

PACS numbers: 72.10.-d, 72.20.Dp, 72.20.Fr, 73.23.-b, 73.63.-b, 85.35.-p

## Учёт рассеяния в обобщённой модели транспорта электронов в микро- и нанoeлектронике

Ю. А. Кругляк

*Одесский государственный экологический университет,  
ул. Львовская, 15,  
65016 Одесса, Украина*

При описании транспорта электронов по проводнику в диффузионном режиме важную роль играет средняя длина свободного обратного рассеяния  $\lambda$ , которая определяет коэффициент прохождения  $T$ . Для более глубокого понимания того, как средняя скорость электронов и среднее время рассеяния определяют величину  $\lambda$ , качественно рассматривается рассеяние носителей тока и тепла в транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма (ЛДЛ) по ходу изменения времён рассеяния в процессе столкновений. На примере 1D-проводника выводится базовое соотношение между коэффициентом прохождения  $T$  и средней длиной свободного пробега  $\lambda$ . Устанавливается связь между  $\lambda$  и временем импульсной релаксации  $\tau_m$  для проводников разной размерности. Дается оценка усреднённого значения длины свободного пробега из экспериментальных измерений через коэффициент диффузии и устанавливается связь длины свободного пробега с подвижностью. В качестве примера анализируются экспериментальные данные для полевого транзистора Si MOSFET в разных приближениях в рамках транспортной теории ЛДЛ с привлечением моделей различной достоверности. В ходе анализа ищется ответ на два вопроса: 1) сколько мод проводимости обеспечивают ток? и 2) насколько измеренное сопротивление близко к баллистическому пределу? Ответить на сформулированные вопросы можно с разной степенью достоверности. Для упрощения вычислений поначалу пользуемся простой моделью при  $T=0$  К, что, конечно, недостаточно удовлетворительно, особенно для комнатной температуры. Далее, предположим максвелл-больцмановскую статистику для носителей тока (невыврожденные проводники); выкладки в этом случае не вызывают затруднений, однако, выше порогового напряжения допущение невырожденности также неудовлетворительно. Наконец, откажемся от каких-либо допущений и добросовестно просчитаем интегралы Ферми–Дирака и для  $\langle\langle\lambda\rangle\rangle$  получим значение 15 нм, которое является наилучшим из возможных оценок для рассматриваемого резистора длиной 60 нм. Длина этого резистора не может считаться слишком большой по сравнению с длиной свободного пробега, так что фи-

зически коректно считать, что этот резистор работает в квазибаллистическом режиме.

При описі транспорту електронів по провіднику в дифузійному режимі важливу роль відіграє середня довжина вільного зворотнього розсіяння  $\lambda$ , яка визначає коефіцієнт проходження  $T$ . Для більш глибокого розуміння того, як середня швидкість електронів і середній час розсіяння визначають величину  $\lambda$ , якісно розглядається розсіяння носіїв струму та тепла у транспортному моделю Ландауера–Датти–Лундстрома (ЛДЛ) по ходу зміни часів розсіяння в процесі зіткнень. На прикладі 1D-провідника виводиться базове співвідношення між коефіцієнтом проходження і середньою довжиною вільного пробігу  $\lambda$ . Встановлюється зв'язок між  $\lambda$  і часом  $\tau_m$  імпульсної релаксації для провідників різної вимірності. Дається оцінка усередненого значення довжини вільного пробігу з експериментальних мірянь через коефіцієнт дифузії і встановлюється зв'язок довжини вільного пробігу з рухливістю. В якості прикладу аналізуються експериментальні дані для польового транзистора Si MOSFET в різних наближеннях у рамках транспортної теорії ЛДЛ із залученням моделей різної вірогідності. В ході аналізу шукається відповідь на два питання: 1) скільки мод провідності забезпечують струм? і 2) наскільки виміряний опір близький до балістичної границі? Відповіді на сформульовані запитання можна з різним ступенем вірогідності. Для спрощення обчислень спочатку користуємося простим модельом при  $T=0$  К, що, звичайно, є недостатньо задовільним, особливо для кімнатної температури. Далі, припустимо Максвелл–Больцманнову статистику для носіїв струму (невироджені провідники); розрахунки в цьому випадку не викликають труднощів, однак, вище порогової напруги припущення невірності також є незадовільним. Нарешті, відмовимося від будь-яких припущень і сумлінно прорахуємо інтеграли Фермі–Дірака і для  $\langle\langle\lambda\rangle\rangle$  одержимо значення у 15 нм, яке є найкращим з можливих оцінок для розглянутого резистора завдовжки у 60 нм. Довжина цього резистора не може вважатися надто великою порівняно з довжиною вільного пробігу, так що фізично коректно вважати, що цей резистор працює в квазибалістичному режимі.

When describing the transport of electrons through a conductor in the diffusion regime, an important role is played by the average mean free path  $\lambda$ , which determines the transmission coefficient  $T$ . For a deeper understanding of how the average electron velocity and average scattering time, which determine the magnitude of  $\lambda$ , both the scattering of current carriers and the heat transport are qualitatively described within the Landauer–Datta–Lundstrom (LDL) model in the course of change of scattering times in the process of collisions. The basic relationship between the transmission coefficient and the average mean free path is proved for 1D resistor as the simplest example. A connection is established between  $\lambda$  and the time  $\tau_m$  of momentum relaxation for conductors of different dimensions. There is given an estimation of the averaged values for the mean free path  $\lambda$  from experimental measurements using the diffusion coefficient, and the connection between the mean free path and mobility is established. As an example, the experimental data for Si MOSFET at different approximations along the LDL theory of transport involving models of different accuracy are analysed. The analysis

sought to answer two questions: 1) how many modes provide a current conduction? and 2) how the measured resistance is close to the ballistic limit? Answers to these questions are given with different degrees of reliability. To simplify the calculations, the simplest model at  $T=0$  K was initially used that is certainly not sufficiently satisfactory, especially for the room temperature. Further, we assume the Maxwell–Boltzmann statistics for the charge carriers (non-degenerate conductors); the calculations in this case do not cause difficulties, however, the assumption of non-degeneracy is also inadequate above the voltage threshold. Finally, abandon any assumptions and simply calculate the Fermi–Dirac integrals to get the value of  $\langle\langle\lambda\rangle\rangle$  equal to 15 nm, which is the best possible estimation for a given resistor length of 60 nm. The length of this resistor cannot be considered too large compared to the mean free path, so it is physically correct to assume that this resistor operates in a quasi-ballistic regime.

**Ключевые слова:** нанофизика, наноэлектроника, рассеяние электронов, коэффициент прохождения, длина свободного пробега, Si MOSFET.

**Ключові слова:** нанофізика, наноелектроніка, розсіяння електронів, коефіцієнт проходження, довжина вільного пробігу, Si MOSFET.

**Key words:** nanophysics, nanoelectronics, electron scattering, transmission coefficient, the mean free path, Si MOSFET.

*(Получено 22 декабря 2015 г.)*

## 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)  $\lambda$ , которая определяет коэффициент прохождения

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

где  $L$  — длина проводника. Откуда берётся это выражение?

Обычно под  $\lambda$  подразумевается среднее расстояние между двумя актами рассеяния. В подходе Ландауэра [5, 6] величина  $\lambda$  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,  $\Lambda$ ,

$$\lambda(E) \propto \Lambda(E) = v(E) \tau(E), \quad (2)$$

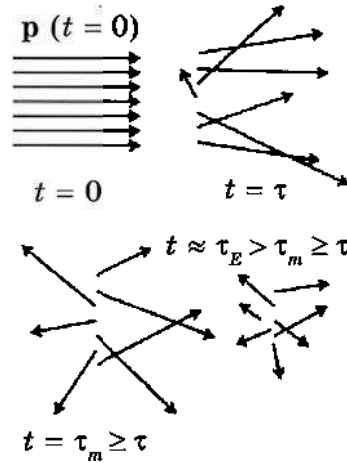
где средняя скорость определяется зонной структурой резистора,

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

## 2. КАЧЕСТВЕННО О ФИЗИКЕ РАССЕЯНИЯ

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

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 ещё некоторого времени  $t \approx \tau_m(E) \geq \tau(E)$  импульсы электронов рандомизируются. Если, однако, доминирующий механизм рассеяния упругий, то первоначальная энер-



**Рис. 1.** Качественная визуализация различных времён 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 своё равновесное значение через время  $t \approx \tau_E(E) > \tau_m(E) \geq \tau(E)$  [2, 7].<sup>1</sup>

гия ансамбля электронов не примет ещё своего равновесного значения. По прошествии ещё некоторого времени  $t \approx \tau_E(E) \gg \tau_m(E), \tau(E)$  первоначальный избыток энергии занулится, и энергия примет своё равновесное значение. Рисунок 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  $S(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ , переводящая систему частиц из первоначального состояния  $\mathbf{p}$  в некое конечное состояние  $\mathbf{p}'$ .

Скорость рассеяния, иначе вероятность рассеяния за единицу времени, есть просто единица, делённая на среднее время между соседними столкновениями, и получается путём суммирования по всем возможным конечным состояниям, а именно:

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

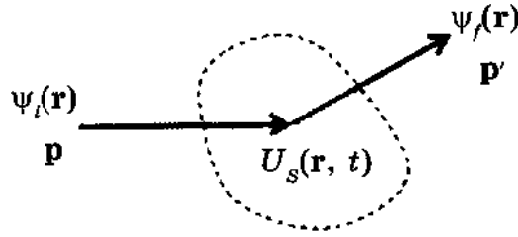
В предположении, что электроны впрыскиваются в проводник с начальным импульсом, направленным вдоль оси  $z$ , для скорости импульсной релаксации, по аналогии с (3), имеем [7]:

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

Анизотропное рассеяние стремится отклонить электроны на небольшие углы, в результате чего время импульсной релаксации растёт, 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 обрисуем лишь её основные моменты. Рассмотрим акт рассеяния подробнее (рис. 2).

Пусть электрон с импульсом  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  и описываемый волновой функцией  $\psi_i(\mathbf{r})$  оказался в области действия потенциала рассеяния  $U_s(\mathbf{r}, t)$ , который может быть как статическим (рассеяние на заряженных примесях), так и динамическим (рассеяние на фононах). В результате акта рассеяния первоначальный импульс электрона становится иным  $\mathbf{p}'$ , изменяется и его волновая функ-



**Рис. 2.** Переход электрона из начального состояния в конечное в результате акта рассеяния на потенциале  $U_s(\mathbf{r}, t)$ .<sup>2</sup>

ция на  $\psi_f(\mathbf{r})$ . Нужно рассчитать вероятность (за единицу времени)  $S(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$  перехода электрона из первоначального состояния  $\mathbf{p}$  в конечное  $\mathbf{p}'$ .

В первом порядке теории возмущений

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

где матричный элемент перехода

$$|H_{p',p}|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(\mathbf{r}) U_s(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5b)$$

Выражение (5) известно в квантовой теории как золотое правило Ферми–Дирака [8, 9]. Фигурирующая в (5a)  $\delta$ -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  $\omega$  (колебания решётки)  $\Delta E = \pm \hbar\omega$ , 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  $\delta$ -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 растёт с энергией ( $n$ -проводники), можно ожидать уменьшения вре-

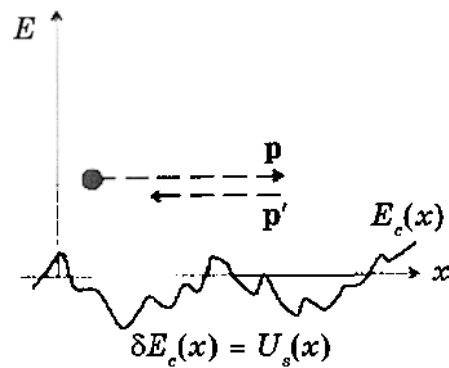


Рис. 3. Флуктуирующий потенциал, создаваемый случайно расположенными зарядами.<sup>3</sup>

мени 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  $E_c(\mathbf{r})$ , что ведёт 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.

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).

Рассмотрим однородный  $1D$ -проводник в диффузионном режиме. Левый контакт впрыскивает электроны с током  $I^+(x=0)$ . Доля электронов  $T$  войдёт в правый контакт с током  $I^+(x=L) = T I^+(x=0)$ . Оставшаяся доля вернётся в левый контакт (рассеяние назад) с током  $I^-(x=0) = R I^+(x=0)$ . В отсутствии 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  $\lambda$  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

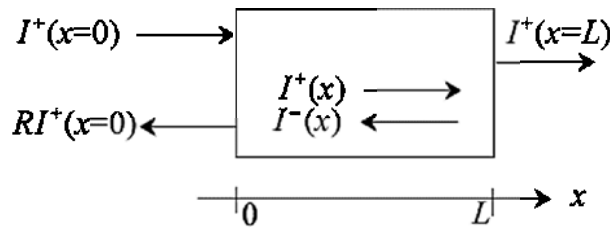


Рис. 4. К выводу связи между коэффициентом прохождения и средней длиной свободного пробега на примере однородного  $1D$ -проводника.<sup>4</sup>



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

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:

$$I^+(L) = I^+(0) - \frac{I}{\lambda} L = I^+(0) - [I^+(L) - I^-(L)] \frac{L}{\lambda} = I^+(0) - I^+(L) \frac{L}{\lambda}, \quad (11)$$

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 проведённых рассуждениях является интерпретация  $1/\lambda$  как вероятности (на единицу длины) обращения потока частиц в обратном направлении в результате рассеяния. Именно поэтому саму длину  $\lambda$ , как уже упоминалось, часто называют средней длиной свободного рассеяния назад.

#### 4. СРЕДНЯЯ ДЛИНА СВОБОДНОГО ПРОБЕГА И ВРЕМЯ РАССЕЯНИЯ

Установим связь между  $\lambda$  и временем рассеяния  $\tau_m$ . Пусть электрон совершает акт рассеяния в изотропном  $1D$ -проводнике. У него есть две возможности: рассеяться вперёд 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:

$$\lambda_{1D}(E) = 2\Lambda(E) = 2v(E)\tau_m(E). \quad (13a)$$

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

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

где усреднение для  $2D$ - и  $3D$ -проводников ведётся по углам. Для изотропных проводников

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

$$\lambda_{3D}(E) = \frac{4}{3} v(E) \tau_m(E). \quad (13в)$$

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

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

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 УСРЕДНЁННОГО ЗНАЧЕНИЯ ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Для  $2D$ -проводника в диффузионном режиме [11]

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

где поверхностная проводимость

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

или иначе

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

где

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

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

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

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

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

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

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

откуда вычислить  $\eta_F$ , 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 усреднённое значение длины свободного пробега можно сразу записать в явном виде через измеряемые поверхностные проводимость и плотность

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{2(kT / q) \left( \frac{\sigma_s}{n_s} \right)}{qv_T}, \quad (22a)$$

где  $v_T$  есть однонаправленная термическая скорость электронов [11]

$$v_T = \sqrt{2kT / \pi m^*}. \quad (226)$$

Но часто 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

Вернёмся к 1D-проводнику на рис. 4. Предположим, что речь идёт 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

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

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

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

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  $I = T I^+(0)$  и найдём его, опираясь на уравнение (25). В результате получим

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

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

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

Этот результат может показаться удивительным, так как принято считать, что диффузионный закон Фика выполняется на расстояниях, намного превышающих среднюю длину свободного пробега. Однако подобное допущение не делалось при выводе уравнения (28). В этой связи ещё 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, а полученный таким образом коэффициент диффузии будет соответствовать усреднённой по энергии длине свободного пробега.

Простая ситуация имеет место в невырожденных проводниках со средней длиной свободного пробега  $\lambda_0$ , не зависящей от энергии. В этом случае коэффициент диффузии зависит от термической скорости (22б)

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

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

$$\sigma_s = q n_s \mu, \quad (30)$$

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 возьмём эту формулу, известную также как формула Кубо–Гринвуда, в качестве определения 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  $\eta_F$  и далее  $\langle M_{2D} \rangle$  по (18), а именно:

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

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

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

где первый сомножитель 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. УСРЕДНЁННАЯ 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:

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

Для невырожденных проводников последний множитель равен единице.

## 9. ПОДВИЖНОСТЬ ПРИ ПОСТОЯННОМ ЗНАЧЕНИИ ВРЕМЕНИ РАССЕЯНИЯ

Воспользуемся предыдущим результатом и найдём подвижность для невырожденного проводника, характеризуемого постоянным значением времени рассеяния  $\tau_0$ . 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 (136)

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

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 проведём 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.

Для интересующего нас линейного участка ВАХ измеренные значения при комнатной температуре:

$$n_s \approx 6,7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}, R \approx 215 \text{ Ом}\cdot\mu\text{м}, \mu \approx 260 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}. \quad (44)$$

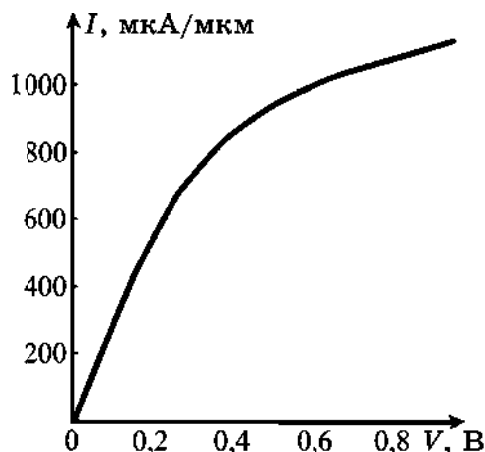


Рис. 5. Вольт-амперная характеристика Si MOSFET при  $V_G = 1,2$  В [13].<sup>5</sup>

Зададим себе два вопроса: 1) Сколько мод проводимости обеспечивают ток? 2) Насколько измеренное сопротивление близко к баллистическому пределу?

Сначала вспомним, что у кристаллического Si долинные вырождение минимумов эллипсоидальной формы равно шести [14]. В нашем образце квантовые ограничения снимают вырождение до  $g_v = 2$  с  $m^* = m_t = 0,19 m_0$  [15, 16]. Ответить на интересующие нас вопросы можно с разной степенью достоверности. Для упрощения вычислений можно воспользоваться простой моделью при  $T = 0$  К [11], что, конечно, может быть недостаточно удовлетворительным, особенно для комнатной температуры. Далее, можно предположить максвелл-больцмановскую 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.

Пойдём самым простым путём, что, по крайней мере, даст нам возможность почувствовать числа. В модели  $T = 0$  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 учётом  $L = 60$  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]:  $R_{2D}^{ball} \approx 90$  Ом· $\mu\text{м}$ , что примерно в два раза меньше измеренного сопротивления (44). Теперь можем получить оценку длины свободного пробега из формулы (35) в [11]:  $\lambda(E_F) \approx 40$  нм. Более тщательный анализ предполагает использование максвелл-



больцмановской модели, а ещё точнее — вычисление интегралов Ферми–Дирака с учётом заселённости подзон. Однако, так или иначе, уже ясно, что современные Si MOSFET работают в квази-баллистическом 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 протяжённому проводнику и традиционно является диффузионной. Чтобы оценить баллистическую подвижность опять обратимся к простейшей модели  $T = 0$  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  $\mu \approx 1200$  см<sup>2</sup>/В·с, что в несколько раз превышает диффузионную подвижность. Кажущаяся подвижность, согласно уравнению (47) из [11], будет несколько меньше подвижности нашего образца за счёт баллистической подвижности. К приведённым оценкам нельзя относиться слишком строго из-за явной недостаточности модели  $T = 0$  К.

Подвижность (44) была измерена при комнатной температуре. Уточним модель  $T = 0$  К, перейдя к максвелл-больцмановской для невырожденных проводников. Из соотношения Эйнштейна (37) найдём коэффициент диффузии

$$\bar{D} = \frac{kT}{q} \mu = 6,7 \text{ см}^2/\text{с}^2. \quad (46)$$

Теперь можно вычислить усреднённую длину свободного пробега  $\langle\langle\lambda\rangle\rangle$  по (36). Для этого нужно оценить термическую скорость  $v_T$  (226), что в свою очередь требует знания эффективной массы. Для электронов в инверсионном слое (100)Si, когда заселена только лишь одна подзона зоны проводимости,  $m^* = m_t = 0,19 m_0$  [16], откуда  $v_T = 1,2 \cdot 10^7$  см/с и далее

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

Ещё более точный результат можно получить, перейдя к статистике Ферми–Дирака. Из (33) следует

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

Значение  $\eta_F$  находим через известную измеренную поверхност-

ную плотность

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

Для электронов в первой подзоне инверсионного слоя (100)Si  $g_v = 2$ , так что  $N_{2D} = 4,1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . Интеграл Ферми–Дирака вычисляется аналитически

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

так что

$$\eta_F = \ln(e^{n_s/N_{2D}} - 1) = 1,42. \quad (51)$$

Окончательно,

$$\langle\langle \lambda \rangle\rangle_{FD} = 11 \times \frac{\mathfrak{S}_0(1,42)}{\mathfrak{S}_{-1/2}(1,42)} \approx 15 \text{ нм}, \quad (52)$$

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

Подведём итоги. Основное внимание в этом обзоре уделено понятию длины свободного пробега  $\lambda$  как длины рассеяния назад и её связи с коэффициентом прохождения. Установлена связь между  $\lambda$  и временем импульсной релаксации для проводников разной размерности. Показано как вычислить усреднённое значение  $\lambda$  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 2011–2015 годах в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

Благодарю Н. Е. Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА—REFERENCES

1. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*

- (Hackensack–New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); [www.nanohub.org/courses/FoN1](http://www.nanohub.org/courses/FoN1).
2. M. Lundstrom, Jeong Changwook, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/resources/11763](http://www.nanohub.org/resources/11763).
  3. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 3: 519 (2013) (in Russian); Erratum: *ibidem*, **12**, No. 2: 415 (2014); Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, вып. 3: 519 (2013); Erratum: *ibidem*, **12**, вып. 2: 415 (2014).
  4. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13**, No. 3: 549 (2015) (in Russian); Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **13**, вып. 3: 549 (2015).
  5. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.*, **1**, No. 3: 223 (1957).
  6. R. Landauer, *Philos. Mag.*, **21**: 863 (1970).
  7. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* (Cambridge: Cambridge Univ. Press: 2000).
  8. P. A. M. Dirac, *Proc. Royal Soc.*, **114A**, No. 767: 243 (1927).
  9. E. Fermi, *Nuclear Physics* (New York: University of Chicago Press: 1950).
  10. C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.*, **107**: 023707 (2010).
  11. Yu. O. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 4: 655 (2013) (in Russian); Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, вып. 4: 655 (2013).
  12. W. Shockley, *Phys. Rev.*, **125**: 1570 (1962).
  13. C. Jeong, D. A. Antoniadis, and M. S. Lundstrom, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **56**, No. 11: 2762 (2009).
  14. R. F. Pierret, *Semiconductor Device Fundamentals* (Reading: Addison–Wesley: 1996).
  15. M. Lundstrom, *ECE 612: Nanoscale Transistors. Lecture 4. Polysilicon Gates/QM Effects*, 2008; [www.nanohub.org/resources/5364](http://www.nanohub.org/resources/5364).
  16. Yuan Taur and Tak Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices* (Cambridge: Cambridge University Press: 2009).

---

*Odessa State Environmental University,  
Lvivska Str. 15,  
65016 Odessa, Ukraine*

<sup>1</sup> Fig. 1. Qualitative visualization illustrating the characteristic times for electron scattering. An ensemble of electrons with momentum directed along one axis is injected at  $t = 0$ . Electrons have, on average, experienced one collision at  $t \approx \tau(E)$ . The momentum of the initial ensemble has been relaxed to zero at  $t \approx \tau_m(E) \geq \tau(E)$ , and the energy has relaxed to its equilibrium value at  $t \approx \tau_E(E) > \tau_m(E) \geq \tau(E)$  [2, 7].

<sup>2</sup> Fig. 2. Transition of electron from the initial state to the final state as a result of scattering at potential  $U_S(\mathbf{r}, t)$ .

<sup>3</sup> Fig. 3. Fluctuating potential generated by randomly distributed charges.

<sup>4</sup> Fig. 4. For drawing a conclusion on relation between transmission coefficient and mean-free-path for backscattering illustrated for a regular 1D conductor.

<sup>5</sup> Fig. 5. Measured  $I_D - V_{DS}$  characteristic of an  $n$ -channel silicon MOSFET at  $V_G = 1.2$  V [13].