

Давидович М.В.
Саратовский национальный исследовательский государственный
университет им. Н.Г. Чернышевского

Об импедансных условиях в металлических нанопроводах

В рамках модели Ландауэра-Датты-Лундстрома получены приближенные формулы для проводимости металлических нанопроволок конечной ширины и толщины, а также пленок конечной толщины, переходящие в известные предельные случаи. В соотношения входят оба поперечных размера. Для оценки числа мод проводимости квантовых проволок с конечными поперечными размерами предложены приближенные формы распределения потенциала и функционалы для решения соответствующего уравнения Шредингера. Проведена численная оценка числа энергетических уровней и решена задача о волне Зоммерфельда-Ценнека в прямоугольном проводе, которая на высоких частотах переходит в поверхностный плазмон.

Ключевые слова: импеданс; модель Ландауэра-Датты-Лундстрома; квантовая нить; уравнение Шредингера; число мод проводимости.

Тонкие металлические, полупроводниковые и другие проводящие структуры в виде проводов ширины w и толщины t широко применяются при создании различных проволочных метаматериалов (wire media), гиперболических метаматериалов в виде плоскостойких металлодиэлектрических структур, дифракционных решеток, двумерных и трехмерных фотонных кристаллов, линий передачи, нанотранзисторов, терагерцевых усилителей и т.п. В них w и t могут иметь размеры от нескольких нанометров до нескольких десятков или сотен нанометров. Для моделирования необходимо знать их импедансы как функции размеров. Теория проводимости Друде здесь не работает, особенно при малых по сравнению с длиной свободного пробега (ДПС) λ_0 размеров проводников, что характерно для графена, графеновых нанолента, квантовых проволок. Строгий анализ требует решения задач квантовой механики, электродинамики и неравновесной статистической механики, поэтому подобного рода задачи решаются приближенными методами типа формализма Грина-Кубо, модели Ландауэра-Датты-Лундстрома (ЛДЛ) [1, 2], транспортного уравнения Больцмана в приближениях времени релаксации, Бхатнагара-Гросса-Крука [3] и ряда других.

В данной работе получены выражения в виде простых приближенных формул для проводимости проволоки поперечного размера w , t и длины L , а также погонной проводимости, что и является целью работы. Пусть $d = 1, 2, 3$ означает размерность проводника. Указанные соотношения должны быть, с одной стороны простыми, а с другой стороны – достаточно точными и переходить в известные формулы в одномерном случае $d = 1$ (квантовая нить, $w \rightarrow 0$, $t \rightarrow 0$), двумерном случае $d = 2$ (квантовая яма $t \rightarrow 0$) и трехмерном случае $d = 3$ неограниченного образца ($w \rightarrow \infty$, $t \rightarrow \infty$).

В концепции баллистического сопротивления/проводимости $R_B = 1/G_B$ для проводника любой размерности d и длины L можно записать его сопротивление как

$$R = R_B(L + \lambda)/\lambda = \rho_d(L + \lambda) \left\{ 1, \frac{1}{w}, \frac{1}{wt} \right\}. \quad (1)$$

Величины в фигурных скобках соответствуют размерностям 1, 2, 3. Это означает обычно принятые записи через удельные сопротивления ρ_d и проводимости σ_d

$$\rho_d = \frac{1}{\sigma_d} = \frac{1}{G_B \lambda} \{1, w, wt\}. \quad (2)$$

В (1) и (2) равенства для фигурных скобок определяют соответствующие физические размерности удельных величин для $d=1, 2, 3$. При малых размерах соотношения типа (1) нелинейно зависят от размеров (квантуются). Размерности ρ_d и σ_d в силу (2) разные, при этом обычные удельные величины суть $\rho = \sigma^{-1} = \rho_3 = \sigma_3^{-1}$. ДСП массивного проводника $\lambda_0 = \bar{v} \tau$, где \bar{v} – средняя скорость, τ – время свободного пробега (релаксации импульса), т.е. τ^{-1} – вероятность рассеяния в единицу времени с полной потерей направления импульса. Очевидно, ДСП зависит от того, как определена средняя скорость. При движении носителей вдоль оси z $\bar{v} = \langle |v_z| \rangle$ при усреднении по энергиям, вводя в рамках теории случайных блужданий коэффициент диффузии $\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle$, можно определить проводимость трехмерного проводника как [1, 2]

$$\sigma = \sigma_3 = q^2 \bar{D} d_{EF} = q^2 \bar{D} D_d(E_F)/(Lwt), \quad (3)$$

где d_{EF} – плотность состояний на поверхности Ферми, $D_d(E)dE$ – число энергетических состояний в интервале dE (индекс d означает размерность). В общем случае надо усреднять по энергиям с функцией $-\partial f_0/\partial E$, где обозначена равновесная функция Ферми-Дирака $f_0 = f(E, \mu_0, T)$, $\mu_0 = E_F$. В случае малой длины L неравновесного проводника, включенного между двумя равновесными проводниками с электрохимическими потенциалами μ_1 и μ_2 следует усреднять с функцией $f_1(E) - f_2(E)$. Формула (3) допускает обобщение на любую размерность [1, 2]

$$\sigma_d = q^2 \bar{D} g_d = \frac{q^2 \bar{D} D_d}{L} \left\{ 1; \frac{1}{w}; \frac{1}{wt} \right\}, \quad g_d = \frac{D_d}{L} \left\{ 1; \frac{1}{w}; \frac{1}{wt} \right\}. \quad (4)$$

Вводя закон дисперсии $E(\mathbf{p})$, получаем, вообще говоря, тензорную проводимость. Далее рассматриваем изотропные зависимости $E(p)$. Усреднение $v_z(E)$ по углам (направлениям с учетом баллистического движения) дает [1] $\langle |v_z(E)| \rangle = v(E)$, $\langle v_z^2(E) \rangle = v^2(E)$ для 1-d проводника, $\langle |v_z(E)| \rangle = 2v(E)/\pi$, $\langle v_z^2(E) \rangle = v^2(E)/2$ для 2-d проводника, $\langle |v_z(E)| \rangle = v(E)/2$, $\langle v_z^2(E) \rangle = v^2(E)/3$ для 3-d проводника, что записываем как $\langle |v_z| \rangle = \bar{v} \{1; 2/\pi; 1/2\}$, $\bar{D} = \langle \bar{v}^2 \tau \rangle = \bar{v}^2 \tau \{1; 1/2; 1/3\}$. Используя определение $\lambda = 2\bar{D}/\langle |v_z| \rangle$, получаем $\lambda = \bar{v} \tau \{2; \pi/2; 4/3\}$. Здесь \bar{v} , τ соответствует бесконечному образцу, а индекс d опущен. Обобщим приведенные соотношения на случай проводника прямоугольного сечения так, чтобы имело место совпадение при его вырождении в двумерный и одномерный проводники:

$$\lambda = \lambda_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_0 + w} + \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + t} \right) \right\}, \quad (5)$$

$$R = R_B \frac{L + \lambda}{\lambda} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_0 + w} + \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + t} \right) + (2 - \exp(-w/\lambda_0) - \exp(-t/\lambda_0)) \right\}. \quad (6)$$

Здесь $\lambda_0 = \bar{v}\tau$, $R_B = R_{B1} = 2L/(q^2 D \bar{v})$ – баллистическое сопротивление одномерного проводника. Из (5) для λ_d следует $\lambda_1 = 2\lambda_0$ (если $w = t = 0$), $\lambda_2 \approx \lambda_0(1.5 + \lambda_0/w)$ (если $t = 0$, $w \gg \lambda_0$), что приближенно соответствует $\pi\lambda_0/2$, а также $\lambda_3 = \lambda_0$. Соотношение (6) соответствует объемному ограниченному проводнику. Для одномерного проводника получаем $R = R_B(L + \lambda)/\lambda$, для двумерного проводника $R = (3/2)R_B(L + \lambda)/\lambda$, для трехмерного $R = 2R_B(L + \lambda)/\lambda$, что хорошо согласуется с определением баллистической проводимости [1, 2]:

$$G_{Bd} = \frac{q^2 D_d \bar{v}}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}. \quad (7)$$

В случае малых по сравнению с ДСП поперечных размеров для квантовой проволоки

$$R = R_B \frac{L + \lambda}{\lambda} \left\{ 1 - (w/\lambda_0 + t/\lambda_0)/2 - \left((w/\lambda_0)^2 + (t/\lambda_0)^2 \right) \right\}. \quad (8)$$

Считая ток в баллистической проволоке равномерным, получаем удельное сопротивление:

$$\rho = R_B w t \frac{L + \lambda}{L \lambda} \left\{ 1 - (w/\lambda_0 + t/\lambda_0)/2 - \left((w/\lambda_0)^2 + (t/\lambda_0)^2 \right) \right\}. \quad (9)$$

Определение удельной двумерной (поверхностной) проводимости берется как предел $\sigma_s = \sigma/t$ при стремлении толщины проводника к нулю:

$$\sigma_s = G_B \frac{\lambda}{2(1 + \lambda/L)(w + t)} \left\{ 1 - (w/\lambda_0 + t/\lambda_0)/2 - \left((w/\lambda_0)^2 + (t/\lambda_0)^2 \right) \right\}^{-1}. \quad (10)$$

Определим число мод проводимости [1, 2] путем решения уравнения Шредингера (УШ) для соответствующих размерных потенциальных ям. Пример ям приведен на рис. 1.

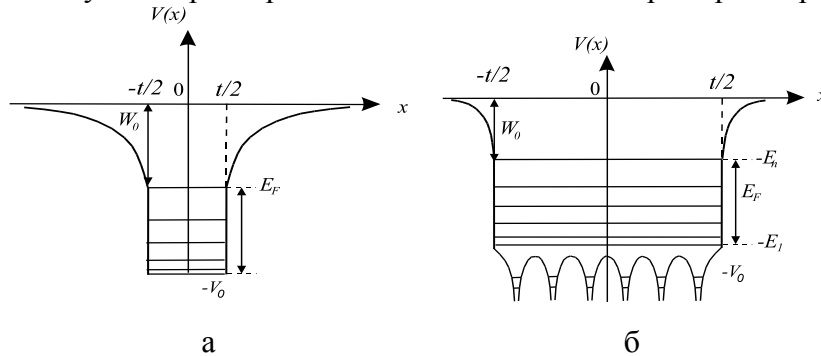


Рис. 1. Схематический вид энергетических уровней и потенциальной ямы с плоским дном для металлической пленки толщины t (а) и аналогичной ямы с энергетическими уровнями с учетом квазипериодической структуры атомов (б)

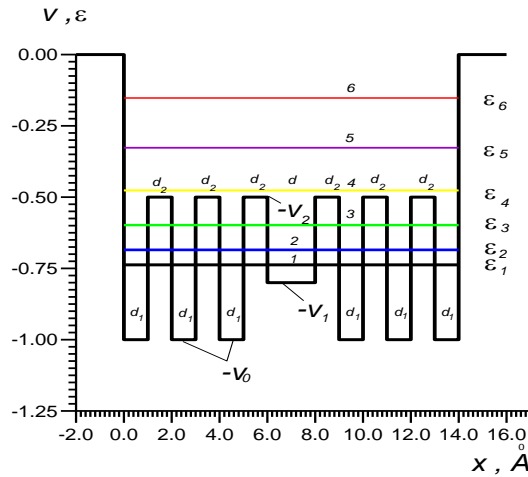


Рис. 2. Нормированные энергетические уровни и конфигурация потенциала для потенциальной ямы с пятью периодами слева и справа от центральной области с дислокацией $2d$ при $d_1 = d_2 = d = 1 \text{ \AA}$, $-v_0 = 1$, $-v_1 = 0.8$, $-v_2 = 0.5$

На рис. 2 приведен результат для одномерной прямоугольной потенциальной ямы с квазипериодическим дном. Одномерное УШ решено методом матриц передачи. Для задач о двумерной яме и о трехмерном ящике использован вариационный метод. Форма ямы связана действующими на электрон силами изображений.

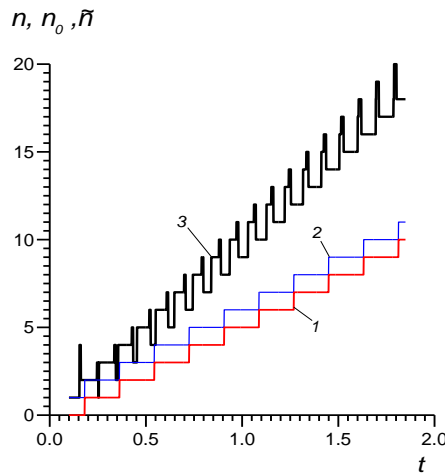


Рис. 3. Числа энергетических уровней n , n_0 и \tilde{n} в двумерной яме с плоским дном в зависимости от ширины t (нм). Кривая 1 – расчет по формуле [1], 2 – яма с резкими стенками (n_0), 3 – яма с двумя барьерами (\tilde{n}). Глубина ямы $V_0 = 11.46 \text{ эВ}$, работа выхода $W_0 = 4.36 \text{ эВ}$

На рис. 3 приведено вычисление числа энергетических уровней, которые связаны с числом мод проводимости, на основе решения УШ, а также определением числа укладывающихся волн де-Бройля [1]. Таким образом, учет формы ямы дает существенное отличие импеданса от приближенной формулы, используемой в модели ЛДЛ. Полученные результаты использованы для получения динамической проводимости квантовой проволоки и вычисления дисперсии моды H_{11} волновода в виде изолированного металлического бруса прямоугольной формы ($w = t$). Это известная втекающая медленная

поверхностная волна Зоммерфельда-Ценнека. При очень высоких оптических частотах, когда металл по свойствам становится близок к диэлектрику, она переходит в основную HE_{11} волну ДВ. Для круглого волновода и проволочного фотонного кристалла волна рассчитана в [4]. Задачу решаем методом объемного интегрального уравнения (ИУ) [4], заключающегося в том, что возбуждение происходит за счет тока поляризации $\mathbf{J}_p(\mathbf{r}) = i\omega\epsilon_0(\tilde{\epsilon}(\omega) - 1)\mathbf{E}(\mathbf{r})$. В нашем случае в силу представления $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}_\tau)\exp(-ik_z z)$ получается двумерное объемное ИУ, т.е. уравнение на поперечном сечении S :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_\tau) = (\tilde{\epsilon}(\omega) - 1) \frac{(\nabla_\tau \cdot \nabla_\tau + k_\tau^2)}{4i} \iint_S H_0^{(2)}(k_\tau |\mathbf{r}_\tau - \mathbf{r}'_\tau|) \mathbf{E}(\mathbf{r}'_\tau) dS'. \quad (11)$$

На основе ИУ (11) построен функционал, при этом поперечный оператор ∇_τ перенесен на весовую функцию. Диэлектрическая проницаемость $\tilde{\epsilon}(\omega)$ связана с динамической проводимостью, определяемой как $\sigma(\omega) = \sigma(0)/[1 + i\omega/\omega_c]$. Полученное дисперсионное уравнение решено итерационным методом. Результаты представлены на рис. 4.

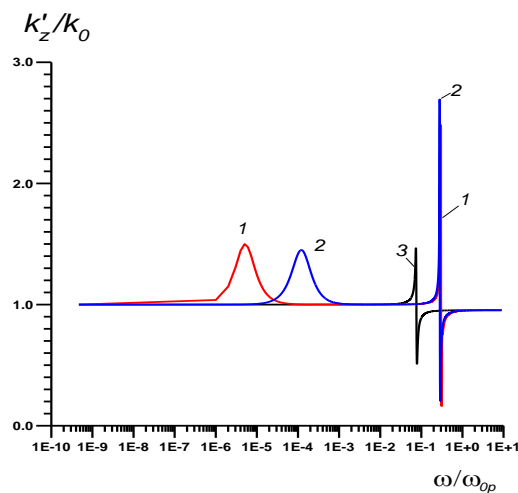


Рис. 4. Замедление $n'_z = k'_z/k_0$ для квадратного медного провода с $t = 500$ нм (кривая 1), $t = 100$ нм (2) и $t = 5$ нм (3). Штрихи означают реальную часть

Таким образом, в работе получены приближенные формулы для статических погонных сопротивлений квантовых нитей и квантовых лент и тонких пленок, переходящие в соответствующие формулы для массивных структур. Рассмотрены методы определения числа уровней и мод проводимости на основе решения УШ, на основе которых уточнены динамические проводимости и плазменные частоты структур. Они использованы для определения дисперсии плазмонных мод в квантовом проводе.

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № 3.1155.2014/К.

Библиографический список

1. Ю. А. Кругляк. Обобщённая модель электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрёма. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, 11, № 3, 2013. – С. 519-527.
2. Yu. Kruglyak. Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics. *Journal of Nanoscience*, 2014, Article ID 725420, 2014. – P. 1-15.
3. G. Lovat, G.W. Hanson, R. Araneo, P. Burghignoli. Semiclassical spatially dispersive intraband conductivity tensor and quantum capacitance of graphene. *Phys. Rev. B* 87, 2013. – P. 115429-11.