

纳米器件电流噪声的散射理论统一模型研究^{*}

唐冬和[†] 杜磊 王婷岚 陈华 贾晓菲

(西安电子科技大学技术物理学院, 西安 710071)

(2010 年 11 月 12 日收到; 2010 年 12 月 24 日收到修改稿)

传统散射理论在研究器件噪声特性时, 并没有考虑非相干输运和库仑作用对散粒噪声的抑制, 而在实际纳米器件中这两种效应不可忽略. 本文基于散射区等效接触端模型推导了考虑上述两种效应的电流噪声散射理论统一模型, 该模型适用于从相干输运到非相干输运的整个输运区, 并同时考虑了泡利不相容原理和库仑作用对散粒噪声的抑制. 本文也提出了一种基于统一模型的电流噪声数值模拟方法, 该方法所得散射区特性与散射区等效接触端模型特性一致.

关键词: 电流噪声, 散射理论, 统一模型

PACS: 72.70.+m, 72.10.-d, 73.23.-b

1. 引言

1957 年, Landauer 首先推导了单通道导体的 Landauer 公式^[1], 开创了研究介观系统电子输运的先河. 之后, Büttiker 运用散射矩阵方法推导了描述多端口多通道系统的 Landauer-Büttiker 散射理论, 即散射理论 (scattering theory)^[2-4]. 散射理论已成为研究纳米尺度电子器件输运问题的标准方法之一^[5-7]. 但是, 散射理论处理器件电子输运时仍存在一些问

题. 最初的散射理论只适用于相干输运^[5], 而对于非相干输运一般采用 Büttiker 虚拟探针法进行处理^[2, 8]. 在 Büttiker 虚拟探针法中将引起相位非相干的散射中心处理为处于准平衡状态的虚拟探针, 该探针可用局域费米能级描述. 两个虚拟探针之间的输运为相干输运, 所以可以利用最初的散射理论处理. 每个虚拟探针的局域费米能级可根据流守恒求解得到. 流守恒要求在一个电子从导体的某一点进入探针的同时另一个电子必须从探针发射到导体的同一点, 这就意味着两个过程之间没有相位相关性^[9]. 实际上, 并非每一个散射中心的入射电子波和出射电子波之间都毫无相位相关性. 其实, 包含大量散射中心的散射区起到的作用类似于一个特殊的电子发射端或接收端, 散射

区与实际发射端和接收端一样, 只在全局上满足流守恒而在局域上并不满足流守恒^[5]. 因此, 需要一种能更准确描述散射区物理图像的方法使散射理论更适用于实际纳米器件. 文献[5]对这一问题给予了讨论.

散粒噪声主要源于接触端 (contact) 费米能级附近电子态的随机占据而引起的电子注入随机性以及电子反射和透射的随机性 (配分噪声). 对散粒噪声能产生显著影响的作用力有泡利不相容原理和库仑作用. 泡利不相容原理通过限制注入电子态的占有概率而减小注入电子发射率的涨落, 进而对散粒噪声产生抑制. 库仑作用会导致器件区域电势分布的涨落, 一般情况下这一涨落会抑制注入电子发射率涨落对噪声的影响, 不过有时也会出现相反的情况^[10]. Landauer-Büttiker 噪声公式虽然包含了泡利不相容原理对散粒噪声的抑制作用^[4, 11], 但并没有考虑库仑作用对散粒噪声的抑制作用^[10]. 因此, 需要寻求一种方法将库仑作用对散粒噪声的抑制引入散射理论. 文献[10]在弹道输运 (相干输运) 下提出了一种引入库仑作用的统计模拟方法.

本文将在文献[5]和文献[10]的基础上推导同时考虑泡利不相容原理和库仑作用的电流噪声散射理论统一模型, 该模型适用于从相干输运到非相干输运的整个输运区. 本文不考虑磁场作用.

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 60376023) 资助的课题.

[†] E-mail: dhtang2010@yahoo.cn

2. 理论模型

2.1. 非相干输运的处理

考察如图 1 所示的两端结构,器件(散射区)处于源漏接触端之间,接触端的电子态占据情况由其费米能级决定,假设整个结构处于同一温度. 定义 $\hat{a}_{S_n}^\dagger$ 和 \hat{a}_{S_n} 为源端入射电子的产生和湮没算符,它们表示在由源端进入导体的第 n 个横向传输通道中产生和湮没一个总能量为 E 的电子. 同样可以定义以下算符,漏端入射电子的产生湮没算符 \hat{a}_{Dn}^\dagger 和 \hat{a}_{Dn} ,源端出射电子的产生湮没算符 $\hat{b}_{S_n}^\dagger$ 和 \hat{b}_{S_n} ,漏端出射电子的产生湮没算符 \hat{b}_{Dn}^\dagger 和 \hat{b}_{Dn} . 各对算符之间满足反对易关系.



图 1 两端多通道介观系统示意图

在相干输运下,湮没算符 \hat{a} 和 \hat{b} 之间通过散射矩阵 S 相互联系

$$\begin{bmatrix} \hat{b}_{S1} \\ \vdots \\ \hat{b}_{S_n} \\ \hat{b}_{D1} \\ \vdots \\ \hat{b}_{DN} \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} \hat{a}_{S1} \\ \vdots \\ \hat{a}_{S_n} \\ \hat{a}_{D1} \\ \vdots \\ \hat{a}_{DN} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

其中 N 表示横向传输通道总数,在这里假设了源端和漏端的通道数相等. 产生算符 \hat{a}^\dagger 和 \hat{b}^\dagger 之间则可通过散射矩阵 S 的厄密共轭矩阵 S^\dagger 相互联系. 散射矩阵 S 是 $2N \times 2N$ 维的,可表示为 $S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}$, 其中 r, r', t 和 t' 都为 $N \times N$ 维矩阵, r 和 r' 表示电子的反射, t 和 t' 表示电子的透射. 此时, Landauer 公式^[1, 12]和 Landauer-Büttiker 噪声公式^[11, 12]可分别表示为

$$\langle I \rangle = \frac{e}{\pi \hbar} \int dE \{ \text{Tr}[t(E)^\dagger t(E)] [f_S(E) - f_D(E)] \} \quad (2)$$

和

$$S(0) = S_{SS}(0) = \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \{ [f_S(1 - f_S) + f_D(1 - f_D)] \text{Tr}[t^\dagger t t^\dagger t] + [f_S(1 - f_D) + f_D(1 - f_S)] (\text{Tr}[t^\dagger t] - \text{Tr}[t^\dagger t t^\dagger t]) \}, \quad (3)$$

其中 $f_\alpha(E) = \{\exp[(E - \mu_\alpha)/k_b T_\alpha] + 1\}^{-1}$ 为分布函数, μ_α 为费米能级.

随着器件的小型化,电子在输运过程中受到的散射次数虽然不断减小,但在大多数情况下器件输运还是由散射所决定. 尤其在考察实际纳米器件时,不可忽略电子-声子散射等散射的作用,即电子输运是一种非相干输运,如图 2 所示^[13].

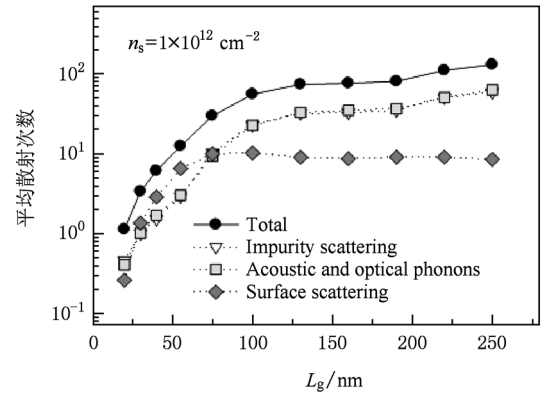


图 2 纳米 MOSFET 载流子平均散射次数随沟道长度的变化关系^[13]

在考虑诸如电子-声子散射等非弹性散射时,电子相位在电子进入散射区后会随机发生改变. 当电子从散射区出来时,它们拥有由它们所经受的散射所决定的相位,这一相位有可能还具有入射时的相位信息,也有可能完全失去了相位记忆. 因此,散射区应该看成一个能发射或吸收电子的准独立的接触端^[5],可称为散射区等效接触端模型. 为了很好的描述散射区等效接触端模型,有必要引入一对类似于源漏区产生湮没算符的算符 ($\hat{d}_n^\dagger, \hat{d}_n$) 表示在散射区产生和湮没一个作用态. 入射态算符、出射态算符和作用态算符之间的关系可表示为

$$\hat{b}_{\alpha n} = \sum_{l=1}^N \left[\sum_{\gamma=S,D} S_{\alpha\gamma, nl} \hat{a}_{\gamma l} + \lambda_{\alpha, nl} \hat{d}_l \right], \quad (4)$$

$$\hat{b}_{\beta m}^\dagger = \sum_{k=1}^N \left[\sum_{\delta=S,D} S_{\beta\delta, mk}^* \hat{a}_{\delta k}^\dagger + \lambda_{\beta, mk}^* \hat{d}_k^\dagger \right], \quad (5)$$

其中, $S_{\alpha\gamma, nl}$ 为散射矩阵元, $\lambda_{\alpha, nl}$ 组成相移矩阵. 相移矩阵和散射矩阵的元素之间的关系可以通过算符

的反对易关系得到

$$\sum_{k=1}^N \left[\sum_{\gamma=S,D} S_{\alpha\gamma,nk}(E) S_{\beta\gamma,mk}^*(E') + \lambda_{\alpha,nk}(E) \lambda_{\beta,mk}^*(E') \right] = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} \delta(E - E'). \quad (6)$$

从上式可以看出,当忽略 \hat{d}_n^\dagger 和 \hat{d}_n 时 ($\lambda_\alpha = 0$),即相位相干,散射矩阵变为么正矩阵,透射系数 T_n 和反射系数 R_n 满足基本的概率守恒定律: $T_n + R_n = 1$.但在非相干输运下,散射矩阵不再具有么正性,即 $T_n + R_n \leq 1$.不过,(6)式仍能说明系统的总电流守恒^[5].

2.2. 库仑作用的引入

泡利不相容原理和库仑作用都会导致散粒噪声的抑制,但 Landauer-Büttiker 噪声公式只考虑了前一种作用 ($f_\alpha(1 - f_\alpha)$),并没有考虑库仑作用对散粒噪声的抑制.库仑作用对散粒噪声的影响是通过势垒分布的涨落来实现的.具有涨落的势垒分布会引起透射系数和反射系数的涨落,继而导致电流涨落^[10].而势垒分布的涨落源于接触端电子发射的随机性和散射区电子散射的随机性,即源于接触端的产生湮没算符以及散射区的产生湮没算符的统计特性.因此,若能在噪声公式中包含接触端和散射区产生湮没算符的统计特性则可引入库仑作用.

接触端电子态平均占有概率的费米狄拉克分布函数表示忽略了电子态占据的随机性.实际上,由于泡利不相容原理,电子态只能被一个电子所占据或者为空.所以,在考虑库仑作用的情况下,费米狄拉克分布函数必须由 1 或 0 代替.

定义 $|\sigma\rangle$ 表示多粒子态,则 α 接触端的 n 通道的占有概率可表示为

$$\sigma_{\alpha n}(E) = \langle \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(E) \hat{a}_{\alpha n}(E) \rangle_\sigma. \quad (7)$$

同样可以定义 $\sigma_{\theta n}(E)$ 表示散射区作用态的占有概率为

$$\sigma_{\theta n}(E) = \langle \hat{d}_n^\dagger(E) \hat{d}_n(E) \rangle_\sigma. \quad (8)$$

$\sigma_{\alpha n}(E)$ 和 $\sigma_{\theta n}(E)$ 只取 1 或 0.

从上面的分析知道,库仑作用导致势垒分布的随机涨落,从而引起透射系数和反射系数的涨落.这就说明散射矩阵 S 是所有态占有概率的函数

$$S(E) = F_S[\sigma_{S1}(E), \dots, \sigma_{SN}(E), \sigma_{D1}(E), \dots, \sigma_{DN}(E), \sigma_{\theta 1}(E), \dots, \sigma_{\theta N}(E)]. \quad (9)$$

如文献[10]所述,电流涨落可以通过计算电子态集合 $\{|\sigma_1\rangle, |\sigma_2\rangle, \dots, |\sigma_M\rangle\}$ 的统计平均 $\langle \rangle_\sigma$ 得到.在热平衡条件下接触端的平均占有概率可描

述为费米狄拉克统计 $f_\alpha, \sigma_{\alpha n}(E)$ 的统计平均则可写为^[10]

$$\langle \sigma_{\alpha n}(E) \rangle_\sigma = \langle \langle \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(E) \hat{a}_{\alpha n}(E) \rangle_\sigma \rangle_\sigma = f_\alpha(E). \quad (10)$$

同样可以将 $\sigma_{\theta n}(E)$ 的统计平均写为

$$\langle \sigma_{\theta n}(E) \rangle_\sigma = \langle \langle \hat{d}_n^\dagger(E) \hat{d}_n(E) \rangle_\sigma \rangle_\sigma = f_\theta(E). \quad (11)$$

$f_\theta(E)$ 与 $f_\alpha(E)$ 之间的关系可通过总平均电流守恒得到.

为了计算平均电流和噪声功率谱,必须知道两个算符之积和四个算符之积的量子统计平均^[5, 10, 11]

$$\langle \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(E) \hat{a}_{\beta m}(E') \rangle_\sigma = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} \delta(E - E') \sigma_{\alpha n}(E), \quad (12)$$

$$\langle \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(E) \hat{d}_m(E') \rangle_\sigma = \langle \hat{d}_n^\dagger(E) \hat{a}_m(E') \rangle_\sigma = 0, \quad (13)$$

$$\langle \hat{d}_n^\dagger(E) \hat{d}_m(E') \rangle_\sigma = \delta_{mn} \delta(E - E') \sigma_{\theta n}(E), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} & \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\beta l}(E_2) \hat{a}_{\gamma m}^\dagger(E_3) \hat{a}_{\delta n}(E_4) \rangle_\sigma \\ & \simeq \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{kn} \delta_{ml} \delta(E_1 - E_4) \delta(E_2 - E_3) \\ & \times \sigma_{\alpha n}(E_1) [1 - \sigma_{\beta m}(E_2)] \\ & + \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\beta l}(E_2) \rangle_\sigma \langle \hat{a}_{\gamma m}^\dagger(E_3) \hat{a}_{\delta n}(E_4) \rangle_\sigma, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & \langle \hat{d}_k^\dagger(E_1) \hat{d}_l(E_2) \hat{d}_m^\dagger(E_3) \hat{d}_n(E_4) \rangle_\sigma \\ & - \langle \hat{d}_k^\dagger(E_1) \hat{d}_l(E_2) \rangle_\sigma \langle \hat{d}_m^\dagger(E_3) \hat{d}_n(E_4) \rangle_\sigma \\ & \simeq \delta_{kn} \delta_{ml} \delta(E_1 - E_4) \delta(E_2 - E_3) \sigma_{\theta n}(E_1) \\ & \times [1 - \sigma_{\theta m}(E_2)], \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{d}_l(E_2) \hat{d}_m^\dagger(E_3) \hat{a}_{\delta n}(E_4) \rangle_\sigma \\ & \simeq \delta_{\alpha\delta} \delta_{kn} \delta_{ml} \delta(E_1 - E_4) \delta(E_2 - E_3) \sigma_{\alpha n}(E_1) \\ & \times [1 - \sigma_{\theta m}(E_2)], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} & \langle \hat{d}_m^\dagger(E_1) \hat{a}_{\delta n}(E_2) \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_3) \hat{d}_l(E_4) \rangle_\sigma \\ & \simeq \delta_{\alpha\delta} \delta_{kn} \delta_{ml} \delta(E_1 - E_4) \delta(E_2 - E_3) \sigma_{\theta n}(E_1) \\ & \times [1 - \sigma_{\alpha n}(E_2)], \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\delta n}(E_2) \hat{d}_m^\dagger(E_3) \hat{d}_l(E_4) \rangle_\sigma \\ & = \langle \hat{a}_{\alpha k}^\dagger(E_1) \hat{a}_{\delta n}(E_2) \rangle_\sigma \langle \hat{d}_m^\dagger(E_3) \hat{d}_l(E_4) \rangle_\sigma. \end{aligned} \quad (19)$$

2.3. 统一模型

源端的平均电流可表示为

$$\langle I_S \rangle = \frac{e}{\pi \hbar} \sum_{m=1}^N \int dE \langle N_{Sm}^+(E) - N_{Sm}^-(E) \rangle, \quad (20)$$

其中, $\langle \rangle$ 表示 $\langle \rangle_\sigma$, $N_{Sm}^+(E)$ 和 $N_{Sm}^-(E)$ 分别表示 S 端 m 通道输入和输出能量为 E 的电子的数目, 它们表示为

$$N_{Sm}^+(E) = \hat{a}_{Sm}^\dagger(E) \hat{a}_{Sm}(E), \quad (21)$$

$$N_{Sm}^-(E) = \hat{b}_{Sm}^\dagger(E) \hat{b}_{Sm}(E). \quad (22)$$

2 将(4)—(6), (12)—(14) 以及(21), (22) 式代入(20) 式, 化简得

$$\begin{aligned} \langle I_S \rangle = & \frac{e}{\pi \hbar} \int dE \left\{ \sum_{m=1}^N \langle (1 - [\Gamma]_{S;mm}) \sigma_{Sm}(E) \rangle_s \right. \\ & - \sum_{m=1}^N \langle [\Gamma]_{D;mm} \sigma_{Dm}(E) \rangle_s \\ & \left. - \sum_{m=1}^N [(1 - [\Gamma]_{S;mm}) \right. \end{aligned}$$

$$\left. - [\Gamma]_{D;mm} \right) \sigma_{\theta m}(E) \rangle_s \}, \quad (23)$$

其中, $[\Gamma]_{\alpha;mn} = \delta_{\alpha S} [\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r}]_{mn} + \delta_{\alpha D} [\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}']_{mn}$, \mathbf{r}, \mathbf{t}' 为散射矩阵 \mathbf{S} 的子矩阵, $[\]_{mn}$ 表示矩阵的第 m 行 n 列上的元素, 上标 \dagger 表示共轭转置. 散射矩阵 \mathbf{S} 的元素应为能量的函数, 但为了书写方便我们省去子矩阵的能量标识.

忽略库仑作用时, 平均电流可表示为

$$\begin{aligned} I_S = & \frac{e}{\pi \hbar} \int dE \{ [N - \text{Tr}(\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r})] f_S(E) \\ & - [N - \text{Tr}(\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r}) - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}')] f_\theta(E) \\ & - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}') f_D(E) \}. \end{aligned} \quad (24)$$

按照同样的方法我们可以推导出漏端的平均电流, 再根据系统总电流守恒, 结合两端电流可以计算得

$$f_\theta(E) = \frac{[N - \text{Tr}(\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r}) - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}')] f_S(E) + [N - \text{Tr}(\mathbf{r}'^\dagger \mathbf{r}') - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}')] f_D(E)}{[N - \text{Tr}(\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r}) - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}')] + [N - \text{Tr}(\mathbf{r}'^\dagger \mathbf{r}') - \text{Tr}(\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{t}')]}. \quad (25)$$

在得到散射矩阵 \mathbf{S} 之后, 结合(24) 与(25) 式即可得到器件的平均电流. 在相干输运下, $\text{Tr}(\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}) + \text{Tr}(\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r}) = N$, (24) 式即为 Landauer 公式. 因此, (24) 式所示电流表达式适用于从相干输运到非相干输运的整个输运区.

根据 Milatz 理论, 零频率电流噪声功率谱可表示为^[14]

$$S(0) = \lim_{1/\nu \rightarrow \infty} \frac{2}{\nu} \text{var}(I), \quad (26)$$

其中, $\nu = 2 \frac{\Delta E}{2\pi \hbar}$ 为接触端的发射率^[12], ΔE 为发射电子态之间的最小能量差, $\text{var}(I)$ 为电流的方差. 代入发射率表达式, (26) 式可写成

$$S(0) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} 2\pi \hbar \frac{\text{var}(I)}{\Delta E}. \quad (27)$$

根据(27) 式, 计算零频率电流噪声需要计算电流的均方值.

电流均方值可表示为

$$\begin{aligned} \langle I^2 \rangle = & \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \sum_{m,n=1}^N \{ \langle N_{Sm}^+(E) N_{Sn}^+(E') \rangle \\ & - \langle N_{Sm}^+(E) N_{Sn}^-(E') \rangle \\ & - \langle N_{Sm}^-(E) N_{Sn}^+(E') \rangle + \langle N_{Sm}^-(E) N_{Sn}^-(E') \rangle \} \\ = & F^{++} + F^{+-} + F^{-+} + F^{--}. \end{aligned} \quad (28)$$

上式由四项组成, 第一项 F^{++} 表示两股输入流之间的互相关性, 第二项 F^{+-} 和第三项 F^{-+} 表示输入流和输出流之间的互相关性, 第四项 F^{--} 则表示两股

输出流之间的互相关性^[10]. 将(21), (22) 代入(28) 式, 并结合(12)—(19) 式, 可计算得到上述四项. 第一项 F^{++} 为

$$F^{++} = \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \sum_{m,n=1}^N \langle \sigma_{Sm}(E) \sigma_{Sn}(E') \rangle_s, \quad (29)$$

其中运用到 $\sigma_{Sm}^2(E) = \sigma_{Sm}(E)$, 因为 $\sigma_{Sm}(E)$ 只能取 1 或 0. 第二项 F^{+-} 为

$$\begin{aligned} F^{+-} = & - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \\ & \times \sum_{\alpha=S,D,m,n=1}^N \langle [\Gamma]_{\alpha;nn} \sigma_{Sm}(E) \sigma_{\alpha n}(E') \rangle_s \\ & - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \sum_{m,n=1}^N \langle (1 - [\Gamma]_{S;nn} \\ & - [\Gamma]_{D;nn}) \sigma_{Sm}(E) \sigma_{\theta n}(E') \rangle_s, \end{aligned} \quad (30)$$

其中同样运用到 $\sigma_{Sm}^2(E) = \sigma_{Sm}(E)$. 第三项 F^{-+} 为

$$\begin{aligned} F^{-+} = & - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \\ & \times \sum_{\alpha=S,D,m,n=1}^N \langle [\Gamma]_{\alpha;mm} \sigma_{\alpha m}(E) \sigma_{Sn}(E') \rangle_s \\ & - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \int dE \int dE' \sum_{m,n=1}^N \langle (1 - [\Gamma]_{S;mm} \\ & - [\Gamma]_{D;mm}) \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{Sn}(E') \rangle_s. \end{aligned} \quad (31)$$

令 $m \leftrightarrow n, E' \leftrightarrow E$, 则有(31) 式等于(30) 式. 其实根据算符的反对易关系就可以得到 $F^{+-} = F^{-+}$, 即 $\langle N_{Sm}^-(E) N_{Sn}^+(E') \rangle = \langle N_{Sn}^+(E') N_{Sm}^-(E) \rangle$. 同样可以

得到第四项 F^{--} 的表达式,但由于式子过于冗长(由 22 项之和组成,可化简为 12 项之和),故在此不再罗列,下面直接给出电流均方值:

$$\begin{aligned}
 \langle I^2 \rangle = & \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m=1}^N \langle [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm} \\
 & \times (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm}) \sigma_{\alpha m}(E) \rangle_s \\
 & + \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \sum_{m=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} \\
 & + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} \\
 & - [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) \sigma_{\theta m}(E) \rangle_s - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \\
 & \times \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m, n=1}^N \langle [\mathbf{F}]_{\alpha; mn} [\mathbf{F}]_{\alpha; nm} \\
 & \times \sigma_{\alpha m}(E) \sigma_{\alpha n}(E) \rangle_s \\
 & - \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \sum_{m, n=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; mn} \\
 & + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mn}) ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; nm} \\
 & + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; nm}) \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\theta n}(E) \rangle_s \\
 & - 2 \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \\
 & \times \sum_{m, n=1}^N \langle [\mathbf{r}^\dagger \mathbf{t}']_{mn} [\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{r}]_{nm} \sigma_{Sm}(E) \sigma_{Dn}(E) \rangle_s \\
 & - 2 \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m=1}^N \langle [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm} \\
 & \times (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} - [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) \\
 & \times \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\alpha m}(E) \rangle_s \\
 & + 2 \left(\frac{e}{\pi \hbar} \right)^2 \Delta E \int dE \\
 & \times \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m, n=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mn} \langle [\mathbf{F}^\dagger]_{S; nm} \\
 & + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; nm}) \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\alpha n}(E) \rangle_s \\
 & + \left\langle \left(\frac{e}{\pi \hbar} \int dE \left\{ \sum_{m=1}^N (1 - [\mathbf{F}]_{S; mm}) \sigma_{Sm}(E) \right. \right. \right. \\
 & - \sum_{m=1}^N [\mathbf{F}]_{D; mm} \sigma_{Dm}(E) \\
 & - \sum_{m=1}^N (1 - [\mathbf{F}]_{S; mm} \\
 & \left. \left. - [\mathbf{F}]_{D; mm}) \sigma_{\theta m}(E) \right\}^2 \right\rangle_s, \quad (32)
 \end{aligned}$$

其中, $[\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mn} = \delta_{\alpha S} [\mathbf{r} \mathbf{r}^\dagger]_{mn} + \delta_{\alpha D} [\mathbf{t}' \mathbf{t}'^\dagger]_{mn}$.

将(32)和(23)式代入(27)式可以得到零频率

电流噪声功率谱. 根据物理意义, 零频率电流噪声功率谱可写成四部分之和, 即

$$S(0) = S_1(0) + S_2(0) + S_3(0) + S_4(0), \quad (33)$$

其中, 第一项 $S_1(0)$ 表示源端、漏端和散射区的配分噪声, 如(34)式所示. 本文将散射区等效为准独立的接触端, 所以, 可将 $(1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} - [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm})$ 看成散射区等效接触端的反射, 即载流子进入散射区, $([\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm})$ 则看成透射, 即载流子从散射区发射.

$$\begin{aligned}
 S_1(0) = & \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m=1}^N \langle [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm} \\
 & \times (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm}) \sigma_{\alpha m}(E) \rangle_s \\
 & + \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \sum_{m=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) \\
 & \times (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} - [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) \sigma_{\theta m}(E) \rangle_s. \quad (34)
 \end{aligned}$$

第二项 $S_2(0)$ 表示各个接触端(包括散射区)本身的不同反射态或透射态之间的相关性, 如(35)式所示. 因为是以源区为考察对象, 所以在(35)式中对于源区本身而言是反射态之间的相关性, 而对于漏区和散射区而言则是透射态之间的相关性.

$$\begin{aligned}
 S_2(0) = & - \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m, n=1}^N \langle [\mathbf{F}]_{\alpha; mn} \\
 & \times [\mathbf{F}]_{\alpha; nm} \sigma_{\alpha m}(E) \sigma_{\alpha n}(E) \rangle_s \\
 & - \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \sum_{m, n=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; mn} + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mn}) \\
 & \times ([\mathbf{F}^\dagger]_{S; nm} + [\mathbf{F}^\dagger]_{D; nm}) \\
 & \times \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\theta n}(E) \rangle_s. \quad (35)
 \end{aligned}$$

第三项 $S_3(0)$ 表示不同接触端之间透射态和反射态之间的相关性, 其中同样包括散射区等效接触端, 如(36)式所示. 第二项 $S_2(0)$ 和第三项 $S_3(0)$ 体现了载流子的交换效应(exchange effect).

$$\begin{aligned}
 S_3(0) = & - 2 \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \\
 & \times \sum_{m, n=1}^N \langle [\mathbf{r}^\dagger \mathbf{t}']_{mn} [\mathbf{t}'^\dagger \mathbf{r}]_{nm} \sigma_{Sm}(E) \sigma_{Dn}(E) \rangle_s \\
 & - 2 \frac{2e^2}{\pi \hbar} \int dE \sum_{\alpha=S, D} \sum_{m=1}^N \langle ([\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha; mm} \\
 & \times (1 - [\mathbf{F}^\dagger]_{S; mm} - [\mathbf{F}^\dagger]_{D; mm}) \\
 & \times \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\alpha m}(E) \rangle_s
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 2 \frac{2e^2}{\pi\hbar} \int dE \sum_{\alpha=S,D,m,n=1}^N \sum_{m \neq n} \langle [\mathbf{F}^\dagger]_{\alpha;mn} ([\mathbf{F}^\dagger]_{S;nm} \\
 & + [\mathbf{F}^\dagger]_{D;nm}) \sigma_{\theta m}(E) \sigma_{\alpha n}(E) \rangle_s. \quad (36)
 \end{aligned}$$

最后一项 $S_4(0)$ 表示注入噪声,如下

$$\begin{aligned}
 S_4(0) = & \frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \text{var} \left[\frac{e}{\pi\hbar} \int dE \right. \\
 & \times \left\{ \sum_{m=1}^N (1 - [\mathbf{F}]_{S;mm}) \sigma_{Sm}(E) \right. \\
 & - \sum_{m=1}^N [\mathbf{F}]_{D;mm} \sigma_{Dm}(E) \\
 & \left. \left. - \sum_{m=1}^N (1 - [\mathbf{F}]_{S;mm} - [\mathbf{F}]_{D;mm}) \sigma_{\theta m}(E) \right\} \right]. \quad (37)
 \end{aligned}$$

由(33)–(37)式所表示的零频率电流噪声功率谱为本文的主要结论.从以上的推导过程可知,本文所得的零频率电流噪声功率谱适用于任意输运机理,包括属于相干输运的弹道输运和介观扩散输运、属于非相干输运的宏观漂移扩散输运和准弹道输运(包含非弹性散射)以及各输运机理之间的过渡区.同时,本文所得噪声模型也考虑了泡利不相容原理和库仑作用对散粒噪声的抑制.因此,本文模型为零频率电流噪声的散射理论统一模型.

3. 数值模拟方法

文献[10]提出了一种在相干输运下考虑库仑作用的噪声数值模拟方法.文中运用非平衡格林函数(NEGF)方法自洽求解薛定谔方程和泊松方程,并在求解过程中使用 $\sigma_{\alpha n}(E)$ 替代平均占有概率

$f_{\alpha}(E) \cdot \sigma_{\alpha n}(E)$ 序列的产生采用 Monte Carlo 方法,生成一个均匀分布在 0 和 1 之间的随机数 r ,若 $r < f_{\alpha}(E)$ 则 $\sigma_{\alpha n}(E)$ 等于 1,否则等于 0.详细方法参考文献[10].

上述数值模拟方法同样适用于非相干输运,不同的是需要知道散射区等效接触端的平均占有概率 $f_{\theta}(E)$ 和随机占有数 $\sigma_{\theta n}(E)$.在 Born 近似下^[15, 16],运用传统的 NEGF 方法(不考虑库仑作用)进行数值计算得到散射矩阵,再根据(25)式即可得到平均占有概率 $f_{\theta}(E)$.知道 $f_{\theta}(E)$ 之后,随机占有数 $\sigma_{\theta n}(E)$ 的选取方法与相干输运下选取 $\sigma_{\alpha n}(E)$ ($\alpha = S, D$) 的方法一样.从上述计算方法可以看出,只有散射区作用态的平均占有概率与源漏区电子态的平均占有概率直接相关,而散射区作用态的随机占有数相对源漏区电子态占有数而言具有自身的独立性.作用态的这一特性与散射区等效接触端模型特性一致,满足全局流守恒,而不满足局域流守恒.同时,这种计算方法与非相干输运相符.在非相干输运下,非弹性散射会导致各能量通道之间发生电子交换.所以,源漏区的电子态都为空的能量通道在散射区有可能被占据,而有电子发射的能量通道在散射区也有可能为空.散射区作用态随机占有数的相对独立性可以很好的描述上述非相干输运物理图像.这也证明了本文所用的散射区等效接触端模型和散射区作用态数值模拟方法的正确性.

为了验证本文结论,将本文结论用于假设散射矩阵已知的双通道单势垒结构,各通道所遇势垒高度分别为 V_1 和 V_2 ,如图 3 所示.图中非相干输运的

$$\begin{aligned}
 \kappa_{11} &= \frac{\sqrt{2mE}}{h}, \quad \kappa_{12} = \frac{\sqrt{2m(E + V_D)}}{h}, \quad \gamma_1 = \frac{\sqrt{2m(V_1 + \Delta V - E)}}{h}, \\
 \kappa_{21} &= \frac{\sqrt{2mE}}{h}, \quad \kappa_{22} = \frac{\sqrt{2m(E + V_D)}}{h}, \quad \kappa_{22} = \frac{\sqrt{2m(V_1 + \Delta V - E)}}{h}. \\
 T_1(E) &= \left(\frac{\frac{4\kappa_{12}\kappa_{11}}{(\kappa_{12} + \kappa_{11})^2}}{1 + \left[\frac{(\kappa_{11}^2 + \gamma_1^2)(\kappa_{12}^2 + \gamma_1^2)}{\gamma_1^2(\kappa_{12} + \kappa_{11})^2} \right] \sinh^2(2\gamma_1 a)} \right) e^{-c}, \\
 T_2(E) &= \left(\frac{\frac{4\kappa_{22}\kappa_{21}}{(\kappa_{22} + \kappa_{21})^2}}{1 + \left[\frac{(\kappa_{21}^2 + \gamma_2^2)(\kappa_{22}^2 + \gamma_2^2)}{\gamma_2^2(\kappa_{22} + \kappa_{21})^2} \right] \sinh^2(2\gamma_2 a)} \right) e^{-c},
 \end{aligned}$$

$$R_1(E) = \left(1 - \frac{\frac{4\kappa_{12}\kappa_{11}}{(\kappa_{12} + \kappa_{11})^2}}{1 + \left[\frac{(\kappa_{11}^2 + \gamma_1^2)(\kappa_{12}^2 + \gamma_1^2)}{\gamma_1^2(\kappa_{12} + \kappa_{11})^2} \right] \sinh^2(2\gamma_1 a)} \right) e^{-c},$$

$$R_2(E) = \left(1 - \frac{\frac{4\kappa_{22}\kappa_{21}}{(\kappa_{22} + \kappa_{21})^2}}{1 + \left[\frac{(\kappa_{21}^2 + \gamma_2^2)(\kappa_{22}^2 + \gamma_2^2)}{\gamma_2^2(\kappa_{22} + \kappa_{21})^2} \right] \sinh^2(2\gamma_2 a)} \right) e^{-c}.$$

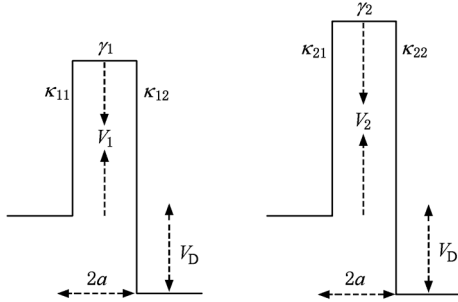


图3 单势垒双通道结构, V_D 为偏置电压(a 为势垒半宽度, T 和 R 分别表示透射系数和反射系数)

存在使得散射矩阵不再具有么正性^[5], 因此我们在透射系数和反射系数中人为地引入衰减因子

e^{-c} , c 表示非相干强度. 同时, 通道之间的载流子交换要求散射矩阵非对角元不等于零. 库仑作用通过势垒高度变化量与接触端电子态占有数的关系体现, 即

$$\Delta V = p \left(- \sum_{\kappa=S,D,\theta} \sigma_{\kappa 1}(E) + \sum_{\kappa=S,D,\theta} \sigma_{\kappa 2}(E) \right), \quad (38)$$

其中 p 表示库仑作用强度, ΔV 的统计平均值等于零.

根据透射系数和反射系数构造如表 1 所示的散射矩阵, 该散射矩阵虽然不是通过严格计算得到的, 但它能很好的表现非相干运输和库仑作用对散射矩阵的影响. 因此, 基于该散射矩阵计算所得结果能定性验证本文结论.

表 1 散射矩阵

$\sqrt{R_1(E)}$	$\sqrt{[1 - T_2(E) - R_2(E)] R_1(E)}$	$\sqrt{T_1(E)}$	$\sqrt{[1 - T_2(E) - R_2(E)] T_1(E)}$
$\sqrt{[1 - T_1(E) - R_1(E)] R_2(E)}$	$\sqrt{R_2(E)}$	$\sqrt{[1 - T_1(E) - R_1(E)] T_2(E)}$	$\sqrt{T_2(E)}$
$\sqrt{T_1(E)}$	$\sqrt{[1 - T_2(E) - R_2(E)] T_1(E)}$	$\sqrt{R_1(E)}$	$\sqrt{[1 - T_2(E) - R_2(E)] R_1(E)}$
$\sqrt{[1 - T_1(E) - R_1(E)] T_2(E)}$	$\sqrt{T_2(E)}$	$\sqrt{[1 - T_1(E) - R_1(E)] R_2(E)}$	$\sqrt{R_2(E)}$

从上一节的推导过程可知, 本文噪声和电流表达式在相干条件下 ($c = 0$) 与文献[10]的结论相似, 二者只相差自旋简并度 2, 而 Fano 因子相等. 将表 1 所示散射矩阵代入(33)–(37)式和文献[10]中的噪声表达式进行数值计算, 计算结果如图 4 所示, 图中所示结果与上述结论一致. 文献[10]指出, 弹道 MOS 器件沟道中的载流子数随栅极电压的增加而增多, 载流子之间的库仑作用加强, 进而导致散粒噪声抑制增强. 如图 4 所示, Fano 因子随库仑作用强度 p 值的增加而减小, 这一规律正说明了库仑作用的增强会导致散粒噪声抑制增强.

图 5 所示为不同非相干强度下由本文噪声表达式计算所得的 Fano 因子. 从图中结果可以看出 Fano 因子随非相干强度的增加而减小, 这与文献关于载

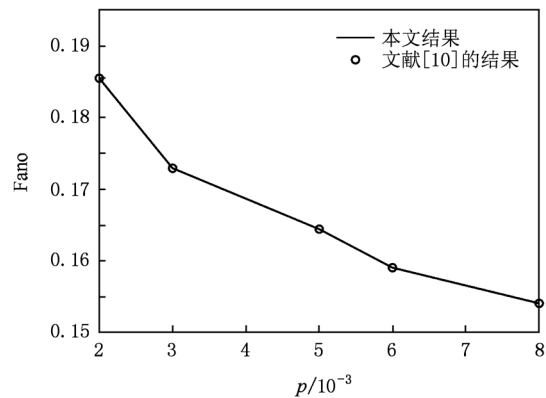
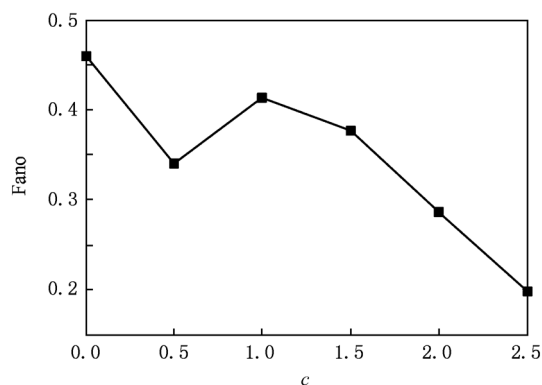


图4 Fano 因子随库仑作用强度变化曲线图, $V_D = 0.05$ V

流子所受非弹性散射次数越多散粒噪声抑制越强烈的报道一致^[17, 18].

图5 Fano因子随非相干强度变化曲线图, $V_D = 1.0$ V

4. 结 论

本文所提出的电流噪声散射理论模型适用于所有输运机理,并且同时考虑了泡利不相容原理和库仑作用对散粒噪声的抑制. 本文也提出了一种能在非相干输运下将库仑作用引入散射理论的数值模拟方法,该方法能有效地描述散射区的特性. 本文所提电流噪声模型和数值模拟方法可用以定量研究纳米尺度 MOSFET 的噪声特性,这也是作者下一步的研究工作.

- [1] Landauer R 1957 *Ibm. J. Res. Dev.* **1** 223
- [2] Büttiker M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761
- [3] Büttiker M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2901
- [4] Martin T, Landauer R 1992 *Phys. Rev. B* **45** 1742
- [5] Do V, Dollfus P, Nguyen V 2007 *Phys. Rev. B* **76** 125309
- [6] Zhang Z Y, Wang T H 2004 *Acta Phy. Sin.* **53** 942 (in Chinese) [张志勇、王太宏 2004 物理学报 **53** 942]
- [7] An X T, Li Y X, Liu J J 2007 *Acta Phy. Sin.* **56** 4105 (in Chinese) [安兴涛、李玉现、刘建军 2007 物理学报 **56** 4105]
- [8] Venugopal R, Paulsson M, Goasguen S, Datta S, Lundstrom M 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 5613
- [9] Büttiker M 1991 *Physica B: Condensed Matter* **175** 199
- [10] Betti A, Fiori G, Iannaccone G 2010 *Phys. Rev. B* **81** 035329
- [11] Büttiker M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 12485
- [12] Blanter Y, Büttiker M 2000 *Physics Reports* **336** 1
- [13] Martin M, Rengel R, Pascual E, Lusakowski J, Knap W, Gonzalez T 2008 *Physica Status Solidi (C)* **5** 123
- [14] Van der Ziel A 1986 *Noise in solid state devices and circuits* (New York: Wiley) 16 and 75—78
- [15] Datta S 1995 *Electronic transport in mesoscopic systems* (London: Cambridge University Press) 307—311
- [16] Svizhenko A, Anantram M 2003 *IEEE Trans. Electr. Dev.* **50** 1459
- [17] Naveh Y, Averin D, Likharev K 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15371
- [18] González T, Mateos J, Pardo D, Bulashenko O, Reggiani L 1999 *Phys. Rev. B* **60** 2670

A unified scattering theory model for current noise in nanoscale devices^{*}

Tang Dong-He[†] Du Lei Wang Ting-Lan Chen Hua Jia Xiao-Fei

(School of Technical Physics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 12 November 2010; revised manuscript received 24 December 2010)

Abstract

In the study of the noise characteristics of devices by traditional scattering theory, the incoherent transport and the effect of Coulomb interaction on shot noise are not taken into account, which may not be ignored in real nanoscale devices. Based on the equivalent contact model of the scattering region, we derive a unified scattering theory model for current noise, including the effects mentioned above. Our model covers the whole range of transport regime from coherent transport to incoherent transport. Our model also includes the effects of Pauli exclusion and Coulomb interaction on shot noise. Then, a numerical simulation approach is presented for our model. The approach coincides with the equivalent contact model in the property of the scattering region.

Keywords: current noise, scattering theory, unified model

PACS: 72.70.+m, 72.10.-d, 73.23.-b

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60376023).

[†] E-mail: dhtang2010@yahoo.cn