

экономичности агрегатов и систем тепловозов. Труды МИИТ. – 1980. – Вып. 663. – С. 139–146.

2. Башков, В. М. Комплексная оценка степени совершенства систем охлаждения электрических машин тепловозов [Текст] / В. М. Башков, Г. М. Басов, В. И. Могила – Локомотив – информ, 2011. – С. 14–16.

3. Декларацийний патент України на винахід “Система охолодження тягових електричних машин тепловозів” 67220 від 15.06.2004 р. [Текст] / Башков В. М. та ін. – Бюл. № 6.

4. Кузьмич, В. Д. Вентиляционные системы тягових електрических машин тепловозов [Текст] / В. Д. Кузьмич // Научные труды Московского института инженеров железнодорожного транспорта. Воздухоочистители и системы воздушного охлаждения тяговых электрических машин тепловоз. – 1970. – Вып. 335. – С. 15–22.

5. Епифанов, В. П. Компановка охладящих устройств тепловозов. [Текст] / В. П. Епифанов, Ю. А. Куликов, В. И. Рягузов, В. С. Таля. – М. НИИИИФОРМТЯЖМАШ, 1968. – 54 с.

6. Большаков, Н. В. Условия эксплуатации системы вентиляции электрических машин тепловозов ТЭП60(2ТЭП60) [Текст] / Н. В. Большаков // Научные труды Московского института инженеров железнодорожного транспорта. Вспомогательное оборудование тепловозов. – 1971. – Вып. 394. – С. 59–63.

7. Миончинский, В. А. Система охлаждения электрических машин на тепловозе ТЭП70 [Текст] / В. А. Миончинский. – Электрическая и тепловозная тяга. – 1976. – № 8. – С. 23–24.

References

1. Bashkov, V. M., Epifanov, V. P., Kuzmich, V. D. (1980). Estimation of aerodynamic indexes of the systems of cooling of hauling electric machines and vehicles of diesel engines. In book: Increase of reliability and economy of aggregates and systems of diesel engines. Labours MIIT., 663, 139–146.

2. Bashkov, V. M., Basov, G. M., Mogula, V. I. (2011). Comprehensive assessment of the degree of perfection of cooling systems of electric machines locomotives. Locomotive - Inform, 14–16.

3. Bashkov, V. N. Patent for the invention of Ukraine "Cooling system of locomotive traction electric cars" 67220 of 15.06.2004. Bull. Number 6.

4. Kuzmich, V. D. (1970). Ventilation systems of traction electric machines locomotives. Proceedings of the Moscow Institute of Railway Engineers - Air and air cooling systems locomotive traction electric machines, 335, 15–22.

5. Epifanov, V. P., Kulikov, Y. A., Ryaguzov, V. I., Tala, V. S. (1968). The line of cooling devices locomotives. Moscow: NIИИИФОРМТЯЖМАШ, 54.

6. Bolshakov, N. V. (1971). Operating conditions of the ventilation system of electrical machines locomotives ТЕР60 (2ТЕР60). Proceedings of the Moscow Institute of Railway Engineers. Accessories locomotives, 394, 59–63.

7. Mionchinsky, V. A. (1976). The cooling system of electric cars on the locomotive ТЕР70. Electric and diesel traction, 8, 23–24.

*Рекомендовано до публікації д-р техн. наук, професор Ткаченко В. П.
Дата надходження рукопису 15.02.2015*

Башков Вадим Михайлович, кандидат технических наук, доцент, кафедра теоретической механики, Национальный технический университет Украины “Киевский политехнический институт”, пр. Победы, 37, г. Киев, Украина, 03056

E-mail: vadim.qwert@ukr.net

Бабаев Александр Арташесович, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра теоретической механики, Национальный технический университет Украины “Киевский политехнический институт”, пр. Победы, 37, м. Киев, Украина, 03056

E-mail: babaevaa@ukr.net

Штефан Наталья Ильинична, кандидат технических наук, доцент, кафедра теоретической механики, Национальный технический университет Украины “Киевский политехнический институт”, пр. Победы, 37, м. Киев, Украина, 03056

E-mail: nishtefan@gmail.com

Гнатейко Нонна Валентиновна, кандидат технических наук, доцент, кафедра теоретической механики, Национальный технический университет Украины “Киевский политехнический институт”, пр. Победы, 37, г. Киев, Украина, 03056

E-mail: nonna.gnatyjko@gmail

УДК 537.32

DOI: 10.15587/2313-8416.2015.38847

УЧЕТ РАССЕЯНИЯ В ТРАНСПОРТНОЙ МОДЕЛИ ЛАНДАУЭРА-ДАТТЫ-ЛУНДСТРОМА

© Ю. А. Кругляк

Качественно рассматривается рассеяние носителей тока и тепла в транспортной модели ЛДЛ по ходу изменения времен рассеяния в процессе столкновений. На примере 1D проводника выводится базовое соотношение между коэффициентом прохождения T и средней длиной свободного пробега λ . В качестве примера анализируются экспериментальные данные для Si MOSFET с привлечением моделей различной достоверности

Ключевые слова: нанозелектроника, рассеяние электронов, рассеяние фононов, коэффициент прохождения, длина свободного пробега, коэффициент диффузии, подвижность, Si MOSFET

Scattering of carriers in the LDL transport model during the changes of the scattering times in the collision processes is considered qualitatively. The basic relationship between the transmission coefficient T and the average mean free path λ is derived for 1D conductor. As an example, the experimental data for Si MOSFET are analyzed with the use of various models of reliability

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, electron scattering, phonon scattering, transmission coefficient, mean free path, diffusion coefficient, mobility, Si MOSFET

1. Введение

При описании транспорта электронов в диффузионном режиме модели ЛДЛ [1–4] важную роль играет средняя длина свободного обратного рассеяния (mean-free-pass for backscattering) λ , которая определяет коэффициент прохождения

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}, \tag{1}$$

где L – длина проводника. Откуда берется это выражение?

Обычно под λ подразумевается среднее расстояние между двумя актами рассеяния. В подходе Ландауэра [5, 6] величина λ имеет специальное значение: это длина, на которой коэффициент прохождения (1) уменьшается вдвое. Мы позже увидим, что средняя длина свободного рассеяния назад пропорциональна средней длине свободного пробега, Λ ,

$$\lambda(E) \propto \Lambda(E) = v(E) \tau(E), \tag{2}$$

где средняя скорость определяется зонной структурой резистора, а среднее время рассеяния определяется также и физикой процессов рассеяния. Хотелось бы глубже понять как эти скорость и время определяют величину λ . Обсудим также каким образом среднюю длину свободного пробега определить из измерений проводимости или подвижности. Начнем с того как контролируется время рассеяния $\tau(E)$.

2. Обзор физики рассеяния электронов (качественные аспекты)

Пусть ансамбль электронов с энергией E впрыскивается в проводник в момент времени $t=0$ (рис. 1). Первоначальные импульсы одинаковы и одинаково направлены.

Через время $t \approx \tau(E)$ электроны испытают в среднем одно столкновение. В зависимости от физики процессов рассеяния импульсы электронов (направления стрелок на рис. 1) могут измениться, а их энергия увеличится или уменьшится (длины стрелок на рис. 1). Если рассеяние анизотропно и стремится отклонить электроны на небольшой угол, то одного акта рассеяния недостаточно для зануления суммарного импульса ансамбля электронов. По истечении еще некоторого времени $t \approx \tau_m(E) \geq \tau(E)$ импульсы электронов рандомизируются. Если, однако, доминирующий механизм рассеяния упругий, то первоначальная энергия ансамбля электронов не примет еще своего равновесного значения. По прошествии еще некоторого времени $t \approx \tau_E(E) \gg \tau_m(E), \tau(E)$ первоначальный избыток энергии занулится и энергия примет свое равновесное значение.

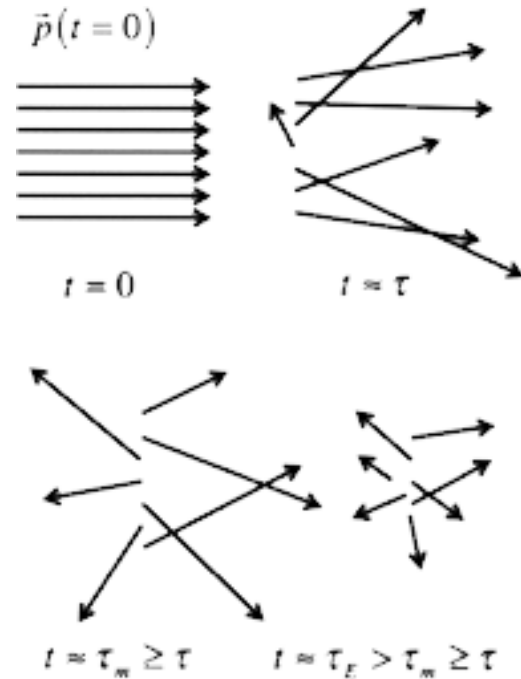


Рис. 1. Качественная визуализация различных времен рассеяния. В момент времени $t = 0$ электроны с одинаковыми импульсами впрыскиваются в проводник в одном направлении. Электроны испытывают в среднем одно столкновение через время $t \approx \tau(E)$. Суммарный импульс первоначального ансамбля электронов зануляется через время $t \approx \tau_m(E) \geq \tau(E)$, а энергия принимает свое равновесное значение через время $t \approx \tau_E(E) > \tau_m(E) \geq \tau(E)$ [2, 7]

Рис. 1 наглядно иллюстрирует три характеристических времени рассеяния:

- 1) среднее время между двумя последовательными актами рассеяния $\tau(E)$;
- 2) время релаксации импульса $\tau_m(E)$;
- 3) время релаксации энергии $\tau_E(E)$.

В общем случае $\tau_m(E) \geq \tau(E)$ и $\tau_E(E) \gg \tau_m(E), \tau(E)$.

Поскольку мы рассматриваем транспорт зарядов и тепла, то наибольший интерес для нас представляет время импульсной релаксации, а также то каким образом это время зависит от физики рассеяния.

Фундаментальным понятием в теории рассеяния является матрица рассеяния $S(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$, переводящая систему частиц из первоначального состояния \vec{p} в некое конечное состояние \vec{p}' .

Скорость рассеяния, иначе вероятность рассеяния за единицу времени, есть просто единица, де-

ленная на среднее время между соседними столкновениями, и получается путем суммирования по всем возможным конечным состояниям, а именно:

$$\frac{1}{\tau(\vec{p})} = \sum_{\vec{p}'} S(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'). \quad (3)$$

В предположении, что электроны впрыскиваются в проводник с начальным импульсом, направленным вдоль оси z , для скорости импульсной релаксации, по аналогии с (3), имеем [7]:

$$\frac{1}{\tau_m(\vec{p})} = \sum_{\vec{p}'} S(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \frac{\Delta p_z}{p_z}. \quad (4)$$

Анизотропное рассеяние стремится отклонить электроны на небольшие углы, в результате чего время импульсной релаксации растет, а соответствующая скорость падает. Аналогичным образом записывается скорость релаксации энергии через время соответствующей релаксации.

Время импульсной релаксации можно рассчитать из скорости перехода. Техника вычислений скорости перехода подробно изложена в [7]. Здесь мы обрисовем лишь ее основные моменты. Рассмотрим акт рассеяния подробнее (рис. 2).

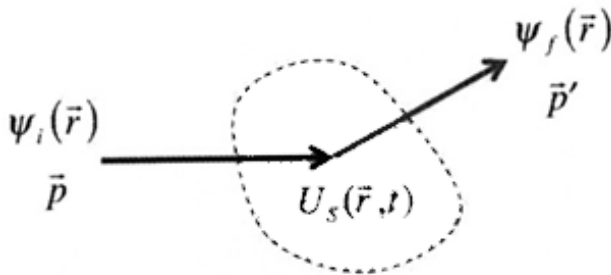


Рис. 2. Переход электрона из начального состояния в конечное в результате акта рассеяния на потенциале $U_s(\vec{r}, t)$

Пусть электрон с импульсом $\vec{p} = \hbar k$ и описываемый волновой функцией $\psi_i(\vec{r})$ оказался в области действия потенциала рассеяния $U_s(\vec{r}, t)$, который может быть как статическим (рассеяние на заряженных примесях), так и динамическим (рассеяние на фононах). В результате акта рассеяния первоначальный импульс электрона становится иным \vec{p}' , изменяется и его волновая функция на $\psi_f(\vec{r})$. Нужно рассчитать вероятность (за единицу времени) $S(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ перехода электрона из первоначального состояния \vec{p} в конечное \vec{p}' .

В первом порядке теории возмущений

$$S(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{p',p}|^2 \delta(E' - E - \Delta E), \quad (5)$$

где матричный элемент перехода

$$|H_{p',p}|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(\vec{r}) U_s(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Выражение (5) известно в квантовой теории как золотое правило Ферми-Дирака [8, 9]. Фигурирующая в (5) δ -функция ответственна за сохранение энергии. В случае статического потенциала рассеяния (например, на заряженных примесях) энергия не релаксирует ($\Delta E = 0$). Для периодического потенциала с характерной частотой ω (колебания решетки) $\Delta E = \pm \hbar \omega$, что соответствует излучению или поглощению фонона.

В любом случае сначала нужно задаться потенциалом рассеяния, затем воспользоваться (5) и далее вычислить характерное время (3) или (4). Позже будет показано как из времени импульсной релаксации вычислить среднюю длину свободного рассеяния назад.

Некоторые простые потенциалы рассеяния, например, короткодействующие δ -потенциалы, а также потенциалы рассеяния на акустических и оптических фононах в неполярных материалах просто равновероятно отклоняют носители тока с сохранением энергии. В таких случаях можно ожидать, что скорость рассеяния будет пропорциональна плотности конечных состояний. При упругом рассеянии $1/\tau(E) \propto D(E)$, при рассеянии с поглощением фонона $1/\tau(E) \propto D(E + \hbar \omega)$, а с эмиссией фонона $1/\tau(E) \propto D(E - \hbar \omega)$. Поскольку обычно плотность состояний растет с энергией (n -проводники), можно ожидать уменьшения времени рассеяния с ростом энергии носителей тока или тепла.

Ситуация с рассеянием на заряженных примесях или на фононах в полярных средах иная. Случайно расположенные заряды создают флуктуации у дна зоны проводимости $E_c(\vec{r})$, что ведет к рассеянию электронов и фононов (рис. 3). Высокоэнергетические электроны менее чувствительны к флуктуирующему потенциалу рассеяния по сравнению с низкоэнергетическими электронами, так что в случае рассеяния на заряженных примесях (и полярных фононах) с ростом энергии носителей время рассеяния $\tau(E)$ будет расти, а скорость рассеяния $1/\tau(E)$ будет падать.

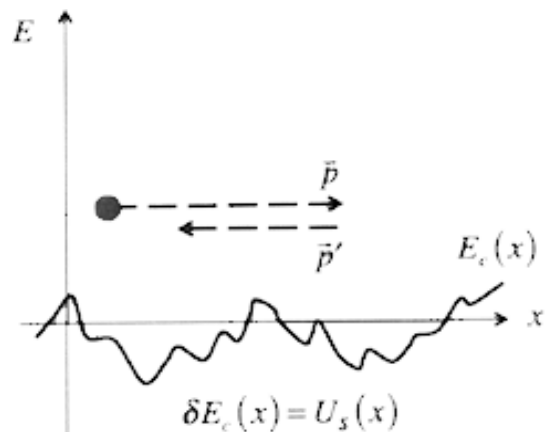


Рис. 3. Флуктуирующий потенциал, создаваемый случайно расположенными зарядами

Для некоторых механизмов рассеяния время рассеяния можно записать в виде степенного закона

$$\tau(E) = \tau_0 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^s, \quad (6)$$

в котором показатель степени разный для различных механизмов рассеяния. Так, для рассеяния на акустических фононах в 3D проводниках с параболической дисперсией $s = -1/2$, а для рассеяния на ионизированных примесях $s = +3/2$ [7].

Наша задача в этом обзоре лучше понять каким образом рассеяние влияет на среднюю длину свободного пробега и на коэффициент прохождения. Мы ожидаем, что длина свободного пробега будет пропорциональна произведению скорости носителя и времени рассеяния. Мы стали лучше понимать какие факторы влияют на время рассеяния. Прежде чем увязать между собой длину свободного пробега и время рассеяния, сначала рассмотрим как связаны друг с другом длина свободного пробега и коэффициент прохождения.

3. Коэффициент прохождения и средняя длина свободного пробега

Связь этих двух важнейших характеристик диффузионного транспорта проще всего проиллюстрировать на примере электронного транспорта по 1D проводнику в диффузионном режиме (рис. 4).

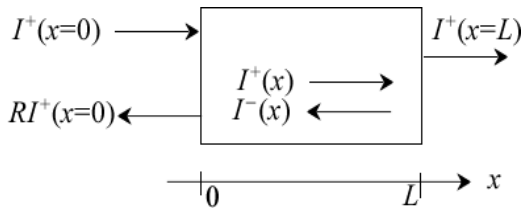


Рис. 4. К выводу связи между коэффициентом прохождения и средней длиной свободного пробега на примере однородного 1D проводника

Рассмотрим однородный 1D проводник в диффузионном режиме. Левый контакт впрыскивает электроны с током $I^+(x=0)$. Доля электронов T войдет в правый контакт с током $I^+(x=L) = T I^+(x=0)$. Оставшаяся доля вернется в левый контакт (рассеяние назад) с током $I^-(x=0) = R I^+(x=0)$. В отсутствие процессов рекомбинации $T + R = 1$. Предполагается также, что правый контакт идеальный, поглощает все входящие в него электроны. Результирующий ток, очевидно, будет $I = (1 - R) I^+(0) = T I^+(0)$. Так или иначе, в проводнике имеют место как прямые, так и обратные потоки электронов, и нам необходимо описать их пространственное распределение.

Определим обратное значение средней длины свободного пробега $1/\lambda$ как вероятность (на единицу длины) обращения положительного потока электронов в отрицательный и наоборот. Именно исходя из этого определения, величину λ и называют средней длиной свободного обратного рассеяния (mean-free-pass for backscattering) или проще средней длиной свободного

пробега. В диффузионном проводнике некоторая доля положительного потока в результате рассеяния назад обращается в отрицательный. В проводнике формируется отрицательный поток и его некоторая доля в результате рассеяния назад обращается, усиливая положительный поток. В результате градиент положительного тока складывается из двух величин:

$$\frac{dI^+(x)}{dx} = -\frac{I^+(x)}{\lambda} + \frac{I^-(x)}{\lambda}. \quad (7)$$

Пренебрегая процессами рекомбинации, результирующий ток

$$I = I^+(x) - I^-(x) \quad (8)$$

является постоянной величиной, так что градиент тока

$$\frac{dI^+(x)}{dx} = -\frac{I}{\lambda} \quad (9)$$

является константой. Другими словами, ток спадает линейно вдоль проводника:

$$I^+(x) = I^+(0) - \frac{I}{\lambda} x. \quad (10)$$

Воспользуемся полученным уравнением для вычисления тока, входящего в правый контакт:

$$\begin{aligned} I^+(L) &= I^+(0) - \frac{I}{\lambda} L = \\ &= I^+(0) - \left[I^+(L) - I^-(L) \right] \frac{L}{\lambda} = I^+(0) - I^+(L) \frac{L}{\lambda}, \end{aligned} \quad (11)$$

где мы воспользовались уравнением баланса (8) и тем, что правый контакт идеальный ($I^-(L) = 0$). Из последнего равенства находим

$$I^+(L) = \frac{\lambda}{\lambda + L} I^+(0) = T I^+(0), \quad (12)$$

Если провести аналогичные рассуждения для впрыскивания электронов правым контактом, то получим аналогичное уравнение для электронов, входящих в левый контакт, а именно: $I^-(0) = T' I^-(L)$. Для однородного проводника $T' = T$. Проводник под напряжением не является однородным, но нас интересует режим линейного отклика, так что вполне приемлемо положить $T' \approx T$. Окончательно, в предположении независимости друг от друга мод проводимости получаем искомое уравнение (1), связывающее коэффициент прохождения со средней длиной свободного пробега:

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

Вывод этого уравнения сделан в рамках простой модели, что никак не мешает успешному и широкому использованию его на практике. Важным моментом в проведенных рассуждениях является интерпретация $1/\lambda$ как вероятности (на единицу длины) обращения потока частиц в обратном направлении в результате рассеяния. Именно поэтому саму

длину λ , как уже упоминалось, часто называют средней длиной свободного рассеяния назад.

4. Средняя длина свободного пробега и время рассеяния

Установим связь между λ и временем рассеяния τ_m . Пусть электрон совершает акт рассеяния в изотропном 1D проводнике. У него есть две возможности: рассеяться вперед и рассеяться назад. Только рассеяние назад существенно для определения средней длины свободного пробега. Отсюда следует, что средняя длина рассеяния назад равна удвоенному значению средней длины рассеяния:

$$\lambda_{1D}(E) = 2\Lambda(E) = 2v(E)\tau_m(E).$$

Для проводника произвольной размерности средняя длина рассеяния назад дается выражением [10]

$$\lambda(E) = 2 \frac{\langle v_x^2 \tau_m \rangle}{\langle |v_x| \rangle},$$

где усреднение для 2D и 3D проводников ведется по углам. Для изотропных проводников

$$\lambda_{2D}(E) = \frac{\pi}{2} v(E) \tau_m(E), \tag{13}$$

$$\lambda_{3D}(E) = \frac{4}{3} v(E) \tau_m(E).$$

Аналогичный (6) степенной закон часто используется для средней длины рассеяния:

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r. \tag{14}$$

Для параболической зонной структуры $v(E) \propto E^{1/2}$, так что $r = s + 1/2$, где s – показатель степени в степенном законе (6) для времени рассеяния. Для акустических фононов $r = 0$, а для рассеяния на ионизированных примесях $r = 2$.

5. Оценка усредненного значения средней длины свободного пробега из экспериментальных измерений

Для 2D проводника в диффузионном режиме [11]

$$G_{2D}^{diff} = \frac{1}{\rho_{2D}} \frac{W}{L} = \sigma_s \frac{W}{L}, \tag{15}$$

где поверхностная проводимость

$$\sigma_s = \frac{2q^2}{h} \int M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \tag{16}$$

или иначе

$$\sigma_s = \frac{2q^2}{h} \langle M_{2D} \rangle \langle \lambda \rangle, \tag{17}$$

где

$$\langle M_{2D} \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} M_{2D}(kT) \mathfrak{S}_{-1/2}(\eta_F) \tag{18}$$

выражается через интеграл Ферми-Дирака с $\eta_F = (E_F - E_C) / kT$, а усредненное значение длины свободного пробега [11]

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{\int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} = \frac{\langle M \lambda \rangle}{\langle M \rangle}. \tag{19}$$

Измерив экспериментально поверхностную проводимость (17), мы хотим вычислить $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ из (17), а именно:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{\sigma_s}{(2q^2/h) \langle M_{2D} \rangle}. \tag{20}$$

Для вычисления $\langle M_{2D} \rangle$ согласно (18) нужно знать η_F или иначе положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости. Измерения одной проводимости недостаточно, нужно еще измерить поверхностную плотность электронов [11]

$$n_s = g_v \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \mathfrak{S}_0(\eta_F) = N_{2D} \mathfrak{S}_0(\eta_F), \tag{21}$$

откуда вычислить η_F , далее $\langle M_{2D} \rangle$ по (18) и, наконец, $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ по (20).

Для невырожденных проводников ситуация упрощается, поскольку в этом случае интегралы Ферми-Дирака сводятся к экспонентам и усредненное значение длины свободного пробега можно сразу записать в явном виде через измеряемые поверхностные проводимость и плотность

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{2(kT/q)}{qv_T} \left(\frac{\sigma_s}{n_s} \right),$$

где v_T есть однонаправленная термическая скорость электронов [11]

$$v_T = \sqrt{2kT/\pi m^*}. \tag{22}$$

Часто, однако, измеряются коэффициент диффузии и подвижность, так что нам нужно увязать $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ с этими измеряемыми величинами.

6. Оценка длины свободного пробега из коэффициента диффузии

Вернемся к 1D проводнику на рис. 4. Предположим, что речь идет о транспорте электронов в диффузионном режиме и вычислим ток. На левом конце ($x = 0$) число электронов, движущихся в направлении $+x$, есть $n^+(0) = I^+(0) / \langle v_x^+ \rangle$, где $\langle v_x^+ \rangle$ есть средняя скорость в направлении $+x$. В режиме квазиравновесного транспорта $\langle v_x^- \rangle \approx \langle v_x^+ \rangle$, так что $n^-(0) = I^-(0) / \langle v_x^+ \rangle$. Суммарная плотность электронов

$$n(0) = \frac{(1+R)I^+(0)}{\langle v_x^+ \rangle} = \frac{(2-T)I^+(0)}{\langle v_x^+ \rangle}. \tag{23}$$

На правом конце проводника $n^+(L) = I^+(L) / \langle v_x^+ \rangle$, а $n^-(L) = 0$, поскольку электроны не впрыскиваются с правого контакта. Суммарная плотность электронов на правом контакте

$$n(L) = \frac{I^+(L)}{\langle v_x^+ \rangle} = \frac{TI^+(0)}{\langle v_x^+ \rangle}, \quad (24)$$

и она меньше, чем на левом контакте:

$$n(0) - n(L) = 2(1-T) \frac{I^+(0)}{\langle v_x^+ \rangle}. \quad (25)$$

Воспользуемся выражением для суммарного тока $I = TI^+(0)$ и найдем его, опираясь на ур-е (25). В результате получим

$$I = \frac{\langle v_x^+ \rangle}{2} \frac{TL}{1-T} \times \left[\frac{n(0) - n(L)}{L} \right] = - \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2} \times \frac{dn(x)}{dx}. \quad (26)$$

Поскольку коэффициент диффузии в нашем случае [11]

$$\bar{D} = \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2}, \quad (27)$$

то в итоге мы получаем хорошо известный закон диффузии Фика

$$I = -\bar{D} \times \frac{dn}{dx}. \quad (28)$$

Этот результат может показаться удивительным, поскольку принято считать, что диффузионный закон Фика выполняется на расстояниях, намного превышающих среднюю длину свободного пробега. Однако, подобного допущения не делалось при выводе ур-я (28). В этой связи еще Шокли [12] заметил, что закон Фика не ограничен большими расстояниями, он применим и для описания баллистического и квазibalлистического транспорта, нужно лишь аккуратно учитывать граничные условия.

Поскольку при выводе использовался 1D проводник, то ток в (28) соответствует одной моде с энергией E . При наличии многих каналов проводимости полный ток получается интегрированием по всем модам, так что полученный таким образом коэффициент диффузии будет соответствовать усредненной по энергии длине свободного пробега.

Простая ситуация имеет место в невырожденных проводниках со средней длиной свободного пробега λ_0 , не зависящей от энергии. В этом случае коэффициент диффузии зависит от термической скорости (22)

$$\bar{D} = \frac{v_T \lambda_0}{2}, \quad (29)$$

что открывает простую возможность оценить длину свободного пробега из коэффициента диффузии.

7. Связь длины свободного пробега с подвижностью

И поныне часто измеряют подвижность, зная которую можно оценить среднюю длину свободного

пробега. Удельная поверхностная проводимость (16) может быть записана [11] как

$$\sigma_s = qn_s \mu, \quad (30)$$

уравнивая которую с (16), для подвижности получаем:

$$\mu \equiv \frac{\frac{2q}{h} \int M_{2D}(E) \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{n_s}, \quad (31)$$

и возьмем эту формулу, известную также как формула Кубо-Гринвуда, за определение подвижности.

Уравнение (31), используя (20) и (30), можно переписать в виде

$$\mu = \frac{1}{n_s} \frac{2q}{h} \langle \langle \lambda \rangle \rangle \langle M_{2D} \rangle. \quad (32)$$

Отсюда можно вычислить $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$, задавшись измеренными значениями подвижности и поверхностной плотности электронов, как и прежде для вычисления η_F и далее $\langle M_{2D} \rangle$ по (18), а именно:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{2kT\mu}{qv_T} \frac{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_{-1/2}(\eta_F)}. \quad (33)$$

Для невырожденных проводников последняя дробь равна единице, так что $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ легко вычисляется:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{2kT\mu}{qv_T}, \quad (34)$$

откуда для подвижности в невырожденных проводниках

$$\mu = \frac{v_T \langle \langle \lambda \rangle \rangle}{2} \times \frac{1}{kT/q}, \quad (35)$$

где первый множитель можно определить как коэффициент диффузии

$$\bar{D} = \frac{v_T \langle \langle \lambda \rangle \rangle}{2}, \quad (36)$$

откуда получается известное выражение Эйнштейна для невырожденных проводников

$$\frac{\bar{D}}{\mu} = \frac{kT}{q}. \quad (37)$$

8. Усредненная длина свободного пробега для степенного закона рассеяния

Из определения $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ по (19) с использованием степенного закона рассеяния (14) имеем:

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \lambda_0 \frac{\int \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}, \quad (38)$$

что сводится к интегралам Ферми-Дирака, а именно:

$$\langle\langle\lambda\rangle\rangle = \lambda_0 \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(3/2)} \times \frac{\mathfrak{F}_{r-1/2}(\eta_F)}{\mathfrak{F}_{1/2}(\eta_F)}. \quad (39)$$

Для невырожденных проводников последний множитель равен единице.

9. Подвижность при постоянном значении времени рассеяния

Вспользуемся предыдущим результатом и найдем подвижность для невырожденного проводника, характеризуемого постоянным значением времени рассеяния τ_0 . Из (35) с подстановкой (39) имеем:

$$\mu = \frac{v_T \lambda_0}{2} \frac{1}{kT/q} \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(3/2)}. \quad (40)$$

Для 2D проводника из (13)

$$\lambda(E) = \frac{\pi}{2} v(E) \tau_0 = \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2kT}{m^*}} \right) \tau_0 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^{1/2}, \quad (41)$$

откуда следует, что показатель степени в законе рассеяния $r = 1/2$ и

$$\lambda_0 = \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2kT}{m^*}} \right) \tau_0, \quad (42)$$

а после подстановки в (40) получаем ожидаемый результат:

$$\mu = \frac{q\tau_0}{m^*}. \quad (43)$$

10. Анализ экспериментальных данных для Si MOSFET

В качестве примера проведем анализ экспериментальных данных для полевого транзистора Si MOSFET в разных приближениях в рамках транспортной модели ЛДЛ [2]. Вольт-амперная характеристика (ВАХ) Si MOSFET с длиной канала проводимости 60 нм приведена на рис. 5.

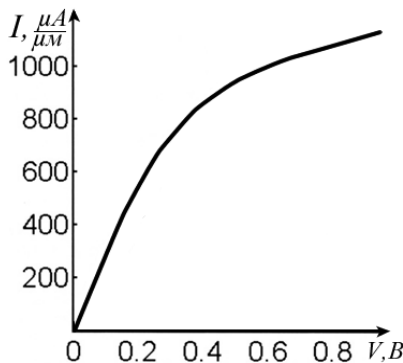


Рис. 5. Вольт-амперная характеристика Si MOSFET при $V_G = 1.2 \text{ В}$ [13]

Для интересующего нас линейного участка ВАХ измеренные значения при комнатной температуре

$$n_s \approx 6.7 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$$

$$R \approx 215 \text{ Ом} \cdot \mu\text{м}; \quad (44)$$

$$\mu \approx 260 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}.$$

Зададим себе два вопроса:

- 1) Сколько мод проводимости обеспечивают ток?
- 2) Насколько измеренное сопротивление близко к баллистическому пределу?

Сначала вспомним, что у кристаллического Si долинное вырождение минимумов эллипсоидальной формы равно шести [14]. В нашем образце квантовые ограничения снимают вырождение до $g_v = 2$ с $m^* = m_t = 0.19m_0$ [15, 16]. Ответить на интересующие нас вопросы можно с разной степенью достоверности. Для упрощения вычислений можно воспользоваться простой моделью при $T = 0^\circ \text{ К}$ [11], что, конечно, может быть недостаточно удовлетворительным, особенно для комнатной температуры. Далее, можно предположить максвелл-болцмановскую статистику для носителей тока (невырожденные проводники), выкладки в этом случае также не вызовут затруднений, однако, выше порогового напряжения допущение невырожденности также неудовлетворительно. Наконец, отказаться от каких-либо допущений и добросовестно просчитать интегралы Ферми-Дирака.

Пойдем самым простым путем, что, по крайней мере, даст нам возможность почувствовать числа. В модели $T = 0^\circ \text{ К}$ плотность числа мод $M_{2D}(E_F) \approx 150 \mu \text{ м}^{-1}$. Для наименьшего по размерам из изученных транзисторов [13] $W/L = 2$, а с учетом $L = 60 \text{ нм}$ для числа мод, обеспечивающих ток, получаем $M_{2D}(E_F) \approx 18$. Это весьма небольшое число мод.

Баллистический предел находим из выражения (8) в [11]: $R_{2D}^{ball} \approx 90 \text{ Ом} \cdot \mu\text{м}$, что примерно в два раза меньше измеренного сопротивления (44). Теперь можем получить оценку длины свободного пробега из формулы (35) в [11]: $\lambda(E_F) \approx 40 \text{ нм}$. Более тщательный анализ предполагает использование максвелл-болцмановской модели, а еще точнее – вычисление интегралов Ферми-Дирака с учетом заселенности подзон. Однако, так или иначе уже ясно, что современные Si MOSFET работают в квазibalлистическом режиме, а не в баллистическом или чисто диффузионном режиме.

Далее обратимся к оценке баллистической подвижности нашего образца Si MOSFET. Измеренная подвижность (44) относится к достаточно протяженному проводнику и традиционно является диффузионной. Чтобы оценить баллистическую подвижность опять обратимся к простейшей модели $T = 0^\circ \text{ К}$, в рамках которой уравнение (52) работы [11] можно переписать следующим образом

$$\mu_{2D}^{ball} = \frac{2q}{h} L \sqrt{2g_v / \pi n_s}. \quad (45)$$

Подставляя все известные величины, находим $\mu \approx 1200 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$, что в несколько раз превышает

диффузионную подвижность. Кажущаяся подвижность, согласно уравнению (47) из [11], будет несколько меньше подвижности нашего образца за счет баллистической подвижности. К приведенным оценкам нельзя относиться слишком строго из-за явной недостаточности модели $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$.

Подвижность (44) была измерена при комнатной температуре. Уточним модель $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$, перейдя к максвелл-большцмановской для невырожденных проводников. Из соотношения Эйнштейна (37) найдем коэффициент диффузии

$$\bar{D} = \frac{kT}{q} \mu = 6.7 \text{ см}^2/\text{с}. \quad (46)$$

Теперь можно вычислить усредненную длину свободного пробега $\langle\langle\lambda\rangle\rangle$ по (36). Для этого нужно оценить термическую скорость v_T (22), что в свою очередь требует знания эффективной массы. Для электронов в инверсионном слое (100) Si, когда заселена только лишь одна подзона зоны проводимости, $m^* = m_i = 0.19m_0$ [16], откуда $v_T = 1.2 \times 10^7 \text{ см/с}$ и далее

$$\langle\langle\lambda\rangle\rangle_{MB} \approx 11 \text{ нм}. \quad (47)$$

Еще более точный результат можно получить перейдя к статистике Ферми-Дирака. Из (33) следует

$$\langle\langle\lambda\rangle\rangle = \langle\langle\lambda\rangle\rangle_{MB} \times \frac{\mathfrak{F}_0(\eta_F)}{\mathfrak{F}_{-1/2}(\eta_F)}. \quad (48)$$

Значение η_F находим через известную измеренную поверхностную плотность

$$n_s = N_{2D} \mathfrak{F}_0(\eta_F) = \left(g_v \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \right) \mathfrak{F}_0(\eta_F). \quad (49)$$

Для электронов в первой подзоне инверсионного слоя (100) Si $g_v = 2$, так что $N_{2D} = 4.1 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Интеграл Ферми-Дирака вычисляется аналитически

$$\mathfrak{F}_0(\eta_F) = \ln(1 + e^{\eta_F}), \quad (50)$$

так что

$$\eta_F = \ln(e^{n_s/N_{2D}} - 1) = 1.42. \quad (51)$$

Окончательно

$$\langle\langle\lambda\rangle\rangle_{FD} = 11 \times \frac{\mathfrak{F}_0(1.42)}{\mathfrak{F}_{-1/2}(1.42)} \approx 15 \text{ нм}, \quad (52)$$

что и является наилучшей из возможных оценок для рассматриваемого транзистора длиной 60 нм. Длина этого транзистора не может считаться слишком большой по сравнению с длиной свободного пробега, так что физически корректно считать, что этот транзистор работает в квазibalлистическом режиме.

Подведем итоги. Основное внимание в этом обзоре уделено понятию длины свободного пробега

λ как длины рассеяния назад и ее связи с коэффициентом прохождения. Установлена связь между λ и временем импульсной релаксации для проводников разной размерности. Показано как вычислить усредненное значение λ из экспериментальных измерений: через коэффициент диффузии или через подвижность. В качестве примера анализируются экспериментальные данные для Si MOSFET с привлечением моделей различной достоверности.

В основу настоящего обзора положены лекции Марка Лундстрема «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications» [1] и Суприе Датты «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» [2], прочитанных в 2011–2012 годах в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u], а также наши статьи [17, 18].

10. Благодарности

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

Литература

1. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport [Electronic resource] / Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. – 473 p. – Available at: www.nanohub.org/courses/FoN1
2. Lundstrom, M. Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications [Electronic resource] / M. Lundstrom, J. Changwook. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. – 227 p. – Available at: www.nanohub.org/resources/11763
3. Kruglyak, Yu. A. Обобщенная модель электронного транспорта Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Yu. A. Kruglyak // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2013. – Vol. 11, Issue 3. – P. 519–549. Erratum: ibid, 2014. – Vol. 12, Issue 2. – P. 415.
4. Кругляк, Ю. А. Перенос тепла фононами в транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 2, № 2 (7). – С. 81–93. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332
5. 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
6. Landauer, R. Electrical resistance of disordered onedimensional lattices [Text] / R. Landauer // Philosophical Magazine. – 1970. – Vol. 21, Issue 172. – P. 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472
7. Lundstrom, M. Fundamentals of Carrier Transport, 2nd Ed. [Text] / M. Lundstrom. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. – 418 p. doi: 10.1017/cbo9780511618611
8. Dirac, P. A. M. The Quantum Theory of Emission and Absorption of Radiation [Text] / P. A. M. Dirac // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1927. – Vol. 114, Issue 767. – P. 243–265. doi: 10.1098/rspa.1927.0039
9. Fermi, E. Nuclear Physics [Text] / E. Fermi. – University of Chicago Press, 1950
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
11. 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.

12. Shockley, W. Diffusion and Drift of Minority Carriers in Semiconductors for Comparable Capture and Scattering Mean Free Paths [Text] / W. Shockley // Physical Review. – 1962. – Vol. 125, Issue 5. – P. 1570–1576. doi: 10.1103/physrev.125.1570

13. Jeong, C. On backscattering and mobility in nanoscale silicon MOSFETs [Text] / C. Jeong, D. A. Antoniadis, M. S. Lundstrom // IEEE Trans. Electron Dev. – 2009. – Vol. 56, Issue 11. – P. 2762–2769. doi: 10.1109/ted.2009.2030844

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

15. Lundstrom, M. ECE 612: Nanoscale Transistors. Lecture 4 [Electronic resource] / M. Lundstrom. – Polysilicon Gates/QM Effects, 2008. – Available at: www.nanohub.org/resources/5364

16. Taur, Y. Fundamentals of Modern VLSI Devices, 2nd Ed. [Text] / Y. Taur, T. Ning. – Cambridge univ. Press, Cambridge, UK, 2009.

17. 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

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

References

1. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport (2012). Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 473. Available at: www.nanohub.org/courses/FoNI

2. Lundstrom, M., Jeong, C. (2013). Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 227. Available at: www.nanohub.org/resources/11763

3. Kruglyak, Yu. A. (2013). The Generalized Landauer – Datta – Lundstrom Electron Transport Model. Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, 11 (3), 519–549. Erratum: *ibid.*, (2014). 12 (2), 415.

4. Kruglyak, Yu. A. Heat transfer by phonons in Landauer-Datta-Lundstrom transport model, ScienceRise. – 2015. – Т. 2, № 2 (7). – С. 81–93. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332

5. 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

6. Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. Philosophical Magazine, 21 (172), 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472

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

8. Dirac, P. A. M. (1927). The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 114 (767), 243–265. doi: 10.1098/rspa.1927.0039

9. Fermi, E. (1950). Nuclear Physics. University of Chicago Press.

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

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

12. Shockley, W. (1962). Diffusion and Drift of Minority Carriers in Semiconductors for Comparable Capture and Scattering Mean Free Paths. Physical Review, 125 (5), 1570–1576. doi: 10.1103/physrev.125.1570

13. Jeong, C., Antoniadis, D. A., Lundstrom, M. S. (2009). On Backscattering and Mobility in Nanoscale Silicon MOSFETs. IEEE Transactions on Electron Devices, 56 (11), 2762–2769. doi: 10.1109/ted.2009.2030844

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

15. Lundstrom, M. (2008). ECE 612: Nanoscale Transistors. Lecture 4. Polysilicon Gates. QM Effects. Available at: www.nanohub.org/resources/5364

16. Taur, Y., Ning, T. (2009). Fundamentals of Modern VLSI Devices, 2nd Ed., Cambridge univ. Press, Cambridge, UK.

17. Kruglyak, Yu. Landauer-Datta-Lundstrom (2014). Generalized Transport Model for Nanoelectronics, Journal of Nanoscience, 725420, 15. doi: 10.1155/2014/725420

18. Kruglyak, Yu. A. (2014). A Generalized Landauer-Datta-Lundstrom Electron Transport Model, Russian Journal of Physical Chemistry, 88 (11), 1826–1836.

*Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О.В.
Дата надходження рукопису 21.02.2015*

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