

УДК 538.935 PACS numbers: 71.15.Mb, 71.20.-b,
73.22.Pr, 73.23.Ad, 84.32.Ff, 85.35.-p

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА И ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Ю.А. Кругляк, проф.
Л.С. Кострицкая, старш. преп.

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, quantumnet@yandex.ua

В рамках концепции «снизу – вверх» нанозлектроники рассматриваются общие вопросы электронной проводимости, причины возникновения тока, роль электрохимических потенциалов, функций Ферми и фермиевского окна проводимости, модель упругого резистора, различные режимы транспорта электронов, моды проводимости, коэффициент прохождения. Излагается обобщенная модель транспорта электронов в режиме линейного отклика, развитая Р. Ландауэром, С. Даттой и М. Лундстромом применительно к проводникам любой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом, квази-баллистическом или диффузионном режиме.

Ключевые слова: нанозфизика, нанозлектроника, упругий резистор, моды проводимости, коэффициент прохождения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие нанозлектроники в последние 15 – 20 лет привело не только к созданию и широкому использованию нанотранзисторов и других разнообразных наноразмерных устройств электроники, но и к более глубокому пониманию причин возникновения тока, обмена и диссипации энергии и принципов работы устройств в целом как наноразмерных, так и привычных электронных приборов [1 – 4].

В наши дни фактически происходят революционные изменения в электронике, что влечет за собой необходимость пересмотра содержания университетского физического образования. Похожая революционная ситуация наблюдалась 50 лет назад после открытия транзистора, что привело не только к повсеместному использованию устройств микроэлектроники, но и к коренному пересмотру университетских и инженерных курсов общей физики, не говоря уже о специальных курсах в области электроники и смежных дисциплин.

С времен становления физики твердого тела используемые в электронике материалы и вещества характеризовались интегральными свойствами такими, например, как подвижность носителей тока или коэффициент оптического поглощения, с дальнейшим их использованием для объяснения наблюдаемых физических явлений и моделирования различных электронных устройств. С переходом в наши дни к мезо- и наноскопике нано- и молекулярные транзисторы требуют с самого начала для своего описания и моделирования применения законов квантовой механики и неравновесной статистической термодинамики, что неизбежно приведет к пересмотру физического образования уже на начальных университетских курсах.

Феноменологическая модель электронной проводимости Друде [5, 6] и поныне занимает центральное место и в преподавании и в экспериментальных измерениях электрических характеристик различных материалов [7]. В качестве причины, вызывающей элек-

трический ток, принимается внешнее электрическое поле

$$E_x = -\frac{dV}{dx} = \frac{V}{L}, \quad (1)$$

возникающее как градиент разности потенциалов V , подаваемой на проводник (рис. 1).

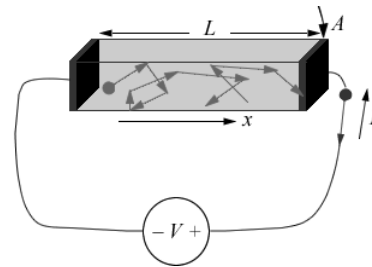


Рис. 1. – Электронный транспорт в режиме диффузии через проводник длины L и площади поперечного сечения A . Используется традиционное соглашение о знаках: ток I и направление движения электронов противоположны

Электрон испытывает действие силы

$$F_e = -qE_x \quad (2)$$

со стороны электрического поля и движется с дрейфовой скоростью

$$v_d = -\mu E_x, \quad (3)$$

характеризуемой подвижностью μ .

Ток равен суммарному заряду

$$Q = nqAL, \quad (4)$$

где n – объемная плотность электронов, перенесенная за время t ,

$$I = Q/t, \quad (5)$$

которое в свою очередь определяется скоростью дрейфа

$$t_i = L / v_d. \quad (6)$$

Для тока окончательно имеем

$$I = nqv_d A = nq\mu E_x A \quad (7)$$

и

$$I = nq\mu \frac{A}{L} V, \quad (8)$$

а для проводимости G и ее удельного значения σ имеем

$$G = nq\mu \frac{A}{L} = \sigma \frac{A}{L} \quad (9)$$

и

$$\sigma = nq\mu. \quad (10)$$

Согласно закону Ома, сопротивление

$$R \equiv V / I = \rho L / A, \quad (11)$$

где удельное сопротивление ρ , как и обратная ему удельная проводимость σ не зависят от геометрии проводника и являются свойствами материала, из которого изготовлен проводник. Закон Ома утверждает, что если уменьшить длину проводника в несколько раз, то в это же число раз уменьшится его сопротивление. А если уменьшить длину канала проводимости до очень маленьких размеров, то сопротивление практически «занулится»?

При обычном «диффузионном» движении электронов по проводнику среднее значение длины свободного пробега в полупроводниках меньше 1 мкм и изменяется в широких пределах в ту и в другую стороны в зависимости от температуры и природы материала, из которого сделан проводник. Длина канала проводимости в современных полевых транзисторах ~ 30 – 40 нм, что соответствует нескольким сотням атомов. Вполне уместно задаться вопросом: а если длина проводника меньше диффузионной длины свободного пробега, то движение электрона станет баллистическим? Будет ли сопротивление подчиняться закону Ома? А если уменьшить длину канала проводимости до нескольких атомов? Имеет ли смысл в этом случае говорить о сопротивлении как таковом? Все эти вопросы были предметом жарких дискуссий еще лет 15 – 20 назад. Сегодня ответы на эти вопросы даны и надежно подкреплены многочисленными экспериментальными данными. Измерено даже сопротивление молекулы водорода [8] и создан полевой транзистор на одиночном атоме фосфора [9].

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что впечатляющие успехи экспериментальной нанoeлектроники практически не повлияли на то как мы думаем, обучаем и объясняем понятия сопротивления, проводимости и работу электронных устройств в целом. И поныне, по-видимому, по историческим

причинам доминирует привычная концепция «сверху – вниз», от массивных проводников до молекул. Такой подход был вполне приемлем до тех пор, пока не было достаточного массива экспериментальных данных по измерению проводимости наноразмерных проводников. В последнее десятилетие ситуация изменилась. Накоплены обширные экспериментальные данные и для больших и для предельно малых проводников. Началась разработка концепции проводимости «снизу – вверх» [10 – 13], которая не только оказалась комплементарной концепции «сверху – вниз», но и привела к переосмысливанию принципов работы обычных электронных устройств. Вспомним, что в квантовой механике с самого начала доминировала концепция «снизу – вверх»: от атома водорода в направлении твердого тела.

Есть еще один круг задач в нанoeлектронике, для решения которых концепция «снизу – вверх» особенно привлекательна. Это – транспортные задачи. В обычной электронике транспорт частиц описывается законами механики – классической или квантовой. Транспорт по массивному проводнику сопровождается выделением тепла, что описывается законами термодинамики – обычной или статистической. Процессы в механике обратимы, а в термодинамике необратимы. Разделить эти два процесса – движения и выделения тепла – строго говоря, невозможно. Совсем другая ситуация в нанoeлектронике. Здесь процессы движения электронов и выделения тепла пространственно разделены: электроны движутся упруго, баллистически («упругий резистор»), а выделение тепла происходит лишь на границах контакта проводника с электродами. Концепция «упругого резистора» была предложена Ландауэром в 1957 году [14 – 16] задолго до ее экспериментального подтверждения в нанотранзисторах. Концепция «упругого резистора», строго говоря, является идеализацией, но она надежно подтверждена многочисленными экспериментальными данными для ультрамалых нанотранзисторов. Развитие концепции «снизу – вверх» Рольфом Ландауэром, Суприе Даттой и Марком Лундстромом (ЛДЛ) привело к созданию единой модели транспортных явлений в электронных устройствах как наноразмерных, так и макроскопических, изложению которой и посвящено настоящее сообщение. В своем изложении мы будем ближе всего следовать лекциям Марка Лундстрорма «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications» [11], прочитанных им в 2011 году, и лекциям Суприе Датты «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts», прочитанных им в 2012 году в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] и изданных позже в виде книг [12, 13]. Однако, сначала вернемся к вопросу о причинах возникновения электрического тока.

2. ПРИЧИНЫ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

На вопрос о причине возникновения тока при приложении разности потенциалов к концам проводника обычно ссылаются на связь плотности тока \vec{J} с

внешним приложенным электрическим полем \vec{E}

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (12)$$

что следует из (7); другими словами, причиной возникновения тока обычно считают электрическое поле. Ответ, в лучшем случае, не полный. Еще до подключения проводника к клеммам источника напряжения на электроны проводника действуют сильные электрические поля, создаваемые ядрами атомов, а ток тем не менее не возникает. Почему сильные внутренние электрические поля не вызывают движение электронов, а намного более слабое внешнее электрическое поле батареи вызывает движение электронов? Обычно говорят, что внутренние микроскопические поля не могут вызвать движение электронов, необходимо приложить внешнее макроскопическое поле. Трудно признать такое объяснение удовлетворительным. В современных экспериментах по измерению проводимости отдельных молекул невозможно с определенностью вычленив отдельно внутренние и внешние электрические поля. Приходится считаться с этим уроком, преподнесенным нам современной экспериментальной нанoeлектроникой, и заново задаться вопросом почему же движутся электроны при подключении батареи к концам проводника.

Для ответа на вопрос о причине возникновения тока нам с самого начала потребуются два понятия – плотности состояний проводника на единицу энергии $D(E)$, занятых электронами и свободных и электрохимического потенциала E_{F0} (рис. 2).

Простоты ради, что никак не скажется на окончательных выводах, будем пользоваться точечной моделью проводника, которая предполагает неизменность плотности состояний $D(E)$ при *движении* вдоль проводника. Если система, включающая источник электрод (S/Source), проводник M и стоковый электрод (D/Drain), находится в равновесии (закорочена), то электрохимический потенциал E_{F0} везде одинаков и все состояния с $E < E_{F0}$ заполнены электронами, а состояния с $E > E_{F0}$ пустые (рис. 2).

При включении в цепь источника напряжения (рис. 3) разность потенциалов V понижает все энергии на положительном электроде D на величину qV , где q – заряд электрона, в результате чего на электродах создается разность электрохимических потенциалов.

$$E_{F1} - E_{F2} = qV. \quad (13)$$

Точно так же как разность температур приводит к потоку тепла, а различие в уровнях жидкости ведет к ее перетоку, так и разность электрохимических потенциалов является причиной возникновения тока. Только состояния проводника в окне $E_{F1} - E_{F2}$ и находящиеся достаточно близко к значениям E_{F1} и E_{F2} дают вклад в поток электронов, тогда как все состояния, лежащие значительно выше E_{F1} и ниже E_{F2} , не играют никакой роли. Причина этого кроется в следующем.

Каждый контакт стремится привести токовый ка-

нал в равновесие с собой путем заполнения электронами всех состояний канала с энергией, меньшей электрохимического потенциала E_{F1} , и опорожнения состояний канала с энергией, большей потенциала E_{F2} .

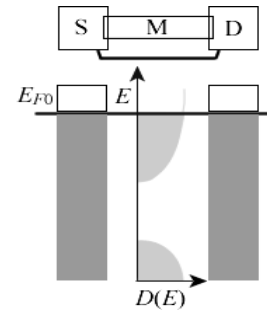


Рис. 2 – Первым шагом в объяснении работы любого электронного устройства должно быть задание плотности состояний $D(E)$ как функции энергии E внутри проводника M и определение равновесного значения электрохимического потенциала E_{F0} , отделяющего заполненные электронами состояния от пустых состояний.

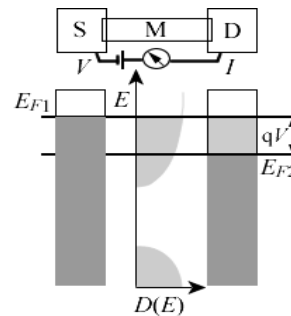


Рис. 3 – При подаче напряжения V на клеммы проводника потенциал анода D понижается на величину qV , создавая разность электрохимических потенциалов на концах проводника.

Рассмотрим токовый канал с состояниями, энергия которых меньше E_{F1} , но больше E_{F2} . Контакт 1 стремится заполнить эти состояния, поскольку их энергия меньше E_{F1} , а контакт 2 стремится опорожнить эти состояния, поскольку их энергия больше E_{F2} , что и приводит к непрерывному движению электронов от контакта 1 к контакту 2.

Рассмотрим теперь состояния канала с энергией, большей E_{F1} и E_{F2} . Оба контакта стремятся опорожнить эти состояния, но они и так пустые и не дают вклада в электрический ток. Аналогична ситуация с состояниями, энергия которых одновременно меньше обоих потенциалов E_{F1} и E_{F2} . Каждый из контактов стремится заполнить их электронами, но они уже заполнены, и вклада в ток дать не могут, а точнее не могут в пределах нескольких kT от ширины окна, в чем мы убедимся позже.

Подобная картина выглядит почти очевидной, если бы не привычное утверждение о том, что электроны движутся под действием электрического поля внутри проводника. Если бы это было так, то вклад в ток должны были бы дать все электроны, а не только те, энергия состояний которых лежит в пределах разности потенциалов на концах проводника.

2.1 Роль фермиевских функций

Итак, утверждалось, что в равновесии все состояния с энергией $E < E_{F0}$ заполнены электронами, а состояния с энергией $E > E_{F0}$ пустые (рис. 2). Это справедливо только в пределе абсолютного нуля температуры. Более точно, переход от полностью заполненных состояний к пустым совершается в зазоре $\sim \pm 2kT$, охватывающем значение $E = E_{F0}$, где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Математически этот переход описывается функцией Ферми

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}. \quad (14)$$

График функции Ферми показан на рис. 4 слева, возможно, в несколько непривычном виде с энергией в безразмерных единицах по вертикальной оси, что позволит нам позже при объяснении причины токообразования совместить функцию Ферми с графиком плотности состояний $D(E)$.

Функция Ферми играет ключевую роль в статистической механике, однако же для наших целей достаточно понимать, что состояния с низкой энергией всегда заняты ($f = 1$), тогда как состояния с высокой энергией всегда пустые ($f = 0$), а переход от $f = 1$ к $f = 0$ происходит в узком интервале энергии $\sim \pm 2kT$, охватывающем значение $E = E_{F0}$.

Действительно, на рис. 4 показана производная от функции Ферми, помноженная на kT с тем, чтобы сделать ее безразмерной:

$$F_T(E, E_F) = kT \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right). \quad (15)$$

Подставляя выражение для фермиевской функции (14), видно, что

$$F_T(E, E_F) = \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}, \quad (16)$$

где $x \equiv (E - E_F)/kT$. Из (16) видно, что

$$F_T(E, E_F) = F_T(E - E_F) = F_T(E_F - E), \quad (17)$$

а из уравнений (16) и (14) следует, что

$$F_T = f(1 - f). \quad (18)$$

Интегрирование функции (18) во всем интервале изменения энергии дает площадь, равную kT

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE F_T(E, E_F) = kT \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = kT [-f]_{-\infty}^{+\infty} = kT(1 - 0) = kT. \quad (19)$$

Так что функцию F_T можно приблизительно пред-

ставить себе в виде прямоугольного «импульса», центрированного относительно значения $E = E_F$ с высотой, равной $\frac{1}{4}$ и шириной $\sim 4kT$.

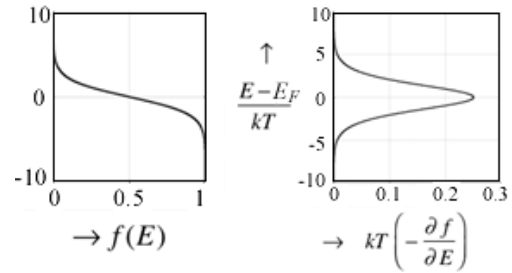


Рис. 4 – Графики функции Ферми и нормированной функции теплового уширения

Функция $P = \partial f / \partial E$ получила название фермиевского окна проводимости.

2.2 Выход из равновесия

Когда рассматриваемая система находится в равновесии (рис. 2), электроны распределяются по имеющимся состояниям в соответствии с функцией Ферми. При выходе из равновесия нет простых правил для вычисления функции распределения электронов. Все зависит от конкретной задачи, решать которую нужно методами неравновесной статистической механики.

В нашем специальном случае выхода из равновесия (рис. 3) можно надежно утверждать, что оба контакта S и D настолько велики по сравнению с каналом переноса электронов, что они не могут выйти из равновесия. Каждый из контактов локально находится в равновесии со своим собственным электрохимическим потенциалом, порождая две фермиевские функции (рис. 5).

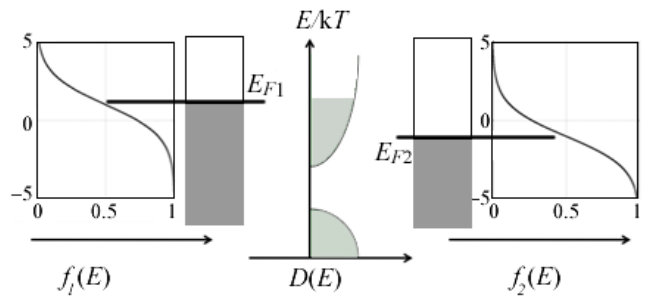


Рис. 5 – При выходе из равновесия электроны в контактах занимают доступные им состояния в соответствии с фермиевскими распределениями и значениями электрохимических потенциалов.

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F1}}{kT}\right) + 1} \quad (20)$$

и

$$f_2(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F2}}{kT}\right) + 1}. \quad (21)$$

Подводя итоги, утверждается, что причиной появления тока является различие в подготовке равновесных состояний контактов, отображаемое их соответствующими фермиевскими функциями $f_1(E)$ и $f_2(E)$. Качественно это справедливо для любых проводников – и наноразмерных и макроскопических. Однако, для наноразмерных проводников ток при любых значениях энергии электронных состояний в проводнике, как будет показано позже, пропорционален разности фермиевских распределений в обоих контактах: $I(E) \sim f_1(E) - f_2(E)$. Эта разность зануляется, если энергия E больше E_{F1} и E_{F2} , поскольку в этом случае обе функции Ферми равны нулю. Эта разность также зануляется, если энергия E меньше E_{F1} и E_{F2} , поскольку в этом случае обе фермиевские функции равны единице. Ток возникает лишь в окне $E_{F1} - E_{F2}$, если в этом окне есть хотя бы одно электронное состояние проводника.

2.3 Линейный отклик

Вольт-амперная характеристика обычно нелинейная, но из нее можно вычленить участок «линейного отклика», под которым подразумевается проводимость dI/dV при $V \rightarrow 0$.

Построим функцию разности двух фермиевских функций, нормированную к приложенному напряжению,

$$F(E) = \frac{f_1(E) - f_2(E)}{qV/kT}, \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} E_{F1} &= E_{F0} + (qV/2), \\ E_{F2} &= E_{F0} - (qV/2). \end{aligned} \quad (23)$$

Функция разности $F(E)$ сужается по мере того, как напряжение V , помноженное на заряд электрона, становится все меньше величины kT (рис. 6).

Отметим также, что по мере того, как kT начинает превосходить энергию qV , функция $F(E)$ все больше приближается к функции теплового уширения (15)

$$F(E) \rightarrow F_T(E) \text{ при } qV/kT \rightarrow 0,$$

так что из ур-я (22) следует, что

$$f_1(E) - f_2(E) = \frac{qV}{kT} F_T(E, E_{F0}) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV, \quad (24)$$

если приложенное напряжение, помноженное на заряд электрона, $qV = E_{F1} - E_{F2}$ становится намного меньшим kT .

Нам потребуется также следующее выражение

$$f(E) - f_0(E) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} (E_F - E_{F0}), \quad (25)$$

которое, как и уравнение (24), можно получить следующим образом.

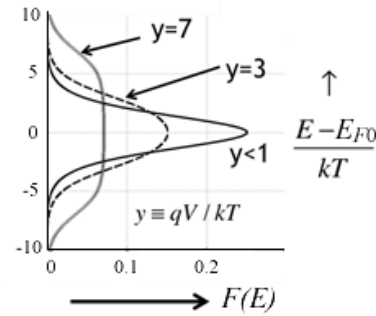


Рис. 6 – График функции разности $F(E)$ в зависимости от значения $(E - E_{F0})/kT$ для различных значений $qV/kT \equiv y$

Для функции Ферми

$$f(x) \equiv \frac{1}{e^x + 1}, \quad x \equiv \frac{E - E_F}{kT}, \quad (26)$$

имеем

$$\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial E} = \frac{df}{dx} \frac{1}{kT},$$

$$\frac{\partial f}{\partial E_F} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial E_F} = -\frac{df}{dx} \frac{1}{kT}, \quad (27)$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{df}{dx} \frac{E - E_F}{kT^2},$$

откуда

$$\frac{\partial f}{\partial E_F} = -\frac{\partial f}{\partial E}, \quad (28)$$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{E - E_F}{T} \frac{\partial f}{\partial E}.$$

Уравнение (25) получается из разложения функции Ферми вблизи точки равновесия в ряд Тейлора

$$f(E, E_F) \cong f(E, E_{F0}) + \left(\frac{\partial f}{\partial E_F} \right)_{E_F=E_{F0}} (E_F - E_{F0}). \quad (29)$$

Из уравнения (28) следует

$$\left(\frac{\partial f}{\partial E_F} \right)_{E_F=E_{F0}} = \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E_F=E_{F0}}. \quad (30)$$

Пусть $f(E)$ соответствует $f(E, E_F)$, а $f_0(E)$ соответствует $f(E, E_{F0})$, тогда

$$f(E) \approx f_0(E) + (E_F - E_{F0}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right), \quad (31)$$

что после перегруппировки дает искомое уравнение (25), которое справедливо при $E_F - E_{F0} \ll kT$.

Подведем итоги. Проводимость веществ может меняться более чем в 10^{20} раз, переходя, например, от серебра до стекла – веществ, весьма удаленных друг от друга в шкале проводимости. Стандартное объяснение различия в их проводимости якобы состоит в том, что плотность «свободных электронов» в этих веществах существенно отличается. Подобное объяснение немедленно требует пояснения, какие электроны свободные, а какие нет. Это различие становится все более абсурдным по мере перехода к наноразмерным проводникам.

Концепция «снизу – вверх» предлагает следующий простой ответ. Проводимость зависит от плотности состояний в окне шириной несколько kT , охватывающих равновесный электрохимический потенциал E_{F0} , определяемый функцией F_T (ф-ла (15), рис. 4), которая отлична от нуля в небольшом промежутке шириной несколько kT вокруг равновесного значения электрохимического потенциала.

Дело не в суммарном числе электронов, которое одного порядка как в серебре, так и в стекле. Ключевым моментом является наличие электронных состояний в области значений электрохимического потенциала E_{F0} (фермиевское окно проводимости), что в корне отличает одно вещество от другого.

Настоящий ответ нельзя назвать новым, и он хорошо известен специалистам в области микро- и нанoeлектроники. Тем не менее обсуждение проводимости и поныне обычно начинается с теории Друде [7], которая сыграла важнейшую историческую роль в понимании природы электрического тока. К сожалению, подход Друде породил два недоразумения, которые следовало бы преодолеть, а именно:

- (1) ток порождается электрическим полем и
- (2) ток зависит от числа электронов.

Оба недоразумения связаны друг с другом, поскольку если бы ток действительно порождался бы электрическим полем, то все электроны были бы подвержены влиянию поля.

Уроки, преподнесенные нам экспериментальной нанoeлектроникой, показывают, что ток порождается «подготовкой» двух контактов $f_1(E) - f_2(E)$, и эта разница не нулевая только в фермиевском окне проводимости вокруг равновесного электрохимического потенциала E_{F0} . Проводимость канала высокая или низкая зависит только от наличия электронных состояний в этом окне. К этому выводу обычно приходят на основе транспортного уравнения Больцмана [22] или формализма Кубо [23], тогда как предлагаемая концепция «снизу – вверх» сразу дает корректную картину возникновения тока.

3. ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В МОДЕЛИ ЛАНДАУЭРА – ДАТТЫ – ЛУНДСТРОМА

Мы рассмотрим модель электронного транспорта довольно простую и вместе с тем удивительно полезную в прикладном отношении и нашедшую широкое применение при анализе как электронного, так и фо-

нонного транспорта не только в режиме линейного отклика, но и в высоковольтном режиме горячих электронов, нелокального и квантового транспорта, транспорта в неупорядоченных и наноструктурированных материалах как наноразмерных, так и протяженных, в которых проводимость определяется только свойствами проводника. Свое начало она берет в работах Ландауэра [14 – 16], переосмысленных Даттой [12, 17, 18] и далее развитых Лундстромом применительно к самым различным материалам [13, 19].

Центральное место в любом электронном устройстве играет канал проводимости, характеризуемый плотностью состояний $D(E - U)$, где E – энергия состояний проводника, а U – самосогласованный электростатический потенциал затвора, позволяющий смещать состояния вверх или вниз по шкале энергии (рис. 7).

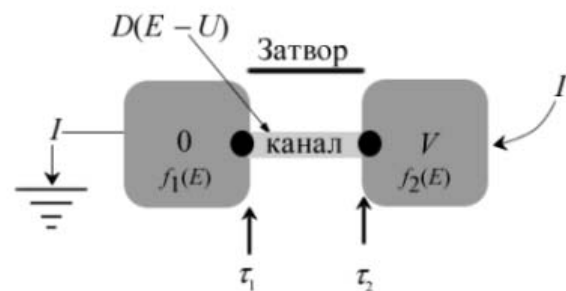


Рис. 7 – Типичное наноразмерное электронное устройство с контактами, характеризуемыми временами пролета τ

Далее будем рассматривать двухтерминальное устройство ($U = 0$). Канал проводимости связан с двумя «идеальными» контактами, способными к быстрому восстановлению равновесия в процессе электронного транспорта и характеризуемыми фермиевскими функциями (20) и (21) с соответствующими электрохимическими потенциалами E_{F1} и E_{F2} . При подаче напряжения V электрохимический потенциал E_{F2} понижается относительно потенциала E_{F1} на величину qV .

Связь контактов с каналом проводимости характеризуется временами пролета τ , дающими представление о том, как быстро электроны могут покинуть контакт или проводник. Для наноразмерных резисторов, например, молекул, времена τ контролируются контактами. Для протяженных резисторов с хорошими контактами, как мы убедимся позже, времена τ становятся сопоставимыми с временами пролета всей протяженности проводника. В общем случае качество обоих контактов может быть различным, что ведет к различным значениям τ_1 и τ_2 . Иногда времена τ удобнее выражать в единицах энергии $\gamma = \hbar/\tau$. Если в роли канала проводимости выступает одиночная молекула, величина γ приобретает простой физический смысл уширения энергетических уровней молекулы за счет конечности времени жизни электронов на молекулярных уровнях.

Предполагается, что канал имеет зонную структуру $E(k)$. Это требование, однако, не является обязательным [17]. Обсуждение ограничений и примени-

мости модели ЛДЛ можно найти в [12, 13, 17, 18].

Перейдем к построению математической модели транспорта ЛДЛ в концепции «снизу – вверх». Начать надо с нахождения зависимости плотности электронов и тока в проводнике в зависимости от фермиевских распределений и соответствующих электрохимических потенциалов, плотности состояний проводника и характеристических времен τ пролета.

3.1 Число электронов и ток в проводнике

Пусть пока только левый контакт 1 связан с каналом проводимости. Он стремится пополнить проводник электронами в соответствии со своим электрохимическим потенциалом E_{F1} . В конце концов равновесие между контактом и каналом проводимости наступит тогда, когда число электронов с энергиями между E и $E + dE$ станет равным

$$N'_{01}(E)dE = D(E)dEf_1(E), \quad (32)$$

где $D(E)$ – плотность состояний с энергией E (пусть каждое состояние заполнено двумя электронами с противоположными спинами), а $f_1(E)$ есть равновесная функция Ферми контакта 1.

Процесс установления равновесия между контактом 1 и каналом описывается простым кинетическим уравнением

$$F_1 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_1 = \frac{N'_{01}(E) - N'(E)}{\tau_1(E)}, \quad (33)$$

где скорость подачи электронов в канал dN'/dt положительна, если число электронов в канале N' меньше его равновесного значения N'_{01} , и отрицательна в противном случае. Если канал первоначально пустой, то он заполняется электронами до их равновесного числа; если же канал переполнен электронами, то он опустошается до тех пор, пока в канале не будет достигнуто равновесное число электронов.

Если канал проводимости связан только с контактом 2, аналогичные рассуждения приводят к следующей паре уравнений:

$$N'_{02}(E)dE = D(E)dEf_2(E), \quad (34)$$

$$F_2 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_2 = \frac{N'_{02}(E) - N'(E)}{\tau_2(E)}. \quad (35)$$

Когда канал проводимости связан одновременно с двумя контактами и оба контакта одновременно пополняют электронами канал и опорожняют его, имеем

$$\left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_{1+2} = F_1 + F_2 = \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_1 + \left. \frac{dN'(E)}{dt} \right|_2. \quad (36)$$

В состоянии динамического равновесия левые части кинетического уравнения (36) равны нулю. При-

равнивая нулю правую часть равенства (36) и подставляя выражения для скоростей на обоих контактах 1 и 2 по уравнениям (33) и (35), для числа электронов в канале проводимости получим:

$$N'(E) = \frac{(1/\tau_1)}{(1/\tau_1) + (1/\tau_2)} N'_{01}(E) + \frac{(1/\tau_2)}{(1/\tau_1) + (1/\tau_2)} N'_{02}(E). \quad (37)$$

Простоты ради, положим $\tau_1 = \tau_2$ и подставим равновесные значения числа электронов N'_{01} и N'_{02} по уравнениям (32) и (34). Тогда для числа электронов в канале в состоянии динамического равновесия в дифференциальной форме получим:

$$N'(E)dE = \frac{D(E)dE}{2} f_1(E) + \frac{D(E)dE}{2} f_2(E). \quad (38)$$

Остается проинтегрировать по всему спектру энергий и получим число электронов в канале проводимости в состоянии динамического равновесия двух контактов с электрохимическими потенциалами E_{F1} и E_{F2} , разница между которыми пропорциональна напряжению, поданному на концы проводника, а именно:

$$N = \int N'(E)dE = \int \left[\frac{D(E)}{2} f_1(E) + \frac{D(E)}{2} f_2(E) \right] dE. \quad (39)$$

Получен ответ на первый из поставленных нами двух вопросов: найдено число электронов, или иначе плотности электронов, если известны геометрические параметры проводника, в зависимости от плотности состояний проводника и фермиевских распределений на контактах. Когда электронное устройство (рис. 7) находится в равновесии ($f_1 = f_2 \equiv f_0$), получаем стандартное выражение для равновесного числа электронов в проводнике [20]

$$N_0 = \int D(E)f_0(E)dE, \quad (40)$$

в отличие от которого уравнение (39) пригодно как для равновесного состояния устройства (рис. 7), так и для случая, когда электронное устройство выведено далеко за пределы равновесия.

Напомним, что для 1D-, 2D- и 3D-проводников плотность состояния пропорциональна, соответственно, длине L проводника, площади его поперечного сечения A и объему проводника Ω :

$$D(E) \approx \{L, A, \Omega\}, \quad (41)$$

а плотность электронов определяется, соответственно, как

$$n_L = N/L, n_S = N/A, n = N/\Omega. \quad (42)$$

Перейдем к вычислению тока в состоянии динамического равновесия. В этом состоянии один из контактов пополняет канал проводимости электронами, а другой контакт опустошает его. Если $E_{F1} > E_{F2}$, контакт 1 инжектирует электроны, а контакт 2 поглощает их, и наоборот, если $E_{F1} < E_{F2}$.

Скорости, с которыми электроны покидают или поглощаются контактами 1 и 2, даются уравнениями (33) и (35). В состоянии динамического равновесия

$$F_1 + F_2 = 0. \quad (43)$$

По договоренности, ток считается положительным, если он входит в контакт 2 (рис. 7), так что

$$I' = qF_1 = -qF_2. \quad (44)$$

Выразив ток один раз через F_1 , а второй раз через F_2 согласно (44), и сложив эти одинаковые токи, сразу получим, что

$$I' = \frac{q}{2}(F_1 - F_2). \quad (45)$$

Остается подставить значения для скоростей (33) и (35) в предположении одинаковости контактов ($\tau_1 = \tau_2 \equiv \tau$), затем воспользоваться (32) и (34), и мы имеем:

$$\begin{aligned} I'(E) &= \frac{q}{2\tau(E)}(N'_{01} - N'_{02}) = \\ &= \frac{2q}{h} \frac{\gamma(E)}{2} \pi D(E)(f_1 - f_2), \end{aligned} \quad (46)$$

где характеристическое время пролета τ выражено в единицах энергии, а именно:

$$\gamma \equiv \frac{\hbar}{\tau(E)}. \quad (47)$$

Интегрируя (46) по всему спектру энергий, окончательно для тока в состоянии динамического равновесия получаем

$$\begin{aligned} I &= \int I'(E)dE = \\ &= \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2}(f_1 - f_2)dE. \end{aligned} \quad (48)$$

Согласно (48), ток возникает лишь тогда, когда фермиевские распределения на контактах различны, то ли по причине различия электрохимических потенциалов, то ли по причине различия в температуре контактов, то ли сразу по этим обоим причинам. При различии в электрохимических потенциалах контактов один из контактов стремится передать электроны проводнику, а другой стремится принять их на себя.

Рассмотрение тока при различии в температуре контактов потребует отдельной публикации.

Подведем итоги. Получены два основных уравнения транспортной модели ЛДЛ:

$$N = \int \frac{D(E)}{2}(f_1 + f_2)dE, \quad (49)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2}(f_1 - f_2)dE. \quad (50)$$

Первое из них выражает число электронов в проводнике в состоянии динамического равновесия через плотность состояний проводника и фермиевские функции контактов, а второе уравнение дает ток через эти же характеристики электронного устройства и через характеристическое время пролета. Дальнейшее построение модели ЛДЛ фактически сводится к использованию и развитию этих двух основных уравнений.

3.2 Моды проводимости

Как и ожидалось, ток пропорционален разности фермиевских функций контактов. Позже мы убедимся, что комбинация фундаментальных констант $2q/h$ играет важную роль в выражении для тока (50). А каков смысл произведения $\gamma\pi D/2$?

Параметр γ (47) имеет размерность энергии, а размерность плотности состояний D есть (энергия)⁻¹, так что интересующее нас произведение $\gamma\pi D/2$ не имеет размерности. В отношении размерности плотности состояний обратим внимание на то, что мы оперируем с числом электронов, а не с плотностями электронов (42), как это обычно принято в физике полупроводников, где плотность состояний для 3D-образца имеет размерность (энергия·объем)⁻¹. Мы сейчас увидим, что произведение $\gamma\pi D/2 = M(E)$ имеет физический смысл числа мод (иначе, каналов) проводимости резистора.

Рассмотрим 2D баллистический резистор длины L , меньшей средней длины свободного пробега λ , вытянутый вдоль оси x и шириной W вдоль оси y . Полная плотность состояний

$$D(E) = D_{2D}(E)L \cdot W, \quad (51)$$

$$D_{2D}(E) = g_v \frac{m^*}{\pi\hbar^2}, \quad (52)$$

где D_{2D} есть плотность состояний на единицу площади, выписанная для параболической зонной структуры с эффективной массой m^* и долинным вырождением g_v [20].

Определим характеристическое время τ . Из (38) и (46) имеем:

$$\frac{qN'(E)dE}{I'(E)dE} = \frac{\hbar}{\gamma} \frac{(f_1 + f_2)}{(f_1 - f_2)}. \quad (53)$$

Приложим к концам проводника достаточно большое напряжение такое, чтобы имело место $E_{F2} \ll E_{F1}$, так что $f_2 \ll f_1$. Тогда из (53) имеем

$$\frac{qN'(E)dE}{I'(E)dE} = \frac{\text{Накопленный заряд}}{\text{Ток}} = \frac{\hbar}{\gamma} = \tau(E). \quad (54)$$

Число электронов в канале

$$N'(E) = n'_s(E)L \cdot W, \quad (55)$$

где n'_s – электронная плотность на единицу площади, а ток

$$I'(E) = qWn'_s(E)\langle v_x^+(E) \rangle, \quad (56)$$

так что из (54) имеем:

$$\tau(E) = \frac{L}{\langle v_x^+(E) \rangle}, \quad (57)$$

что есть просто среднее время пролета электрона через всю длину упругого резистора.

Для оценки τ нужно вычислить среднюю скорость пролета от контакта 1 до контакта 2 в направлении $+x$ (рис. 1). Эта скорость в случае баллистического транспорта, т.е. без изменения направления движения

$$\langle v_x^+(E) \rangle = v(E)\langle \cos \theta \rangle, \quad (58)$$

где угол θ отсчитывается от положительного направления оси x . Поскольку в нашем случае

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \theta d\theta}{\pi} = \frac{2}{\pi}, \quad (59)$$

для средней скорости в случае параболического дисперсионного соотношения и изотропии скорости имеем:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi}v = \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2(E-E_C)}{m^*}}. \quad (60)$$

Определяя число мод проводимости как

$$M(E) = \gamma(E)\pi\frac{D(E)}{2} \quad (61)$$

и используя определение γ по (47) и плотности состояний для 2D проводника по (51) для числа мод 2D проводника, окончательно получаем

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W\frac{\hbar}{4}\langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E). \quad (62)$$

Аналогичные соображения для 1D и 3D проводни-

ков дают

$$M(E) = M_{1D}(E) = \frac{\hbar}{4}\langle v_x^+(E) \rangle D_{1D}(E),$$

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W\frac{\hbar}{4}\langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (63)$$

$$M(E) = AM_{3D}(E) = A\frac{\hbar}{4}\langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E).$$

Обратим внимание, что в случае 2D проводников число мод проводимости пропорционально ширине проводника W , а для 3D проводников – площади их поперечного сечения A .

Заслуживает внимания физический смысл полученных результатов (63). Так, для 2D проводника с учетом (60) и (52) число мод проводимости

$$WM_{2D}(E) = g_v W \frac{\sqrt{2m^*(E-E_C)}}{\pi\hbar}. \quad (64)$$

Для частного случая параболической дисперсии

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (65)$$

и выражая волновой вектор через де Бройлевскую длину волны

$$\lambda_B = 2\pi/k, \quad (66)$$

вместо общего выражения (64) для числа мод проводимости 2D проводника имеем:

$$WM_{2D}(E) = g_v \frac{Wk}{\pi} = g_v \frac{W}{\lambda_B(E)/2}, \quad (67)$$

что открывает возможность их физической интерпретации, а именно: число мод проводимости 2D проводника (с учетом долинного вырождения) показывает сколько де Бройлевских полуволен энергии E укладывается по ширине 2D проводника.

Целочисленность мод обеспечивается граничными условиями, согласно которым волновые функции электронов на обеих сторонах 2D проводника должны обращаться в нуль. Сам термин «моды» заимствован из теории волноводов.

Теперь мы можем базовые уравнения модели ЛДЛ (49) и (50) переписать в виде

$$N = \int \frac{D(E)}{2}(f_1 + f_2)dE, \quad (68)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi\frac{D(E)}{2}(f_1 - f_2)dE.$$

Таким образом, для вычисления числа электронов

и тока в проводнике кроме фермиевских функций контактов нужно знать плотность состояний $D(E)$ и число мод $M(E)$ проводника.

Для параболической дисперсии (65) плотности состояний хорошо известны [20]:

$$D_{1D}(E)L = \frac{L}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_C}} H(E - E_C), \quad (69)$$

$$D_{2D}(E)A = A \frac{m^*}{\pi\hbar^2} H(E - E_C), \quad (70)$$

$$D_{3D}(E)\Omega = \Omega \frac{m^* \sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi^2 \hbar^3} H(E - E_C), \quad (71)$$

где $H(E - E_C)$ – ступенчатая функция Хевисайда, а соответствующие моды проводимости таковы:

$$M_{1D}(E) = H(E - E_C), \quad (72)$$

$$M_{2D}(E) = g_v \frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi\hbar} H(E - E_C), \quad (73)$$

$$M_{3D}(E) = g_v \frac{m^*(E - E_C)}{2\pi\hbar^2} H(E - E_C). \quad (74)$$

Поведение плотности состояний $D(E)$ и числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- и 3D-проводников с параболической дисперсией качественно показано на рис. 8.

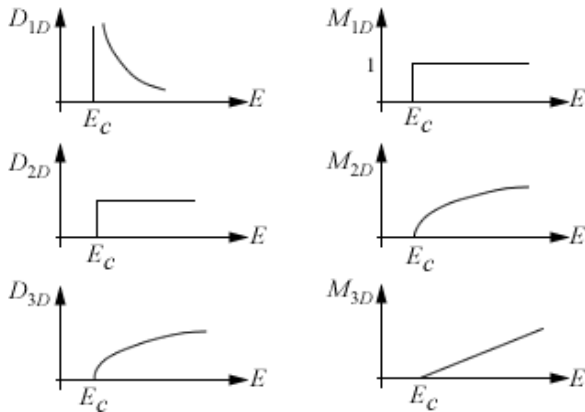


Рис. 8 – Сравнительное поведение плотности состояний $D(E)$ и числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- и 3D-проводников с параболической дисперсией (65)

Плотность состояний для 1D проводника обратно пропорциональна \sqrt{E} , для 2D проводника постоянна, для 3D – прямо пропорциональна \sqrt{E} . Что касается мод проводимости, то 1D проводник характеризуется единственной модой проводимости, равной функции Хевисайда, что позволяет определить ее калибровку для использования ее в формулах (69) – (74). Число же мод 2D проводника прямо пропорциональна \sqrt{E} , а 3D проводника расчет с энергией линейно.

Заключая этот раздел, подведем итоги:

1. Плотность состояний $D(E)$ нужна для вычисления плотности носителей тока.

2. Число мод $M(E)$ используется для вычисления тока.

3. Число мод $M(E)$ пропорционально средней скорости носителей тока в направлении их движения, помноженной на плотность состояний $D(E)$.

4. Число мод $M(E)$ зависит от зонной структуры и размерности проводника.

Хотя выше в качестве примера и рассмотрены проводники с параболической дисперсией, формулы (63) носят общий характер. Мы воспользуемся ими в другом обзоре, посвященном графену, дисперсия у которого линейная [21]. Для произвольной дисперсионной зависимости $E(k)$ разработаны численные методы вычисления числа мод проводимости [22].

3.3 Коэффициент прохождения

До сих пор мы рассматривали баллистический транспорт. Перейдем к рассмотрению диффузионного транспорта, когда $L \gg \lambda$. Электроны, инжектируемые контактами 1 и 2, подвержены случайным блужданиям. Некоторые из них заканчиваются на инжектирующем контакте, а иные – на другом контакте. Если на контакт 2 подан положительный потенциал, то большая часть блужданий закончится на этом контакте.

Ключевым параметром в модели ЛДЛ есть величина $\gamma\pi D(E)/2$, которая в случае баллистического транспорта оказывается равной числу мод проводимости $M(E)$. Уширение γ и время пролета τ связаны между собой: $\gamma = \hbar/\tau$. В режиме диффузионного транспорта следует ожидать увеличения времени τ , что влечет за собой уменьшения величины $\gamma\pi D(E)/2$. Сейчас покажем, что в случае диффузионного транспорта $\gamma\pi D(E)/2 = M(E) \cdot T(E)$, где $T(E) \leq 1$ получил название коэффициента прохождения (transmission coefficient).

В режиме баллистического транспорта электроны инжектируются в проводник под разными углами, в результате чего время пролета описывается некой функцией распределения. Величину γ мы оценивали через среднее время пролета

$$\gamma(E) = \frac{\hbar}{\langle \tau(E) \rangle}, \quad (75)$$

где

$$\langle \tau(E) \rangle = \frac{L}{\langle v_x^+(E) \rangle} = \frac{L}{v(E) \langle \cos \vartheta \rangle} = \frac{L}{v(E) (2/\pi)}. \quad (76)$$

Наша задача сейчас оценить $\langle \tau(E) \rangle$ в режиме диффузионного транспорта. Воспользуемся первым законом диффузии Фика применительно к потоку электронов в 2D проводнике:

$$J = q\bar{D} \frac{dn_s}{dx}, \quad (77)$$

где плотность тока J пропорциональна градиенту плотности электронов с коэффициентом диффузии \bar{D}

в роли коэффициента пропорциональности.

Пусть электроны в проводник с подавляющим преимуществом поставляют только контакт 1, т.е. $f_1 \approx 1$, $f_2 \approx 0$. На левом конце проводника ($x = 0$) есть конечная плотность электронов $\Delta n_s(0)$ (рис. 9).

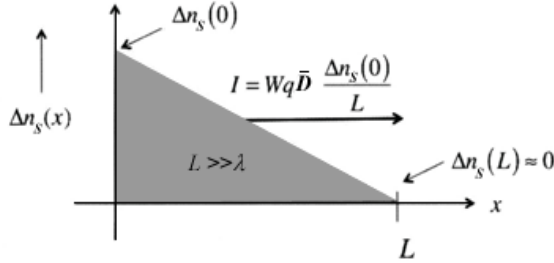


Рис. 9 – К выводу времени пролета τ_D в диффузионном режиме

Поскольку процессы рекомбинации/рождения носителей тока не учитываются, то профиль плотности электронов на всем протяжении проводника будет линейным с практически нулевым значением плотности на правом конце проводника: $\Delta n_s(L) \rightarrow 0$ за счет $f_2 \approx 0$. Время пролета, согласно (54), есть отношение накопленного в проводнике заряда к току

$$\tau_D = \frac{qN}{I} = \frac{Wq\Delta n_s(0)L/2}{Wq\bar{D}\Delta n_s(0)/L} = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (78)$$

где накопленный в проводнике заряд qN есть половина площади прямоугольника (рис. 9), построенного для 2D проводника на его длине L и ширине W , а ток $I = J \cdot W$ и, согласно (77), $dn_s/dx = \Delta n_s(0)/L$. Таким образом, время пролета в диффузионном режиме

$$\tau_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (79)$$

тогда как в баллистическом режиме

$$\tau_B = \frac{L}{\langle v_x^+ \rangle}. \quad (80)$$

Собирая все вместе, имеем:

$$\begin{aligned} \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} &= \frac{\hbar}{\tau_D} \pi \frac{D(E)}{2} = \\ &= \frac{\hbar}{\tau_B} \pi \frac{D(E)}{2} \frac{\tau_B}{\tau_D} \equiv M(E)T(E) \end{aligned} \quad (81)$$

где коэффициент прохождения есть отношение двух времен пролета – в баллистическом режиме и в диффузионном:

$$T(E) = \frac{\tau_B}{\tau_D}. \quad (82)$$

Другими словами, при наличии рассеяния число мод $M(E)$ нужно заменить на $M(E) \cdot T(E)$.

Для оценки $T(E)$ воспользуемся определением коэффициента прохождения (82) и выражениями (79) и (80). Тогда

$$T(E) = \frac{2\bar{D}}{L\langle v_x^+ \rangle}. \quad (83)$$

Опираясь на теорию случайных блужданий [23], можно показать [24], что коэффициент диффузии

$$\bar{D} = \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2}, \quad (84)$$

что вместе с (83) дает простое выражение для коэффициента прохождения

$$T(E) = \frac{\lambda}{L} \ll 1 \quad (85)$$

Как и ожидалось, число мод проводимости в диффузионном режиме $M(E) \cdot T(E)$ резко уменьшается.

Выражение для коэффициента прохождения (85) верно для диффузионного режима. Можно показать [24], что в общем случае коэффициент прохождения

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}. \quad (86)$$

Это выражение справедливо как для диффузионного режима ($L \gg \lambda$), так и для баллистического ($L \ll \lambda$), приближаясь к единице, так и для промежуточных случаев. Подводя итоги, в общем случае имеет место соотношение

$$\gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} = M(E)T(E), \quad (87)$$

в котором число мод определяется общими выражениями (63), а в отношении коэффициента прохождения в реальных экспериментах рассматривают три режима:

Диффузионный: $L \gg \lambda$; $T = \lambda/L \ll 1$,

Баллистический: $L \ll \lambda$; $T \rightarrow 1$, (88)

Квази-баллистический: $L \approx \lambda$; $T < 1$.

Примечательно, что сравнительно простая транспортная модель ЛДЛ применима ко всем трем режимам.

3.4 Режим линейного отклика

Для тока в модели ЛДЛ получены два выражения:

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE, \quad (89)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int T(E)M(E)(f_1 - f_2) dE.$$

В них не учитывается важный в прикладном от-

ношении низковольтный режим. Если подать на проводник большое напряжение, то вследствие появления множества неупругих столкновений в режиме горячих электронов нарушатся принятые нами допущения, которые привели нас к модели независимых мод проводимости. Мы далее продолжим строить модель ЛДЛ для режима линейного отклика, что позволит упростить уравнения (89).

В режиме линейного отклика (п. 2.3), иначе линейного транспорта или почти равновесного транспорта (near-equilibrium transport), фермиевские функции контактов (20) и (21) и равновесная функция Ферми

$$f_0(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F0}}{kT}\right) + 1}, \quad (90)$$

находятся в соотношении

$$f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E) \approx f_0(E), \quad (91)$$

при этом подаваемое на концы проводника напряжение

$$V = \Delta E_F / q = (E_{F1} - E_{F2}) / q, \quad (92)$$

незначительно. Пользуясь малостью ΔE_F , фермиевскую функцию контакта 2 можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться первой степенью, а именно:

$$f_2 = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} \Delta E_F = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} qV, \quad (93)$$

а учитывая (30) и (91), окончательно для разности фермиевских функций контактов в режиме линейного отклика имеем:

$$f_1 - f_2 = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) qV. \quad (94)$$

Окончательно для тока (89) и проводимости в режиме линейного отклика модели ЛДЛ имеем:

$$I = \left[\frac{2q^2}{h} \int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE \right] V = GV, \quad (95)$$

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE, \quad (96)$$

где последнее уравнение известно как уравнение Ландауэра для проводимости.

Теперь мы имеем выражение для проводимости, в котором проводимость связана со свойствами материала проводника. Эти выражения справедливы для 1D-, 2D- и 3D-проводников как в баллистическом режиме, так и в диффузионном, если пользоваться соответствующими выражениями для числа мод (63).

3.5 Транспорт в массивных проводниках

Модель ЛДЛ пригодна как для коротких, наноразмерных, так и длинных, массивных проводников. Когда канал проводимости достаточно длинный, роль контактов пренебрежимо мала и проводимость определяется свойствами материала проводника. Выражения для тока в массивных проводниках в режиме линейного отклика можно получить из любого из общих уравнений (89). Воспользуемся первым из них.

Перепишем разность фермиевских функций (94) в виде

$$f_1 - f_2 \approx -\frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}} \Delta E_F. \quad (97)$$

Тогда для тока имеем:

$$I = \frac{2q}{h} \int \left[\gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}}\right) \Delta E_F \right] dE. \quad (98)$$

В массивных проводниках всегда реализуется диффузионный режим, так что

$$\gamma(E) = \frac{\hbar}{\tau(E)} = \frac{\hbar}{L^2 / 2D(E)}. \quad (99)$$

Пусть мы рассматриваем 2D проводник. Для него, согласно (70),

$$D(E) = WLD_{2D}(E). \quad (100)$$

Подставляя (99) и (100) в (98), для плотности тока получаем

$$J_x = I / W = \left[\int qD(E) D_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E_{F0}}\right) dE \right] \frac{\Delta E_F}{L}. \quad (101)$$

Поскольку массивный проводник находится в режиме линейного отклика и почти равновесного транспорта по всей длине проводника, мы вправе предположить линейное падение электрохимического потенциала от контакта 1 до контакта 2 так, что $\Delta E_F / L$ есть градиент фермиевской функции dE_F / dx , и (101) можно переписать в виде

$$J_x = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F)}{dx}, \quad (102)$$

где удельная проводимость

$$\sigma = \int q^2 D(E) D_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (103)$$

Оба уравнения (102) и (103) представляют собой стандартный результат, получаемый обычно в термо-

динамике необратимых процессов или же путем решения транспортного уравнения Больцмана [7]. Мы же получили эти стандартные результаты для массивных проводников, предположив в модели ЛДЛ лишь то, что длина проводника намного превышает длину свободного пробега.

Уравнение (102) можно переписать иначе. Из теории полупроводников для невырожденных n -проводников известно [20], что

$$n_S = N_{2D} \exp[(E_F - E_C)kT],$$

$$N_{2D} = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2},$$

$$E_F = E_C + kT \ln \frac{N_{2D}}{n_S},$$

$$\sigma = nq\mu.$$

Для этого случая уравнение для плотности тока (102) можно переписать в виде:

$$J_x = n_S q \mu E_x + q \bar{D} \frac{dn_S}{dx}, \quad (104)$$

где

$$\frac{\bar{D}}{\mu} = \frac{kT}{q}, \quad (105)$$

есть соотношение Эйнштейна между коэффициентом диффузии электронов и их подвижностью.

Уравнение (104) дрейфа и диффузии хорошо известно в физике полупроводников и обычно служит начальным приближением при анализе полупроводниковых устройств [20]. Оно справедливо для невырожденных проводников в предположении постоянства температуры вдоль проводника и, как мы видели, предполагает почти равновесный транспорт.

До сих пор речь шла только о транспорте электронов. Если же речь пойдет о транспорте «дырок», то в модели ЛДЛ нужно лишь помнить, что «дырки» описываются своим электрохимическим потенциалом $E_F^{(p)}$, отличным от химпотенциала электронов E_F , в обозначении которого мы просто опускали верхний индекс (n) за очевидностью его. Это связано с тем, что в валентной зоне и в зоне проводимости носители тока отделены друг от друга и в равновесии находятся лишь носители тока в каждой из зон. Процессы рекомбинации/рождения носителей тока, которые связывают заселенности в этих зонах, идут намного медленнее, чем процессы рассеяния, устанавливающие равновесие в каждой из зон.

Для электронов в зоне проводимости имеем уравнения (102), (103) и (91). Уравнения (102) и (103) выводились без учета природы носителей тока. Поэтому для «дырок» в валентной зоне эти уравнения

нужно просто переписать с «дырочным» электрохимическим потенциалом, а именно:

$$J_x^{(p)} = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F^{(p)})}{dx}, \quad (106)$$

$$\sigma_p = \int q^2 D_p(E) D_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0^{(p)}}{\partial E} \right) dE, \quad (107)$$

$$f_0^{(p)}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F0}^{(p)}}{kT}\right) + 1}. \quad (108)$$

Полный ток есть сумма токов в каждой из зон.

Осталось подвести итоги. Уравнение Ландауэра для проводимости (96) описывает электронный транспорт в проводнике с общих позиций. Проводимость пропорциональна фундаментальным константам ($G \approx 2q^2/h$), которые определяют квант проводимости, ассоциируемый с контактами, в чем мы убедимся в следующей части настоящего обзора. Проводимость зависит от числа мод проводимости $M(E)$ и от коэффициента прохождения $T(E)$, представляющего собой вероятность того, что электрон с энергией E , инжектированный контактом 1, достигнет контакта 2. Полную проводимость находим путем интегрирования вкладов от всех мод проводимости. Уравнение справедливо для 1D-, 2D- и 3D-проводников, нужно лишь просто корректно вычислить число мод проводимости по (63). Справедливо оно как для баллистических нанорезисторов, так и для массивных резисторов и корректно описывает промежуточные ситуации. Следующую часть обзора мы начнем с уравнения Ландауэра и посвятим ее вычислению проводимости для 1D-, 2D- и 3D-проводников, работающих в режиме баллистическом или диффузионном, как, впрочем, и в любом промежуточном. Нужно также помнить, что электронный транспорт рассматривался нами в изотермических условиях. Термоэлектрические явления и термоэлектрики с позиций транспортной модели ЛДЛ будут рассмотрены отдельно.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны Н.Е.Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mitin V.V., Kochelap V.A., Strosio M.A., *Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
2. Hoeflinger B. (Ed.). *Chips 2020: A Guide to the Future of Nanoelectronics*. Berlin: Springer-Verlag, 2012.
3. Мартинес-Дуарт Дж.М. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники / Дж.М. Мартинес-Дуарт, Р.Дж. Мартин-Палма, Ф. Агулло-Рueda. - Москва: Техносфера, 2007.
4. Драгунов В.П. Основы нанoeлектроники / Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. - (Москва: Логос: 2006).
5. Drude P. Zur Elektronentheorie der metalle. *Ann. Physik.*, 1900, vol. 306, no.3, pp. 566, doi:10.1002/andp.19003060312.
6. Drude P. Zur Elektronentheorie der Metalle: II. Teil. *Galvanomag-*

- netische und thermomagnetische Effecte. *Ann. Physik.*, 1900, vol. 308, no.11, pp.369, doi: 10.1002/andp.19003081102.
7. Ашкрофт Н. Физика твердого тела / Мермин Н. - (М: Мир:1979).
 8. Smit R.H.M., Noat Y., Untiedt C., Lang N.D., van Hemert M.C., van Ruitenbeek J.M. *Nature*, 2002, vol.419, no. 3, pp.906.
 9. Fuechsle M., Miwa J.A., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Warschkow O., Hollenberg L.C.L., Klimeck G., Simmons M.Y., *Nature Nanotech.*, 2012, vol.7, pp.242.
 10. Lundstrom M., Datta S. *Electronics from the Bottom Up: A New Approach to Nanoelectronic Devices and Materials*. Available at: <http://www.nanohub.org/topics/ElectronicsFromTheBottomUp>.
 11. Lundstrom M., *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Available at: <http://www.nanohub.org/resources/11763>.
 12. Datta S. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing-Compan 2012. Available at: <http://www.nanohub.org/courses/FoN1>.
 13. Lundstrom M., Jeong C. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013.
 14. Landauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 1957, vol. 1, no.3: pp. 223-231.
 15. Landauer R. Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. *Philos. Mag.*, 1970, vol. 21, pp. 863-867.
 16. Landauer R. Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. *J.Math. Phys.*, 1996, vol. 37, no. 10, 5259 p.
 17. Datta S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
 18. Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
 19. Lundstrom M. *Nanoscales Transistors*. Available at: <http://www.nanohub.org/courses/NT>.
 20. Pierret R.F. *Semiconductor Device Fundamentals*. Reading, MA: Addison-Wesley, 1996.
 21. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом g-остова. Теоретические основы. // Вісник Од. держ. екол. ун-ту.– 2012. – Вип. 13. - С. 207-218.
 22. Jeong C., Kim R., Luisier M., Datta S., Lundstrom M. *Appl. J.Phys.*, 2010, no. 107, pp. 023707.
 23. Howard C.Berg, *Random walks in biology* (Princeton: Princeton University Press: 1993).
 24. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Уроки нанoeлектроники 2. Модель упругого резистора и новая формулировка закона Ома в концепции "снизу - вверх". // Физич. образов. в вузах. - 2013, - Вип 19, С 2- 161.
 4. Dragunov V.P., Neizvestnyy I.G., Gridchin V.A. *Osnovy nano-elektroniki* [Fundamentals of nanoelectronics]. Moscow: Logos, 2006.
 5. Drude P. Zur Elektronentheorie der metalle *Ann. Physik.*, 1900, vol. 306, no.3: pp.566, doi:10.1002/andp.19003060312.
 6. Drude P. Zur Elektronentheorie der Metalle".II. Teill. Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte. *Ann. Physik.*, 1900, vol. 308, no.11, pp.369, doi: 10.1002/andp.19003081102.
 7. Ashkroft N., Mermin N. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. Moscow: Mir, 1979.
 8. Smit R.H.M., Noat Y., Untiedt C., Lang N.D., van Hemert M.C., van Ruitenbeek J.M. *Nature*, 2002, vol.419, no. 3, pp.906.
 9. Fuechsle M., Miwa J.A., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Warschkow O., Hollenberg L.C.L., Klimeck G., Simmons M.Y., *Nature Nanotech.*, 2012, vol. 7, pp. 242.
 10. Lundstrom M., Datta S. *Electronics from the Bottom Up: A New Approach to Nanoelectronic Devices and Materials*. Available at: <http://www.nanohub.org/topics/ElectronicsFromTheBottomUp>.
 11. Lundstrom M. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Available at: <http://www.nanohub.org/resources/11763>.
 12. Datta S. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing-Compan 2012. Available at: <http://www.nanohub.org/courses/FoN1>.
 13. Lundstrom M., Jeong C. *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013.
 14. Landauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 1957, vol. 1, no.3: pp. 223-231.
 15. Landauer R. Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. *Philos. Mag.*, 1970, vol. 21, pp. 863-867.
 16. Landauer R. Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. *J.Math. Phys.*, 1996, vol. 37, no. 10, pp. 5259.
 17. Datta S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
 18. Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
 19. Lundstrom M. *Nanoscales Transistors*. Available at: <http://www.nanohub.org/courses/NT>.
 20. Pierret R.F. *Semiconductor Device Fundamentals*. Reading, MA: Addison-Wesley, 1996.
 21. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E. *Visn. Odes. derž. ekol. univ. – Bulletin of Odessa state environmental university*, 2012, vol. 13, pp. 207- 218. (In Russian).
 22. Jeong C., Kim R, Luisier M., Datta S., Lundstrom M. *Appl.Phys J.*, 2010, no. 107, pp. 023707.
 23. Howard C. Berg. *Random walks in biology*. Princeton: Princeton University Press, 1993.
 24. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E. Uroki nanoelektroniki 2. Model uprugogo rezistora i novaya formulirovka zakona Oma v kontseptsii "snizu - vverkh" *Fizich.obrazov. v vuzakh - Physics in Higher Education*, 2013, vol. 19, no 2 – 167p. (In Russian)..

REFERENCES

1. Mitin V.V, Kochelap V.A, Stroschio M.A, *Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
2. Hoefflinger B. (Ed.), *Chips 2020: A Guide to the Future of Nanoelectronics*. Berlin: Springer-Verlag, 2012.
3. Martines Dzh.M., Marin-Palma R.Dzh., Agullo-Rueda F. *Nano-*

GENERALIZED MODEL OF ELECTRON TRANSPORT AND HEAT TRANSFER IN MICRO- AND NANOELECTRONICS

Yu.A. Kruglyak, prof.
L.S. Kostritskaya, sen. lect.

*Odessa State Environmental University,
15, Lvivska St., 65016 Odessa, Ukraine, quantumnet@yandex.ua.*

General issues of electronic conductivity and the causes for the current flow, role of electrochemical potentials, Fermi functions, and Fermi window for conduction are discussed, as well as there given detailed description of the Landauer elastic resistor model, different transport regimes from ballistic to diffusion and in

between, conductivity modes, and transmission coefficient in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics. Generalized model of electron transport in the linear response regime developed by R. Landauer, S. Datta, and M. Lundstrom with application to the resistors of any dimension, any size and arbitrary dispersion working in ballistic, quasi-ballistic or diffusion regime is summarized.

In summary, the Landauer equation for the conductivity describes the electron transport in the conductor from the very general positions. The conductivity is proportional to the fundamental constants q and h , which determine the quantum of conductance, associated with contacts. The conductivity depends on the number of modes of conductance and transmission coefficient, representing the probability that an electron with energy E injected by one contact to reach another contact. Conductivity we finally find by integrating the contributions from all modes of conduction. The equations valid for 1D, 2D and 3D conductors for ballistic nanoreactors as well as for massive conductors.

Keywords: Nanophysics and Nanoelectronics, elastic resistor fashion conductivity, transmittance.

УЗАГАЛЬНЕНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТУ І ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА В МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

Ю.О. Кругляк, проф.
Л.С. Кострицька, ст.викл.

*Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська,
15, 65016 Одеса, Україна, quantumnet@yandex.ua.*

В рамках концепції «знизу – вгору» нанoeлектроніки розглядаються загальні питання електронної провідності, причини виникнення струму, роль електрохімічних потенціалів, функцій Фермі і ферміївського вікна провідності, модель пружного резистора, різні режими транспорту електронів, моди провідності, коефіцієнт проходження. Викладається узагальнена модель транспорту електронів в режимі лінійного відгуку, розвинена Р. Ландауером, С.Даттой і М.Лундстромом стосовно провідникам будь-якої розмірності, будь-якого масштабу і довільної дисперсії, що працюють в балістичним, квазі-балістичним або дифузійним режимі.

Ключові слова: нанофізика, нанoeлектроніка, пружний резистор, моди провідності, коефіцієнт проходження.

*Дата першого представлення: 05.05.2015
Дата поступлення окончательной версии : 21.09.2015
Дата опубликования статьи: 24.09.2015*