

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

Ю.А.Кругляк, д.х.н.

Одесский государственный экологический университет

Н.Е.Кругляк, к.х.н.

Одесский национальный университет им. И.И.Мечникова

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ.3. ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И МОДЫ ПРОВОДИМОСТИ В КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ»

В рамках концепции «снизу – вверх» современной нанoeлектроники рассматриваются общие вопросы электронной проводимости, моды проводимости, проводники n-и p-типа и графен.

Ключевые слова: нанoeлектроника, молекулярная электроника, снизу-вверх, электронная проводимость, моды проводимости, проводники n-типа, проводники p-типа, графен.

Введение. Стандартное выражение для удельной проводимости дается формулой Друде [1], связывающей проводимость σ с электронной плотностью n , эффективной массой m и временем свободного пробега τ

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

или используя понятие мобильности

$$\bar{\mu} = \frac{q\tau}{m}, \quad (2)$$

имеем

$$\sigma = qn\bar{\mu}. \quad (3)$$

С другой стороны, для удельной проводимости в рамках концепции «снизу – вверх» получаются [2, 3] следующих два эквивалентных выражения для проводимости, одно из которых выражает проводимость через произведение плотности состояний D и коэффициента диффузии \bar{D}

$$\sigma(E) = q^2 \bar{D} \frac{D}{L} \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (4)$$

а другое – через произведение числа мод M в канале проводимости и средней длины пробега λ

$$\sigma(E) = \frac{q^2}{h} M \lambda \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (5)$$

где A – площадь поперечного сечения 3d-проводника, W – ширина 2d-проводника, L – длина проводника.

Как и проводимость [3]

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

удельную проводимость по уравнениям (4) и (5) нужно усреднить по энергии в области нескольких kT , включающей $E = \mu_0$ с помощью функции теплового уширения

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sigma(E). \quad (6)$$

Уравнение (4) хорошо известно, выводится в стандартных учебниках по физике твердого тела [1], чего нельзя сказать об эквивалентном ему уравнению (5), вывод которого обычно требует использования статистической термодинамики необратимых процессов, например, формализма Кубо [4, 5].

По поводу модели Друде хотелось бы подчеркнуть следующее. Применимость модели Друде весьма ограничена, в то время как уравнения для проводимости (4) и (5) имеют самое общее значение. Например, эти уравнения применимы к графену [6, 7] с непараболическим поведением зон и «безмассовыми» электронами – свойствами, описание которых невозможно в модели Друде. Один из уроков, преподнесенных наноэлектроникой, – широкая применимость уравнений для проводимости (4) и (5).

Фундаментальное различие между уравнениями (4) и (5) и теорией Друде состоит в том, что усреднение (6) делает проводимость свойством фермиевской поверхности: проводимость определяется уровнями энергии, близкими к $E = \mu_0$. А согласно уравнениям (1) – (3) теории Друде проводимость зависит от общей электронной плотности, суммированной по всему спектру энергий, что и приводит к ограниченной применимости модели Друде. Проводимость веществ меняется в очень широких пределах несмотря на то, что число электронов приблизительно одинаково. Низкая проводимость стекла объясняется не тем, что в стекле мало так называемых «свободных» электронов, а потому, что для стекла характерна очень низкая плотность состояний и числа мод [2] вблизи $E = \mu_0$. Понятие же «свободных» электронов относится к интуитивным понятиям.

Для произвольных проводников, как с кристаллической структурой, так и аморфных, так и для молекулярных проводников, следуя [2], покажем, что независимо от функциональной зависимости $E(p)$ плотность состояний $D(E)$, скорость $v(E)$ и импульс $p(E)$ связаны с числом электронных состояний $N(E)$ с энергией, меньшей значения E , соотношением

$$D(E)v(E)p(E) = N(E) \cdot d, \quad (7)$$

где d – размерность проводника. Используя (7) для вычисления проводимости (4) с учетом коэффициента диффузии [3]

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle.$$

для 3d-проводника получим

$$\sigma(E) = q^2 \frac{N(E) \tau(E)}{A \cdot L m(E)}. \quad (8)$$

где масса определена как

$$m(E) = \frac{p(E)}{v(E)}. \quad (9)$$

Легко убедиться, что фундаментальное соотношение (7) справедливо и для параболической зависимости $E(p)$ и для линейной, как в графене [7]. Для параболической зависимости масса носителя тока от энергии не зависит, что в общем случае не так.

Формула (8) выглядит как выражение (1) теории Друде, если $N/A \cdot L$ считать электронной плотностью n . При низких температурах это действительно так, поскольку усреднение (6) при $E = \mu_0$ дает

$$\sigma = \left(q^2 \frac{N \tau}{A \cdot L m} \right)_{E=\mu_0} = q^2 n \tau / m, \quad (10)$$

так как $N(E)$ при $E = \mu_0$ есть полное число электронов (рис. 1). При ненулевой температуре ситуация тем более сложнее, если плотность состояний непараболическая. Отметим, что ключевым моментом в сведении общего выражения для проводимости (4) к выражению (8), похожему на формулу Друде (1), есть фундаментальное выражение (7), связывающее плотность состояний $D(E)$, скорость $v(E)$ и импульс $p(E)$

для данного значения энергии с полным числом состояний $N(E)$, полученных интегрирование плотности

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dE D(E). \quad (11)$$

Каким образом полное число состояний $N(E)$ по (11) может быть однозначно связано с плотностью состояний $D(E)$, скоростью $v(E)$ и импульсом $p(E)$ для конкретного значения энергии? Ответ состоит в том, что уравнение (7) удовлетворяется только в том случае, когда уровни энергии вычисляются однозначно из выражения для $E(p)$. Оно может не выполняться в области энергий перекрывающихся зон или, например, для аморфных тел,

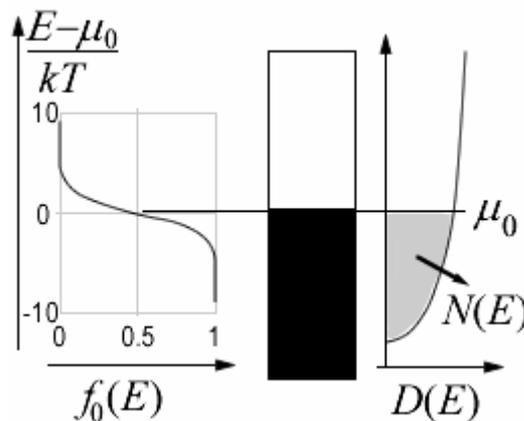


Рис. 1 – Равновесная функция Ферми $f_0(E)$. Плотность состояний $D(E)$ и полное число электронов $N(E)$.

когда не известна зависимость $E(p)$. В этих случаях уравнения (4) и (5) не эквивалентны уравнению (8) и пользоваться можно только первыми.

Теперь посмотрим, как одиночные зоны, описываемые различными соотношениями $E(p)$ приводят к фундаментальному уравнению (7) и таким образом откроется возможность установления связи между выражениями для проводимости (4) – (5) и формулами Друде (1) – (3). Это приведет также к новой интерпретации мод $M(E)$, введенных в [3], и к объяснению их целочисленности.

Соотношения $E(p)$ для кристаллических твердых тел. Пусть стандартно связь энергии с импульсом параболическая (рис. 2)

$$E(p) = E_c + \frac{p^2}{2m}, \quad (12)$$

где под m подразумевается эффективная масса. Будем пользоваться соотношениями $E(p)$ вместо $E(k)$, хотя всегда можно перейти к волновому вектору $k = p/\hbar$. Дисперсия (12) широко используется для различных веществ – и для металлов и для полупроводников. Но это не единственная возможность. Для графена [6, 7], использование которого в нанoeлектронике, как ожидается, приведет к следующему шагу в миниатюризации, имеет место линейная зависимость от импульса (рис. 3)

$$E = E_c + v_0 p, \quad (13)$$

где v_0 – константа, равная приблизительно 1/300 от скорости света. Здесь и ранее под импульсом p подразумевается его абсолютное значение. Другими словами, подразумевается, что зависимость $E(p)$ изотропная.

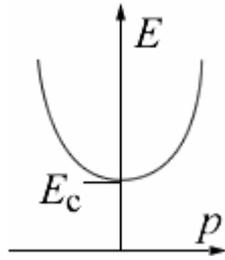


Рис. 2 – Параболическая дисперсия.

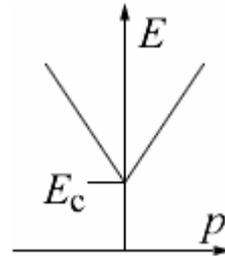


Рис. 3 – Линейная дисперсия.

Для изотропных $E(p)$ скорость сонаправлена с импульсом, а величина ее равна

$$v \equiv \frac{dE}{dp}. \quad (14)$$

К подсчету числа состояний. На длине резистора L должно укладываться целое число де-бройлевских волн с длиной $\lambda = h/p$

$$\frac{L}{h/p} = \text{целому числу или } p = \text{целое число} \cdot (h/L).$$

Это означает, что разрешенные состояния однородно распределены для данного значения p и каждое из состояний занимает промежуток

$$\Delta p = \frac{h}{L}. \quad (15)$$

Определим функцию $N(p)$ как полное число состояний со значениями импульса, меньшими, чем заданное значение p . Для одномерных проводников 1d (рис. 4)

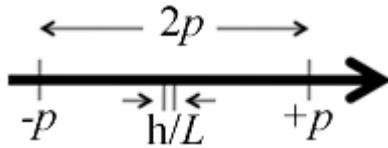


Рис. 4 – К подсчету числа состояний для 1d-проводника.

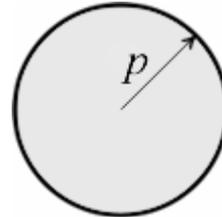


Рис. 5 – К подсчету числа состояний для 2d-проводника.

эта функция равна отношению доступной длины $2p$ (от $-p$ до $+p$) к промежутку Δp

$$N(p) = \frac{2p}{h/L} = 2L \left(\frac{p}{h} \right). \quad (16)$$

Для 2d-проводников (рис. 5) нужно разделить площадь поперечного сечения πp^2 на промежутки по длине h/L и по площади поперечного сечения h/W , так что окончательно

$$N(p) = \frac{\pi p^2}{(h/L)(h/W)} = \pi W \cdot L \left(\frac{p}{h} \right)^2. \quad (17)$$

Для 3d-проводников объем сферы радиуса p делится на произведение промежутков $(h/L) \cdot (h/W_1) \cdot (h/W_2)$, где площадь поперечного сечения $A = W_1 \cdot W_2$, так что окончательно

$$N(p) = \frac{(4p/3)p^3}{(h/L)(h^2/A)} = \frac{4p}{3} A \cdot L \left(\frac{p}{h}\right)^3, \quad (18)$$

или собирая все вместе для $d = \{1, 2, 3\}$ имеем

$$N(p) = \left\{ 2 \frac{L}{h/p}, \quad p \frac{L \cdot W}{(h/p)^2}, \quad \frac{4p}{3} \frac{L \cdot A}{(h/p)^3} \right\}. \quad (19)$$

Задавшись законом дисперсии $E(p)$, теперь можно посчитать зависимость числа состояний $N(E)$ с энергией, меньшей заданного значения E .

Плотность состояний $D(E)$. Полученная таким образом функция числа состояний $N(E)$ должна быть равна плотности состояний $D(E)$, проинтегрированной вплоть до энергии состояний E

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dE D(E),$$

так что плотность состояний

$$D(E) = \frac{dN}{dE}, \quad (20)$$

а с использованием ур-я (19) получается

$$D(E) = \frac{dN}{dp} \frac{dp}{dE} = \frac{dp}{dE} \frac{p^{d-1}}{h^d} \left\{ 2L, \pi LW, \frac{4}{3} \pi LA \right\}. \quad (21)$$

Воспользовавшись (14) и (19), окончательно получим искомое общее уравнение (7), независимое от закона дисперсии.

Формула Друде. Как уже было показано, используя (7) для вычисления проводимости (4) для 3d-проводника получаем выражение (8), в котором зависящая от энергии масса определена уравнением (9). Также было показано, что ур-е (8) сводится к формуле Друде (1) при температурах, близких к нулю. Теперь рассмотрим проводники n-типа и p-типа отдельно при температурах, отличных от нуля.

Проводники n-типа. Используя уравнение (8) и предполагая в нем независимость от энергии массы m и времени τ , получим

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{1}{A \cdot L} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E). \quad (22)$$

Интегрируя по частям, получим

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) &= \left[-N(E) f_0(E) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E) \\ &= [0 - 0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E) f_0(E) = \text{полному числу электронов,} \end{aligned} \quad (23)$$

поскольку произведение $dE \cdot D(E) \cdot f_0(E)$ есть число электронов в области энергий от E до $E + dE$. Таким образом, уравнение (22) сводится к формуле Друде

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{N}{A \cdot L}, \quad (24)$$

имея в виду, что $N/A \cdot L = n$.

Проводники р-типа. Любопытная ситуация имеет место для р-проводников с ниспадающей дисперсией, например,

$$E(p) = E_c - \frac{p^2}{2m}. \quad (25)$$

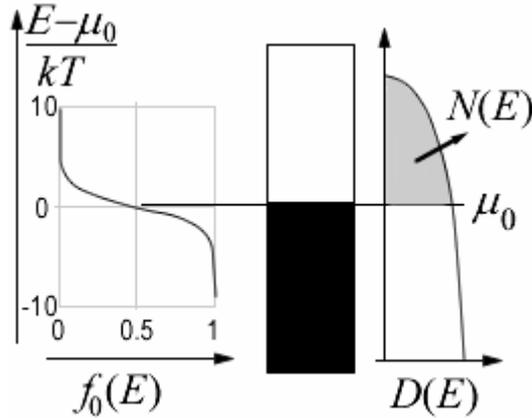


Рис. 6 – Равновесная функция Ферми $f_0(E)$, плотность состояний $D(E)$ и число состояний $N(E)$ для р-проводника с дисперсией (25).

Вместо числа состояний по (11) мы теперь имеем (рис. 6)

$$N(E) = \int_E^{+\infty} dE D(E), \quad (26)$$

что дает

$$D(E) = -\frac{dN}{dE}. \quad (27)$$

Так получается потому, что функция $N(E)$ определяется через функцию $N(p)$, которая дает полное число состояний с импульсом, меньшим заданного значения p , что соответствует энергиям, большим чем заданное значение E согласно дисперсионному соотношению (25).

Если, как и прежде, проинтегрировать по частям

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) = \left[-N(E) f_0(E) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E), \quad (28)$$

теперь первое слагаемое не зануляется, поскольку и $N(E)$ и $f_0(E)$ в нижнем пределе не нули.

Обойти эту ситуацию можно следующим образом: вместо производной от f_0 брать производную от $(1 - f_0)$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial(1-f_0)}{\partial E} \right) N(E) &= \left[-N(E)(1-f_0(E)) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} (1-f_0(E)) \\ &= [0-0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E)(1-f_0(E)) = \text{полному числу «дырок»}. \end{aligned} \quad (29)$$

Другими словами, для проводников р-типа можно пользоваться формулой Друде

$$\sigma = q^2 n \tau / m, \quad (30)$$

если под значением n понимать число «дырок»: большему значению n соответствует меньшее число электронов.

Графен. Как подсчитывать значение n в случае, когда зоны распространяются в обоих направлениях как в графене с дисперсией $E = \pm v_0 p$ [6, 7] (рис. 7 слева). Нельзя не признать изобретательным разбить зоны в графене на зону n-типа и зону p-типа (рис. 7 справа) так, что

$$D(E) = D_n(E) + D_p(E), \quad (31)$$

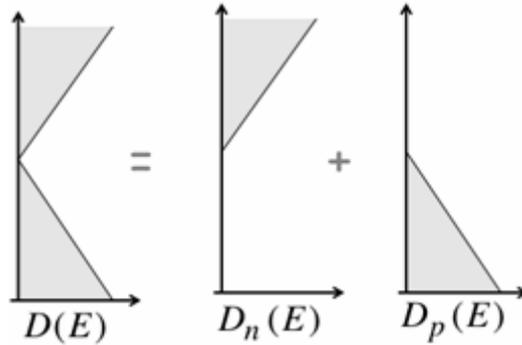


Рис. 7 – Искусственное разбиение зонной структуры графена на зоны n- и p-типа.

а затем пользоваться формулами Друде.

Хотелось бы подчеркнуть, что нет нужды для подобной изобретательности, поскольку уравнения (4) и (5) применимы во всех случаях и корректно отражают физику проводимости.

Пропорциональна ли проводимость электронной плотности?

Экспериментальные измерения проводимости часто ведутся в зависимости от электронной плотности, которые, согласно теории Друде, связаны линейно, так что отклонения от линейности трактуют как проявления зависимости времени свободного пробега от энергии. При этом не учитывают, что для непараболических дисперсий масса носителя тока, сама определяемая как p/v , может зависеть от энергии и тем самым приводить к нелинейности проводимости от плотности электронов.

Сначала определим электронную плотность из ур-я (19)

$$n(p) = \left\{ 2 \frac{p}{h}, p \frac{p^2}{h^2}, \frac{4p}{3} \frac{p^3}{h^3} \right\}, \quad (32)$$

где плотность n равна N/L , $N/W \cdot L$ и $N/A \cdot L$ для $d = 1, 2$ и 3 . Перепишем (32) в виде

$$n(p) = K p^d, \quad (33)$$

где коэффициент пропорциональности $K = \{2/h, \pi/h^2, 4\pi/3h^3\}$. Теперь для проводимости (10) с учетом (9) имеем

$$\sigma = q^2 \frac{n(p)\tau(p)}{m(p)} = q^2 K p^{d-1} v(p)\tau(p). \quad (34)$$

Если известна или выбрана зависимость скорости и времени свободного пробега от энергии, а стало быть и от импульса, в уравнениях (33) и (34) можно избавиться от зависимости от импульса и таким образом установить связь между проводимостью σ и электронной плотностью n .

Например, в случае графена $E = \pm v_0 p$, скорость dE/dp постоянна и равна v_0 , не зависит от импульса. Полагая время свободного пробега от энергии не зависящим, проводимость от плотности электронов из уравнений (33) и (34) с учетом ур-я (35)

из [3] для длины свободного пробега

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}} = v\tau \left\{ 2, \frac{\pi}{2}, \frac{4}{3} \right\}$$

получается следующей

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4n}{\pi}} \quad (35)$$

или с учетом g -фактора (для графена $g = 4$)

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4gn}{p}}. \quad (36)$$

Таким образом, проводимость в графене получается пропорциональной $\sim \sqrt{n}$, а не как обычно предполагается $\sim n$, и с временем свободного пробега, не зависящем от энергии. Вычисления по формуле (36) с $\lambda = 2 \mu\text{м}$ и $\lambda = 300 \text{ нм}$ (рис. 8) согласуются с экспериментальными данными [8].

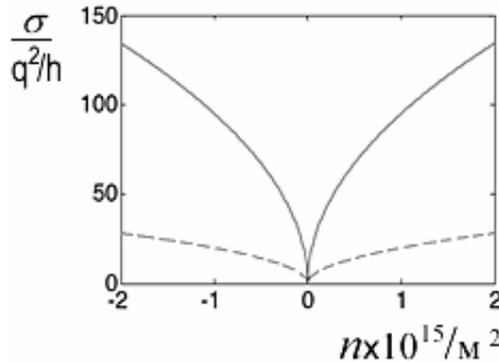


Рис. 8 – Проводимость графена по ур-ю (36) как функция электронной плотности для значений $\lambda = 2 \mu\text{м}$ (сплошная) и $\lambda = 300 \text{ нм}$ (пунктиром) согласуется с экспериментальными данными (рис. 1 в [8]).

Квантование проводимости и моды проводимости. Баллистическая проводимость квантуется [3]

$$G_B \equiv \frac{q^2}{h} M.$$

где для низкоразмерных проводников при низких температурах число M – целое. Там же в [3] получено выражение для числа мод

$$M \equiv \frac{\hbar D v}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{p}, \frac{1}{2} \right\} \quad (37)$$

через произведение плотности состояний D и скорости электронов v , и совершенно не очевидна целочисленность выражения (37). Пользуясь выражениями для дисперсии $E(p)$ оказывается возможным дать иную интерпретацию $M(p)$, свидетельствующую о целочисленной природе величины M .

Используя (7), перепишем (37) в виде

$$M = \frac{\hbar N}{2Lp} \left\{ 1, \frac{4}{p}, \frac{3}{2} \right\}, \quad (38)$$

где $N(p)$ есть полное число состояний с импульсом, меньшим заданного значения p .

С использованием (19) преобразуем (38) в

$$M(p) = \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, p \frac{A}{(h/p)^2} \right\}. \quad (39)$$

Так же как число состояний $N(p)$ дает нам число де-бройлевских длин волн, укладывающихся в проводнике, так и $M(p)$ дает нам число мод, укладывающихся в поперечном сечении проводника, причем это число не зависит от закона дисперсии, поскольку при выводе (39) нигде не использовался какой-либо конкретный закон дисперсии.

При оценке чисел $N(p)$ и $M(p)$ в конкретной задаче на практике получаются, конечно, дробные числа. Однако, по физическому смыслу эти числа должны быть целыми. В больших проводниках при низких температурах квантование $M(p)$ смазывается, однако, в мезо- и наноразмерных проводниках наблюдается целочисленная природа числа мод $M(p)$ и квантование проводимости. Поэтому (39) правильнее переписать в виде

$$M(p) = \text{Int} \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, p \frac{A}{(h/p)^2} \right\}, \quad (40)$$

где под $\text{Int}\{x\}$ подразумевается наибольшее целое число, меньшее значения x .

В одномерных проводниках число мод совпадает с g -фактором, равным числу долин, умноженным на вырождение по спину, равное 2. Сопротивление баллистических проводников $\sim M \cdot h/q^2$, так что сопротивление баллистического 1d-проводника приблизительно равно $25 K\Omega$, деленных на g , что и наблюдается экспериментально [9]: большинство металлов и полупроводников типа GaAs имеют $g = 2$ и баллистическое сопротивление 1d-образцов $\sim 12.5 K\Omega$, а углеродные нанотрубки двухдолинные с $g = 4$ и их баллистическое сопротивление $\sim 6.25 K\Omega$.

Настоящая работа явилась результатом посещения одним из нас (ЮАК) курса лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts», прочитанного он-лайн в январе – феврале 2012 года проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

Список литературы

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела, том 1. – М: Мир. – 1979. – 400 с.
2. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 340.
3. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Уроки нанoeлектроники: модель упругого резистора и новая формулировка закона Ома в концепции «снизу – вверх» // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2012, В. 14. – С. XXX – XXX.

4. *Sears F.W., Salinger G.L.* Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. – Boston: Addison-Wesley. – 1975. – pp. 331 – 336, 355 – 361.
5. *Kubo R.* Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes.I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // *J.Phys.Soc. Japan.* – 1957. – V. 12. – P. 570 – 586.
6. *Стрїха М.В.* Фізика графену: стан і перспективи // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2010. – Т. 1(7), N 3. – С. 5 – 13.
7. *Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е.* Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2012, В. 13. – С. 207 – 218.
8. *Bolotin K.I., Sikes K. J., Hone J., Kim P., Stormer H. L.* Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 101.– P. 096802.
9. *Mitin Vladimir V., Kochelap Viatcheslav A., Stroschio Michael A.* Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2012. – pp. 346.

**Уроки наноелектроніки 3. Електронна провідність і моди провідності в концепції «знизу – нагору»
Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю.**

В рамках концепції «знизу – нагору» сучасної наноелектроніки розглядаються загальні питання електронної провідності і моди провідності, провідники n- і p-типу та графен.

Ключові слова: *наноелектроніка, молекулярна електроніка, знизу – нагору, електронна провідність, моди провідності, провідники n-типу, провідники p-типу, графен.*

**Lessons of nanoelectronics. 3. Electronic conductivity and conductivity modes by «bottom – up»
approach. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E.**

General questions of electronic conductivity, conductivity modes, n- and p-type conductors and graphene are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics.

Keywords: *nanoelectronics, molecular electronics, bottom – up, electronic conductivity, conductivity modes, n-type conductor, p-type conductor, graphene.*

*Надійшла до редакції 12.03.2012
Прийнята до публікації 28.03.2013*