

76. Fukutome, H. (1968). Spin density wave and charge transfer. Wave in long conjugated molecules. Progress of Theoretical Physics, 40 (6), 1227–1245. doi: 10.1143/ptp.40.1227

77. Misurkin, I. A., Ovchinnikov, A. A. (1968). The electronic structures of large π -electron systems (graphite, polyacenes, cumulenes). Theoretical and Experimental Chemistry, 4 (1), 1–5.

78. Misurkin, I. A., Ovchinnikov, A. A. (1969). Electronic structure of high π -electron systems (graphite,

polyacenes, cumulenes). Theoretica Chimica Acta, 13 (2), 115–124. doi: 10.1007/bf00533435

79. Ukrainsky, I. I., Kventsel, G. F. (1972). Electronic structure of long polyene chains with an impurity atom. Theoretica chimica Acta, 25 (4), 360–371. doi: 10.1007/bf00526568

80. Lieb, E. H., Wu, F. Y. (1968). Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. Physical Review Letters, 20 (25), 1445–1448. doi: 10.1103/physrevlett.20.1445

Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.

Дата надходження рукопису 14.11.2014

Кругляк Юрий Алексеевич, доктор химических наук, профессор, кафедра информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, г. Одесса, Украина, 65016

E-mail: quantumnet@yandex.ua

УДК 538.935

DOI: 10.15587/2313-8416.2014.30728

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ТРАНСПОРТА ЭЛЕКТРОНОВ И ТЕПЛА ЛАНДАУЭРА-ДАТТЫ-ЛУНДСТРОМА В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

© Ю. А. Кругляк

Излагается обобщенная модель транспорта электронов, развитая Р. Ландауэром, С. Даттой и М. Лундстромом, вплоть до вычисления проводимости резисторов любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом, квази-баллистическом или диффузионном режиме линейного отклика как вблизи 0 К, так и при высоких температурах. Обсуждаются и ныне широко используемое понятие подвижности, а также диссипация тепла и падение напряжения в баллистических резисторах

Ключевые слова: нанофизика, наноэлектроника, транспорт электронов, линейный отклик, диссипация тепла, баллистический резистор

Generalized model of electron transport in the linear response regime developed by R. Landauer, S. Datta, and M. Lundstrom with application to the resistors of any dimension, any size and arbitrary dispersion working in ballistic, quasi-ballistic or diffusion regime up to calculation of conductivity near 0 K and at higher temperatures is summarized. There is also discussed still widely used concept of mobility, as well as the dissipation of heat and the voltage drop in the ballistic resistors

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, electron transport, linear response, heat dissipation, ballistic resistors

1. Введение

Мы рассмотрим модель электронного транспорта довольно простую и вместе с тем удивительно полезную в прикладном отношении и нашедшую широкое применение при анализе как электронного, так и фононного транспорта не только в режиме линейного отклика, но и в высоковольтном режиме горячих электронов, нелокального и квантового транспорта, транспорта в неупорядоченных и наноструктурированных материалах как наноразмерных, так и протяженных, в которых проводимость определяется только свойствами проводника. Свое начало она берет в пионерских работах Ландауэра [1–3], переосмысленных Даттой [4–6] и далее развитых Лундстромом применительно к самым различным материалам [7, 8].

2. Обзор транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрома

Центральное место в любом электронном устройстве играет канал проводимости, характеризующий плотностью состояний $D(E-U)$, где E – энергия состояний проводника, а U – самосогласованный электростатический потенциал затвора, позволяющий смещать состояния вверх или вниз по шкале энергии (рис. 1).

Далее будем рассматривать двухтерминальное устройство ($U=0$). Канал проводимости связан с двумя «идеальными» контактами, способными к быстрому восстановлению равновесия в процессе электронного транспорта и характеризующимися фермиевскими функциями

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F1}}{kT}\right) + 1}, \quad f_2(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F2}}{kT}\right) + 1} \quad (1)$$

с соответствующими электрохимическими потенциалами E_{F1} и E_{F2} . При подаче напряжения V электрохимический потенциал E_{F2} понижается относительно потенциала E_{F1} на величину qV .

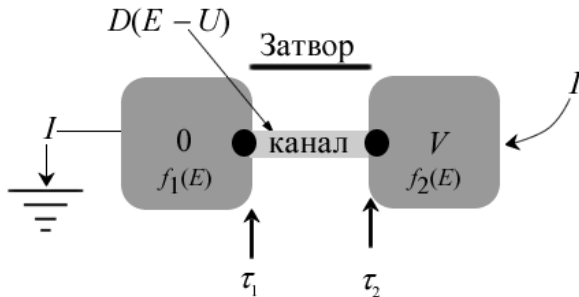


Рис. 1. Типичное электронное устройство с контактами, характеризуемыми временами пролета τ

Связь контактов с каналом проводимости характеризуется временами пролета τ , дающими представление о том, как быстро электроны могут покинуть контакт или проводник. Для наноразмерных резисторов, например, молекул, времена τ контролируются контактами. Для протяженных резисторов с хорошими контактами, как мы убедимся позже, времена τ становятся сопоставимыми с временами пролета всей протяженности проводника. В общем случае качество обоих контактов может быть различным, что ведет к различным значениям τ_1 и τ_2 . Иногда времена τ удобнее выражать в единицах энергии $\gamma = \hbar/\tau$. Если в роли канала проводимости выступает одиночная молекула, величина γ приобретает простой физический смысл уширения энергетических уровней молекулы за счет конечности времени жизни электронов на молекулярных уровнях.

Предполагается, что канал имеет зонную структуру $E(k)$. Это требование, однако, не является обязательным [5]. Обсуждение ограничений и применимости модели ЛДЛ можно найти в [4–7].

Перейдем к построению математической модели транспорта ЛДЛ в концепции «снизу – вверх». Начать надо с нахождения зависимости плотности электронов и тока в проводнике в зависимости от фермиевских распределений и соответствующих электрохимических потенциалов, плотности состояний проводника и характеристических времен τ пролета.

3. Число электронов и ток в проводнике

Пусть пока только левый контакт 1 связан с каналом проводимости. Он стремится пополнить проводник электронами в соответствии со своим электрохимическим потенциалом E_{F1} . В конце концов равновесие между контактом и каналом проводимости наступит тогда, когда число электронов с энергиями между E и $E+dE$ станет равным

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

где $D(E)$ – плотность состояний с энергией E (пусть каждое состояние заполнено двумя электронами с противоположными спинами), а $f_1(E)$ есть равновесная функция Ферми контакта 1.

Процесс установления равновесия между контактом 1 и каналом описывается простым кинетическим уравнением

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

где скорость подачи электронов в канал dN'/dt положительна, если число электронов в канале N' меньше его равновесного значения N'_{01} , и отрицательна в противном случае. Если канал первоначально пустой, то он заполняется электронами до их равновесного числа; если же канал переполнен электронами, то он опустошается до тех пор, пока в канале не будет достигнуто равновесное число электронов.

Если канал проводимости связан только с контактом 2, аналогичные рассуждения приводят к следующей паре уравнений:

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

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

Когда канал проводимости связан одновременно с двумя контактами и оба контакта одновременно пополняют электронами канал и опорожняют его, имеем

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

В состоянии динамического равновесия левые части кинетического уравнения (6) равны нулю. Приравнявая нулю правую часть равенства (6) и подставляя выражения для скоростей на обоих контактах 1 и 2 по уравнениям (3) и (5), для числа электронов в канале проводимости получим:

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

Простоты ради, положим $\tau_1 = \tau_2$ и подставим равновесные значения числа электронов N'_{01} и N'_{02} по уравнениям (2) и (4). Тогда для числа электронов в канале в состоянии динамического равновесия в дифференциальной форме получим:

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

Остается проинтегрировать по всему спектру энергий и получим число электронов в канале проводимости в состоянии динамического равновесия двух контактов с электрохимическими потенциалами E_{F1} и E_{F2} , разница между которыми пропорциональна напряжению, поданному на концы проводника, а именно:

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

Получен ответ на первый из поставленных нами двух вопросов: найдено число электронов, или иначе плотности электронов, если известны геометрические параметры проводника, в зависимости от плотности состояний проводника и фермиевских распределений на контактах. Когда электронное устройство (рис. 1) находится в равновесии ($f_1=f_2=f_0$), получаем стандартное выражение для равновесного числа электронов в проводнике [9]

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

в отличие от которого уравнение (9) пригодно как для равновесного состояния электронного устройства (рис. 1), так и для случая, когда электронное устройство выведено далеко за пределы равновесия.

Напомним, что для 1D-, 2D- и 3D-проводников плотность состояния пропорциональна, соответственно, длине L проводника, площади его поперечного сечения A и объему проводника Ω :

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

а плотность электронов определяется, соответственно, как

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

Перейдем к вычислению тока в состоянии динамического равновесия. В этом состоянии один из контактов пополняет канал проводимости электронами, а другой контакт опустошает его. Если $E_{F1} > E_{F2}$, контакт 1 инжектирует электроны, а контакт 2 поглощает их, и наоборот, если $E_{F1} < E_{F2}$.

Скорости, с которыми электроны покидают или поглощаются контактами 1 и 2, даются уравнениями (3) и (5). В состоянии динамического равновесия

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

По договоренности, ток считается положительным, если он входит в контакт 2 со стороны внешней цепи (рис. 2), так что

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

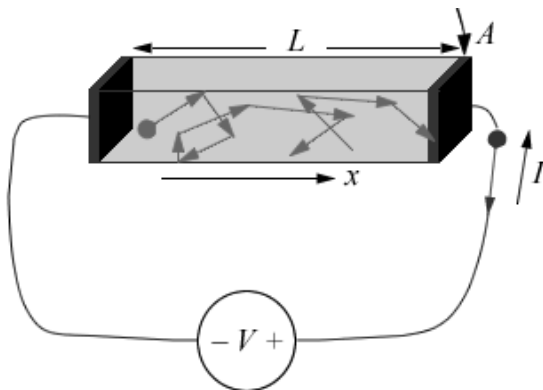


Рис. 2. Электронный транспорт в режиме диффузии через проводник длины L и площади поперечного сечения A . Используется традиционное соглашение о знаках: ток I и направление движения электронов противоположны

Выразив ток один раз через F_1 , а второй раз через F_2 согласно (14), и сложив эти одинаковые токи, сразу получим, что

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

Остается подставить значения для скоростей (3) и (5) в предположении одинаковости контактов ($\tau_1 = \tau_2 = \tau$), затем воспользоваться (2) и (4), и мы имеем:

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

где характеристическое время пролета τ выражено в единицах энергии, а именно:

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

Интегрируя (16) по всему спектру энергий, окончательно для тока в состоянии динамического равновесия получаем

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

Согласно (18), ток возникает лишь тогда, когда фермиевские распределения на контактах различны, то ли по причине различия электрохимических потенциалов, то ли по причине различия в температуре контактов, то ли сразу по этим обоим причинам. При различии в электрохимических потенциалах контактов один из контактов стремится передать электроны проводнику, а другой стремится принять их на себя. Рассмотрение тока при различии в температуре контактов как и транспорт тепла требуют отдельных публикаций.

Подведем итоги. Получены два основных уравнения транспортной модели ЛДЛ:

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

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

Первое из них выражает число электронов в проводнике в состоянии динамического равновесия через плотность состояний проводника и фермиевские функции контактов, а второе уравнение дает ток через эти же характеристики электронного устройства и через характеристическое время пролета. Дальнейшее построение модели ЛДЛ фактически сводится к использованию и развитию этих двух основных уравнений.

4. Моды проводимости

Как и ожидалось, ток пропорционален разности фермиевских функций контактов. Позже мы убедимся, что комбинация фундаментальных констант $2q/h$ играет важную роль в выражении для тока (20). А каков смысл произведения $\gamma D/2$?

Параметр γ (17) имеет размерность энергии, а размерность плотности состояний D есть (энергия)⁻¹,

так что интересующее нас произведение $\gamma\pi D/2$ не имеет размерности. В отношении размерности плотности состояний обратим внимание на то, что мы оперируем с числом электронов, а не с плотностями электронов (12), как это обычно принято в физике полупроводников, где плотность состояний для 3D-образца имеет размерность $(\text{энергия} \cdot \text{объем})^{-1}$. Мы сейчас увидим, что произведение $\gamma\pi D/2=M(E)$ имеет физический смысл числа мод (иначе, каналов) проводимости резистора.

Рассмотрим 2D баллистический резистор длины L , меньшей средней длины свободного пробега λ , вытянутый вдоль оси x и шириной W вдоль оси y . Полная плотность состояний

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

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

где D_{2D} есть плотность состояний на единицу площади, выписанная для параболической зонной структуры с эффективной массой m^* и долинным вырождением g_v [9].

Определим характеристическое время τ . Из (8) и (16) имеем:

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

Приложим к концам проводника достаточно большое напряжение такое, чтобы имело место $E_{F2} \ll E_{F1}$, так что $f_2 \ll f_1$. Тогда из (23) имеем

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

Число электронов в канале

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

где n'_S – электронная плотность на единицу площади, а ток

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

так что из (24) имеем:

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

что есть просто среднее время пролета электрона через всю длину упругого резистора.

Для оценки τ нужно вычислить среднюю скорость пролета от контакта 1 до контакта 2 в направлении $+x$ (рис. 2). Эта скорость в случае баллистического транспорта, т. е. без изменения направления движения,

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

где угол θ отсчитывается от положительного направления оси x . Поскольку в нашем случае

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

для средней скорости в случае параболического дисперсионного соотношения и изотропии скорости имеем:

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

Определяя число мод проводимости как

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

и используя определение γ по (17) и плотности состояний для 2D проводника по (21) для числа мод 2D проводника окончательно получаем

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

Аналогичные соображения для 1D и 3D проводников дают

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

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

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

Обратим внимание, что в случае 2D проводников число мод проводимости пропорционально ширине проводника W , а для 3D проводников – площади их поперечного сечения A .

Заслуживает внимания физический смысл полученных результатов (33). Так, для 2D проводника с учетом (30) и (22) число мод проводимости

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

Для частного случая параболической дисперсии

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

и выражая волновой вектор через де Бройлевскую длину волны

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

вместо общего выражения (34) для числа мод проводимости 2D проводника имеем:

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

что открывает возможность их физической интерпретации, а именно: число мод проводимости 2D проводника (с учетом долинного вырождения) показывает сколько де Бройлевских полувольт энергии E укладывается по ширине 2D проводника. Целочисленность мод обеспечивается граничными

условиями, согласно которым волновые функции электронов на обеих сторонах 2D проводника должны обращаться в нуль. Сам термин «моды» заимствован из теории волноводов.

Теперь мы можем базовые уравнения модели ЛДЛ (19) и (20) переписать в виде

$$N = \int \frac{D(E)}{2} (f_1 + f_2) dE, \\ I = \frac{2q}{h} \int M(E) (f_1 - f_2) dE. \quad (38)$$

Таким образом, для вычисления числа электронов и тока в проводнике кроме фермиевских функций контактов нужно знать плотность состояний $D(E)$ и число мод $M(E)$ проводника.

Для параболической дисперсии (35) плотности состояний хорошо известны [9]:

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

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

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

где $H(E - E_C)$ – ступенчатая функция Хевисайда, а соответствующие моды проводимости таковы:

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

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

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

Поведение плотности состояний $D(E)$ и числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- и 3D-проводников с параболической дисперсией качественно показано на рис. 3.

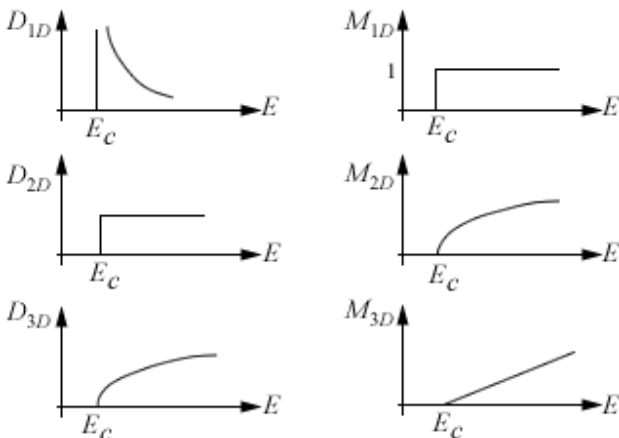


Рис. 3. Сравнительное поведение плотности состояний $D(E)$ и числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- и 3D-проводников с параболической дисперсией (35)

Плотность состояний для 1D проводника обратно пропорциональна \sqrt{E} , для 2D проводника постоянна, для 3D – прямо пропорциональна \sqrt{E} . Что

касается мод проводимости, то 1D проводник характеризуется единственной модой проводимости, равной функции Хевисайда, что позволяет определить ее калибровку для использования ее в формулах (39)–(44). Число же мод 2D проводника прямо пропорционально \sqrt{E} , а 3D проводника расчет с энергией линейно.

Закljučая этот раздел, подведем итоги:

1. Плотность состояний $D(E)$ нужна для вычисления плотности носителей тока.
2. Число мод $M(E)$ используется для вычисления тока.
3. Число мод $M(E)$ пропорционально средней скорости носителей тока в направлении их движения, помноженной на плотность состояний $D(E)$.
4. Число мод $M(E)$ зависит от зонной структуры и размерности проводника.

Хотя выше в качестве примера и рассмотрены проводники с параболической дисперсией, формулы (33) носят общий характер. Мы воспользуемся ими позже при рассмотрении графена в модели ЛДЛ, дисперсия у которого линейная. Для произвольной дисперсионной зависимости $E(k)$ разработаны численные методы вычисления числа мод проводимости [10].

5. Коэффициент прохождения

До сих пор мы рассматривали баллистический транспорт. Перейдем к рассмотрению диффузионного транспорта, когда $L \gg \lambda$. Электроны, инжектируемые контактами 1 и 2, подвержены случайным блужданиям. Некоторые из них заканчиваются на инжектирующем контакте, а иные – на другом контакте. Если на контакт 2 подан положительный потенциал, то большая часть блужданий закончится на этом контакте.

Ключевым параметром в модели ЛДЛ есть величина $\gamma\pi D(E)/2$, которая в случае баллистического транспорта оказывается равной числу мод проводимости $M(E)$. Уширение γ и время пролета τ связаны между собой: $\gamma = \hbar/\tau$. В режиме диффузионного транспорта следует ожидать увеличения времени τ , что влечет за собой уменьшения величины $\gamma\pi D(E)/2$. Сейчас покажем, что в случае диффузионного транспорта $\gamma\pi D(E)/2 = M(E) \cdot T(E)$, где величина $T(E) \leq 1$ получила название коэффициента прохождения (transmission coefficient).

В режиме баллистического транспорта электроны инжектируются в проводник под разными углами, в результате чего время пролета описывается некой функцией распределения. Величину γ мы оценивали через среднее время пролета

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

где

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

Наша задача сейчас оценить $\langle \tau(E) \rangle$ в режиме диффузионного транспорта.

Воспользуемся первым законом диффузии Фика применительно к потоку электронов в 2D проводнике:

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

где плотность тока J пропорциональна градиенту плотности электронов с коэффициентом диффузии \bar{D} в роли коэффициента пропорциональности.

Пусть электроны в проводник с подавляющим преимуществом поставляет только контакт 1, т. е. $f_1 \approx 1$, а $f_2 \approx 0$. На левом конце проводника ($x=0$) есть конечная плотность электронов $\Delta n_s(0)$ (рис. 4).

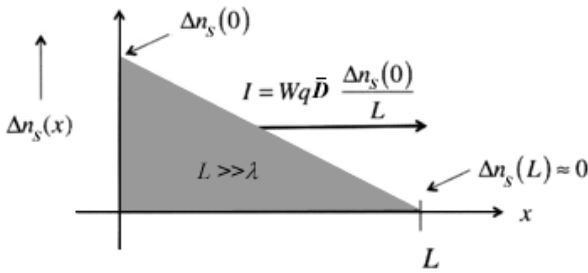


Рис. 4. К выводу времени пролета τ_D в диффузионном режиме

Поскольку процессы рекомбинации/рождения носителей тока не учитываются, то профиль плотности электронов на всем протяжении проводника будет линейным с практически нулевым значением плотности на правом конце проводника: $\Delta n_s(L) \rightarrow 0$ за счет $f_2 \approx 0$. Время пролета, согласно (24), есть отношение накопленного в проводнике заряда к току

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

где накопленный в проводнике заряд qN есть половина площади прямоугольника (рис. 4), построенного для 2D проводника на его длине L и ширине W , а ток $I=J \cdot W$ и, согласно (47), $dn_s/dx = \Delta n_s(0)/L$. Таким образом, время пролета в диффузионном режиме

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

тогда как в баллистическом режиме

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

Собирая все вместе, имеем:

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

где коэффициент прохождения есть отношение двух времен пролета – в баллистическом режиме и в диффузионном:

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

Другими словами, при наличии рассеяния число мод $M(E)$ нужно заменить на $M(E) \cdot T(E)$.

Для оценки $T(E)$ воспользуемся определением коэффициента прохождения (52) и выражениями (49) и (50). Тогда

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

Опираясь на теорию случайных блужданий [11], можно показать, что коэффициент диффузии

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

что вместе с (53) дает простое выражение для коэффициента прохождения

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

Как и ожидалось, число мод проводимости в диффузионном режиме $M(E) \cdot T(E)$ резко уменьшается.

Выражение для коэффициента прохождения (55) верно для диффузионного режима. Можно показать, что в общем случае коэффициент прохождения

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

Это выражение справедливо как для диффузионного режима ($L \gg \lambda$), так и для баллистического ($L \ll \lambda$), приближаясь к единице, так и для промежуточных случаев.

Подводя итоги, в общем случае имеет место соотношение

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

в котором число мод определяется общими выражениями (33), а в отношении коэффициента прохождения в реальных экспериментах обычно рассматривают три режима:

1. Диффузионный: $L \gg \lambda$; $T = \lambda/L \ll 1$,
2. Баллистический: $L \ll \lambda$; $T \rightarrow 1$,
3. Квази-баллистический: $L \approx \lambda$; $T < 1$.

Примечательно, что сравнительно простая транспортная модель ЛДЛ применима ко всем трем режимам.

6. Режим линейного отклика

Для тока в модели ЛДЛ получены два выражения:

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE, \quad (59)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int T(E)M(E)(f_1 - f_2) dE.$$

В них не учитывается важный в прикладном отношении низковольтный режим. Если подать на проводник большое напряжение, то вследствие появления множества неупругих столкновений в режиме горячих электронов нарушатся принятые нами допущения, которые привели нас к модели независимых мод проводимости. Мы далее продолжим строить модель ЛДЛ для режима линейного отклика, что позволит упростить уравнения (59).

В режиме линейного отклика, иначе линейного транспорта или почти равновесного транспорта (near-equilibrium transport), фермиевские функции контактов (1а) и (1б) и равновесная функция Ферми

$$f_0(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F0}}{kT}\right) + 1} \quad (60)$$

находятся в соотношении

$$f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E) \approx f_0(E), \quad (61)$$

при этом подаваемое на концы проводника напряжение

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

незначительно. Пользуясь малостью ΔE_F , фермиевскую функцию контакта 2 можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться первой степенью, а именно:

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

а учитывая очевидное свойство фермиевской функции

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

и (61), окончательно для разности фермиевских функций контактов в режиме линейного отклика имеем:

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

Окончательно для тока (59) и проводимости в режиме линейного отклика модели ЛДЛ имеем:

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

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

где последнее уравнение известно как уравнение Ландауэра для проводимости.

Теперь мы имеем выражение для проводимости, в котором проводимость связана со свойствами материала проводника. Эти выражения справедливы для 1D-, 2D- и 3D-проводников как в баллистическом режиме, так и в диффузионном, если

пользоваться соответствующими выражениями для числа мод (33).

7. Транспорт в массивных проводниках

Модель ЛДЛ пригодна как для коротких, наноразмерных, так и длинных, массивных проводников. Когда канал проводимости достаточно длинный, роль контактов пренебрежимо мала и проводимость определяется свойствами материала проводника. Выражения для тока в массивных проводниках в режиме линейного отклика можно получить из любого из общих уравнений (59). Воспользуемся первым их них.

Перепишем разность фермиевских функций (64) в виде

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

Тогда для тока имеем:

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

В массивных проводниках всегда реализуется диффузионный режим, так что

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

Пусть мы рассматриваем 2D проводник. Для него, согласно (40),

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

Подставляя (69) и (70) в (68), для плотности тока получаем

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

Поскольку массивный проводник находится в режиме линейного отклика и почти равновесного транспорта по всей длине проводника, мы вправе предположить линейное падение электрохимического потенциала от контакта 1 до контакта 2 так, что $\Delta E_F / L$ есть градиент фермиевской функции dE_F / dx , и (71) можно переписать в виде

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

где удельная проводимость

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

Оба уравнения (72) и (73) представляют собой стандартный результат, получаемый обычно в термодинамике необратимых процессов или же путем решения транспортного уравнения Больцмана. Мы же получили эти стандартные результаты для массивных проводников, предположив в модели ЛДЛ

лишь то, что длина проводника намного превышает длину свободного пробега.

Уравнение (72) можно переписать иначе. Из теории полупроводников для невырожденных n -проводников известно [9], что

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

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

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

$$\sigma = nq\mu.$$

Для этого случая уравнение для плотности тока (72) можно переписать в виде:

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

где

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

есть соотношение Эйнштейна между коэффициентом диффузии электронов и их подвижностью.

Уравнение (74) дрейфа и диффузии хорошо известно в физике полупроводников и обычно служит начальным приближением при анализе полупроводниковых устройств [9]. Оно справедливо для невырожденных проводников в предположении постоянства температуры вдоль проводника и, как мы видели, предполагает почти равновесный транспорт.

До сих пор речь шла только о транспорте электронов. Если же речь пойдет о транспорте «дырок», то в модели ЛДЛ нужно лишь помнить, что «дырки» описываются своим электрохимическим потенциалом $E_F^{(p)}$, отличным от химпотенциала электронов E_F , в обозначении которого мы просто опускали верхний индекс (n) за очевидностью его. Это связано с тем, что в валентной зоне и в зоне проводимости носители тока отделены друг от друга и в равновесии находятся лишь носители тока в каждой из зон. Процессы рекомбинации/рождения носителей тока, которые связывают заселенности в этих зонах, идут намного медленнее, чем процессы рассеяния, устанавливающие равновесие в каждой из зон.

Для электронов в зоне проводимости имеем уравнения (72), (73) и (61). Уравнения (72) и (73) выводились без учета природы носителей тока. Поэтому для «дырок» в валентной зоне эти уравнения нужно просто переписать с «дырочным» электрохимическим потенциалом, а именно:

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

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

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

Полный ток есть сумма токов в каждой из зон.

Осталось подвести итоги. Уравнение Ландауэра для проводимости (66) описывает электронный транспорт в проводнике с общих позиций. Проводимость пропорциональна фундаментальным константам ($G \approx 2q^2/h$), которые определяют квант проводимости, ассоциируемый с контактами, в чем мы убедимся ниже. Проводимость зависит от числа мод проводимости $M(E)$ и от коэффициента прохождения $T(E)$, представляющего собой вероятность того, что электрон с энергией E , инжектированный контактом 1, достигнет контакта 2. Полную проводимость находим путем интегрирования вкладов от всех мод проводимости. Уравнение справедливо для 1D-, 2D- и 3D-проводников, нужно лишь просто корректно вычислить число мод проводимости по (33). Справедливо оно как для баллистических нанорезисторов, так и для массивных резисторов и корректно описывает промежуточные ситуации. Далее мы начнем с уравнения Ландауэра и займемся вычислением проводимости для 1D-, 2D- и 3D-проводников, работающих в режиме баллистическом или диффузионном, как, впрочем, и в любом промежуточном. Нужно также помнить, что электронный транспорт рассматривался нами в изотермических условиях. Термоэлектрические явления и термоэлектрики с позиций транспортной модели ЛДЛ будут рассмотрены отдельно.

8. От баллистической проводимости к диффузионной в модели ЛДЛ

Рассмотрим электрическую проводимость в модели ЛДЛ для 1D-, 2D- и 3D-проводников, начиная с очень коротких баллистических резисторов, затем перейдем к обычным резисторам, работающим в диффузионном режиме, и рассмотрим также промежуточные режимы. В 1D проводнике («нанопроволака») длины L электроны могут перемещаться лишь в одном измерении, в 2D проводнике («нанояма») ширины W – в двух измерениях, в 3D проводнике с площадью поперечного сечения A все три измерения доступны электронам.

Согласно общепринятой договоренности [9], сопротивление R и его удельное значение ρ для проводников всех трех размерностей запишем следующим образом:

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

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

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

где μ – подвижность электронов, а n_L , n_S и n есть плотность электронов для проводников размерности 1D, 2D и 3D, соответственно, удельное сопротивление которых измеряется в разных единицах в зависимости от размерности проводника. Подобная запись сопротивления для проводников разной размерности физически вполне корректна: во всех случаях сопротивление пропорционально длине проводника, а для 2D и 3D проводников еще и обратно пропорционально, соответственно, ширине W и площади A поперечного сечения проводника, поскольку увеличение W и A физически эквивалентно параллельному соединению проводников. И вместе с тем мы увидим, что уравнения (76)–(78) не всегда корректны: удивительное встречается даже в таких, казалось бы, простых устройствах, какими нам представляются проводники разной размерности.

Уравнение Ландауэра для проводимости

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

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

Рассмотрим 2D проводник, проводимость которого запишем в виде

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

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

Основное внимание мы уделим 2D проводникам, хотя похожие рассуждения и выкладки могут быть проведены и для 1D и 3D проводников, для которых мы приведем только окончательные результаты. В отношении формулы Ландауэра (79) напомним, что множитель $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$ происходит из разложения в ряд Тейлора разности электрохимических потенциалов на контактах проводника $f_1 - f_2$ в предположении, что температура обоих контактов одинакова. Термоэлектрические явления в модели ЛДЛ будут рассмотрены отдельно.

9. 2D баллистические резисторы

У баллистических 2D резисторов коэффициент прохождения $T(E) = 1$, а число мод проводимости в (79), согласно (33), $M(E) = WM_{2D}(E)$. Рассмотрим подробнее множитель $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$ в уравнении

Ландауэра, который получил название «фермиевского окна проводимости».

На рис. 5 качественно показан график функции Ферми $f_0(E)$ и функции $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$ в зависимости от энергии E .

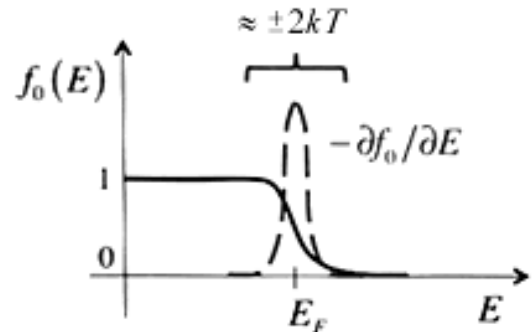


Рис. 5. Фермиевское окно проводимости

Мы видим, что функция $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$ существенна лишь в окрестности $\sim \pm 2 kT$ вокруг энергии Ферми E_F . Площадь под этой кривой равна единице, так что для низких температур фермиевское окно проводимости можно записать через дельта-функцию Кронекера:

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

Используя (81) и $T(E) = 1$, из уравнения Ландауэра (79) получаем выражение для баллистической проводимости

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

которое является общим и справедливым для резисторов любой размерности. Если число мод невелико, его можно вычислить из экспериментальных измерений, тогда проводимость и соответственно сопротивление не может принимать произвольные значения, а квантуется согласно

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

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

Тот факт, что сопротивление квантуется, надежно установлено экспериментально [12, 13]. В экспериментах ширина резистора W контролировалась электростатически напряжением на затворе V_G . Баллистический режим транспорта обеспечивался низкой температурой. По мере роста ширины резистора проводимость растет ступенчато (рис. 6) в соответствии с уравнением (82).

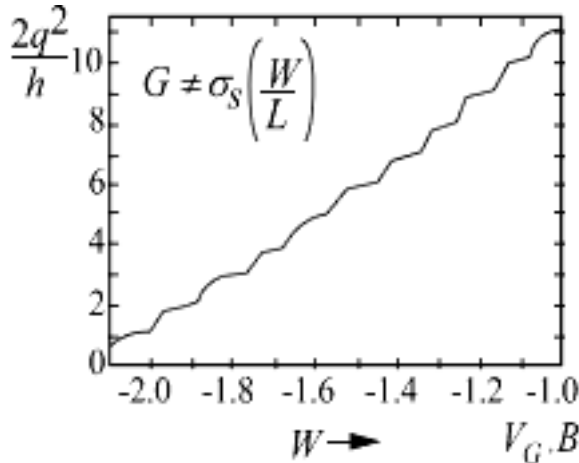


Рис. 6. Квантование проводимости электронного газа в интерфейсе AlGaAs/GaAs [12, 13]

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

10. Широкие 2D баллистические резисторы при T=0 K

Ширина W резистора может стать столь значительной, что на ней укладывается большое число де бройлевских полуволн и число мод измерить экспериментально становится затруднительно. В этом случае, например, для параболической дисперсии из уравнений (34) и (43) имеем:

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

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

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

где двойка учитывает спиновое вырождение, а g_v – долинное вырождение. Отсюда находим k_F через поверхностную плотность и подставляем в (37), так что окончательно

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

Уравнение (86) связывает число мод при энергии, равной энергии Ферми, с поверхностной плотностью электронов 2D баллистического проводника. Обратим внимание на то, что этот результат не предполагает задание какой-либо конкретной зонной структуры, важно лишь, чтобы она была изотропной. А вот увязка k_F и E_F уже требует задания конкретной дисперсии. Например, для параболической дисперсии волновой вектор k_F находим из

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

11. Широкие 2D баллистические резисторы при T > 0 K

Приближение (81) хорошо работает при низких температурах. При комнатных температурах и выше интеграл Ландауэра (79) нужно добросовестно вычислять. Пользуясь выражением для фермиевской функции, для баллистической 2D проводимости (T=1) имеем:

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

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

Фермиевская функция обладает полезным свойством, а именно:

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

которое позволяет производную в уравнении (88) вынести из под знака интеграла. Тогда вместо (88) с учетом (34) получим:

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

Далее введем новые переменные:

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

что позволяет интеграл (90) преобразовать к виду

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

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

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

который называется интегралом Ферми-Дирака порядка одна вторая.

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

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

Воспользуемся этим свойством и перепишем выражение (92) следующим образом:

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

где

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

а $WM_{2D}(kT)$ есть $WM_{2D}(E - E_C)$, вычисленное при энергии $E - E_C = kT$. Сравнивая (95) с (82), мы видим, что проводимость 2D баллистических резисторов при конечных температурах имеет тот же вид, что и при $T = 0$ K: нужно лишь заменить число мод $M(E_F)$ на $\langle M \rangle$ по (96). Величина $\langle M \rangle$ есть число мод проводимости 2D баллистического резистора при конечных температурах в фермиевском окне проводимости $-\partial f_0 / \partial E$.

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

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

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

12. Интегралы Ферми-Дирака

Интеграл Ферми-Дирака порядка j

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

где гамма-функция при n целом положительном

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

при этом

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

и

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

Важным свойством интеграла Ферми-Дирака является понижение его порядка при дифференцировании интеграла по его параметру (94). Например, известно аналитическое выражение для интеграла нулевого порядка [14]:

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

Тогда для интеграла минус первого порядка имеем:

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

Продолжая таким же образом далее, можно получить аналитические полиномиальные выражения для любых целых отрицательных порядков [14–16].

Для невырожденных полупроводников

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

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

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

Роль интегралов Ферми-Дирака в физике полупроводников, производные интегралов, асимптотические и приближенные выражения для них, методы и алгоритмы высокоточных и приближенных методов их расчета можно найти в [16].

13. 2D диффузионные резисторы

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

Уравнение Ландауэра (79) перепишем с учетом (33) для 2D резистора в диффузионном режиме, а именно:

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

Появление множителя W/L согласуется с традиционным определением (77) сопротивления 2D проводника. В модели же ЛДЛ пропорциональность проводимости ширине резистора W объясняется тем, что число мод проводимости 2D проводника должно быть пропорционально его ширине, а обратная пропорциональность длине проводника L вызвана диффузионным режимом.

14. Широкие 2D диффузионные резисторы при $T = 0$ K

Выражение (106) для низких температур существенно упрощается за счет сужения фермиевского окна проводимости (81) и сразу можно записать

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

где баллистическая проводимость дается выражением (82). Если определена длина свободного пробега λ , проводимость в диффузионном режиме можно вычислить через ее значение в баллистическом режиме.

Мы уже обсудили проводимость отдельно в баллистическом и в диффузионном режимах при низких температурах. Однако, можно рассмотреть весь спектр режимов при переходе от баллистического режима к диффузионному. Воспользуемся общим выражением для коэффициента прохождения (56)

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

тогда

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

а для сопротивления имеем:

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

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

15. Широкие 2D диффузионные резисторы при $T > 0$ K

При конечных температурах интеграл (106) нужно вычислять. Поступим следующим образом. Умножая и деля его на

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

переписываем (106) следующим образом:

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

где $\langle WM_{2D} \rangle$ дается выражением (96), а усредненное значение длины свободного пробега определяется как

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

Уравнение (112) по форме такое же как и уравнение (107). При низких температурах мы $\langle M \rangle$ заменяем на $M(E_F)$, а $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ на $\lambda(E_F)$. Одиночные и двойные угловые скобки указывают лишь на то, как производится усреднение.

Чтобы реально оценить усредненное значение средней длины свободного пробега, нужно задаться дисперсионным соотношением и выражением для $\lambda(E)$. В случае обычных и наиболее распространенных механизмов рассеяния, которым мы посвятим отдельное сообщение, простейший путь записать выражение для $\lambda(E)$ это воспользоваться степенным законом в форме [17]

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

где значение показателя степени r определяется выбором того или иного механизма рассеяния, а константа λ_0 в типичных случаях еще и температурозависимая. Например, при рассеянии

электронов на акустических фононах в 3D проводнике $r=0$, а на заряженных примесях $r=2$.

Оба интеграла в (113) выражаются через интегралы Ферми – Дирака следующим образом:

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

Если $r=0$, средняя длина свободного пробега не зависит от энергии и $\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0$.

Мы не будем рассматривать весь спектр перехода от баллистического режима к диффузионному. Заметим лишь, что в случае не зависящей от энергии средней длины свободного пробега сопротивление резистора

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

что очень похоже на уже известный результат (110).

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

16. О понятии подвижности

Традиционно обсуждение сопротивления проводников начинается с определений (76)–(78), которые, однако, не применимы к проводникам, работающим в баллистическом или квазibalлистическом режимах. В этих режимах не совсем ясно, как оценить подвижность носителей тока. Транспортная модель ЛДЛ начинается с уравнения Ландауэра (79) и пригодна для любых транспортных режимов, от баллистического до диффузионного и во всем спектре режимов между ними. В рамках модели ЛДЛ вообще нет нужды обращаться к понятию подвижности. Вместе с тем понятие подвижности и поныне широко используется несмотря на то, что в отдельных случаях оно приводит к недоразумениям. Так уравнения (76)–(78) утверждают, что проводимость пропорциональна произведению плотности неких электронов и подвижности, тогда как согласно уравнению Ландауэра (79) проводимость обеспечивается только теми электронами, энергия которых попадает в фермиевское окно проводимости $(-\frac{\partial f_0}{\partial E})$. Для полупроводников n -типа это могут быть все электроны в зоне проводимости (невырожденные полупроводники), а может быть только малая их доля (вырожденные полупроводники). Поскольку понятие подвижности и поныне широко используется, следует обсудить его в рамках концепции ЛДЛ.

Лучше всего опять начать с уравнения Ландауэра (79) и приравнять его проводимости 2D проводника по уравнению (77), а именно:

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

откуда кажущаяся подвижность для 2D резистора

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

берется нами за определение подвижности в отличие от определения подвижности по модели Друде [18]

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

где τ – среднее время рассеяния, иначе, время импульсной релаксации. Мы называем подвижность по (118) кажущейся, поскольку определение (118) пригодно как для баллистической подвижности, так и для диффузионной. Например, положив время прохождения $T(E)=1$, для баллистической подвижности имеем:

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

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

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

Концепция баллистической подвижности была введена в обращение Шуром [19] и оказалась полезной при анализе различных устройств [20]. Сравнивая выражения (120) и (121), мы видим, что диффузионная подвижность отличается от баллистической только заменой средней длины свободного пробега просто на длину баллистического резистора. Подобная замена выглядит вполне физически приемлемой. Вспомним, что в контактах равновесие быстро достигается за счет интенсивных процессов рассеяния. Электрон, инжектированный в баллистический канал истоком, участвовал в рассеянии в контакте с истоком, а затем следующий раз участвовал в рассеянии лишь в контакте со стоком. Расстояние между этими двумя событиями есть как раз длина баллистического резистора, которая и играет роль средней длины свободного пробега в диффузионном канале.

Проблемы в наноэлектронике возникают в области, промежуточной между баллистическим и диффузионным предельными режимами. В этой области коэффициент прохождения определяется выражением (108) и можно показать [20], что для кажущейся подвижности имеет место следующее соотношение

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

которое выглядит как традиционное правило Матиссена [17, 21]. По другому в этой переходной области можно поступить, если в (121) среднюю

длину свободного пробега заменить на ее кажущееся значение, а именно:

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

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

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

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

а также из формулы (33) следует, что

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

где скорость

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

выражается через фермиевскую скорость v_F .

Используя (120) и (121) вместе с (124) и (125), находим, что

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

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

где коэффициенты диффузии даются выражениями:

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

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

Уравнения (127) и (128) напоминают соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии (75) с разностью $E_F - E_C$, играющей роль kT , поскольку с самого начала предполагалось, что $T = 0$ К.

Уравнение (130) дает привычное определение коэффициента диффузии, а вот (129) вводит новое понятие «баллистического коэффициента диффузии».

17. Способы записи 2D проводимости

Согласно уравнению (107), удельная диффузионная проводимость, иначе поверхностная проводимость, при $T=0$ К дается выражением

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

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

Нам уже известно выражение $M_{2D}(E)$ из (33), а именно:

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

где для средней скорости в случае параболической дисперсии и изотропии скорости имеем уравнение (30), а именно:

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

При рассмотрении общих вопросов рассеяния при электронном транспорте в другом сообщении для средней длины свободного пробега в (131) мы получим

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

где τ есть время импульсной релаксации, иначе, время между двумя соседними актами рассеяния. Используя (133) и (134), для поверхностной проводимости (131) получаем типичное выражение:

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

Определяя электронный коэффициент диффузии

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

переписываем (135) в более привычном виде:

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

Приведем еще один способ записи поверхностной проводимости. Для параболической дисперсии

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

Используя это выражение и (124), переписываем (135) в виде

$$\sigma_s = n_s q \mu, \quad (139)$$

где подвижность

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

Уравнение (140) хорошо известно, но его нельзя назвать удачным в качестве базового уравнения для анализа работы электронного устройства в целом. Типичным примером может служить ситуация когда не работает предположение о параболической зонной структуре, порождающее понятие эффективной массы носителя тока.

Подведем итоги. Получены четыре разных способа записи удельной 2D проводимости при $T=0$ К. Это уравнения (131), (135), (137) и пара уравнений (139)–(140). Все уравнения эквивалентны, но обладают они разными возможностями. Уравнение (131) увязывает удельную проводимость с числом мод проводимости. По уравнениям (135) и (137) нужно знать плотность состояний резистора и скорость или коэффициент диффузии при энергии, равной фермиевскому значению. Уравнение (139) связывает удельную проводимость с поверхностной плотностью электронов. Конечно, роль фермиевского окна проводимости $(-\partial f_0 / \partial E)$ остается прежней: проводимость обеспечивают лишь те электроны, энергия которых попадает в окно $\sim \pm 2$ kT, охватывающее фермиевскую энергию E_F .

При конечных температурах вместо уравнения (131) имеем:

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

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

$$\sigma_s = \int \sigma'_s(E) dE, \quad (142)$$

где

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

Полную проводимость (142) получаем суммированием проводимостей по всем модам резистора. Уравнение (143) при конечных температурах можно записать по-разному так же, как это было показано выше для $T=0$ К.

18. Диссипация мощности в баллистических резисторах

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

Диссипация мощности в баллистическом резисторе иллюстрируется на рис. 7.

Ток возникает в фермиевском окне, созданном разностью фермиевских функций f_1-f_2 , отличной от нуля, и следовательно разностью электрохимических потенциалов $E_{F1}-E_{F2}=qV$. Как схематически показано на рис. 7, когда электрон покидает контакт 1,

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

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

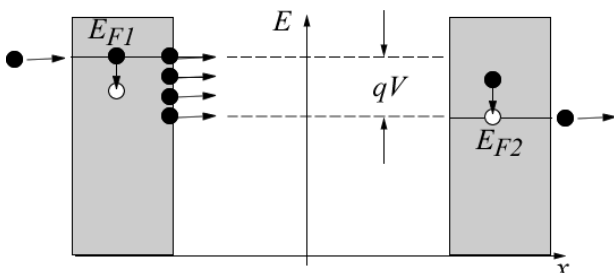


Рис. 7. Диссипация мощности в баллистическом канале происходит на контактах

19. Падение напряжения в баллистических резисторах

В диффузионном режиме работы однородного резистора напряжение падает линейно вдоль его длины. А как падает напряжение в баллистическом резисторе? Ответ, наверное, ожидаемый – на контактах (рис. 8).

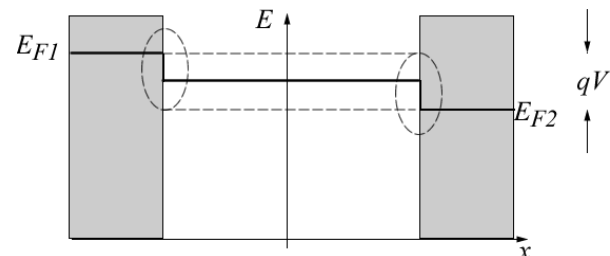


Рис. 8. В баллистическом резисторе при равноправии контактов напряжение $V=(E_{F1}-E_{F2})/q$ падает на контактах поровну

Внутри контакта 1 есть один хорошо определенный уровень Ферми E_{F1} , аналогично и в контакте 2 есть один уровень E_{F2} . Внутри же всего устройства уровней Ферми два. Часть электронных состояний резистора заполняется истоком. Поскольку они находятся в равновесии с ним, то заполнены они в соответствии с фермиевской функцией контакта 1. Аналогичная ситуация имеет место со стороны стока. Состояния заполняются в соответствии с фермиевской функцией контакта 2. Расчет среднего значения электрохимического потенциала внутри баллистического резистора [5]

приводит к результату, показанному на рис. 8. При равноправии контактов половина падения электрохимического потенциала происходит на истоке, а вторая половина – на стоке. По этой причине баллистическое сопротивление в 12.9 кОм называют квантом контактного сопротивления.

20. 1D и 3D резисторы

Уравнение Ландауэра для проводимости (79) справедливо для резисторов любой размерности, нужно только корректно учесть число мод проводимости $M(E)$. Вернемся к 2D проводнику. Он удлинен в направлении движения электронов и имеет конечную ширину W . Движение электронов ограничено потенциальной ямой, их энергия квантуется, а именно:

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

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

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

где сумма берется по всем подзонам.

Теперь рассмотрим 1D проводник. Он похож на очень узкий 2D резистор. Если его ширина и толщина малы, то все подзоны далеко расположены друг от друга по энергии и их можно легко пересчитать, так что согласно (33)

$$M(E) = M_{1D}(E) = \text{Число подзон энергии } E. \tag{146}$$

Наконец, если ширина и толщина резистора велики, то мы имеем фактически 3D проводник, все подзоны близко расположены друг по отношению к другу по энергии и число мод проводимости согласно (33)

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

где A – площадь поперечного сечения 3D проводника.

Для 1D резистора имеет место строгое квантовое ограничение в двух измерениях и число мод проводимости дается простым выражением (146). Для 2D резистора строгое квантовое ограничение имеет место в одном измерении и число мод дается выражением (145). Для 3D резистора квантовых ограничений нет и число мод дается выражением (147). Из (145) и (147) видно, что эти формулы выписаны для параболической дисперсии. С таким же успехом их можно выписать для любой аналитически заданной дисперсии, например, для

линейной как в графене, которому мы намерены посвятить отдельную публикацию в концепции «снизу – вверх» транспортной модели ЛДЛ. Если дисперсия задается эмпирически, то остается прибегнуть только к численным методам. Как только число мод выявлено, интеграл Ландауэра для проводимости (79) не трудно оценить для проводников любой размерности.

Уравнение Ландауэра (79) бывает удобнее переписать в другом виде, а именно:

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

$$\langle M \rangle = \int M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (148)$$

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

Воспользуемся общим выражением для коэффициента прохождения (108) и простоты ради предположим, что средняя длина свободного пробега постоянна и равна λ_0 . Тогда для проводимости имеем:

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

В случае параболической дисперсии для 1D резистора

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

где

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

и суммирование в (150) ведется по подзонам.

При $T=0$ K проводимость 1D резистора упрощается до

$$G_{1D} = \frac{2q^2}{h} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + L} \times \text{Число подзон энергии } E_F. \quad (152)$$

В случае статистики Максвелла-Больцмана

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

где

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

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

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

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

Для 2D резистора имеем:

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

где для параболической дисперсии

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

При $T=0$ K выражение (149) для 2D резистора упрощается до

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

В случае статистики Максвелла-Больцмана

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

Наконец, для 3D резистора

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

где

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

и

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

При $T = 0$ K выражение (149) для 3D резистора упрощается до

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

В случае статистики Максвелла – Больцмана

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

В заключение в качестве примера приведем результаты анализа экспериментальной вольт-амперной характеристики (ВАХ) углеродных нанотрубок. Это почти идеальные 1D проводники. Экспериментальные ВАХ одностеночных углеродных нанотрубок в металлическом режиме длиной 1 мкм при $T=4, 100, 200$ K в широком диапазоне напряжений воспроизведены из [22] на рис. 9.

Из линейного участка ВАХ для проводимости получается 22 мкСм. Для таких углеродных нанотрубок приближение при $T = 0$ K хорошо работает даже при весьма высоких температурах. Так что можно пользоваться выражением для проводимости (152). Долинное вырождение для углеродных нанотрубок равно двойке. В предположении, что заполнена одна подзона для баллистической проводимости получается $G^{ball} = 154$ мкСм. Оценка среднего пути свободного пробега из ур-я (152) дает $\lambda_0=167$ нм, что намного меньше физической длины использованных в эксперименте нанотрубок в 1 мкм, так что транспорт в таких нанотрубках диффузионный.

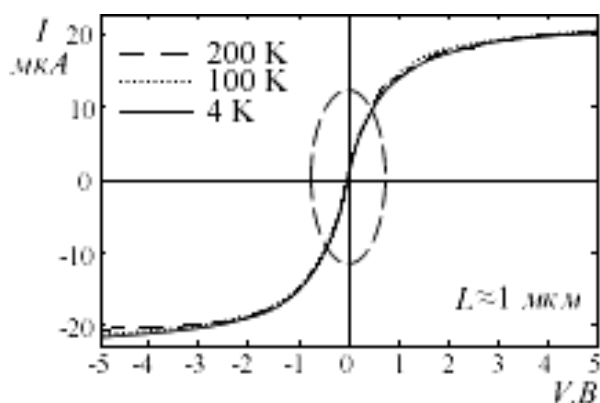


Рис. 9. Вольт-амперная характеристика одностеночных углеродных нанотрубок в металлическом режиме при трех разных температурах [22]. Обведен участок линейного отклика

21. Выводы

Мы ставили перед собой задачу в этом обзоре показать как пользоваться уравнением проводимости Ландауэра при отсутствии перепада температур на концах проводника. Основные результаты можно было бы сформулировать коротко следующим образом:

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

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

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

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

5. При изучении электрических свойств любого нового материала, включая наносистемы, начинать следует не с договоренностей (76)–(78), а с уравнения Ландауэра (79).

В основу настоящего обзора положены лекции Марка Лундстрема «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications» [7] и Суприе Датты «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» [4], прочитанных в 2011–2012 годах в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u], а также наши статьи [23–26].

Благодарности

Автор благодарен Н. Е. Кругляк за помощь в работе при подготовке рукописи к печати.

Литература

1. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction [Text] /

R. Landauer // IBM Journal of Research and Development. – 1957. – Vol. 1, Issue 3. – P. 223–231. doi: [10.1147/rd.13.0223](https://doi.org/10.1147/rd.13.0223)

2. Landauer, R. Electrical resistance of disordered one dimensional lattices [Text] / R. Landauer // Philosophical Magazine. – 1970. – Vol. 21, Issue 172. – P. 863–867. doi: [10.1080/14786437008238472](https://doi.org/10.1080/14786437008238472)

3. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction [Text] / R. Landauer // Journal of Mathematical Physics. – 1996. – Vol. 37, Issue 10. – P. 5259. doi: [10.1063/1.531590](https://doi.org/10.1063/1.531590)

4. Datta, S. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport [Electronic resource] / S. Datta. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. – Available at: www.nanohub.org/courses/FoNI

5. Datta, S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems [Text] / S. Datta. – Cambridge: Cambridge University Press, 2001.

6. Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor [Text] / S. Datta. – Cambridge: Cambridge University Press, 2005.

7. Lundstrom, M. Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications [Electronic resource] / M. Lundstrom, C. Jeong. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. – Available at: www.nanohub.org/resources/11763

8. Lundstrom, M. Nanoscale Transistors [Electronic resource] / M. Lundstrom. – Available at: www.nanohub.org/courses/NT

9. Pierret, R. F. Semiconductor Device Fundamentals [Text] / R. F. Pierret. – Reading, MA: Addison-Wesley, 1996.

10. Jeong, C. On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients [Text] / C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, M. Lundstrom // Journal of Applied Physics. – 2010. – Vol. 107, Issue 2. – P. 023707. doi: [10.1063/1.3291120](https://doi.org/10.1063/1.3291120)

11. Berg, H. C. Random walks in biology [Text] / H. C. Berg. – Princeton: Princeton University Press, 1993.

12. van Wees, B. J. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas [Text] / B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon // Physical Review Letters. – 1988. – Vol. 60, Issue 9. – P. 848–850. doi: [10.1103/physrevlett.60.848](https://doi.org/10.1103/physrevlett.60.848)

13. Holcomb, D. F. Quantum Electrical Transport in samples of limited dimensions [Text] / D. F. Holcomb // American Journal of Physics. – 1999. – Vol. 67, Issue 4. – P. 278. doi: [10.1119/1.19251](https://doi.org/10.1119/1.19251)

14. Cvijovic, D. Fermi-Dirac and Bose-Einstein functions of negative integer order [Text] / D. Cvijovic // Theoretical and Mathematical Physics. – 2009. – Vol. 161, Issue 3. – P. 1663–1668. doi: [10.1007/s11232-009-0153-9](https://doi.org/10.1007/s11232-009-0153-9)

15. Dingle, R. The Fermi-Dirac Integrals [Text] / R. Dingle // Appl. Scientific Res. – 1957. – Vol. 6, Issue 1. – P. 225.

16. Kim, R. Notes on Fermi-Dirac Integrals [Electronic resource] / R. Kim, M. S. Lundstrom. – Available at: www.nanohub.org/resources/5475

17. Lundstrom, M. Fundamentals of Carrier Transport, 2nd Ed. [Text] / M. Lundstrom. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. – 400 p.

18. Peter, Yu. Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties [Text] / Yu. Peter, C. Manuel. – Berlin: Springer, 2010. – 775 p.

19. Shur, M. S. Low Ballistic Mobility in GaAs HEMTs [Text] / M. S. Shur // IEEE Electron Device Letters. – 2002. – Vol. 23, Issue 9. – P. 511–513. doi: [10.1109/led.2002.802679](https://doi.org/10.1109/led.2002.802679)

20. Wang, J. Ballistic Transport in High Electron Mobility Transistors [Text] / J. Wang, M. Lundstrom // IEEE

Transactions on Electron Devices. – 2003. – Vol. 50, Issue 7. – P. 1604–1609. doi: [10.1109/led.2003.814980](https://doi.org/10.1109/led.2003.814980)

21. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела [Текст] / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М: Мир, 1979. – 458 с.

22. Yao, Z. High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes [Text] / Z. Yao, C. L. Kane, C. Dekker // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 84, Issue 13. – P. 2941–2944. doi: [10.1103/physrevlett.84.2941](https://doi.org/10.1103/physrevlett.84.2941)

23. Kruglyak, Yu. Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics [Text] / Yu. Kruglyak // Journal of Nanoscience. – 2014. – Vol. 2014. – P. 1–15. doi: [10.1155/2014/725420](https://doi.org/10.1155/2014/725420)

24. Kruglyak, Yu. A. A Generalized Landauer-Datta-Lundstrom Electron Transport Model [Text] / Yu. A. Kruglyak // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2014. – Vol. 88, Issue 11. – P. 1826–1836. doi: [10.1134/s0036024414110119](https://doi.org/10.1134/s0036024414110119)

25. Кругляк, Ю. А. Обобщенная модель электронного транспорта Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2013. – Т. 11, № 3. – С. 519–549.

26. Кругляк, Ю. А. От баллистической проводимости к диффузионной в транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2013. – Т. 11, № 4. – С. 655–677.

References

1. Landauer, R. (1957). Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. IBM Journal of Research and Development, 1 (3), 223–231. doi: [10.1147/rd.13.0223](https://doi.org/10.1147/rd.13.0223)

2. Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. Philosophical Magazine, 21 (172), 863–867. doi: [10.1080/14786437008238472](https://doi.org/10.1080/14786437008238472)

3. Landauer, R. (1996). Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. Journal of Mathematical Physics, 37 (10), 5259. doi: [10.1063/1.531590](https://doi.org/10.1063/1.531590)

4. Datta, S. (2012). Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. Available at: www.nanohub.org/courses/FoN1

5. Datta, S. (2001). Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge: Cambridge University Press.

6. Datta, S. (2005). Quantum Transport: Atom to Transistor. Cambridge: Cambridge University Press.

7. Lundstrom, M., Jeong, C. (2013). Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. Available at: www.nanohub.org/resources/11763

8. Lundstrom, M. Nanoscales Transistors. Available at: www.nanohub.org/courses/NT

9. Pierret, R. F. (1996). Semiconductor Device Fundamentals. Reading, MA: Addison-Wesley.

10. Jeong, C., Kim, R., Luisier, M., Datta, S., Lundstrom, M. (2010). On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric

transport coefficients. Journal of Applied Physics, 107 (2), 023707. doi: [10.1063/1.3291120](https://doi.org/10.1063/1.3291120)

11. Berg, H. C. (1993). Random walks in biology. Princeton: Princeton University Press.

12. van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., Foxon, C. T. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. Physical Review Letters, 60 (9), 848–850. doi: [10.1103/physrevlett.60.848](https://doi.org/10.1103/physrevlett.60.848)

13. Holcomb, D. F. (1999). Quantum Electrical Transport in samples of limited dimensions. American Journal of Physics, 67 (4), 278. doi: [10.1119/1.19251](https://doi.org/10.1119/1.19251)

14. Cvijovic, D. (2009). Fermi-Dirac and Bose-Einstein functions of negative integer order. Theoretical and Mathematical Physics, 161 (3), 1663–1668. doi: [10.1007/s11232-009-0153-9](https://doi.org/10.1007/s11232-009-0153-9)

15. Dingle, R. (1957). The Fermi-Dirac Integrals. Appl. Scientific Res., 6 (1), 225.

16. Kim, R., Lundstrom, M. S. Notes on Fermi-Dirac Integrals. Available at: www.nanohub.org/resources/5475

17. Lundstrom, M. (2000). Fundamentals of Carrier Transport, 2nd Ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 440

18. Peter, Yu., Manuel, C. (2010). Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties. Berlin: Springer, 775.

19. Shur, M. S. (2002). Low Ballistic Mobility in GaAs HEMTs, IEEE Electron Device Letters, 23 (9), 511–513. doi: [10.1109/led.2002.802679](https://doi.org/10.1109/led.2002.802679)

20. Wang, J., Lundstrom, M. (2003). Ballistic Transport in High Electron Mobility Transistors. IEEE Transactions on Electron Devices, 50 (7), 1604–1609. doi: [10.1109/led.2003.814980](https://doi.org/10.1109/led.2003.814980)

21. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. (1979). Solid State Physics. Philadelphia: Saunders College, 458

22. Yao, Z., Kane, C. L., Dekker, C. (2000). High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes. Physical Review Letters. 84 (13), 2941–2944. doi: [10.1103/physrevlett.84.2941](https://doi.org/10.1103/physrevlett.84.2941)

23. Kruglyak, Yu. (2014). Landauer – Datta – Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics, Journal of Nanoscience, 2014, 1–15. doi: [10.1155/2014/725420](https://doi.org/10.1155/2014/725420)

24. Kruglyak, Yu. A. (2014). A Generalized Landauer – Datta – Lundstrom Electron Transport Model. Russian Journal of Physical Chemistry A, 88 (11), 1826–1836 doi: [10.1134/s0036024414110119](https://doi.org/10.1134/s0036024414110119)

25. Kruglyak, Yu. A. (2013). The Generalized Landauer – Datta – Lundstrom Electron Transport Model. Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, 12 (2), 415.

26. Kruglyak, Yu. A. (2013). From Ballistic Conductivity to Diffusional in the Landauer-Datta-Lundstrom Transport Model, Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, 11 (4), 655–677.

*Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.
Дата надходження рукопису 14.11.2014*

Кругляк Юрий Алексеевич, доктор химических наук, профессор, кафедра информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, г. Одесса, Украина, 65016
E-mail: quantumnet@yandex.ua