УДК 537.9

Кругляк Ю.А.

Кругляк Ю.А.

Факультет інформаційних технологій,
Одеський державний екологічний університет,
вул.Львівська, 15, Одеса, 65016, Україна

ЕЛЕКТРИЧНИЙ СТРУМ, ТЕРМОСТРУМ І ТЕПЛОВИЙ ПОТІК В НАНО- І МІКРОЕЛЕКТРОНІЦІ: МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСУ

Коротко розглянуті сучасні моделі переносу електронів і тепла Ландауера – Датти – Лундстрома пропонується в стислому викладі. Якщо зонна структура задана аналітично або чисельно, можна оцінити число мод провідності. Далі слід задатися моделлю для середньої довжини вільного пробігу. У підсумку можна обчислити термоелектричні коефіцієнти переносу для 1D, 2D і 3D резисторів будь-якого масштабу в балістичному, квазібалістичному або дифузійному режимах лінійного відгуку при наявності перепаду напруги й/або температури на кінцях пристрою. Використовуються концепції мод провідності й коефіцієнта проходження. Пропонується інший вираз для питомого опору через питоме число мод провідності (на одиницю поперечного перетину провідника) і середню довжину вільного пробігу для зворотного розсіювання. Формулюються й порівнюються фермієвські вікна провідності для електронів і фононів. Хороший або поганий провідник визначається тільки лише наявністю в провіднику енергетичних станів у фермієвському вікні шириною $\sim \pm 2kT$ *, що охоплює рівноважне значення електрохімічного потенціалу, який може змінюватися в широких межах для різних матеріалів. Особлива увага приділяється квазірівноважному переносу. Вводиться загальний вираз для термоструму, зручний при аналізі провідності будь-яких матеріалів від металів і напівпровідників до нанорезисторів і нанокомпозитів. Цей вираз спрощується для режиму лінійного відгуку. Термострум виражається через три коефіцієнти переносу – провідність, коефіцієнт Соре й електронну теплопровідність в умовах короткозамкненого ланцюга. Детально розглядається перенос тепла фононами. Формулюється базове рівняння для термоструму. Електрична провідність і теплопровідність даються схожими рівняннями, а саме: обидві провідності пропорційні відповідному кванту провідності, помноженому на інтеграл від добутку коефіцієнта проходження на число мод провідності й на фермієвське вікно провідності. Більше того, функції теплового розширення для електронів і фононів схожі за формою й мають ширину в декілька кТ. Поряд із числом мод провідності,*

обумовленим дисперсійними співвідношеннями, ці обоє вікна провідності відіграють ключову роль у кількіснім визначенні електричної провідності й теплопровідності.

Ключові слова: наноелектроніка, мікроелектроніка, моди провідності, коефіцієнт проходження, фермієвські вікна, квазірівноважний перенос, балістичний перенос, квазібалістичний перенос, дифузійний перенос.

The Landauer – Datta – Lundstrom modern electron and heat transport model is briefly summarized. If a band structure is chosen analytically or numerically, the number of conduction modes can be evaluated and, if a model for a mean-free-path for backscattering can be established, then the near-equilibrium thermoelectric transport coefficients can be calculated for 1D, 2D, and 3D resistors of any size in ballistic, quasi-ballistic, and diffusive linear response regimes when there are differences in both voltage and/or temperature across the device. Modes of conduction and transmission concepts are introduced. New expression for a specific resistivity is suggested providing a different view of resistivity in terms of the specific number of modes (per unit cross-sectional area) and the mean-free-path for backscattering. Fermi conduction window functions for electrons and phonons are formulated and compared. Whether a conductor is good or bad is determined only by the availability of the conductor energy states in an energy window $\sim \pm 2kT$ *around the equilibrium electrochemical potential, which can vary widely from one material to another. Special attention is given to the near-equilibrium transport. General expression for thermocurrent is introduced which is suitable for analysis of conductivity of any materials from metals and semiconductors up to modern nanoresistors and nanocomposites. This general expression is simplified for the case of the linear response regime. Thermocurrent is derived through three transport coefficients – conductivity, the Soret electro-thermal diffusion coefficient, and the electronic heat conductance under the short circuit conditions. Heat transfer by phonons is treated in details. Basic equation for the heat current is formulated. Electrical and thermal conductances are similar in structure, namely: both are proportional to corresponding quantum of conductance, times an integral over the transmission, times the number of modes, times a window function. Moreover, the thermal broadening functions for electrons and phonons have similar shapes and each has a width of a few kT. Along with the number of modes determined by the dispersion relation, these two window functions play a key role in quantitative determination of the electrical and thermal conductivities.*

Key words: *nanoelectronics, microelectronics, microelectronics, conductivity modes, transmission coefficient, Fermi windows, near-equilibrium transport, ballistic transport, quasi-ballistic transport, diffusive transport.*

Вступ

Ставиться завдання дати короткий огляд сучасної теорії переносу електронів і тепла Ландауера – Датти – Лундстрома (ЛДЛ) [1 – 5], яка застосовна для 1*D*, 2*D* і 3*D* резисторів нано- і макромасштабу в балістичному, квазібалістичному і дифузійному режимах лінійного відгуку за наявності перепаду напруги й температури на кінцях пристрою.

Почнемо із двох відомих основних рівнянь – для струму й для загального числа електронів у каналі провідника в стаціонарних умовах і введемо поняття мод провідності для

резисторів різних розмірів. Потім введемо поняття коефіцієнта проходження як співвідношення балістичного й дифузійного часів переносу. Показано, що коефіцієнт проходження є відношенням довжини середнього вільного шляху для зворотного розсіювання до довжини резистора або, у самому загальному випадку, це відношення довжини середнього вільного шляху для зворотного розсіювання до суми довжини резистора й довжини середнього вільного шляху для зворотного розсіювання. Тепер можна визначити три режими переносу: дифузійний, балістичний і квазібалістичний. Потім пропонується новий вираз для питомого опору, що забезпечує новий погляд на питомий опір з погляду питомого числа мод (на одиницю площі поперечного перетину) і довжини середнього вільного шляху для зворотного розсіювання.

Далі розглядається тільки квазірівноважний перенос, відомий також як режим лінійного відгуку слабкого поля, який має велике практичне значення й впливає на характеристики більшості електронних пристроїв. Функція фермієвського вікна провідності вводиться як негативна похідна рівноважної фермієвської функції по енергії. Хороший або поганий провідник визначається лише наявністю в провіднику енергетичних станів у фермієвському вікні шириною ~ ± 2*kt*, що охоплює рівноважне значення електрохімічного потенціалу, який може змінюватися в широких межах для різних матеріалів. Струм обумовлений різницею функцій фермієвських вікон провідності двох контактів, яка за низького зміщення пропорційна функції фермієвського вікна провідності, але не так званим "зовнішнім електричним полем", як це припускає модель Друде, яка як і раніше застосовується для наукових досліджень і навчання. Таким чином, вводиться відомий вираз Ландауера для провідності. Розглядається перенос у масивному 3D провіднику. Показано, що провідність завжди є добутком кванта провідності, помноженого на середнє проходження, на число мод у фермієвських вікнах, що є одним з основних результатів транспортної моделі ЛДЛ.

Нарешті узагальнюється модель ЛДЛ для термоструму. Вводиться загальний вираз для термоструму, який підходить для аналізу провідності будь-яких матеріалів від металів і напівпровідників до сучасних нанорезисторів і нанокомпозитів. Цей загальний вираз спрощується для режиму лінійного відгуку за наявності перепаду напруги й температури на кінцях пристрою. Термострум виражається через три коефіцієнти переносу – провідність, коефіцієнт електротермічної дифузії Соре й електронну теплопровідність в умовах короткозамкненого ланцюга. Ці рівняння також справедливі для 1*D* і 2*D* резисторів, але одиниці різних членів відрізняються. Таким чином, за наявності зонної структури можна визначити число мод, а з вибором моделі для середнього вільного шляху при зворотнім розсіюванні коефіцієнти квазірівноважного переносу можна визначити за допомогою отриманих рівнянь.

Детально розглядається перенос тепла фононами. Формулюється базове рівняння для термоструму. Подальша частина пов'язана з умовами лінійного відгуку. За аналогією з функцією фермієвського вікна провідності для електронів, вводиться функція фермієвського вікна провідності для фононів. У результаті утворюється вираз для граткової теплопровідності,

яка пропорційна кванту теплопровідності. Важливо, що електрична провідність і теплопровідність даються схожими рівняннями, а саме: обидві провідності пропорційні відповідному кванту провідності, помноженому на інтеграл від добутку коефіцієнта проходження на число мод провідності й на фермієвське вікно провідності. Більше того, функції теплового розширення для електронів і фононів схожі за формою й мають ширину в декілька kT. Поряд із числом мод провідності, обумовленим дисперсійними співвідношеннями, обоє вікон провідності відіграють ключову роль у кількіснім визначенні електричної провідності й теплопровідності.

Модель ЛДЛ для струму

Два основні рівняння для електричного струму

$$N = \int \frac{D(E)}{2}\left(f_1 + f_2\right)dE\,, \tag{1}$$

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

виводяться легко [5 – 7], де N – загальне число, що встановилося, електронів у каналі, $D(E)$ – густина станів, що включає фактор спінового $g_s = 2$ виродження, функція Фермі

$$f\left(E\right) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT}+1} \tag{3}$$

індексована номерами контактів резистора 1 і 2, E_F – енергія Фермі, яка, як і температура T, може бути різною на обох контактах, "розширення" $\gamma(E)$ відноситься до часу переносу електронів для перетинання каналу резистора

$$\gamma(E) \equiv \frac{\hbar}{\phi(E)}\,. \tag{4}$$

Пропорційність струму $\left(f_1 - f_2\right)$ має сенс, а фундаментальна постійна $2q/h$ важлива й відома як константа фон Клітцінга. Згідно (4), γ вимірюється в енергетичних одиницях, густина станів в одиницях (енергія)$^{-1}$, таким чином, добуток $\gamma(E)\pi D(E)/2$ є безрозмірним. Тепер ми побачимо, що $\gamma(E)\pi D(E)/2 \equiv M(E)$ має фізичний сенс числа мод провідності резистора (каналів) за енергії E.

Моди провідності

Розглянемо $2D$ балістичний резистор довжиною L, який набагато коротший, ніж середня довжина вільного пробігу для зворотного розсіювання λ, орієнтований уздовж осі x і має ширину W уздовж осі y. Загальна густина станів становить

$$D(E) = D_{2D}(\mathrm{E})\, L^{*}W, \tag{5}$$

$$D_{2D}(E) = g_v \frac{m^{*}}{\pi\hbar^2}, \tag{6}$$

де $D_{2D}(E)$ – питома густина станів (на одиницю площі $A = L^{*}W$), записана для параболічних енергетичних зон з ефективною масою m^{*} й заповненням однієї підзони за рахунок обмеження в напрямку *z* при долиннім виродженні g_v [8].

Визначимо характеристичний час τ . Рівняння (38) і (46) в [6] дають

$$\frac{qN'(E)dE}{I'(E)dE} = \frac{\hbar}{\gamma}\frac{\left(f_1 + f_2\right)}{\left(f_1 - f_2\right)}, \tag{7}$$

де $N'(E)dE$ – число, що встановилося, електронів у каналі в диференціальній формі

$$N'(E)dE = \frac{D(E)dE}{2} f_1(E) + \frac{D(E)dE}{2} f_2(E), \tag{8}$$

а струм у диференціальній формі

$$I'(E)\,dE = \frac{q}{2\tau(E)}\left(N'_{01}\,dE - N'_{02}\,dE\right) = \frac{2q}{h}\frac{\gamma(E)}{2}\pi D(E)\,dE(f_1 - f_2) \tag{9}$$

при

$$N'_{01}(E)\,dE = D(E)\,dE\, f_1(E) \tag{10}$$

й

$$N'_{02}(E)\,dE = D(E)\,dE\, f_2(E) \tag{11}$$

як число електронів, що перебувають у рівновазі між каналом і контактом 1, а також каналом і контактом 2, між енергією *E* і *E* + *de*. Нами зроблене допущення, що струм визначається позитивним, коли протікає зовні в контакт 2 при русі електронів від контакту 1 до контакту 2 (стандартна згода).

Прикладемо досить високу напругу до контакту 2, яка становить $E_{F2} << E_{F1}$, тому $f_2 << f_1$.Тоді рівняння (7) стає

$$\frac{qN'(E)\,dE}{I'(E)\,dE} = \frac{\text{stored charge}}{\text{current}} = \frac{\hbar}{\gamma} = \tau(E). \tag{12}$$

Число електронів у резисторі дорівнює

$$N'(E) = n'_S(E)\,L\cdot W, \tag{13}$$

де n'_S - питома густина електронів (на одиницю площі), а диференціальний струм

$$I'(E) = qWn'_S(E)\left\langle v_x^{+}(E)\right\rangle. \tag{14}$$

Таким чином, рівняння (12) дає

$$\tau(E) = \frac{L}{\left\langle v_x^+(E) \right\rangle}, \tag{15}$$

що є просто середній час переносу електронів у каналі.

Щоб визначити τ, необхідно розрахувати середню швидкість електрона в напрямку $+x$ від контакту 1 до контакту 2. Швидкість у нашім випадку балістичного переносу, коли електрони рухаються по резистору, не змінюючи напрямку

$$\left\langle v_x^+(E) \right\rangle = v(E)\left\langle \cos\theta \right\rangle, \tag{16}$$

де кут θ відлічується від позитивного напрямку осі x. Середнє

$$\left\langle \cos\theta \right\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\theta d\theta = \frac{2}{\pi}, \tag{17}$$

таким чином, для параболічної дисперсії і з допущенням ізотропних умов одержуємо

$$\left\langle v_x^+(E) \right\rangle = \frac{2}{\pi}v = \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2\left(E - E_C\right)}{m^*}}. \tag{16}$$

Визначивши моди провідності як

$$M(E) \equiv \gamma(E)\pi\frac{D(E)}{2} \tag{17}$$

і використовуючи (4) та (5), можна в підсумку одержати

$$\begin{aligned} M(E) &= M_{1D}(E) = \frac{h}{4}\left\langle v_x^+(E) \right\rangle D_{1D}(E), \\ M(E) &= WM_{2D}(E) = W\frac{h}{4}\left\langle v_x^+(E) \right\rangle D_{2D}(E), \\ M(E) &= AM_{3D}(E) = A\frac{h}{4}\left\langle v_x^+(E) \right\rangle D_{3D}(E), \end{aligned} \tag{18}$$

де аналогічні аргументи застосовувалися для одержання остаточних результатів і для 1D і 3D провідників. Можна помітити, що число мод провідності за енергії E пропорційне ширині 2D резистора й площі поперечного перетину A 3D резистора.

Звернемо увагу на фізичний зміст результатів, узагальнених в (18). Таким чином, для 2D провідника з урахуванням (6) і (16) ми маємо

$$WM_{2D}(E) = g_v W\frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi\hbar}. \tag{19}$$

У випадку параболічної дисперсії

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{20}$$

де хвильовий вектор виражений через довжину хвилі де Бройля електронів за енергії E

$$\lambda B = 2\pi/k, \tag{21}$$

із загального виразу (19) для числа мод для 2D провідника одержуємо важливе співвідношення

$$WM_{2D}(E) = g_v \frac{Wk}{\pi} = g_v \frac{W}{\lambda_B(E)/2} = M(E), \tag{22}$$

що відкриває можливість фізичної інтерпретації числа мод для 2D провідника, а саме: $M(E)$ – просте число (також пояснююче долинне виродження g_v) півхвиль де Бройля для електрона, які відповідають ширині резистора. Цілочисельність номерів мод провідності забезпечується граничними умовами при обов'язковім зверненні до нуля хвильової функції на обох гранях 2D провідника. Докладне обговорення принципу мод провідності для 1D, 2D і 3D нано - і мезорезисторів можна знайти в [9 – 12].

Резюмуючи, одержуємо два основні рівняння для струму

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

$$I = \frac{2q}{h}\int M(E)\left(f_1 - f_2\right) dE, \tag{23}$$

відповідно до яких для розрахунків числа електронів і струмів необхідні дві величини – $D(E)$ та $M(E)$.

Для параболічних енергетичних зон (20) 1D, 2D і 3D густини станів відомі давно й мають вигляд

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

$$D(E) = D_{2D}(E)A = A\frac{m^*}{\pi\hbar^2}H\left(E - E_C\right), \tag{24}$$

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

де Ω – об'єм 3D резистора, а $H(E - Ec)$ – східчаста функція Хевісайда. Число мод у даному конкретному випадку параболічної дисперсії

$$M(E) = M_{1D}(E) = H\left(E - E_C\right),$$

$$M(E) = WM_{2D}(E) = Wg_v\frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi\hbar}H\left(E - E_C\right), \tag{25}$$

$$M(E) = AM_{3D}(E) = Ag_v \frac{m^*(E - E_C)}{2\pi\hbar^2} H\left(E - E_C\right).$$

Незважаючи на те, що вище нами зроблено допущення про параболічну дисперсію, вирази для $M(E)$ (18) мають загальне значення й справедливі для лінійної дисперсії, як у графені. Для довільної зонної структури можна використовувати чисельний метод [13].

Коефіцієнт проходження

Вище ми розглянули балістичний перенос. Звернемося до дифузійного випадку, коли $L >> \lambda$. Електрони, інжектовані від контактів 1 і 2, зазнають випадкового блукання. Одні траєкторії зупиняться на інжектуючому контакті, а інші – на іншому контакті. Якщо до контакту 2 прикласти позитивну напругу, то ще кілька електронів зупиняться на контакті 2.

Ключовим параметром моделі переносу ЛДЛ є величина $\gamma(E)\pi D(E)/2$, що являє собою число мод провідності $M(E)$ у випадку балістичного переносу. Розширення γ відноситься до часу переносу як $\gamma = \hbar/\tau$. Час переносу зростає, коли перенос стає дифузійним, тому $\gamma(E)\pi D(E)/2$ знижуватиметься. Буде показано, що для дифузійного переносу $\gamma\pi D(E)/2 = M(E)\cdot T(E)$, де $T(E) \leq 1$ відоме як коефіцієнт проходження.

У балістичному режимі електрони інжектуються в канал під різними кутами. Відповідно відбувається певний розподіл часу переносу. Таким чином, значення γ знаходиться через середній час переносу

$$\gamma(E) = \frac{\hbar}{\left\langle \tau(E) \right\rangle}, \tag{26}$$

де для $2D$ провідника

$$\left\langle \tau(E) \right\rangle = \frac{L}{\left\langle v_x^+(E) \right\rangle} = \frac{L}{v(E)\left\langle \cos\vartheta \right\rangle} = \frac{L}{v(E)\left(2/\pi\right)}. \tag{27}$$

Яким буде $\left\langle \tau(E) \right\rangle$ для дифузійного транспорту?

При $L >> \lambda$ застосуємо перший закон дифузії Фіка. У випадку $2D$ провідника потік струму

$$J = q\bar{D}\frac{dn_S}{dx}, \tag{28}$$

де густина струму пропорційна градієнту густини поверхневих електронів, а $\bar{D}$ – дифузійний коефіцієнт.

Нехай електрони інжектуються в канал в основному контактом 1. Тоді $f_1 \approx 1$, а $f_2 \approx 0$. Існує кінцева концентрація інжектованих електронів $\Delta n_S(0)$ з лівої сторони ($x = 0$) провідника. Для довгого каналу $\Delta_S(L) \to 0$ за рахунок $f_2 \approx 0$. Електронний профіль є лінійним, оскільки процеси рекомбінації-генерації не передбачаються.

Час переносу згідно (12) визначається накопиченим зарядом відносно струму

$$\tau_D = \frac{qN}{I} = \frac{Wq\Delta n_S(0)L/2}{Wq\bar{D}\Delta n_S(0)/L} = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \tag{29}$$

де загальне число електронів у провіднику становить $N = n_S(0)WL/2$, а струм $I = J{\cdot}W$ заи $dn_s/dx = \Delta n_S(0)/L$. З (29) і (28) ми укладаємо, що дифузійний час переносу

$$\tau_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \tag{30}$$

а балістичний час переносу

$$\tau_B = \frac{L}{\left\langle v_x^+ \right\rangle}. \tag{31}$$

Об'єднавши все разом і пам'ятаючи визначення γ (26) для обох режимів, одержимо

$$\gamma(E)\pi\frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_D}\pi\frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_B}\pi\frac{D(E)}{2}\frac{\tau_B}{\tau_D} \equiv M(E)T(E), \tag{32}$$

де ми бачимо, що коефіцієнт проходження – це відношення балістичного часу переносу до дифузійного

$$T(E) = \frac{\tau_B}{\tau_D}. \tag{34}$$

Іншими словами, за наявності електронного розсіювання число мод $M(E)$ просто необхідно замінити на $M(E)\cdot T(E)$. Всебічне обговорення переходу від балістичного переносу до дифузійного режиму для 1D і 3D провідників знаходимо в [7, 9, 10, 14, 15].

З (34) разом з (30) і (31) одержимо

$$T(E) = \frac{2\bar{D}}{L\left\langle v_x^+ \right\rangle}. \tag{35}$$

Теорія випадкових блукань [16] дає

$$\bar{D} = \frac{\left\langle v_x^+ \right\rangle\lambda}{2}, \tag{36}$$

і, нарешті, ми одержуємо простий вираз для коефіцієнта проходження

$$T(E) = \frac{\lambda}{L} << 1, \tag{37}$$

де λ – довжина середнього вільного шляху для зворотного розсіювання. Як ми вже відзначали,

$$\gamma\pi D(E)/2 = M(E)\cdot T(E) \tag{38}$$

сильно зменшене в дифузійному режимі порівняно з балістичним режимом.

Рівняння (37) є точним у дифузійній межі ($L >> \lambda$), але втрачає силу за малої довжини провідника. У самому загальному випадку [4, 5]

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}, \tag{39}$$

що справедливо для дифузійного, балістичного, а також проміжного режимів:

$$\begin{gathered} \text{дифузійний } L >> \lambda;\ T = \lambda / L << 1, \\ \text{балістичний } L << \lambda;\ T \to 1, \\ \text{квазібалістичний } L \approx \lambda;\ T < 1. \end{gathered} \tag{40}$$

Примітно, що така проста модель переносу добре працює у всіх трьох режимах.

Закон Ома

Тепер чітко встановлено, що опір балістичного провідника можна записати у вигляді

$$R^{ball} = \frac{h}{q^2}\frac{1}{M(E)}. \tag{41}$$

Цей результат досить добре відомий, але згідно з розповсюдженою думкою він застосовний тільки до коротких резисторів і відноситься до курсу спеціальних тем, таких як мезоскопічна фізика або наноелектроніка. Не зовсім відомо те, що опір для довгих і коротких провідників можна записати у вигляді

$$R(E) = \frac{h}{q^2}\frac{1}{M(E)}\left(1 + \frac{L}{\lambda(E)}\right). \tag{42}$$

Балістичні й дифузійні провідники – це не два різні світи, а скоріше суцільне середовище, оскільки довжина L збільшується. Балістична межа очевидна за $L << \lambda$, тоді як за $L >> \lambda$ вона зводиться до стандартного закону Ома

$$R \equiv \frac{V}{I} = \rho\frac{L}{A}. \tag{43}$$

Тоді ми могли б переписати $R(E)$ як

$$R(E) = \frac{\rho(E)}{A}[L + \lambda(E)] \tag{44}$$

з новим виразом для питомого опору

$$\rho(E) = \frac{h}{q^2}\left(\frac{1}{M(E)/A}\right)\frac{1}{\lambda(E)}, \tag{45}$$

що забезпечує інший погляд на питомий опір з погляду числа мод на одиницю площі й середнього шляху вільного пробігу.

Режим лінійного відгуку

Квазірівноважний перенос або режим лінійного відгуку слабкого поля відповідає $\lim(dI/dV)_{V\to 0}$. Є кілька причин для розробки моделі переносу слабкого поля. По-перше, квазірівноважний перенос є основою для розуміння переносу в цілому. Поняття, введені в дослідження квазірівноважного режиму, часто поширюються на розгляд більш складних ситуацій, і квазірівноважний режим служить вихідною точкою для аналізу переносу в більш складних умовах. По-друге, вимірювання квазірівноважного переносу широко застосовуються для характеристики електронних матеріалів і розуміння властивостей нових матеріалів. І, нарешті, квазірівноважний перенос значною мірою визначає й контролює характеристики більшості електронних пристроїв.

Нехай в умовах слабкого поля

$$f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E), \tag{46}$$

де $f_0(E)$ – рівноважна функція Фермі, а прикладене зміщення

$$V = ДE_F / q = (E_{F1} - E_{F2}) / q \tag{47}$$

досить мале. Використовуючи розкладання Тейлора в умовах постійної температури

$$f_2 = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F}\Delta E_F = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} qV \tag{48}$$

і властивість функції Фермі

$$+\frac{\partial f}{\partial E_F} = -\frac{\partial f}{\partial E}, \tag{49}$$

знаходимо

$$f_1 - f_2 = (-\frac{\partial f_0}{\partial E})qV\ . \tag{50}$$

Похідна функції Фермі, помножена на *kT*, що робить її безрозмірною

$$F_T\left(E, E_F\right) = kT\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right), \tag{51}$$

відома як функція теплового розширення й показана на рис. 1.

Якщо інтегрувати F_T по всьому енергетичному діапазону, уся площа

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dEF_T\left(E, E_F\right) = kT\ , \tag{52}$$

так що можна приблизно візуально вважати F_T як прямокутний імпульс, зосереджений навколо $E = E_F$ з піковим значенням ¼ і шириною ~ 4*kt*.

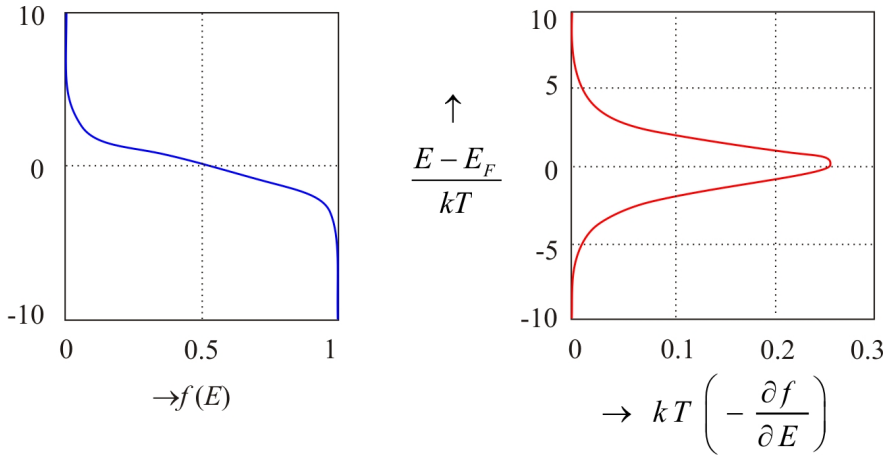

Рис. 1. Функція Фермі й безрозмірна нормалізована функція теплового розширення.

Похідна $(-\partial f_0 / \partial E)$ відома як функція фермієвського вікна провідності. Добрий або поганий провідник – це визначається наявністю енергетичних станів провідника в енергетичнім вікні ~ ± 2*kt* навколо електрохімічного потенціалу *EF0*, який може змінюватися в широких межах від одного матеріалу до іншого. Струм обумовлений різницею $f_1 - f_2$ двох контактів, яка за низького зміщення пропорційна похідній рівноважної функції Фермі (50). Принципи генерування струму на основі експериментальних і теоретичних результатів сучасної нано- і мезофізики докладно розглядаються в [4, 5, 9, 10, 17].

При квазірівноважному допущенні для струму (23) замість самого загального виразу, достовірного для дифузійного й балістичного режиму, а також проміжного

$$I = \frac{2q}{h}\int T(E)M(E)\left(f_1 - f_2\right)dE\,, \tag{53}$$

одержуємо

$$I = \left[\frac{2q^2}{h}\int T(E)M(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE\right]V = GV\,, \tag{54}$$

за провідності

$$G = \frac{2q^2}{h}\int T(E)M(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE\,, \tag{55}$$

відомої як вираз Ландауера, справедливий для 1D, 2D і 3D резисторів, якщо використовувати відповідні вирази для $M(E)$.

Перенос у масивному провіднику

Для балістичної межі $T(E)=1$. Для дифузійного переносу $T(E)$ виражене рівнянням (39). Для провідника, який набагато довший середнього вільного шляху рівняння для густини струму становить

$$J_x = \frac{\sigma}{q}\frac{d\left(E_F\right)}{dx}, \tag{56}$$

де електрохімічний потенціал E_F також відомий як квазірівень Фермі.

Для 2D провідника питома провідність поверхні дорівнює

$$\sigma_S = \frac{2q^2}{h}\int M_{2D}(E)\lambda(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE \tag{57}$$

або в іншій формі

$$\sigma_S = \int \sigma'_S(E)dE, \tag{58a}$$

де диференціальна питома провідність

$$\sigma'_S(E) = \frac{2q^2}{h}M_{2D}(E)\lambda(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right). \tag{58b}$$

Аналогічні вирази можуть бути записані для 1D і 3D резисторів.

Інший спосіб записати провідність – квант провідності помножити на коефіцієнт проходження й на число мод у фермієвських вікнах:

$$G = \frac{2q^2}{h}\left\langle\left\langle T\right\rangle\right\rangle\left\langle M\right\rangle, \tag{59a}$$

$$\left\langle M\right\rangle = \int M(E)(-\frac{\partial f_0}{\partial E})dE, \tag{59б}$$

$$\left\langle\left\langle T\right\rangle\right\rangle = \frac{\int T(E)M(E)\,(-\frac{\partial f_0}{\partial E})\,dE}{\int M(E)\,(-\frac{\partial f_0}{\partial E})\,dE} = \frac{\left\langle MT\right\rangle}{\left\langle M\right\rangle}. \tag{59в}$$

Ще один спосіб записати провідність у переведенні на диференціальну провідність $G'(E)$:

$$G = \int G'(E)dE, \tag{60a}$$

$$G'(E) = \frac{2q^2}{h}M(E)T(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right). \tag{60б}$$

Модель ЛДЛ для термоструму й термоелектричних коефіцієнтів

Електрони переносять і заряд, і тепло. Зарядний струм наведений у рівнянні (53). Для одержання рівняння теплового потоку помітимо, що електрони в контактах протікають із енергією $E \approx E_F$. Для входження в режим $M(E)$ у резисторі електрони повинні поглинати (за $E > E_F$) або виділяти (за $E < E_F$) теплову енергію $E - E_F$. Ми доходимо висновку, що для одержання рівняння теплового потоку необхідно вставити $(E - E_F)/q$ в інтеграл. Отриманий термострум

$$I_Q = \frac{2}{h}\int (E - E_F)T(E)M(E)\left(f_1 - f_2\right)dE\,. \tag{61}$$

Із практичної точки зору важливо, що обидва вирази – для електричного струму (53) і термоструму (61) – підходять для аналізу провідності будь-яких матеріалів від металів і напівпровідників до сучасних нанокомпозитів [18].

За наявності перепаду напруги й температури на резисторі необхідно розкласти різницю Фермі $\left(f_1 - f_2\right)$ в ряд Тейлора по напрузі й температурі й одержати

$$f_1 - f_2 \approx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)q\Delta V - \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)\frac{E - E_F}{T}\Delta T\,, \tag{62}$$

де $\Delta V = V_2 - V_1, \Delta T = T_2 - T_1$ і $T = (T_1 + T_2)/2$.

Тепер одержати загальне рівняння нерівноважного струму просто. Загальний струм є сумою внесків кожної енергетичної моди

$$I = \int I'(E)dE\,, \tag{63а}$$

де диференціальний струм дорівнює

$$I'(E) = \frac{2q}{h}T(E)M(E)\left(f_1 - f_2\right). \tag{63б}$$

Використовуючи рівняння (62), одержимо

$$I'(E) = G'(E)\Delta V + S'_T(E)\Delta T\,, \tag{64а}$$

де

$$G'(E) = \frac{2q^2}{h}T(E)M(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \tag{64б}$$

диференціальна провідність і

$$S'_T(E) = -\frac{2q^2}{h}T(E)M(E)\left(\frac{E - E_F}{qT}\right)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) = -\frac{k}{q}\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)G'(E) \tag{64в}$$

є коефіцієнт Соре для електротермічної дифузії в диференціальній формі. Зауважимо, що $S'_T(E)$ є негативним для мод вище E_F (*n*-резисторів) і позитивним для мод з енергією нижче E_F (*p*-резисторів).

Тепер інтегруємо рівняння (64 а) по всіх енергетичних модах і знайдемо

$$I = G\Delta V + S_{_T}\Delta T\,, \tag{65а}$$

$$I_Q = -T\,S_T\,\Delta V - K_0\,\Delta T\,, \tag{65б}$$

з трьома коефіцієнтами переносу – провідністю, вираженою в рівнянні (60), коефіцієнтом електротермічної дифузії Соре

$$S_T = \int S_T'(E)dE = -\frac{k}{q}\int\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)G'(E)dE\,, \tag{65в}$$

і електронною теплопровідністю в режимі короткого замикання ($\Delta V = 0$)

$$K_0 = T\left(\frac{k}{q}\right)^2\int\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)^2 G'(E)\,dE\,, \tag{65d}$$

де струм I вважається позитивним, коли потрапляє зовні в контакт 2 з електронами, що йдуть назустріч. Тепловий струм I_Q є позитивним, коли витікає в напрямку $+x$ з контакту 2.

Рівняння (65) для довгих дифузійних резисторів можуть бути записані в загальній формі, використовуваній для опису об'ємного переносу як

$$J_x = \sigma\frac{d\left(E_F/q\right)}{dx} - s_T\frac{dT}{dx}\,. \tag{66а}$$

$$J_{Qx} = T\,s_T\frac{d(E_F/q)}{dx} - \kappa_0\frac{dT}{dx} \tag{66б}$$

з трьома специфічними коефіцієнтами переносу

$$\sigma = \int\sigma'(E)\,dE\,, \tag{66в}$$

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h}M_{3D}(E)\,\lambda(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right),$$

$$s_T = -\frac{k}{q}\int\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)\sigma'(E)dE\,, \tag{66г}$$

$$\kappa_0 = T\left(\frac{k}{q}\right)^2\int\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)^2\sigma'(E)dE\,. \tag{66д}$$

Ці рівняння мають однакову форму для 1D і 2D резисторів, але різні одиниці для різних членів.

На практиці перевага часто віддається інвертованій формі рівнянь (65), а саме:

$$\Delta V = RI - S\Delta T\,, \tag{67а}$$

$$I_Q = -\Pi I - K\Delta T\,, \tag{67б}$$

де

$$S = S_T / G\,, \tag{67в}$$

$$\Pi = TS\,, \tag{67г}$$

$$K = K_0 - \Pi SG\,. \tag{67д}$$

У цій формі рівнянь внески від кожної енергетичної моди не підсумовуються, наприклад, $R \neq \int R(E)dE$.

Аналогічно цьому в інвертованій формі об'ємні рівняння переносу (66) стають

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = \rho J_x + S\frac{dT}{dx}\,, \tag{68а}$$

$$J_{Qx} = TSJ_x - \kappa\frac{dT}{dx} \tag{68б}$$

з коефіцієнтами переносу

$$\rho = 1/\sigma\,, \tag{68в}$$

$$S = s_T / \sigma\,, \tag{68г}$$

$$\kappa = \kappa_0 - S^2\sigma T\,, \tag{68д}$$

Таким чином, якщо дана зонна структура, кількість мод можна визначити з рівнянь (18), а якщо можна вибрати модель середнього вільного шляху для зворотного розсіювання $\lambda(E)$, тоді квазірівноважні коефіцієнти переносу можна визначити, використовуючи вирази, наведені вище.

Теплоперенос за рахунок фононів

Електрони переносять і заряд, і тепло. Електрони переносять більшу частину тепла в металах. У напівпровідниках електрони переносять лише частину тепла, а основну частину тепла переносять фонони.

Тепловий потік фононів пропорційний температурному градієнту

$$J_{Qx}^{ph} = -\kappa_L\frac{dT}{dx}\,, \tag{69}$$

де коефіцієнт κ_L відомий як питома граткова теплопровідність. Такий винятковий провідник тепла, як алмаз, має $\kappa_L \approx 2\cdot 10^3$ Вт / м · К, а такий поганий провідник тепла, як скло, має $\kappa_L \approx 1$ Вт / м · К. Помітимо, що електропровідність твердих тіл може змінюватися більш ніж на 20 порядків величини, а теплопровідність твердих тіл може змінюватися в діапазоні всього 3 – 4 порядків величини. Ми переконаємося, що та ж методика, яка застосовується для опису

переносу електронів, може використовуватися й для переносу фононів. Ми також розглянемо відмінності між переносом електронів і фононів.

Для опису потоку фононів нам знадобиться вираз як для потоку електронів (63), записаний в наступному вигляді:

$$I = \frac{2q}{h}\int T_{el}(E)M_{el}(E)\left(f_1 - f_2\right)dE\,. \tag{70}$$

Для електронів стани в контактах заповнювалися згідно з рівноважними функціями фермієвського вікна провідності, але фонони підкоряються статистиці Бозе, тому фононні стани в контактах заповнюються згідно з рівноважним розподілом Бозе-Ейнштейна

$$n_0(\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\,. \tag{71}$$

Нехай температури для лівого й правого контактів T_1 і T_2. Що стосується електронів, обидва контакти покладаються ідеальними. Таким чином, фонони, що надходять у контакт, не здатні відбиватися назад, і коефіцієнт проходження $T_{ph}(E)$ описує проходження фононів по всьому каналу.

Тепер легко переписати рівняння (70) для фононного теплового потоку. Енергію електронів *E* ми замінимо енергією фононів ħщ. У потоці електронів ми маємо заряд *q, що* рухається в каналі, у випадку потоку фононів замість нього рухається квант енергії $\hbar\omega$; таким чином, ми заміняємо *q* в (70) на ħω й переміщаємо його всередині інтеграла. Коефіцієнт 2 в (70) відображає спінове виродження електрона. У випадку фононів ми видаляємо цей коефіцієнт і замість числа типів фононної поляризації, що сприяють тепловому потоку, включимо в число фононних мод $M_{ph}(\hbar\omega)$. У результаті, тепловий потік за рахунок фононів дорівнює

$$Q = \frac{1}{h}\int(\hbar\omega)T_{ph}(\hbar\omega)M_{ph}(\hbar\omega)\left(n_1 - n_2\right)d(\hbar\omega) \tag{72}$$

У режимі лінійного відгуку за аналогією з (50)

$$n_1 - n_2 \approx -\frac{\partial n_0}{\partial T}\Delta T\,, \tag{73}$$

де похідна згідно (71)

$$\frac{\partial n_0}{\partial T} = \frac{\hbar\omega}{T}\left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)}\right), \tag{74}$$

за

$$\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} = \left(-\frac{1}{kT}\right)\frac{e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^2}\,. \tag{75}$$

Тепер рівняння (72) з невеликими перепадами температури стає

$$Q = -K_L \Delta T \ , \tag{76}$$

де теплопровідність

$$K_L = \frac{k^2 T}{h} \int T_{ph}(\hbar\omega) M_{ph}(\hbar\omega) \left[\left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right) \right] d(\hbar\omega) \ . \tag{77}$$

Рівняння (52) – це просто закон Фур'є, що констатує, що тепло протікає вниз до температурного градієнта. Корисно також помітити, що теплопровідність (53) демонструє певну подібність із електричною провідністю

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T_{el}(E) M_{el}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \ . \tag{78}$$

Похідна

$$W_{el}(E) \equiv \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \tag{79}$$

відома як функція фермієвського вікна провідності, яка вирізує моди провідності, що вносять внесок лише в електричний струм. Електронна функція вікна провідності нормалізована:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = 1 \ . \tag{80}$$

У випадку фононів член у квадратних дужках у рівнянні (53) діє як функція вікна провідності, визначаючи, які моди переносять тепловий потік. Після нормалізації

$$W_{ph}(\hbar\omega) = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \left(\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega)} \right) ; \tag{81}$$

у такий спосіб

$$K_L = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} \int T_{ph}(\hbar\omega) M_{ph}(\hbar\omega) W_{ph}(\hbar\omega) \, d(\hbar\omega) \tag{82}$$

за

$$g_0 \equiv \pi^2 k^2 T / 3h \approx (9.456 \times 10^{-13} \ W / K^2) T \ , \tag{83}$$

відомому як квант теплопровідності,вперше експериментально спостережуваний в 2000 [19].

Порівнюючи рівняння (54) і (58), можна помітити, що електрична провідність і теплопровідність даються схожими рівняннями: обидві провідності пропорційні відповідному кванту провідності, помноженому на інтеграл від добутку коефіцієнта проходження на число мод провідності й на фермієвське вікно провідності.

Функції теплового розширення для електронів і фононів мають аналогічну форму шириною декілька kT кожна. У випадку електронів ця функція дана в рівнянні (22) або

$$F_T(x) \equiv \frac{e^x}{\left(e^x+1\right)^2} \tag{84}$$

за $x \equiv (E - E_F)/kT$ й показана на рис.2. Ця функція для фононів дана в рівнянні (57) або

$$F_T^{ph}(x) \equiv \frac{3}{\mathrm{p}^2}\frac{x^2 e^x}{\left(e^x-1\right)^2} \tag{85}$$

за $x \equiv \hbar\omega/kT$. Обидві функції нормалізовані до одиниці й наведені на рис.2.

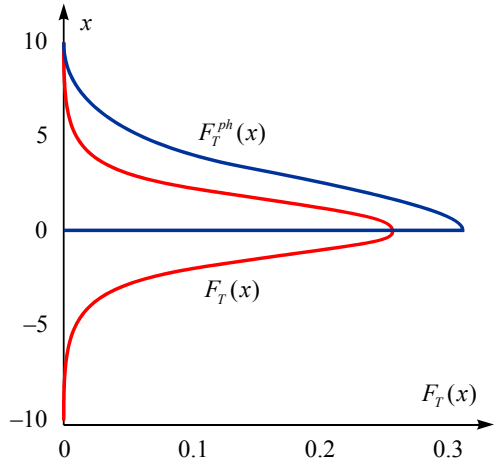

Рис. 2. Функція розширення для фононів у порівнянні з функцією розширення для електронів.

Поряд із числом мод, обумовлених дисперсійним співвідношенням, ці дві функції вікна провідності відіграють ключову роль у визначенні електро- і теплопровідності.

Висновки

Таким чином, ми бачимо, що принцип Ландауера-Датти-Лундстрома, використовуваний для опису переносу електронів, можна узагальнити для фононів. В обох випадках підхід Ландауера, узагальнений і розширений Датта й Лундстромом, дає правильний якісний опис процесів переносу для резисторів будь-якого розміру й масштабу в балістичному, квазібалістичному і дифузійному режимах лінійного відгуку за наявності перепаду напруги й температури на кінцях пристрою. Ми переконалися, що граткова теплопровідність може бути записана у формі, дуже близькій до електричної провідності, але є дві важливі відмінності.

Перша відмінність між електронами й фононами полягає у відмінності ширини смуг їх дисперсії. Для електронів дисперсія $BW >> kT$ за кімнатної температури, тому зайняті тільки низькоенергетичні стани. Для фононів $BW \approx kT$, тому за кімнатної температури зайняті всі акустичні моди по всій зоні Бріллюена. У результаті просте наближення Дебая до дисперсії акустичних фононів не працює, майже так само, як і просте наближення ефективної маси по дисперсії електронів.

Друга відмінність між електронами й фононами полягає в тому, що для електронів популяції мод контролюються функцією вікна провідності, яка залежить від положення рівня Фермі й температури. Для фононів функція вікна провідності залежить тільки від температури. У результаті зі зміною положення рівня Фермі електропровідність змінюється на багато порядків величини, а граткова провідність змінюється всього на кілька порядків величини.

Література

1. R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers metallic conduction IBM J. Res. Dev. – 1957. – Vol **1**. – Issue 3. – P.223-231.
2. R. Landauer. Minimal energy requirements in communication J. Math. Phys. – 1996. – Vol 272 № 5270 P.1914-1918.
3. R. Landauer, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).
4. S. Datta. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport, (Singapore: World Scientific) – 2012. – Vol. 1. P.473.
5. M. Lundstrom, J. Changwook, Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications (World Scientific, Singapore, 2013).
6. Yu.A. Kruglyak, Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, **11**, 519 (2013); Erratum, **12**, 415 (2014).
7. Кругляк Ю.А. Обобщенный метод Хартри-Фока и его версии: от атомов и молекул до полимеров / Ю.А. Кругляк // *Sciencerise*. – 2014. – № **5**/3(5). – С.6-21.
8. C. Gang, *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford University Press, New York, 2005).
9. Кругляк Ю.А. Уроки наноэлектроники: возникновение тока, формулировка закона Ома и моды проводимости в концепции «снизу-вверх» / Ю.А. Кругляк, Н.Е Кругляк, М.В. Стриха // Сенсорна електроника и микросистемни технологии. 2012. – Т.3(9). –№ 4. – С.1-25.
10. Yu.A. Kruglyak First-principles computation of single-electron field transistor on benzene molecule under coulomb blockade regime J. Nano- Electron. Phys. – 2013. – № **5**/1. – 01023.
11. Yu.A. Kruglyak, Physics in Higher Education, **19:** N 3, 99 (2013).
12. Yu.A. Kruglyak, Visnyk Odessa State Environ. Univ. N 15, 213 (2013).
13. C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* **107**, 023707 (2010).
14. Yu.A. Kruglyak, Physics in Higher Education, **19:** N 2, 161 (2013).
15. Yu.A. Kruglyak, *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*, **11**, 655 (2013)
16. H.C. Berg, *Random Walks in Biology* (Princeton University Press, Princeton, 1993)
17. Yu.A. Kruglyak, *Physics in Higher Education*, **19:** N 1, 50 (2013).
18. Анатичук Л.І. Вплив розмірних ефектів на властивості термоелектричних матеріалів / Л.І. Анатичук, П.В. Горський, В.П. Михальченко // Термоелектрика 2014. – № 1.– С.5-12.
19. K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, *Nature*, **404**, 974 (2000).

Надійшла до редакції 21.11.2014