньої довжини пробігу λ (68). Про взаємозв'язок і взаємоперетворюваність цих співвідношень ми поговоримо нижче.

Як і провідність (29), питому провідність у виразах (65) і (68) потрібно усереднити за енергією за допомогою функції теплового розширення, що, нагадаємо, відмінна від нуля в області декількох kT навколо рівноважного значення хімпотенціалу μ_0 :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sigma(E). \quad (72)$$

Вираз (65) добре відомий, він наводиться в стандартних підручниках з фізики твердого тіла [13], чого не можна сказати про еквівалентний йому вираз (68), виведення якого вимагає застосування статистичної термодинаміки необоротних процесів, наприклад, формалізму Кубо [14, 15].

Слід наголосити: застосовність моделі Друде вельми обмежена, тоді як вирази для провідності (65) і (68) мають найзагальніше значення. Наприклад, ці вирази застосовні до графену [19, 20] з його непараболічним спектром зон і «безмасовими» електронами — властивостями, опис яких неможливий у моделі Друде.

Для довільних провідників, — з кристалічною структурою, аморфних, або ж молекулярних, слідує [12], покажемо, що, незалежно від вигляду енергетичного спектру $E(p)$, густина станів $D(E)$, швидкість $v(E)$ та імпульс $p(E)$ пов'язані з числом станів $N(E)$ для електронів провідності з енергією, меншою від E , співвідношенням:

$$D(E)v(E)p(E) = N(E) \cdot d, \quad (73)$$

де d – розмірність провідника. Використовуючи (73) для обчислення провідності (65) з урахуванням вигляду коефіцієнта дифузії (61)

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle, \text{ для 3d-провідника отримаємо:}$$

$$\sigma(E) = q^2 \frac{N(E) \tau(E)}{A \cdot L m(E)}. \quad (74)$$

У (74) маса була визначена як:

$$m(E) = \frac{p(E)}{v(E)}. \quad (75)$$

Легко переконатися, що фундаментальне співвідношення (73) справедливе і для параболічної залежності $E(p)$, що реалізується в твердих тілах з трансляційною симетрією поблизу екстремумів зон, і для лінійної, яка має місце поблизу точки Дірака в графені [19, 20]. В рамках параболічного наближення ефективна маса носія струму від енергії не залежить, що, в загальному випадку не так (найхарактернішим прикладом цього є такий відомий кристал, як InSb, де маса «гарячих» електронів суттєво інша, аніж маса теплових, термалізованих поблизу дна зони провідності).

Формула (74) виглядає як вираз теорії Друде (69), якщо $N/A \cdot L$ вважати концентрацією електронів n . При низьких температурах це справді так, оскільки усереднювання (72) при $E = \mu_0$ дає:

$$\sigma = \left(q^2 \frac{N \tau}{A \cdot L m} \right)_{E=\mu_0} = q^2 n \tau / m, \quad (76)$$

бо $N(E)$ при $E = \mu_0$ за визначенням є повне число електронів, здатних переносити струм (рис. 13). При ненульовій температурі ситуація тим складніша, чим більше енергетичний спектр непараболічний.

Відзначмо, що ключовим моментом у зведенні загального виразу для провідності (65) до виразу (74), схожого на формулу Друде (7), є фундаментальний вираз (73), що зв'язує густину станів $D(E)$, швидкість $v(E)$ і імпульс $p(E)$ для даного значення енергії з повним числом станів $N(E)$, отриманих інтегруванням густини станів:

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dE D(E). \quad (77)$$

За яких умов повне число станів $N(E)$, визначене за (77) може бути однозначно пов'язане з густиною станів $D(E)$, швидкістю $v(E)$ та імпульсом $p(E)$ для конкретного значення енергії співвідношенням (73)? Відповідь полягає в тому, що співвідношення (73) справедливе тільки тоді, коли рівні енергії однозначно обчислюються з виразу для $E(p)$. Воно може не виконуватися в області енергій, за яких зони перекриваються, або, наприклад, для аморфних тіл, коли невідома залежність $E(p)$. У цих випадках вирази (65) і (68) не еквівалентні виразу (74) і користуватися можна тільки двома першими з них.

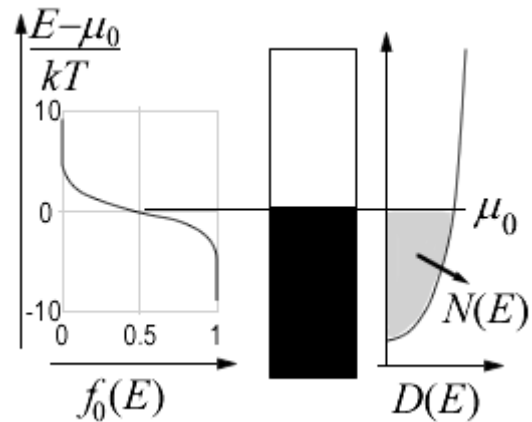


Рис. 13. Рівноважна функція Фермі $f_0(E)$. Густина станів $D(E)$ і повне число заповнених електронами станів $N(E)$

Тепер подивимося, як енергетичні зони, описувані різними законами дисперсії $E(p)$, приводять до фундаментального співвідношення (73) і яким чином відкривається можливість встановлення зв'язку між виразами для провідності (65) і (68) і формулами Друде (2–7). Це призведе також до нової інтерпретації мод $M(E)$, введених вище, і до пояснення їх цілочисельності.

Закон дисперсії $E(p)$ для кристалічних твердих тіл

Наслідком трансляційної симетрії кристалічного твердого тіла є параболічний закон дисперсії поблизу екстремуму зони E_c , якому відповідає нульовий імпульс [13] (рис. 14; взагалі кажучи, такий екстремум може бути зміщений з центру зони Бріллюена, й тоді вирази виявляться дещо складніші). Для ізотропного випадку:

$$E(p) = E_c + \frac{p^2}{2m}, \quad (78)$$

де m – ізотропна ефективна маса, введена як $\frac{1}{m} = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \right|_{E=E_c}$, а імпульс пов'язаний з хвильовим

вектором співвідношенням $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. Закон дисперсії (78) широко використовується для різних речовин – і для металів і для напівпровідників (хоч по мірі віддалення від екстремуму зон відхилення від параболічності наростають). При цьому в напівпровідниках поблизу вершини валентної зони ефективна маса від'ємна. Аби уникнути незручності, в усіх випадках користуються саме додатною масою, але приписують таким носіям заряду – діркам – позитивний електричний заряд.

Для вперше отриманого в 2004 році графену [19, 20], використання якого в наноелектроніці, як очікують, приведе до наступного кроку в мініатюризації, має місце лінійна залежність енергії від двовимірного імпульсу в околі точки Дірака, де конусами сходяться валентна зона і зона провідності (рис. 15):

$$E = \pm v_0 p, \quad (79)$$

де v_0 — константа, що дорівнює приблизно $1/300$ від швидкості світла, знак «плюс» відповідає зоні провідності, а «мінус» — валентній зоні. Ще раз наголосимо: тут і раніше під імпульсом p мається на увазі його абсолютне значення; іншими словами, мається на увазі, що залежність $E(p)$ ізотропна.

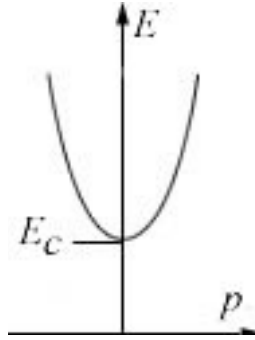


Рис. 14 – Параболічна дисперсія.

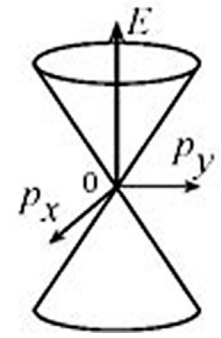


Рис. 15 – Лінійна дисперсія у графені. Верхній конус – зона провідності, нижній – валентна зона. Вони дотикаються в точці Дірака.

Нагадаємо також, що для ізотропного закону дисперсії $E(p)$ швидкість однонаправлена з імпульсом, а величина її дорівнює:

$$v \equiv \frac{dE}{dp}. \quad (80)$$

Число квантових станів

Теорія Друде пов'язала провідність матеріалу з такими його класичними характеристиками, як заряд, концентрація й маса носіїв струму, їх час вільного пробігу. Причиною обмеженої застосовності цієї теорії стало те, що принципово квантове явище було описане в рамках суто класичних уявлень. Тому наступний крок у поясненні механізму провідності Паулі й Фермі зробили на основі здобутків щойно побудованої квантової механіки. Ще більш виражений квантовий характер механізми провідності мають у наносистемах, де довжина хвилі де-Бройля стає величиною одного порядку з розмірами самої системи.

Суто квантовою величиною є число станів, описуваних різними значеннями енергії, імпульсу (й спіну, про який ми до певного часу не згадуватимемо), в яких електрон може перебувати в даній системі (тобто в провіднику різної розмірності). Надалі ми використовуватимемо вже добре відому нам модель пружного резистора, яка добре описує багато реальних наносистем. На довжині резистора L повинне укладатися ціле число де-бройлівських хвиль з довжиною λ , описуваною формулою (8). Це

означає, що відношення $\frac{L}{h/p} =$ цілому числу

або ж $p =$ ціле число $\cdot (h/L)$.

З цього випливає, що дозволені стани повинні бути однорідно розподілені для даного значення p і що кожний зі станів займає в імпульсному просторі проміжок:

$$\Delta p = \frac{h}{L}. \quad (81)$$

Визначимо функцію $N(p)$ як повне число станів з меншими значеннями імпульсу, ніж задане значення p . Для одновимірних провідників 1d (рис. 16)

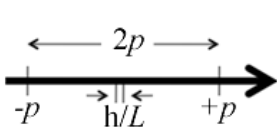


Рис. 16 – До підрахунку числа станів для 1d-провідника.

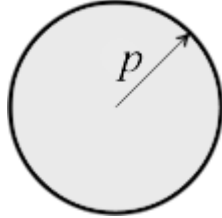


Рис. 17 – До підрахунку числа станів для 2d-провідника.

ця функція дорівнює відношенню доступної довжини $2p$ (від $-p$ до $+p$) до проміжку Δp :

$$N(p) = \frac{2p}{h/L} = 2L \left(\frac{p}{h} \right). \quad (82)$$

Для 2d-провідників (рис. 17) потрібно розділити площу поперечного перерізу πp^2 на проміжки по довжині h/L і по ширині пластини h/W (див. рис. 12), тому остаточно отримуємо:

$$N(p) = \frac{\pi p^2}{(h/L)(h/W)} = \pi W \cdot L \left(\frac{p}{h} \right)^2. \quad (83)$$

Для 3d-провідників об'єм сфери радіусу p ділиться на добуток проміжків в імпульсному просторі для кожної з його координат $(h/L) \cdot (h/W_1) \cdot (h/W_2)$, де площа поперечного перерізу провідника $A = W_1 \cdot W_2$, тому остаточно:

$$N(p) = \frac{(4\pi/3)p^3}{(h/L)(h^2/A)} = \frac{4\pi}{3} A \cdot L \left(\frac{p}{h} \right)^3. \quad (84)$$

Об'єднуючи вирази для $d = \{1, 2, 3\}$ в одному, маємо:

$$N(p) = \left\{ 2 \frac{L}{h/p}, \pi \frac{L \cdot W}{(h/p)^2}, \frac{4\pi}{3} \frac{L \cdot A}{(h/p)^3} \right\}. \quad (85)$$

Знаючи вигляд закону дисперсії $E(p)$, тепер можемо вирахувати залежність числа станів $N(E)$ з енергією, меншою від заданого значення E , від цього значення.

Густина станів $D(E)$

Отримана таким чином функція числа станів $N(E)$ (77) повинна дорівнювати густині станів $D(E)$, проінтегрованої до значення E . Тому густина станів запишеться як:

$$D(E) = \frac{dN}{dE}. \quad (86)$$

Підставивши сюди (85), одержимо:

$$D(E) = \frac{dN}{dp} \frac{dp}{dE} = \frac{dp}{dE} \frac{p^{d-1} d}{h^d} \left\{ 2L, \pi L W, \frac{4}{3} \pi L A \right\}. \quad (87)$$

Враховуючи (80) і (85), остаточно отримаємо звідси шукане фундаментальне рівняння (73), незалежне від конкретного вигляду закону дисперсії.

Провідність за формулою Друде

Як уже було показано, з використанням (73) для провідності (65) 3d-провідника можна одержати вираз (74), в якому залежна від енергії маса визначена співвідношенням (75). Ми також показали, що вираз (74) зводиться до формули Друде (7) при температурах, близьких до нуля. Тепер розглянемо окремо провідники n-типу і p-типу (діркова провідність притаманна для багатьох металів і напівпровідників) при температурах, відмінних від нуля.

Провідники n-типу. Використовуючи вираз (74) і припускаючи в ньому незалежність маси m і часу τ від енергії, отримуємо:

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{1}{A \cdot L} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E). \quad (88)$$

Інтегруючи по частинах, маємо:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) = [-N(E)f_0(E)]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN(E)}{dE} f_0(E) = [0-0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E) f_0(E). \quad (89)$$

Інтеграл у правій частині (89) дорівнює повному числу електронів, оскільки добуток $dE \cdot D(E) \cdot f_0(E)$ є число електронів в інтервалі енергій від E до $E + dE$. Таким чином, вираз (88) зводиться до формули Друде:

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{N}{A \cdot L}, \quad (90)$$

тотожної (7) з урахуванням того, що $N/A \cdot L = n$ – концентрація електронів провідності.

Провідники р-типу. Цікава ситуація має місце для провідників р-типу, де проводять дірки (незайняті електронами стани), розташовані поблизу вершини валентної зони, де закон дисперсії спадний:

$$E(p) = E_c - \frac{p^2}{2m}. \quad (91)$$

Для числа таких незайнятих станів (рис.18) маємо замість (77) вираз:

$$N(E) = \int_E^{+\infty} dE D(E). \quad (92)$$

що дає:

$$D(E) = -\frac{dN}{dE}. \quad (93)$$

Так виходить тому, що функція $N(E)$ визначається через функцію $N(p)$, яка дає повне число станів з імпульсом, меншим від заданого значення p , що відповідає енергіям, більшим, ніж задане значення E згідно до (91).

Як і раніше, інтегруємо по частинах:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) = [-N(E)f_0(E)]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E), \quad (94)$$

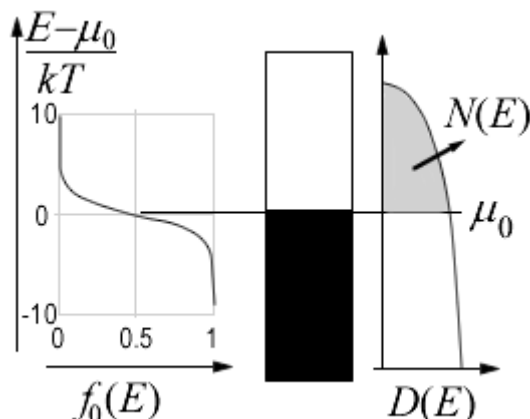


Рис. 18. Рівноважна функція Фермі $f_0(E)$, густина станів $D(E)$ і число станів $N(E)$ для р-провідника з законом дисперсії (91).

Однак тепер перший доданок у правій частині не зануляється, оскільки і $N(E)$ і $f_0(E)$ на нижній межі інтегрування не нулі.

Обійти цю ситуацію можна таким чином: замість похідної від f_0 брати похідну від $(1 - f_0)$, яка є функцією розподілу вже не електронів, а дірок:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial(1-f_0)}{\partial E} \right) N(E) = [-N(E)(1-f_0)]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} (1-f_0) = [0-0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E)(1-f_0). \quad (95)$$

Інтеграл у правій частині (95) дорівнює повному числу дірок. Це означає, що для провідників р-типу можна користуватися формулою Друде:

$$\sigma = \frac{q^2 p \tau}{2m}, \quad (96)$$

де тепер p – концентрація дірок, m – їхня ефективна маса, τ – час вільного пробігу (у напівпровідниках вони можуть суттєво відрізнятися від аналогічних параметрів для електронів).

Графен. Для графену, як уже говорилося, справедливий лінійний спектр (79), який описує валентну зону і зону провідності, що дотикаються в точці Діркака [19, 20] (рис. 15). У власному графені (тобто такому графені, де носії народжуються за рахунок термічних переходів електронів з валентної зони в зону

провідності, при кімнатній температурі концентрація таких носіїв становить приблизно 10^{11} см^{-2}), густину станів можна розбити на густину електронних і діркових станів (рис 19 праворуч):

$$D(E) = D_n(E) + D_p(E), \quad (97)$$

а потім користуватися, наприклад, виразом для провідності (65) при $d = 2$. Застосовувати формулу Друде (7) тут не варто, оскільки ефективна маса електронів і дірок, визначена через другу похідну від енергетичного спектру, в графені нульова, а ефективна маса, визначена як (75), для графену залежить від енергії (про це йтиметься трохи далі).

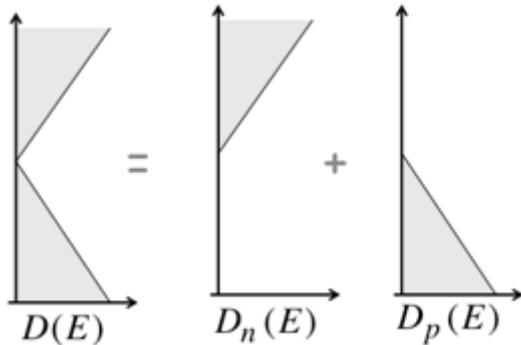


Рис. 19. Розбиття густини станів для графену на електронну і діркову.

Однак частіше реалізують на експерименті ситуацію так званого «графену, легованого напругою на затворі» [19]. При цьому плівку графену закріплюють на діелектричній підкладці завтовшки як правило кілька десятків або сотень нанометрів, а підкладку розмішують на електроді затвору, подаючи на який додатну або від'ємну напругу, «легують» графен електронами чи дірками відповідно. Концентрація носіїв у графені при цьому пов'язана з напруженістю поля в діелектричній підкладці звичайною формулою плоского конденсатора, її залежність від напруги лінійна.

У «легованому» графені провідність має електронний або дірковий характер, залежно від того, додатну чи від'ємну напругу прикладено до затвору. При цьому в (97) слід враховувати лише один з двох доданків у правій частині.

Чи пропорційна провідність до концентрації носіїв?

Експериментальні значення провідності часто отримують для різних значень концентрації носіїв (електронів або дірок). За теорією Друде, ці дві величини пов'язані лінійно. Тому одержані відхилення від лінійності потрактували як прояви залежності часу вільного пробігу від енергії. При цьому не враховували, що для непараболічного закону дисперсії маса носія струму, визначувана як p/v , залежить від енергії і тим самим призводить до нелінійної залежності провідності від концентрації.

Спочатку визначимо електронну концентрацію з виразу (85):

$$n(p) = \left\{ 2 \frac{1}{h/p}, \pi \frac{1}{(h/p)^2}, \frac{4\pi}{3} \frac{1}{(h/p)^3} \right\}, \quad (98)$$

де концентрація n дорівнює N/L , $N/W \cdot L$ і $N/A \cdot L$ для $d = 1, 2$ і 3 (звернімо увагу на те, що розмірність концентрації в усіх трьох випадках різні!). Перепишемо (98) у загальному вигляді:

$$n(p) = K p^d, K = \left\{ 2 \frac{1}{h}, \pi \frac{1}{h^2}, \frac{4\pi}{3} \frac{1}{h^3} \right\}. \quad (99)$$

Тепер для провідності (76) з урахуванням (75) маємо:

$$\sigma = q^2 \frac{n(p)\tau(p)}{m(p)} = q^2 K p^{d-1} v(p) \tau(p). \quad (100)$$

Якщо відома залежність швидкості і часу вільного пробігу від енергії, а отже і від імпульсу, в рівняннях (99) і (100) можна позбутися залежності від імпульсу і встановити зв'язок між провідністю σ і концентрацією електронів n .

Наприклад, у графені з його лінійним спектром (79) швидкість dE/dp стала, дорівнює v_0 і не залежить від імпульсу. Вважаючи, що час вільного пробігу від енергії не залежить, отримаємо зі (100) з урахуванням виразу (56) для довжини вільного пробігу подальшу кореневу залежність:

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4n}{\pi}}. \quad (101)$$

З урахуванням g -фактора (для графена $g = 4$, оскільки має місце подвійне виродження за спіном, яким ми досі нехтували, і подвійне – за двома еквівалентними долинами K і K'), остаточно маємо:

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4gn}{\pi}}. \quad (102)$$

Таким чином, провідність у графені має кореневу залежність від концентрації, а не очікувану на інтуїтивному рівні під впливом вигляду формули (7) лінійну (ще раз наголосимо: цей результат справедливий, коли час вільного пробігу не залежить від енергії). Оцінки за формулою (102) при $\lambda = 2 \text{ мкм}$ і $\lambda = 300 \text{ нм}$ (рис. 20) узгоджуються з експериментальними даними [21].

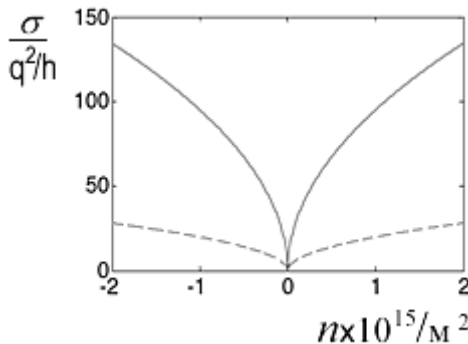


Рис. 20. Провідність графену (102) як функція концентрації електронів для значень $\lambda = 2 \text{ мкм}$ (суцільна) і $\lambda = 300 \text{ нм}$ (пунктирна) узгоджується з експериментальними даними (рис. 1 в [21])

Квантування провідності і моди провідності

Як ми вже відзначали, було експериментально виявлено [3], що балістична провідність квантується згідно з виразом (66), причому для низьковимірних провідників при низьких температурах було встановлено, що число мод M ціле. Вище було отримано вираз для числа мод (67) через добуток густини станів D і швидкості електронів v , цілочисельність якого абсолютно не очевидна. Використовуючи вигляд закону дисперсії $E(p)$, можна дати іншу інтерпретацію $M(p)$, що свідчить про цілочисельну природу величини M .

Використовуючи фундаментальне співвідношення (73), перепишемо (67) у вигляді:

$$M = \frac{hN}{2Lp} \left\{ 1, \frac{4}{\pi}, \frac{3}{2} \right\}, \quad (103)$$

де $N(p)$ — повне число станів з імпульсом, меншим від заданого значення p . З використанням (85) перетворимо (103) на:

$$M(p) = \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, \pi \frac{A}{(h/p)^2} \right\}. \quad (104)$$

Нагадаємо: число станів $N(p)$ дає нам число де-Бройлівських довжин хвиль, що укладаються в провіднику. Найпростішим є випадок $d = 1$, де ці хвилі мають укластися на довжині пружного резистора. Аналогічно $M(p)$ дає нам число мод, що укладаються в поперечному перерізі провідника, причому це число не залежить від закону дисперсії, оскільки при виведенні (104) ніде не використовувався який-небудь конкретний закон дисперсії.

З (104) видно, що для одновимірного випадку це число строго дорівнює одиниці. Ситуація з $d = 2, 3$ складніша. При оцінці чисел $M(p)$ в конкретній задачі за (104) виходять, звичайно, дробові числа. Проте, за фізичним змістом ці числа повинні бути цілими. У великих провідниках при не надто низьких температурах квантування $M(p)$ змазане, проте, в мезо- і нанорозмірних провідниках спостерігається цілочисельна природа числа мод $M(p)$ і квантування провідності [3]. Тому (104) для оцінок можна переписати у вигляді:

$$M(p) = \text{Int} \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, \pi \frac{A}{(h/p)^2} \right\}, \quad (105)$$

де під $\text{Int}\{x\}$ мається на увазі найбільше ціле число, менше від значення x .

Опір балістичних провідників $\sim M \cdot h/q^2$, тому опір балістичного 1d-провідника приблизно дорівнює:

$$R = \frac{h}{q^2} = 25,812807572 \text{ k}\Omega. \quad (106)$$

Цю величину називають сталою Клітцинга на честь ученого, який, відкривши 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 [3].

Досі ми не розглядали виродження електронних станів, вважаючи, що в кожному з них може перебувати лише один електрон. Реально ж в одновимірних провідниках число мод збігається з g -фактором, рівним числу еквівалентних долин, помноженим на двійку, що виникає через виродження по спіну. Тому точніше опір одновимірного пружного резистора дорівнює сталій Клітцинга (106), поділеній на g , що й спостерігається експериментально [1]: більшість металів і напівпровідників типу GaAs має $g = 2$ і балістичний опір 1d-зразків $\sim 12.9 \text{ k}\Omega$, а вуглецеві нанотрубки двохдолинні з $g = 4$ і їх балістичний опір $\sim 6.45 \text{ k}\Omega$.

Замість висновку

У цій статті в рамках концепції «знизу – вгору» автори стисло розглянули причини виникнення струму й роль електрохімічних потенціалів та фермівських функцій в цьому процесі. Було описано модель «пружного резистора» і дано альтернативне формулювання закону Ома. В рамках концепції «знизу–вгору» також обговорено загальні питання електронної провідності, у тому числі на прикладі активно досліджуваного нині графену.

Метою авторів було змусити читачів (у тому числі й тих, які фахово займаються нанофізикою і спорідненими галузями) по новому поглянути на певні базові речі, які ще з університетської лави вони вважали цілком очевидними. Ми не прагнули «відкидати» апробовані концепції, але намагалися показати: кожна з них має власні межі застосовності. Тому ми вважатимемо своє завдання виконаним, якщо прочитання цієї методологічної, оглядової за характером статті змусить колеґ-викладачів замислитися над можливим удосконаленням їхніх курсів. Адже зміст цих курсів часто відбиває не загальну картину явищ, як ми уявляємо її сьогодні, а історичну послідовність, у якій ці явища було отримано, і певну традицію, базовану на цій послідовності [22].

На завершення наголосімо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» і «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитаного он-лайн в січні–квітні 2012 року проф. С.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.

Список використаної літератури

1. *Mitin Vladimir V., Kochelap Viatcheslav A., Stroschio Michael A.* Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2012. – pp. 346.
2. *Hoefflinger Bernd (Editor).* Chips 2020: A Guide to the Future of Nanoelectronics (Frontiers Collection). – Berlin: Springer-Verlag. – 2012. – pp. 505.
3. *Мартинес-Дуарт Дж. М., Мартин-Палма Р. Дж., Агулло-Рюеда Ф.* Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. – Москва: Техносфера. – 2007. – 368 с.
4. *Находкін М. Г., Шека Д. І.* Фізичні основи мікро- та наноелектроніки. Підручник. – Київ: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет». – 2005. – 431 с.
5. *Smit R. H. M., Noat Y., Untiedt C., Lang N. D., van Hemert M. C., van Ruitenbeek J. M.* Measurement of the conductance of a hydrogen molecule // Nature. – 2002. – V. 419, N 3. – P. 906 – 909.
6. *Datta Supriyo.* Electronic Transport in Mesoscopic Systems.- Cambridge: Cambridge University Press. – 2001. – pp. 377.

7. *Datta Supriyo*. Quantum Transport: Atom to Transistor. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2005. – pp. 404.
8. www.nanohub.org/topics/ElectronicsFromTheBottomUp
9. *Landauer Rolf*. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // IBM J. Res. Dev. – 1957. – V. 1, N 3. – P. 223 – 231.
10. *Landauer Rolf*. Electrical resistance of disordered onedimensional lattices // Philos. Mag. – 1970. – V. 21. – P. 863 – 867.
11. *Landauer Rolf*. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // J. Math. Phys. – 1996. – V. 37, N 10. – P. 5259.
12. *Datta Supriyo*. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 473.
13. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела, том 1. – М: Мир. – 1979. – 400 с.
14. *Sears F. W., Salinger G. L.* Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. – Boston: Addison-Wesley. – 1975. – pp. 331 – 336, 355 – 361.
15. *Kubo R.* Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // J. Phys. Soc. Japan. – 1957. – V. 12. – P. 570 – 586.
16. *Lundstrom M., Guo Jing.* Nanoscale Transistors: Physics, Modeling, and Simulation. – Berlin: Springer. – 2006. – pp. 300.
17. *Nazarov Yuli V., Blanter Yaroslav M.* Quantum Transport. Introduction to nanoscience. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2009. – pp. 590.
18. *Berg Howard C.* Random walks in biology. – Princeton: Princeton University Press. – 1993. – pp. 152.
19. *Стриха М.В.* Фізика графену: стан і перспективи // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2010. – Т. 1(7), N 3. – С. 5 – 13.
20. *Кругляк Ю. А., Кругляк Н. Е.* Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -острова. Теоретические основы // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2012, В. 13. – С. 207 – 218.
21. *Bolotin K. I., Sikes K. J., Hone J., Kim P., Stormer H. L.* Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene // Phys. Rev. Lett. – 2008. – V. 101. – P. 096802/1-4.
22. *Ільченко В. І., Проказа О. Т., Стриха М.В.* Фізичні теорії: люди, ідеї, події: навчальний посібник. – Луганськ: Елтон-2. – 2012. – 384 с.

Стаття надійшла до редакції 15.03.2012

Прийнята до публікації 01.09.2012