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

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

PACS numbers: 72.10.-d, 72.20.Dp, 72.20.Fr, 72.90.+y, 73.63.-b
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.1.96432>

КІНЕТИЧНЕ РІВНЯННЯ БОЛЬЦМАНА В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ У МІКРО- ТА НАНОЕЛЕКТРОНІЦІ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна
тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*
* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;
Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

КІНЕТИЧНЕ РІВНЯННЯ БОЛЬЦМАНА В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ У МІКРО- ТА НАНОЕЛЕКТРОНІЦІ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У методичній статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, розглядається кінетичне рівняння Больцмана (КРБ), яке в застосуванні до наноелектроніки розв'язує ті ж завдання, що й узагальнена транспортна модель Ландауера – Датта – Лундстрома (ЛДЛ). Для одних задач краще використовувати КРБ, а для других – модель ЛДЛ. За правильного виконання обчислювальних процедур обидва підходи дають один і той самий результат. У цій

статті дано відповідь на такі питання: як скласти рівняння для функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ як розв'язку КРБ за межами рівноваги, як розв'язати це рівняння в режимі лінійного відгуку, як зіставити отримані таким чином результати з тими, які можна отримати в моделі ЛДЛ в дифузійному режимі транспорту, як врахувати зовнішнє магнітне поле і його вплив на електронний транспорт.

Ключові слова: Нанофізика, наноелектроніка, рівняння Больцмана, час релаксації, поверхнева провідність, ефект Холла, холлівська рухливість, холлівський фактор

THE KINETIC BOLTZMANN EQUATION IN GENERALIZED MODEL OF ELECTRON TRANSPORT FOR MICRO- AND NANOELECTRONICS

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. In a tutorial article directed to serve researchers, university teachers and students, we study Boltzmann kinetic equation (BKE), which in its application to nanoelectronics serves to solve the same problems as the generalized Landauer-Datta-Lundstrom (LDL) transport model does. For some problems BKE formalism is preferable, for the other – LDL model is. Under correct performance of calculations the two approaches leads to similar results. In this article we answer the following questions: how to compose the equation for distribution function $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ as a solution of BKE beyond equilibrium, how to solve this equation for the linear response regime, how to compare the obtained results with those, which can be obtained within LDL model for diffusive transport regime, how to take into consideration the external magnetic field and its effect on electron transport.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, Boltzmann equation, relaxation time, surface conductivity, Hall effect, Hall mobility, Hall factor

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА В ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ТРАНСПОРТА ЭЛЕКТРОНОВ В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В методической статье, рассчитанной на исследователей, преподавателей и студентов высшей школы, мы рассматриваем кинетическое уравнение Больцмана (КУБ), которое в применении к нанoeлектронике решает те же самые задачи, что и обобщенная транспортная модель Ландауэра – Датты – Лундстрема (ЛДЛ). Для одних задач лучше пользоваться КУБ, а для других – моделью ЛДЛ. При правильной постановке вычислений оба подхода приводят к одним и тем же результатам. В нашей статье рассматриваются следующие вопросы: как составить уравнение для функции распределения $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ как решения КУБ за пределами равновесия, как решить это уравнение в режиме линейного отклика, как увязать полученные таким образом результаты с теми, которые получаются в модели ЛДЛ в диффузионном режиме транспорта, как учесть внешнее магнитное поле и его влияние на электронный транспорт.

Ключевые слова: Нанофизика, нанoeлектроника, уравнение Больцмана, время релаксации, поверхностная проводимость, эффект Холла, холловская подвижность, холловский фактор

1. Вступ

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), до певної міри альтернативною традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках, ми розглянули в [1] модель Ландауера-Датта-Лундстрема (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту в резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних.

При цьому розгляд у [1] здійснювався для випадку, коли температура контактів резистора однакова. У [2] натомість ми розглянули термоелектричні ефекти Зеєбека і Пельть'є в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана-Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами. Потому в [3] ми отримали доведення для результатів, постульованих у [2], причому зробили це для 1D, 2D і 3D провідників з довільним законом дисперсії і будь-яким режимом провідності: балістичним, дифузійним, або ж перехідним.

З позицій транспортної моделі Ландауера – Датта – Лундстрема у [4] побудовано узагальнену модель переносу тепла фононами. У [5] ми розглянули, як узагальнена транспортна модель ЛДЛ описує провідність графену. Нарешті, в [6] ми розглянули роль розсіяння в моделі ЛДЛ й продемонстрували, що при описі транспорту електронів у провіднику в дифузійному режимі важливу роль відіграє середня довжина вільного пробігу λ , яка визначає коефіцієнт проходження τ .

Кінетичне (в англомовній науковій літературі – транспортне) рівняння Больцмана (КРБ) в наноелектроніці [7] застосовують при розв'язанні тих самих задач, що й модель ЛДЛ. Як ми побачимо, для одних задач краще використовувати КРБ, а для інших – модель ЛДЛ. Якщо коректно провести обчислення, то обидва підходи призводять природним чином до однакових результатів. У цій статті ми зупинимося на ролі КРБ у концепції ЛДЛ. Як практич-

не застосування КРБ ми розглянемо поведінку струму в зовнішньому магнітному полі.

Основним завданням теорії транспортних явищ Больцмана [8] є обчислення функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ як імовірності того, що стан у точці \vec{r} з хвильовим вектором \vec{k} (або імпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$) зайнятий у момент часу t . У рівноважній ситуації відповідь відома: це – функція Фермі $f(E)$. Ми в нашій статті спробуємо висвітлити подальші питання: як записати рівняння для $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ за межами рівноваги, як розв'язати це рівняння в режимі лінійного відгуку (тобто за не дуже великого відхилення від рівноваги), як поєднати отримані таким чином результати з тими, які можна отримати в моделі ЛДЛ у дифузійному режимі транспорту, як врахувати зовнішнє магнітне поле і його вплив на електронний транспорт. Докладніший розгляд цих питань можна знайти, наприклад, у [9 – 14].

2. Кінетичне рівняння Больцмана

Електрони у кристалі, де потенціал електромагнітного поля змінюється повільно, можна розглядати як квазічастинки. З урахуванням трансляційної симетрії кристалу, яке дозволяє уникнути розгляду швидкозмінного граткового потенціалу, для електрона можна записати квазі-Ньютоновське рівняння руху, яке пов'язує похідну від квантованого *квазі*-імпульсу із силою, що діє на електрон з боку тільки *зовнішнього* поля:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \vec{F}_e, \quad (1)$$

де зовнішня Лоренцівська сила, яка діє на електрон, визначається градієнтом напруженості електричного поля E_e , магнітною індукцією B , швидкістю електрона \vec{v} та елементарним зарядом q :

$$\vec{F}_e = -\nabla E_e - q\vec{v} \times \vec{B} = -q\vec{E}_e - q\vec{v} \times \vec{B}. \quad (2)$$

Для знаходження $\vec{k}(t)$ потрібно обчислити

$$\hbar\vec{k}(t) = \hbar\vec{k}(0) + \int_0^t \vec{F}_e(\vec{r}(t'), t') dt'. \quad (3)$$

Знаючи $\vec{k}(t)$ і вигляд зонного спектру, визначаємо швидкість електронів

$$\vec{v}_g(t) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}(t)) \quad (4)$$

і потім їхню траєкторію

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \int_0^t \vec{v}_g(t') dt' \quad (5)$$

Рівняння (3) і (5) – це напівкласичні рівняння руху електронів у кристалічному твердому тілі. У напівкласичному підході вважаємо, що потенціал $E_c(\vec{r})$ змінюється повільно, тому квантова інтерференція і тунелювання відсутні й електрони можна розглядати як «індивідуальні» частинки. І координата електрона, і його імпульс визначені одночасно, бо квантовомеханічна невизначеність $\Delta r \Delta p \geq \hbar / 2$ мала.

Рівняння руху описують розташування електрона в фазовому просторі. На рис. 1 зображена довільна траєкторія $T[x(t), p_x(t)]$ руху електрона в двовимірному фазовому просторі (x, p_x) .

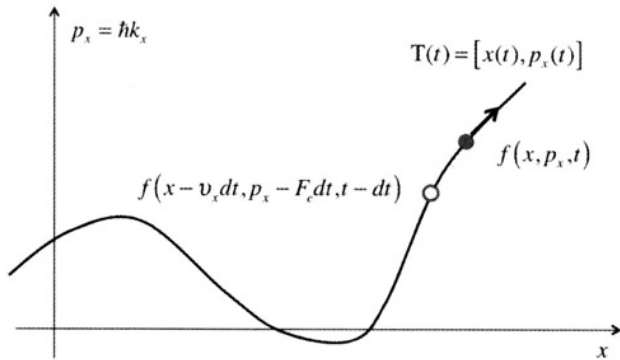


Рис.1. Траєкторія руху електрона $T(t) = [x(t), p_x(t)]$ в фазовому просторі (x, p_x) .

Потрібно визначити ймовірність $f(x, p_x, t)$ того, що стан, позначений чорним кружком, зайнятий у момент часу t . Ця ймовірність має збігатися з ймовірністю того, що попередній стан, позначений світлим кружком, був зайнятий у момент часу $t - dt$.

Чорним кружком на траєкторії позначено стан, для якого ми хочемо визначити ймовірність $f(x, p_x, t)$ того, що він зайнятий. З неперервності руху електрона вздовж траєкторії

впливає, що ця ймовірність має збігатися з такою самою ймовірністю для попереднього стану, зображеного світлим кружком, а саме:

$$f(x, p_x, t) = f(x - v_x dt, p_x - F_e dt, t - dt) \quad (6)$$

Або ж, іншими словами, повна похідна вздовж траєкторії дорівнює нулеві:

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (7)$$

Взявши похідну від функції декількох змінних, одержуємо

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{\partial p_x}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

або, з урахуванням (1)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} v_x + \frac{\partial f}{\partial p_x} F_{e,x} = 0 \quad (9)$$

У тривимірному фазовому просторі маємо

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{F}_e \cdot \nabla_p f = 0 \quad (10)$$

де

$$\nabla_r f = \frac{\partial f}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial f}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial f}{\partial z} \hat{z} \quad (11a)$$

$$\nabla_p f = \frac{\partial f}{\partial p_x} \hat{p}_x + \frac{\partial f}{\partial p_y} \hat{p}_y + \frac{\partial f}{\partial p_z} \hat{p}_z \quad (11b)$$

Рівняння (10) інколи називають КРБ без зіткнень. Це рівняння описує балістичний транспорт без розсіювання, або ж стан рівноваги, в якому кожний акт зіткнення компенсується протилежним до нього актом у відповідності до принципу детальної рівноваги. Спинімося на останньому твердженні докладніше.

Процеси розсіяння збільшують або зменшують густину електронів, яка припадає на фазовий об'єм $d\vec{k}$. Вводять величини

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{in} \quad \text{і} \quad \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{out}$$

такі, що вирази

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{in} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} dt \quad \text{і} \quad \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{out} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} dt$$

дають приріст (*in*) чи зменшення (*out*) числа електронів на одиницю об'єму в елементі об'єму $d\vec{k}$, який охоплює значення \vec{k} , впродовж часового інтервалу dt . У стані рівноваги ці вирази дорівнюють один одному. У напівкласичному підході до транспорту електронів вважають, що розсіяння відбувається під впливом короткодійних сил так швидко, що в процесі розсіяння просторова координата електрона не змінюється, змінюється тільки його імпульс.

При врахуванні розсіяння КРБ набуває вигляду

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{F}_e \cdot \nabla_p f = \hat{S} f, \quad (12)$$

в якому вигляд оператора розсіяння \hat{S} визначається фізикою задачі й може бути вельми складним. При напівкласичному розгляді зазвичай використовують наближення часу релаксації (ЧР) [14]

$$\hat{S} f = - \left(\frac{f(\vec{p}) - f_0(\vec{p})}{\tau} \right) = - \frac{\delta f(\vec{p})}{\tau}, \quad (13)$$

де δf - відхилення функції розподілу від її рівноважного значення, а τ - характеристичний час релаксації імпульсу [9].

«Відчути» наближення ЧР можна на такому простому прикладі. Нехай ми розглядаємо просторово однорідний матеріал за відсутності електричного й магнітного поля. Тоді другий і третій доданки в КРБ (12) зануляються й залишається просте рівняння

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\delta f}{\tau}, \quad (14)$$

яке має очевидний розв'язок

$$\delta f(t) = \delta f(0) e^{-t/\tau}, \quad (15)$$

згідно з яким порушення функції розподілу, викликане відхиленням системи від рівноважного стану, зменшується експоненційно з характеристичним часом τ . Таким чином, розсіювання відновлює рівновагу.

Наближення ЧР цілком прийнятне для опису квазірівноважного транспорту в режимі лінійного відгуку. Однак, таке наближення для інтегралу зіткнень може бути обґрунтоване тільки

поблизу рівноваги і тільки для пружних і/або рівноважних процесів розсіяння [9]. Проте, це наближення широко використовують для одержання результатів в аналітичному вигляді. Ми так само будемо його використовувати. Слід, однак, пам'ятати, що існує чимало ситуацій, коли наближення ЧР не працює (див., наприклад, [14, 15]).

2.1. Розв'язування КРБ в режимі динамічної рівноваги

Як приклад розв'язування КРБ розглянемо випадок динамічної рівноваги. Зовнішнє магнітне поле ми поки не враховуватимемо. В наближенні ЧР для системи в стані динамічної рівноваги ($\partial f / \partial t = 0$) маємо:

$$\vec{v} \cdot \nabla_r f - q \vec{E} \cdot \nabla_p f = - \frac{\delta f}{\tau}. \quad (16)$$

Розв'язок зводиться до рівноважного значення $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ з урахуванням малої поправки $\delta f(\vec{r}, \vec{p}, t)$. Природно припустити, що

$$\begin{aligned} \nabla_r f &\approx \nabla_r f \\ \nabla_p f &\approx \nabla_p f \end{aligned} \quad (17)$$

Тоді для поправки δf з рівняння (16) одержуємо:

$$\delta f = -\tau (\vec{v} \cdot \nabla_r f_0 - q \vec{E} \cdot \nabla_p f_0). \quad (18)$$

Перетворимо праву частину розв'язку (18) подальшим чином. Рівноважну функцію Фермі запишемо в вигляді

$$f_0(\vec{p}) = \frac{1}{e^{\Theta} + 1} \quad (19a)$$

$$\Theta = \frac{E(\vec{r}, \vec{p}) - E_F(\vec{r})}{kT} = \frac{E_c(\vec{r}) + E(\vec{p}) - E_F(\vec{r})}{kT}, \quad (19b)$$

де $E_F(\vec{r})$ – електрохімічний потенціал. Для градієнтів рівноважної функції Фермі маємо:

$$\nabla_r f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \Theta} \nabla_r \Theta, \quad (20a)$$

$$\nabla_p f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \Theta} \nabla_p \Theta, \quad (20b)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \Theta} = kT \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (21)$$

Підставляючи (20) і (21) до (18), одержуємо:

$$\delta f = \tau kT \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \nabla_r \Theta - q \vec{E} \cdot \nabla_p \Theta). \quad (22)$$

З урахуванням

$$\begin{aligned} \nabla_r \Theta &= \frac{1}{kT} \nabla_r (E_c(\vec{r}) - E_F(\vec{r})), \\ -\nabla_r E_c(\vec{r}) &= -q \vec{E}(\vec{r}), \quad \nabla_p \Theta = \frac{\vec{v}}{kT}, \end{aligned}$$

квазірівноважний розв'язок КРБ (22) остаточно можна записати так:

$$\delta f = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \vec{F}_g), \quad (23)$$

$$\vec{F}_g = -\nabla_r E_F(\vec{r}) + T [E_c(\vec{r}) + E(\vec{p}) - E_F(\vec{r})] \nabla_r \left(\frac{1}{T} \right).$$

Силу називають узагальненою силою; саме вона виводить систему зі стану рівноваги. Узагальнена сила містить дві компоненти: градієнт електрохімічного потенціалу й градієнт оберненої температури. Саме ці дві сили виводять у транспортній моделі ЛДЛ систему (провідник) зі стану рівноваги й спричиняють виникнення електричного струму [1, 2]. В моделі ЛДЛ це очевидний фізичний результат, підтверджений тепер математичним розв'язуванням КРБ у квазірівноважному режимі в наближенні ЧР.

2.2. Транспортні коефіцієнти

Перейдімо до обчислення транспортних коефіцієнтів. Маючи розв'язок (23) КРБ в квазірівноважному режимі, можна розрахувати різні властивості провідника. Наприклад, для 2D провідника (найвідоміший приклад [5] – графен) поверхнева густина електронів

$$n_s(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} [f_0(\vec{r}, \vec{k}) + \delta f(\vec{r}, \vec{k})] = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} f_0(\vec{r}, \vec{k}), \quad (24)$$

де остаточний результат є наслідком того, що функція $\delta f(\vec{r}, \vec{k})$ непарна за імпульсом і при інтегруванні в k -просторі зануляється. Процедуру інтегрування в k -просторі розглянуто,

наприклад, у другій лекції курсу М. Лундстрома «Електронний транспорт у напівпровідниках» [16].

Навпаки, для обчислення густини струму в 2D провіднику потрібно обчислити тільки

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} (-q) \vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (25)$$

(A – нормувальна площа), оскільки істотна тільки поправка; добуток $\vec{v}f$ непарний у k -просторі й при інтегруванні зануляється, а добуток $\vec{v}\delta f$ у (25) парний і дає вклад у густину струму.

Густина енергії електричного струму дається виразом

$$\vec{J}_w(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (26)$$

а термострум

$$\vec{J}_Q(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} (E - E_F) \vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (27)$$

де сумарна енергія електрона $E = E_c(\vec{r}) + E(\vec{k})$. Різниця $E - E_F$ є енергія, яку повинен поглинути електрон, що перебуває в контакті з енергією $E < E_F$, щоб увійти в моду провідника при енергії [2].

Якщо ми почнемо вираховувати зарядовий струм і термострум, виходячи з розв'язку КРБ (23), то для кожного зі струмів одержимо вираз із двома доданками, бо узагальнена сила в (23) дає два вклади – за рахунок різниці електрохімічних потенціалів і за рахунок різниці температур контактів. У підсумку вирази містять чотири термоелектричні коефіцієнти [2, 3, 5]. Обчислимо один із них – поверхневу провідність.

Ми вираховуємо зарядовий струм (25) з урахуванням (23):

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{F}_g) = \quad (28)$$

$$= \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v}\vec{v}) \cdot \vec{F}_g,$$

де добуток $(\vec{v}\vec{v})$ у загальному випадку є тензор, тож КРБ дозволяє відносно просто розглядати анізотропний транспорт, для опису якого потрібні тензорні вирази для транспортних коефіцієнтів. Спрощуючи ситуацію, далі розгля-

немо струм тільки в напрямку x у припущенні, що електрохімічний потенціал змінюється тільки в цьому напрямі й температура вздовж провідника стала:

$$\vec{J}_x(\vec{r}) = \left[\frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} q v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \right] \frac{dE_F}{dx}, \quad (29)$$

що можна переписати в стандартній формі

$$J_x = \sigma_S \frac{d(E_F/q)}{dx}, \quad (30)$$

де

$$\sigma_S = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} q^2 v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (31)$$

Отже, для обчислення питомої поверхневої провідності потрібно взяти в (31) суму в k -просторі.

При скінченних розмірах провідника число електронних станів у ньому злічене. Якщо йдеться про нанопровідник, то число станів невелике й підсумовування в (31) можна здійснити безпосередньо. В достатньо великих об'ємних провідниках стани розташовано щільно й суму в (31) можна замінити на інтеграл:

$$\sum_{\vec{k}} (\bullet) \rightarrow \int (\bullet) N_k d\vec{k}, \quad (32)$$

де N_k - густина станів у k -просторі. Для провідників різної вимірності остаточно маємо [7, 16]:

$$\begin{aligned} 1D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{L}{2\pi} \right) dk = \frac{L}{\pi} dk, \\ 2D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{A}{4\pi^2} \right) dk_x dk_y = \frac{A}{2\pi^2} dk_x dk_y, \\ 3D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{\Omega}{8\pi^3} \right) dk_x dk_y dk_z = \frac{\Omega}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z, \end{aligned} \quad (33)$$

де двійка у всіх виразах враховує виродження за спіном.

Замість (31) з урахуванням додаткового долинного виродження (для графену воно дорівнює 2 [5]) маємо:

$$\sigma_S = \frac{1}{A} g_v \frac{A}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} q^2 v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) d\theta k dk. \quad (34)$$

Взявши інтеграл за кутом, з урахуванням $v_x = v \cos \theta$ одержуємо:

$$\sigma_S = g_v \frac{q^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} v^2 \tau(k) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k dk. \quad (35)$$

Для параболічного закону дисперсії

$$k dk = \frac{m^*}{\hbar^2} dE \quad \text{і} \quad v^2 = \frac{2(E - E_c)}{m^*}.$$

Задля спрощення, вважаємо, що характеристичний час розсіяння сталий: $\tau(E) = \tau$. Тоді замість (35) одержуємо:

$$\sigma_S = g_v \frac{q^2 \tau_0}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (36)$$

що після обчислення інтегралу дає

$$\sigma_S = g_v \frac{q^2 \tau_0 k T}{\pi \hbar^2} \mathfrak{F}_0(\eta_F), \quad (37)$$

де інтеграл Фермі – Дірака порядку j визначається як

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

з $\eta_F = (E_F - E_c) / kT$ [1].

Якщо ми згадаємо (ф-ла (97) у [1]), що поверхнева густина електронів

$$n_s = \int_0^{\infty} D_{2D}(E) f_0(E) dE = g_v \frac{m^* k T}{\pi \hbar^2} \mathfrak{F}_0(\eta_F) = N_{2D} \mathfrak{F}_0(\eta_F),$$

то питома поверхнева провідність (37) запишеться у звичному вигляді через рухливість електронів μ :

$$\sigma_S = n_s q \left(\frac{q \tau_0}{m^*} \right) = n_s q \mu. \quad (39)$$

Як цей загальновідомий результат корелює з моделлю ЛДЛ? Для відповіді на це питання слід повернутися до виразу (35) й перейти в ньому до інтегрування за енергією:

$$\sigma_S = \frac{q^2}{2\pi} \int_0^{\infty} v^2 \tau(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left(\frac{g_v m^*}{\hbar^2} \right) dE. \quad (40)$$

Оскільки густина 2D-станів для параболічного закону дисперсії носіїв стала

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

то замість (40) одержимо:

$$\sigma_S = \frac{q^2}{2} \int_0^{\infty} (v\tau) v D_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (41)$$

Введемо множники $\pi/2$ та $h/4$ й обернені до них і перекомпонуюємо (41) подальшим чином:

$$\sigma_s = \frac{q^2}{2} \frac{4}{h} \int_0^\infty \left(\frac{\pi}{2} v \tau \right) \left[\left(\frac{2}{\pi} v \right) \frac{h}{4} D_{2D}(E) \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (42)$$

У підінтегральному виразі перший співмножник у круглих дужках, згідно з формулою (16) з [6], це середня довжина вільного пробігу щодо розсіяння назад $\lambda(E)$, співмножник $2v/\pi$, згідно з (30) із [1], це середня швидкість $\langle v_x^+(E) \rangle$ при енергії E в напрямку $+x$, а весь вираз у квадратних дужках, згідно з (33) із [1], є числом мод провідності $M_D(E)$. Таким чином, отриманий вираз (42) є добре відомим у моделі ЛДЛ (формула (141) у [1]) виразом для поверхневої провідності

$$\sigma_s = \frac{2q^2}{h} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (43)$$

Отже, результатом розв'язування КРБ у квазірівноважному режимі в наближенні ЧР, тобто в дифузійному наближенні, для поверхневої провідності стає звичний для моделі ЛДЛ вираз. Показано також [17], що КРБ у наближенні ЧР дає точно такі ж вирази для коефіцієнта Зеєбека й для електронної теплопровідності, що і транспортна модель ЛДЛ. Перевага моделі ЛДЛ полягає в її фізичній прозорості, а також у тому, що вона дозволяє розглядати квазібалістичний і балістичний режими транспорту так само просто, як і дифузійний режим. З іншого боку, без КРБ не можна обійтися при вивченні анізотропного транспорту. Окрім того, у КРБ легко врахувати наявність магнітного поля, - і ми це покажемо далі. Нарешті, КРБ дозволяє описати транспорт далеко від рівноваги [9].

Перше, аніж перейти до врахування магнітного поля в КРБ, одержимо вираз для усередненого часу розсіяння $\langle\langle \tau \rangle\rangle$.

Якщо при переході від (35) до (36) зберегти залежність часу розсіяння від енергії, то

$$\sigma_s = g_v \frac{q^2}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \tau(E) (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (44)$$

а найпростіший спосіб врахувати залежність часу розсіяння від енергії - це обрати для апроксимації цієї залежності степеневий закон [6]

$$\tau(E) = \tau_0 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^s. \quad (45)$$

Поверхнева провідність пропорційна поверхневій концентрації електронів

$$n_s = \int_0^\infty D_{2D}(E) f_0(E) dE = \int_0^\infty \left(g_v \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \right) f_0(E) dE.$$

Множачи й ділячи вираз для (44) на , одержуємо

$$\sigma_s = q^2 \frac{\left(\frac{g_v}{\pi \hbar^2} \right) \int_0^\infty \tau(E) (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{m^* \int_0^\infty \left(\frac{g_v}{\pi \hbar^2} \right) f_0(E) dE} n_s, \quad (46)$$

що дозволяє записати поверхневу провідність у вигляді

$$\sigma_s = n_s q \frac{q \langle\langle \tau \rangle\rangle}{m^*}, \quad (47)$$

де введено усереднений належним чином час розсіяння

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle \equiv \frac{\int_0^\infty \tau(E) (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_0^\infty f_0(E) dE}. \quad (48)$$

У припущенні степеневій апроксимації (45)

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \frac{\int_0^\infty \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^s (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_0^\infty f_0(E) dE}. \quad (49)$$

Інтегрування знаменника дає $kT \mathfrak{Z}(\eta_F)$, а чисельника - $kT \Gamma(s+2) \mathfrak{Z}_s(\eta_F)$, тож остаточно

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(s+2) \mathfrak{Z}_s(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}. \quad (50)$$

Так само вирази для $\langle\langle \tau \rangle\rangle$ можна отримати для 1D і 3D провідників. Для невідроджених напівпровідників інтеграл Фермі - Дірака перетворюються на експоненти, тож у цьому випадку

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \Gamma(s+2). \quad (51)$$

При розсіюванні на акустичних фонах у 2D провіднику, а на заряджених домішках \approx . Таким чином, для 2D провідників з такими режимами розсіювання $\langle\langle\tau\rangle\rangle$ перевищує в 1–2 рази.

2.3. Врахування магнітного поля в КРБ

Під впливом магнітного поля транспортні коефіцієнти змінюються. Вимірювання ефекту Холла дозволяє повніше схарактеризувати властивості матеріалу провідника [18]. Розв'язання КРБ з урахуванням магнітного поля в загальному випадку цілком можливе, хоча часом і вимагає значних обчислювальних ресурсів. Ми надалі розглянемо частковий випадок вимірювання провідності в 2D провіднику, розташованому в площині xy , з магнітним полем, направленим перпендикулярно до цієї площини вздовж осі z .

Почнімо з наближення ЧР для системи в стані динамічної рівноваги ($\partial f/\partial t = 0$) і, для спрощення, припустимо просторову однорідність провідника ($\nabla =$). Тоді КРБ (16) з урахуванням магнітного поля запишеться як:

$$-q\vec{E} \cdot \nabla_p f - q[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \nabla_p f = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (52)$$

Відразу хотілося б припустити, що

$$\nabla_p f \approx \nabla f, \quad (53)$$

як це ми вважали раніше в (17), але тепер це неможливо. Наближення (53) прийнятне, як ми бачили вище, для першого доданку з електричним полем у лівій частині (52), але неприйнятне для другого доданку з магнітним полем. Причина полягає в тому, що

$$\nabla_p f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_p E = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v}. \quad (54)$$

Коли ми підставимо (54) у другий доданок (52), що містить магнітне поле, то одержимо $[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \vec{v} =$. Щоб отримати розв'язок КРБ з урахуванням магнітного поля, рівняння (52) слід переписати в вигляді

$$-q\vec{E} \cdot \nabla_p f_0 - q[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \nabla_p (\delta f) = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (55)$$

де входить в обидві частини рівняння.

Розв'язати його можна параметрично. Нехай розв'язок має вигляд (23), але узагальнену силу в ньому замінімо на невідомий вектор, а саме:

$$\delta f = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \vec{G}), \quad (56)$$

причому шуканий вектор не залежить від імпульсу. Після підстановки цього пробного розв'язку в (55) слід вирахувати $\nabla_p (\delta f)$. Враховуючи (54) й розглядаючи параболічну зонну структуру ($\nabla_p \vec{v} = 1/m^*$), знаходимо, що

$$\nabla_p (\delta f) = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{\vec{G}}{m^*}. \quad (57)$$

Залишається підставити (54), (56) і (57) в (55). Здійснивши це, ми одержуємо:

$$q\vec{E} \cdot \vec{v} - \frac{q\tau}{m^*} (\vec{v} \times \vec{B} \cdot \vec{G}) + \vec{v} \cdot \vec{G} = 0. \quad (58)$$

Використовуючи властивість потрійного векторного добутку $(\vec{v} \times \vec{B} \cdot \vec{G}) = (\vec{v} \cdot \vec{B} \times \vec{G})$, перепишемо (58) в вигляді

$$\vec{v} \cdot \left(-q\vec{E} + \frac{q\tau}{m^*} [\vec{B} \times \vec{G}] - \vec{G} \right) = 0. \quad (59)$$

Оскільки (59) має виконуватися для будь-якого, то вираз у круглих дужках повинен дорівнювати нулю:

$$\vec{G} = -q\vec{E} + \frac{q\tau}{m^*} [\vec{B} \times \vec{G}]. \quad (60)$$

Відомо, що для векторного рівняння $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b} \times \vec{c}$ розв'язком є

$$\vec{c} = \frac{\vec{a} + [\vec{b} \times \vec{a}] + (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{b}}{1 + b^2}. \quad (61)$$

Тоді розв'язком рівняння (60) буде

$$\vec{G} = \frac{-q\vec{E} - (q^2\tau/m^*) [\vec{B} \times \vec{E}] - q(q\tau/m^*)^2 (\vec{E} \cdot \vec{B})\vec{B}}{1 + (\omega_c\tau)^2}, \quad (62)$$

де циклотронна частота

$$\omega_c = \frac{qB}{m^*}, \quad (63)$$

а площина кругової орбіти електрона перпендикулярна до вектора магнітного поля.

Перший доданок у чисельнику дає вклад у провідність, другий доданок «відповідає» за

ефект Холла, третій доданок і знаменник пропорційні і визначають магнетоопір.

Розглянемо стандартну при вимірюванні ефекту Холла ситуацію, коли $\vec{B} \perp \vec{E}$. У цій конфігурації полів третій доданок зануляється. Вважатимемо також, що магнітне поле слабе, чому відповідає

$$\omega \tau \ll 1. \quad (64)$$

В слабких магнітних полях електрон зазнає багатьох зіткнень, перш ніж замкне свою коловою орбіту. Для слабких магнітних полів маємо

$$\vec{G} = -q\vec{E} - (q \tau / m^*) [\vec{B} \times \vec{E}]. \quad (65)$$

Вектор $\vec{G} \perp \vec{B} \perp \vec{E}$, лежить у площині xy з проєкціями на осі

$$G_x = -qE_x + \left(\frac{q^2 \tau}{m^*} \right) E_y B_z, \quad (66)$$

$$G_y = -qE_y - \left(\frac{q^2 \tau}{m^*} \right) B_z E_x.$$

Отже, розв'язок КРБ при наявності магнітного поля в наближенні ЧР одержано. Розв'язком є вираз (56) з вектором (62), або ж вираз (65) при $\vec{G} \perp \vec{B} \perp \vec{E}$. За відсутності магнітного поля розв'язок дається виразом (23). При цьому ми вважали, що градієнти концентрації електронів і температури відсутні. Якщо потрібно врахувати зміну концентрації електронів уздовж провідника чи перепад температури, слід $-q\vec{E}$ замінити узагальненою силою (23).

Тепер розглянемо, як змінюватимуться транспортні коефіцієнти за наявності магнітного поля. Для цього одержані розв'язки слід підставити в (25) та (27) й подивитися, як зміняться зарядовий струм і термострум. Простіше за все розглянути цю ситуацію на прикладі провідності.

Замінімо узагальнену силу в (28) на вектор

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{G}). \quad (67)$$

Проекції вектора густини струму виходять такими:

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_x (v_x G_x + v_y G_y), \quad (68)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_y (v_x G_x + v_y G_y).$$

Доданки $v_x v_y = v \cos \theta \sin \theta$ після інтегрування від 0 до π дадуть нуль, так що замість (68) запишемо

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_x^2 G_x, \quad (69)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_y^2 G_y.$$

У стані рівноваги $v_x^2 + v_y^2 = v^2$, а після усереднення по кутах $v_x^2 = v_y^2 = v^2/2$. Для параболическої дисперсії $m^* v^2/2 = E - E_c$, так що і в (69) можна замінити на $(E - E_c)/m^*$:

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G_x, \quad (70)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_{\vec{k}} \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G_y.$$

Використовуючи вирази для проєкцій вектора (66), маємо:

$$J_x = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [q^2 E_x - (q^3 \tau / m^*) E_y B_z],$$

$$J_y = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [q^2 E_y + (q^3 \tau / m^*) B_z E_x]. \quad (71)$$

Остаточні вирази для компонент густини струму одержимо діленням правих частин (71) на

$$n_s = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} f_0(E) \quad (72)$$

з одночасним множенням їх на v_x , тож у кінцевому підсумку базові рівняння для струму такі:

$$J_x = \sigma_s E_x - \sigma_s \mu_H E_y B_z, \quad (73a)$$

$$J_y = \sigma_s E_y + \sigma_s \mu_H B_z E_x,$$

або ж у матричній формі

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_s & -\sigma_s \mu_H B_z \\ +\sigma_s \mu_H B_z & \sigma_s \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (73b)$$

і в векторному записі

$$\vec{J} = \sigma_s \vec{E} - \sigma_s \mu_H [\vec{E} \times \vec{B}]. \quad (73в)$$

Пізніше нам потрібен буде запис рівнянь (73) в індексних позначеннях:

$$J_i = \sum_j \sigma_{ij} (B_z) E_j, \quad (73г)$$

де індекси та пробігають усі координатні осі x, y, z або 1, 2, 3. Тензор провідності σ_{ij} подамо матрицею 2×2 (73б). Запис (73г) часто наводять без значка суми:

$$J_i = \sigma_{ij} (B_z) E_j, \quad (73д)$$

за умовчуванням вважаючи, що сума береться за повторюваним індексом.

Вираз (73в) записано в векторній формі. В індексних позначеннях перепишемо його як

$$J_i = \sigma_s E_i - \sigma_s \mu_H \epsilon_{ijk} B_k E_j, \quad (73е)$$

де ϵ_{ijk} - символ Леві-Чівіта, або перестановочний одиничний тензор

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } i, j, k \text{ всі різні й переставляються в циклічному порядку,} \\ -1, & \text{якщо } i, j, k \text{ всі різні й переставляються в ациклічному порядку,} \\ 0 & \text{в інших випадках.} \end{cases}$$

У виразах (73)

$$\sigma_s = n_s q \mu \quad (74)$$

$$\mu = \frac{q \langle \langle \tau \rangle \rangle}{m^*} \quad (75)$$

$$\langle \langle \tau \rangle \rangle \equiv \frac{\sum_k (E - E_c) \tau(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)}{\sum_k f_0(E)}, \quad (76)$$

що є тим самим, що й вираз (48).

Холлівську рухливість у (73) визначають як

$$\mu_H = \mu r_H \quad (77)$$

через холлівський фактор, який відіграє важливу роль у холлівських вимірюваннях,

$$r_H \equiv \frac{\langle \langle \tau^2 \rangle \rangle}{\langle \langle \tau \rangle \rangle^2} \quad (78)$$

$$\langle \langle \tau^2 \rangle \rangle \equiv \frac{\sum_k (E - E_c) \tau^2(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)}{\sum_k f_0(E)}. \quad (79)$$

Вирази (73) і є шуканими виразами для струму в плоскому зразку в присутності слабкого магнітного поля, направлено перпендикулярно до поверхні зразка. З цих виразів випливає, що за відсутності магнітного поля електричне поле в напрямку x породжує струм у тому ж напрямку, а за наявності магнітного поля, перпендикулярного до поверхні зразка, компонента струму з'являється також і в напрямку y . Таким чином, у присутності магнітного поля провідність набуває тензорного характеру.

Аналогічним чином можна отримати вирази для коефіцієнта Зеєбека і для електронної теплопровідності, і обидва ці термічні коефіцієнти також мають тензорний вигляд [14, 19].

Зробимо ще одне зауваження щодо холлівського фактора у випадку 2D провідників, у яких можна застосувати степеневу апроксимацію (45). Нам потрібно обчислити (79). Оскільки

$$\tau^2(E) = \tau_0^2 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^{2s}, \quad (80)$$

то при обчисленні (79) результат виявиться такий самий, як і (51), тільки з заміною показника степені на :

$$\langle \langle \tau^2 \rangle \rangle = \tau_0^2 \Gamma(2s + 2), \quad (81)$$

При цьому ми вважали, що йдеться про невироджений напівпровідник.

Тепер холлівський фактор (78)

$$r_H \equiv \frac{\langle \langle \tau^2 \rangle \rangle}{\langle \langle \tau \rangle \rangle^2} = \frac{\Gamma(2s + 2)}{[\Gamma(s + 2)]^2}. \quad (82)$$

Оскільки при розсіянні в 2D провіднику на акустичних фононах і на заряджених домішках показник степені в законі розсіяння (45) змінюється в межах від 0 до 1, то холлівський фактор змінюється від 1 до 1.5. При виконанні холлівських вимірювань фізичний механізм розсіювання в зразку зазвичай невідомий, і

холлівський фактор покладають . Слід, однак, пам'ятати, що такий підхід вносить невизначеність у результати вимірювань.

3. Частотні межі для графенового польового транзистора

Водночас існує широке коло задач, де застосування моделі ЛДЛ має істотні переваги перед розв'язуванням КРБ «напрямую». До них належить задача про частотні межі для графенового польового транзистора. Актуальним технологічним завданням є не тільки зменшення опору графенового каналу, але й підвищення частоти роботи графенових польових транзисторів [5]. Зменшення довжини каналу до 10 нм дозволило на цей час експериментально досягти терагерцового діапазону частот (див. [20] і посилання в ній). Отже, й тут графен виявляє унікальні властивості – адже проблема створення ефективних пристроїв для важливого терагерцового діапазону, який лежить поміж давно освоєними оптичним і радіодіапазонами, досі не вирішена до кінця. Тому важливо оцінити теоретичні межі для частоти роботи графенового польового транзистора.

Розглянемо електричне коло, що включає графеновий резистор, до якого прикладено змінну напругу. Звернімо увагу, що в більшості задач графенової фізики під вольт-амперною характеристикою розуміють залежність струму в графеновому каналі від напруги на затворі, зміною якої забезпечується «легування» графену електронами, або ж дірками. Однак у цьому випадку ми вважаємо, що затвор заземлено.

Як було показано в [21] в наближенні слабого сигналу, КРБ для графеного каналу може бути формально переписано як:

$$L \frac{\partial I}{\partial t} = \frac{\Delta\mu}{q}, \quad (83)$$

де стум у режимі квазірівноважного балістичного транспорту пропорційний різниці хімпотенціалів на контактах і середньому значенню числа мод провідності $\langle M \rangle$ в околі рівноважного значення потенціалу в енергетичній смузі порядку kT :

$$I = \frac{2q}{h} \langle M \rangle \Delta\mu. \quad (84)$$

У (83) внаслідок формальних здійснених над рівнянням Больцмана у [21] перетворень введено кінетичну індуктивність L :

$$\frac{1}{L} \approx \frac{2q^2 \langle M \rangle \langle v_x^2 \rangle}{h v_F l}, \quad (85)$$

де l – довжина графенового каналу. Цей вираз дозволяє трактувати величину L , що в системі СІ має вимірність [Генрі], як індуктивність, що має, однак, не електромагнітну, а кінетичну природу, бо впливає з альтернативного представлення КРБ для мезоскопічної системи [22].

З іншого боку, сумарний заряд графенового каналу можна записати [21] після підсумовування за всіма електронними станами через співвідношення

$$C = \frac{Qq}{\Delta\mu}, \quad (86)$$

де так само формально введено квантову ємність :

$$C \approx \frac{2q^2 \langle M \rangle l}{h v_F}. \quad (87)$$

Вирази (83), (86) дають підставу зобразити еквівалентну схему графенового каналу так, як це показано на рис.2, а вирази (85), (87) дають значення кінетичної індуктивності й квантової ємності.

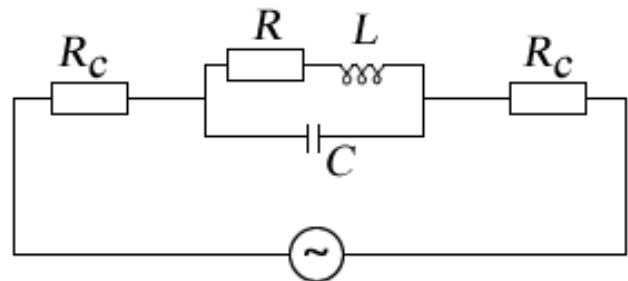


Рис. 2. Еквівалентна схема для графенового провідного каналу [21]. R – омичний опір каналу, R_c – контактні опори, C – квантова ємність, L – кінетична індуктивність.

Імпеданс електричного кола, зображеного на рис. 2, описується відомим виразом:

$$Z = 2R_c + \frac{R(1 - \omega^2 LC) + \omega^2 RLC}{(1 - \omega^2 LC)^2 + (\omega RC)^2} + i \frac{\omega L(1 - \omega^2 LC) - \omega R^2 C}{(1 - \omega^2 LC)^2 + (\omega RC)^2}. \quad (88)$$

Для $\omega = 0$ вираз (88) приводить до тривіального результату:

(89)

Зі зростанням частоти прикладеної змінної напруги на частоті ω , де уявна частина (88) робиться рівною нулеві й опір кола максимальний, спостерігатиметься резонанс. Ця частота визначається як:

$$\omega_r = \omega_o \sqrt{1 - \frac{R^2 C}{L}}; \quad \omega_o = \frac{1}{\sqrt{LC}}. \quad (90)$$

Оцінімо частоти, які передбачаються виразом (90). Для високоякісного графенового резистора Ландауера, де має місце балістичний режим і електрон проходить між контактами без розсіяння, $\langle v_x^2 \rangle \approx v_F^2$. Звідси з (90) з урахуванням (85), (87) маємо:

$$\omega_o \sim \sqrt{\langle v_x^2 \rangle} / l = v_F / l. \quad (91)$$

Цей інтуїтивно очікуваний вираз призводить до терагерцової частоти для графенового каналу мікронної довжини, що узгоджується за порядком величин з результатами [20]. Однак для довгого вирошеного методом CVD графенового каналу, де рух електрона має дифузійний характер, а $\sqrt{\langle v_x^2 \rangle} \sim \mu \bar{E}_{SD}$, де μ – рухливість

електрона, а \bar{E}_{SD} – усереднене в часі електричне поле між контактами, для поля $\bar{E}_{SD} \sim 10^3 \text{ В/м}$ і для рухливості $\mu \sim 10000 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ (що є типовим значенням для не надто досконалого CVD графену, де носії, зокрема, розсіюються й на межах двовимірних кристалітів) частота матиме порядок мегагерців. Для ще менших полів і менших значень рухливості легко отримати й кілогерцові частоти. Таким чином, варіюючи довжину каналу (від сотень мікронів до міліметрів) і рухливість (у характерному для CVD графену інтервалі $1000 - 10000 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$), можна сподіватися отримати ефективні фільтри для відповідного частотного діапазону.

Наголосімо: перейшовши тут формально від КРБ до моделі ЛДЛ, ми звели дуже складну задачу до простої радіотехнічної схеми, яка дозволила зробити правильні за порядками величин оцінки для частотних меж роботи гра-

фенового польового транзистора. Натомість розв'язання КРБ «напрямку» наразилося б тут на значні обчислювальні труднощі і могло б привести до великих похибок.

4. Висновки

За відсутності магнітного поля і КРБ і транспортна модель ЛДЛ приводять до однакових результатів для провідників, які працюють у квазірівноважному дифузійному режимі. Модель ЛДЛ приваблює тим, що вона фізично прозора, а також тим, що транспорт у балістичному й квазібалістичному режимах описується так само просто, як і транспорт у дифузійному режимі. Дуже важливо, що транспортна модель ЛДЛ не передбачає наявності періодичної кристалічної структури матеріалу провідника (що є обов'язковою умовою для застосування КРБ – адже тільки за таких умов можемо записати рівняння (1), яке містить у правій частині тільки зовнішню силу без урахування атомного потенціалу). Тому модель ЛДЛ успішно застосовується до аморфних, полікристалічних і нанокompatитних матеріалів. Натомість перевагою КРБ є можливість опису анізотропного транспорту й транспорту в магнітному полі. Крім того, КРБ дозволяє описувати транспорт при значному відхиленні від стану рівноваги, далеко від квазірівноважних умов.

На завершення наголосімо: стаття 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. Супрійо Датта (Supriyo Datta) [12] 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 факультету радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем Київського національного університету імені Т.Г.Шевченка.

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

Список використаної літератури

- [1]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Uzahalnena model elektronnoho transportu v mikro- i nanoelektronitsi* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2015. – t. 12, No. 3. S. 4 – 27 (in Ukrainian).
- [2]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Termoelektrychni yavlyshcha ta prystroi z pozytsii uzahalnenoї modeli transportu elektroniv* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2015. – t. 12, No. 4. S. 5 – 18 (in Ukrainian).
- [3]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Termoelektrychni koefitsiienty v uzahalnenii modeli transportu elektroniv* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2016. – t. 13, No. 1. S. 5 – 23 (in Ukrainian).
- [4]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transport tepla fononamy v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2016. – t. 13, No. 2. S. 16 – 35 (in Ukrainian).
- [5]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transportni yavlyshcha v hrafeni v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2016. – t. 13, No. 3. S. 5 – 29 (in Ukrainian).
- [6]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Urakhuvannia rozsiannia v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // Sens. elektron. mikrosist. tehnol. – 2016. – t. 13, No. 4. – S. 5-18.
- [7]. Lundstrom Mark, Jeong Changwook. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2013. – pp. 227; www.nanohub.org/resources/11763.
- [8]. Lyudvig Boltzman, *Izbrannye trudy* (Moskva: Mir: 1984) (in Russian).
- [9]. Mark Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge UK: Cambridge University Press: 2000).
- [10]. M. Lundstrom, C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
- [11]. F. M. Sears, G. L. Salinger, *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics* (Boston: Addison-Wesley: 1975).
- [12]. Dzh. Zayman, *Printsipy teorii tverdogo tela* (Moskva: Vysshaya shkola: 1974) (in Russian).
- [13]. N. Ashcroft, N. Mermin, *Fizika tverdogo tela* (Moskva: Mir: 1979) (in Russian).
- [14]. V. P. Savchyn, R. Ya. Shavur. *Elektronne perenesennia v napivprovodnykakh i napivprovodnykovykh strukturakh*. (LNU im. I. Franka, Lviv, 2008) (in Ukrainian).
- [15]. D. I. Pikulin, C. -Y. Hou, C. W. J. Beenakker, *Nernst effect beyond the relaxation-time approximation*. *Phys. Rev. B*, **84**, 035133 (2011).
- [16]. Mark Lundstrom, *Electronic Transport in Semiconductors*, 2011; www.nanohub.org/resources/11872.
- [17]. 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).
- [18]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha, *Uroky nanoelektroniky: efekt Kholla i vymiriuvannia elektrokhimichnykh potentsialiv u kontseptsii «znyzu-vhoru»*. Sens. elektron. mikrosist. tehnol., t. 11, No 1: 5 – 27 (2014) (in Ukrainian).
- [19]. C. M. Wolfe, N. Holonyak, G. E. Stillman, *Physical Properties of Semiconductors* (Englewood Cliffs, N. Jersey: Prentice Hall: 1989).
- [20]. J. Zheng, L. Wang, R. Quhe, Q Liu, H Li, D Yu, WN Mei, J Shi, Z Gao, J Lu. Sub-10 nm gate length graphene transistors: operating at terahertz frequencies with current saturation. *Sci. Rep.* **3**, 1314 – 1322 (2013).
- [21]. M. V. Strikha. *Chastotni mezhi dlia hrafenovoho providnogo kanalu, zumovleni naiavnistiu kvantovoi yemnosti ta kinetychnoi induktyvnosti*. *UFZH* **60**, 355 – 359 (2015) (in Ukrainian).
- [22]. S. Salahuddin, M. Lundstrom, S. Datta. Transport effects on signal propagation in quantum wires. *IEEE Transactions on Electron Devices* **52**, 1734 – 1742 (2005).
- [23]. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); www.nanohub.org/courses/FoN1.

Стаття надійшла до редакції 29.12.2016 р.

PACS numbers: 72.10.-d, 72.20.Dp, 72.20.Fr, 72.90.+y, 73.63.-b
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.1.96432>

THE KINETIC BOLTZMANN EQUATION IN GENERALIZED MODEL OF ELECTRON TRANSPORT FOR MICRO- AND NANOELECTRONICS

*Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha**

Odesa State Environmental University,
Faculty of Computer Sciences
15 Lvivska Str, Odesa, Ukraine

* Taras Shevchenko Kyiv National University
Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Sciences,
4g Hlushkov Av, Kyiv, Ukraine
V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
41 Nauky Av, Kyiv, Ukraine

Summary

In a tutorial article directed to serve researchers, university teachers and students, we study Boltzmann kinetic equation (BKE), which in its application to nanoelectronics serves to solve the same problems as the generalized Landauer-Datta-Lundstrom (LDL) transport model does. For some problems BKE formalism is preferable, for the other – LDL model is. Under correct performance of calculations the two approaches leads to similar results. In this article we answer the following questions: how to compose the equation for distribution function $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ as a solution of BKE beyond equilibrium, how to solve this equation for the linear response regime, how to compare the obtained results with those, which can be obtained within LDL model for diffusive transport regime, how to take into consideration the external magnetic field and its effect on electron transport.

We formulate BKE in the approximation of relaxation time (RT) and search for its solution in the dynamic equilibrium regime. Than we calculate the transport coefficients. We consider the calculation of the surface concentration of electrons in 2D resistor as an example. The solution for BKE in quasi-equilibrium regime within RT approximation is the expression, well known for LDL model. We also demonstrate that BKE within RT approximation leads to the same expressions for Seebeck coefficient and electron thermo-conductivity, as LDL transport model does. The LDL model advantage is its physical transparency and the fact that it enables to consider quasi-ballistic and ballistic transport regimes as simply, as the diffusive one. On the other hand, BKE formalism should be used for studies of the anisotropic transport.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, Boltzmann equation, relaxation time, surface conductivity, Hall effect, Hall mobility, Hall factor

КІНЕТИЧНЕ РІВНЯННЯ БОЛЬЦМАНА В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ У МІКРО- ТА НАНОЕЛЕКТРОНІЦІ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

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

* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;

Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

Реферат

У методичній статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, розглядається кінетичне рівняння Больцмана (КРБ), яке в застосуванні до наноелектроніки розв'язує ті ж завдання, що й узагальнена транспортна модель Ландауера – Датта – Лундстрорма (ЛДЛ). Для одних задач краще використовувати КРБ, а для других – модель ЛДЛ. За правильного виконання обчислювальних процедур обидва підходи дають один і той самий результат. У цій статті дано відповідь на такі питання: як скласти рівняння для функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ як розв'язку КРБ за межами рівноваги, як розв'язати це рівняння в режимі лінійного відгуку, як зіставити отримані таким чином результати з тими, які можна отримати в моделі ЛДЛ в дифузійному режимі транспорту, як врахувати зовнішнє магнітне поле і його вплив на електронний транспорт.

Ми формулюємо КРБ в наближенні часу релаксації (ЧР) й шукаємо його розв'язок у режимі динамічної рівноваги. Потім розраховуємо транспортні коефіцієнти. Як приклад розглядаємо обчислення поверхневої концентрації електронів у 2D провіднику. Результатом розв'язування КРБ в квазірівноважному режимі в наближенні ЧР, або, що те саме, в дифузійному наближенні, для поверхневої провідності стає звичайний для моделі ЛДЛ вираз. Показано також, що КРБ у наближенні ЧР дає ті ж самі вирази для коефіцієнта Зеєбека й для електронної теплопровідності, що й транспортна модель ЛДЛ. Перевага моделі ЛДЛ в її фізичній прозорості, а також у тому, що вона дозволяє розглядати квазібалістичний і балістичний режими транспорту так само просто, як і дифузійний режим. З другого боку, без КРБ не можна обійтися при вивченні анізотропного транспорту.

Ключові слова: Нанofізика, нанoeлектроніка, рівняння Больцмана, час релаксації, поверхнева провідність, ефект Холла, холлівська рухливість, холлівський фактор