

УДК 537.9

Кругляк Ю.А.



Кругляк Ю.А.

Факультет информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, Одесса, 65016, Украина

**ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК, ТЕРМОТОК И ТЕПЛОВОЙ
ПОТОК В НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ:
МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА**

Кратко рассмотрены современные модели переноса электронов и тепла Ландауэра-Датты-Лундстрёма. Если зонная структура задана аналитически или численно, можно оценить число мод проводимости. Далее следует задаться моделью для средней длины свободного пробега. В итоге можно вычислить термоэлектрические коэффициенты переноса для 1D, 2D и 3D резисторов любого масштаба в баллистическом, квазibalлистическом или диффузионном режимах линейного отклика при наличии перепада напряжения и/или температуры на концах устройства. Используются концепции мод проводимости и коэффициента прохождения. Предлагается иное выражение для удельного сопротивления через удельное число мод проводимости (на единицу поперечного сечения проводника) и среднюю длину свободного пробега для обратного рассеяния. Формулируются и сравниваются фермиевские окна проводимости для электронов и фононов. Хороший или плохой проводник определяется только лишь наличием в проводнике энергетических состояний в фермиевском окне шириной $\sim \pm 2kT$ и охватывающем равновесное значение электрохимического потенциала, который может изменяться в широких пределах для различных материалов. Особое внимание уделяется квазиравновесному переносу. Вводится общее выражение для термотока, удобное при анализе проводимости любых материалов от металлов и полупроводников до нанорезисторов и нанокмозитов. Это выражение упрощается для режима линейного отклика. Термоток выражается через три коэффициента переноса – проводимость, коэффициент Соре и электронную теплопроводность в условиях короткозамкнутой цепи. Детально рассматривается перенос тепла фононами. Формулируется базовое уравнение для термотока. Электрическая проводимость и теплопроводность даются схожими уравнениями, а именно: обе проводимости пропорциональны соответствующему кванту проводимости, умноженному на интеграл от произведения коэффициента прохождения на число мод проводимости и на фермиевское окно проводимости. Более того, функции теплового уширения для электронов и фононов похожи по форме и имеют ширину в несколько kT . Наряду с числом мод проводимости, определяемым дисперсионными соотношениями, эти оба окна проводимости играют ключевую роль в количественном определении электрической проводимости и теплопроводности.

Ключевые слова: наноэлектроника, микроэлектроника, моды проводимости, коэффициент прохождения, фермиевские окна, квазиравновесный перенос, баллистический перенос, квази-баллистический перенос, диффузионный 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. A new expression for 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. A 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 a linear response regime. Thermocurrent is expressed in terms of three transport coefficients -the conductivity, the Soret electro-thermal diffusion coefficient, and the electronic heat conductance under the short circuit conditions. Heat transfer by phonons is treated in detail. The 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.

Введение

В работе будем изучать задачи современной теории переноса электронов и тепла Ландауэра-Датты-Лундстрема (ЛДЛ) [1-5], которая применима для 1D, 2D и 3D резисторов нано- и макромасштаба в баллистическом, квазибаллистическом и диффузионном режимах линейного отклика при наличии перепада напряжения и температуры на концах устройства.

Начнем с двух известных основных уравнений – для тока и для общего числа

электронов в канале проводника в стационарных условиях и введем понятие мод проводимости для резисторов разных размеров. Затем введем понятие коэффициента прохождения как соотношение баллистического и диффузионного времен переноса. Показано, что коэффициент прохождения есть отношение длины среднего свободного пути для обратного рассеяния к длине резистора или, в самом общем случае, это отношение длины среднего свободного пути для обратного рассеяния к сумме длины резистора и длины среднего свободного пути для обратного рассеяния. Теперь можно определить три режима переноса: диффузионный, баллистический и квазibalлистический. Затем предлагается новое выражение для удельного сопротивления, обеспечивающее новый взгляд на удельное сопротивление с точки зрения удельного числа мод (на единицу площади поперечного сечения) и длины среднего свободного пути для обратного рассеяния.

Далее рассматривается только квазиравновесный перенос, известный также как режим линейного отклика слабого поля, который имеет большое практическое значение и оказывает сильное воздействие на характеристики большинства электронных устройств. Функция фермиевского окна проводимости вводится как отрицательная производная равновесной фермиевской функции по энергии. Хороший или плохой проводник определяется лишь наличием в проводнике энергетических состояний в фермиевском окне шириной $\sim \pm 2kT$, охватывающем равновесное значение электрохимического потенциала, который может изменяться в широких пределах для различных материалов. Ток обусловлен разностью функций фермиевских окон проводимости двух контактов, которая при низком смещении пропорциональна функции фермиевского окна проводимости, но не так называемым “внешним электрическим полем”, как это предполагает модель Друде, которая по-прежнему применяется для научных исследований и обучения. Таким образом, вводится известное выражение Ландауэра для проводимости. Рассматривается перенос в массивном 3D проводнике. Показано, что проводимость всегда является произведением кванта проводимости, умноженного на среднее прохождение, на число мод в фермиевских окнах, что является одним из основных результатов транспортной модели ЛДЛ.

Наконец, обобщается модель ЛДЛ для термотока. Вводится общее выражение для термотока, которое подходит для анализа проводимости любых материалов от металлов и полупроводников до современных нанорезисторов и нанокomпозитов. Это общее выражение упрощается для режима линейного отклика при наличии перепада напряжения и температуры на концах устройства. Термоток выражается через три коэффициента переноса – проводимость, коэффициент электротермической диффузии S_{ore} и электронную теплопроводность в условиях короткозамкнутой цепи. Эти уравнения также справедливы для 1D и 2D резисторов, но единицы различных членов отличаются. Таким образом, при наличии зонной структуры можно определить число мод, а при выборе модели для среднего свободного пути при обратном рассеянии коэффициенты

квазиравновесного переноса можно определить с помощью полученных уравнений.

Детально рассматривается перенос тепла фононами. Формулируется базовое уравнение для термотока. Дальнейшая часть связана с условиями линейного отклика. По аналогии с функцией фермиевского окна проводимости для электронов, вводится функция фермиевского окна проводимости для фононов. В результате, получается выражение для решеточной теплопроводности, которая пропорциональна кванту теплопроводности. Важно, что электрическая проводимость и теплопроводность даются схожими уравнениями, а именно: обе проводимости пропорциональны соответствующему кванту проводимости, умноженному на интеграл от произведения коэффициента прохождения на число мод проводимости и на фермиевское окно проводимости. Более того, функции теплового уширения для электронов и фононов похожи по форме и имеют ширину в несколько kT . Наряду с числом мод проводимости, определяемым дисперсионными соотношениями, оба окна проводимости играют ключевую роль в количественном определении электрической проводимости и теплопроводности.

Модель ЛДЛ для тока

Два основных уравнения для электрического тока

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

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

выводятся легко [5 – 7], где N – общее установившееся число электронов в канале, $D(E)$ – плотность состояний, включающая фактор спинового вырождения $g_s = 2$, функция Ферми

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

индексирована номерами контактов резистора 1 и 2, E_F – энергия Ферми, которая, как и температура T , может быть разной на обоих контактах, “уширение” $\gamma(E)$ относится к времени переноса электронов для пересечения канала резистора

$$\gamma(E) \equiv \frac{\hbar}{\tau(E)}. \quad (4)$$

Пропорциональность тока $(f_1 - f_2)$ имеет смысл, а фундаментальная постоянная $2q/h$ важна и известна как константа фон Клитцинга. Согласно (4), γ измеряется в энергетических единицах, плотность состояний в единицах (энергия) $^{-1}$, таким образом, произведение $\gamma(E) \pi D(E)/2$ является безразмерным. Теперь мы увидим, что

$\gamma(E)\pi D(E)/2 \equiv M(E)$ имеет физический смысл числа мод проводимости резистора (каналов) при энергии E .

Моды проводимости

Рассмотрим 2D баллистический резистор длиной L , который намного короче, чем средняя длина свободного пробега для обратного рассеяния λ , ориентирован вдоль оси x и имеет ширину W вдоль оси y . Общая плотность состояний составляет

$$D(E) = D_{2D}(E) L \cdot W, \quad (5)$$

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

где $D_{2D}(E)$ – удельная плотность состояний (на единицу площади $A = L \cdot W$), записанная для параболических энергетических зон с эффективной массой m^* и заполнением одной подзоны за счет ограничения в направлении z при долинном вырождении g_v [8].

Определим характеристическое время τ . Уравнения (38) и (46) в [6] дают

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

где $N'(E)dE$ – установившееся число электронов в канале в дифференциальной форме

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

а ток в дифференциальной форме

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

при

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

и

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

как число электронов, находящихся в равновесии между каналом и контактом 1, а также каналом и контактом 2, между энергией E и $E + dE$. Нами сделано допущение, что ток определяется положительным, когда протекает снаружи в контакт 2 при движении электронов от контакта 1 к контакту 2 (стандартное согласие).

Приложим достаточно высокое напряжение к контакту 2, которое составляет $E_{F2} \ll E_{F1}$, поэтому $f_2 \ll f_1$. Тогда уравнение (7) становится

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

Число электронов в резисторе равно

$$N'(E) = n'_s(E)L \cdot W, \quad (13)$$

где n'_s – удельная плотность электронов (на единицу площади), а дифференциальный ток

$$I'(E) = qWn'_s(E)\langle v_x^+(E) \rangle. \quad (14)$$

Таким образом, уравнение (12) дает

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

что есть просто среднее время переноса электронов в канале.

Чтобы определить τ , необходимо рассчитать среднюю скорость электрона в направлении $+x$, от контакта 1 к контакту 2. Скорость в нашем случае баллистического переноса, когда электроны движутся по резистору, не меняя направления

$$\langle v_x^+(E) \rangle = v(E)\langle \cos\theta \rangle, \quad (16)$$

где угол θ отсчитывается от положительного направления оси x . Среднее

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\theta d\theta = \frac{2}{\pi}, \quad (17a)$$

таким образом, для параболической дисперсии и при допущении изотропных условий получаем

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi} v = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2(E - E_C)}{m^*}}. \quad (17b)$$

Определив моды проводимости как

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

и используя (4) и (5) можно в итоге получить

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

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (18)$$

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

где аналогичные аргументы применялись для получения окончательных результатов и для 1D и 3D проводников. Можно заметить, что число мод проводимости при энергии E пропорционально ширине 2D резистора и площади поперечного сечения A 3D резистора.

Обратим внимание на физический смысл результатов, обобщенных в (18). Таким образом, для 2D проводника с учетом (6) и (16) мы имеем

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

В случае параболической дисперсии

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

где волновой вектор выражен через длину волны де Бройля электронов при энергии E

$$\lambda_B = 2\pi/k, \quad (21)$$

из общего выражения (19) для числа мод для 2D проводника получаем важное соотношение

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

что открывает возможность физической интерпретации числа мод для 2D проводника, а именно: $M(E)$ - просто число (также объясняющее долинное вырождение g_v) полувольт де Бройля для электрона, которые соответствуют ширине резистора. Целочисленность номеров мод проводимости обеспечивается граничными условиями при обязательном обращении в нуль волновой функции на обеих гранях 2D проводника. Подробное обсуждение принципа мод проводимости для 1D, 2D и 3D нано- и мезорезисторов можно найти в [9 – 12].

Резюмируя, получаем два основных уравнения для тока

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

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

в соответствии с которыми для расчета числа электронов и тока необходимы две величины – $D(E)$ и $M(E)$.

Для параболических энергетических зон (20) 1D, 2D и 3D плотности состояний

известны давно и имеют вид

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

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

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

где Ω – объем 3D резистора, а $H(E - E_C)$ – ступенчатая функция Хевисайда. Число мод в данном конкретном случае параболической дисперсии

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

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

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

Несмотря на то, что выше нами сделано допущение о параболической дисперсии, выражения для $M(E)$ (18) имеют общее значение и справедливы для линейной дисперсии, как в графене. Для произвольной зонной структуры можно использовать численный метод [13].

Коэффициент прохождения

Выше мы рассмотрели баллистический перенос. Обратимся к диффузионному случаю, когда $L \gg \lambda$. Электроны, инжектируемые от контактов 1 и 2, испытывают случайное блуждание. Одни траектории остановятся на инжектирующем контакте, а другие – на другом контакте. Если к контакту 2 приложить положительное напряжение, то еще несколько электронов остановятся на контакте 2.

Ключевым параметром модели переноса ЛДЛ является величина $\gamma(E)\pi D(E)/2$, представляющая собой число мод проводимости $M(E)$ в случае баллистического переноса. Уширение γ относится к времени переноса как $\gamma = \hbar/\tau$. Время переноса возрастает, когда перенос становится диффузионным, поэтому $\gamma(E)\pi D(E)/2$ будет снижаться. Будет показано, что для диффузионного переноса $\gamma\pi D(E)/2 = M(E) \cdot T(E)$, где $T(E) \leq 1$ известно как коэффициент прохождения.

В баллистическом режиме электроны инжектируются в канал под разными углами. Соответственно, происходит определенное распределение времени переноса. Таким образом, значение γ находится через среднее время переноса

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

где для 2D проводника

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

Каким будет $\langle \tau(E) \rangle$ для диффузионного транспорта?

При $L \gg \lambda$ применим первый закон диффузии Фика. В случае 2D проводника поток тока

$$J = q\bar{D} \frac{dn_s}{dx}, \quad (28)$$

где плотность тока пропорциональна градиенту плотности поверхностных электронов, а \bar{D} - диффузионный коэффициент.

Пусть электроны инжектируются в канал в основном контактом 1. Тогда $f_1 \approx 1$, а $f_2 \approx 0$. Существует конечная концентрация инжектированных электронов $\Delta n_s(0)$ с левой стороны ($x=0$) проводника. Для длинного канала $\Delta n_s(L) \rightarrow 0$ за счет $f_2 \approx 0$. Электронный профиль является линейным, поскольку процессы рекомбинации-генерации не предполагаются.

Время переноса согласно (12) определяется накопленным зарядом относительно тока

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

где общее число электронов в проводнике составляет $N = n_s(0)WL/2$, а ток $I = J \cdot W$ при $dn_s/dx = \Delta n_s(0)/L$. Из (29) и (28) мы заключаем, что диффузионное время переноса

$$\tau_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (30)$$

а баллистическое время переноса

$$\tau_B = \frac{L}{\langle v_x^+ \rangle}. \quad (31)$$

Объединив все вместе и помня определение γ (26) для обоих режимов, получим

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

$$\gamma(E)\pi\frac{D(E)}{2} \equiv M(E)T(E), \quad (33)$$

где мы видим, что коэффициент прохождения – это отношение баллистического времени переноса к диффузионному

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

Иными словами, при наличии электронного рассеяния число мод $M(E)$ просто необходимо заменить на $M(E) \cdot T(E)$. Всестороннее обсуждение перехода от баллистического переноса к диффузионному режиму для 1D и 3D проводников находим в [7, 9, 10, 14, 15].

Из (34) совместно с (30) и (31) получим

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

Теория случайных блужданий [16] дает

$$\bar{D} = \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2}, \quad (36)$$

и, наконец, мы получаем простое выражение для коэффициента прохождения

$$T(E) = \frac{\lambda}{L} \ll 1, \quad (37)$$

где λ - длина среднего свободного пути для обратного рассеяния. Как уже отмечалось,

$$\gamma \pi D(E)/2 = M(E) \cdot T(E) \quad (38)$$

сильно уменьшено в диффузионном режиме по сравнению с баллистическим режимом.

Уравнение (37) является точным в диффузионном пределе ($L \gg \lambda$), но теряет силу при малой длине проводника. В самом общем случае [4, 5]

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

что справедливо для диффузионного, баллистического, а также промежуточного режимов

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

баллистический: $L \ll \lambda$; $T \rightarrow 1$, (40)

квазибаллистический: $L \approx \lambda$; $T < 1$.

Примечательно, что такая простая модель переноса хорошо работает во всех трех режимах.

Закон Ома

Теперь четко установлено, что сопротивление баллистического проводника можно записать в виде

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

Этот результат довольно хорошо известен, но согласно распространенному мнению он применим только к коротким резисторам, и относится к курсу специальных тем, таких как мезоскопическая физика или наноэлектроника. Не совсем известно то, что сопротивление для длинных и коротких проводников можно записать в виде

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

Баллистические и диффузионные проводники – это не два разных мира, а скорее сплошная среда, поскольку длина L увеличивается. Баллистический предел очевиден при $L \ll \lambda$, тогда как при $L \gg \lambda$ он сводится к стандартному закону Ома

$$R \equiv \frac{V}{I} = \rho \frac{L}{A}. \quad (43)$$

Тогда мы могли бы переписать $R(E)$ как

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

с новым выражением для удельного сопротивления

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

что обеспечивает другой взгляд на удельное сопротивление с точки зрения числа мод на единицу площади и среднего пути свободного пробега.

Режим линейного отклика

Квазиравновесный перенос или режим линейного отклика слабого поля соответствует $\lim(dI/dV)_{V \rightarrow 0}$. Существует несколько причин для разработки модели переноса слабого поля. Во-первых, квазиравновесный перенос служит основой для понимания переноса в целом. Понятия, введенные в исследование квазиравновесного режима, часто распространяются на рассмотрение более сложных ситуаций, и квазиравновесный режим служит исходной точкой для анализа переноса в более сложных условиях. Во-вторых, измерения квазиравновесного переноса широко применяются для характеристики электронных материалов и понимания свойств новых материалов. И,

наконец, квазиравновесный перенос в значительной мере определяет и контролирует характеристики большинства электронных устройств.

Пусть в условиях слабого поля

$$f_0(E) \approx f_1(E) > f_2(E), \quad (46)$$

где $f_0(E)$ – равновесная функция Ферми, а приложенное смещение

$$V = \Delta E_F / q = (E_{F1} - E_{F2}) / q \quad (47)$$

достаточно мало. Используя разложение Тейлора в условиях постоянной температуры

$$f_2 = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} \Delta E_F = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} qV \quad (48)$$

и свойство функции Ферми

$$+\frac{\partial f}{\partial E_F} = -\frac{\partial f}{\partial E} \quad (49)$$

находим

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

Производная функции Ферми, умноженная на kT , что делает ее безразмерной

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

известна как функция теплового уширения и показана на рис. 1.

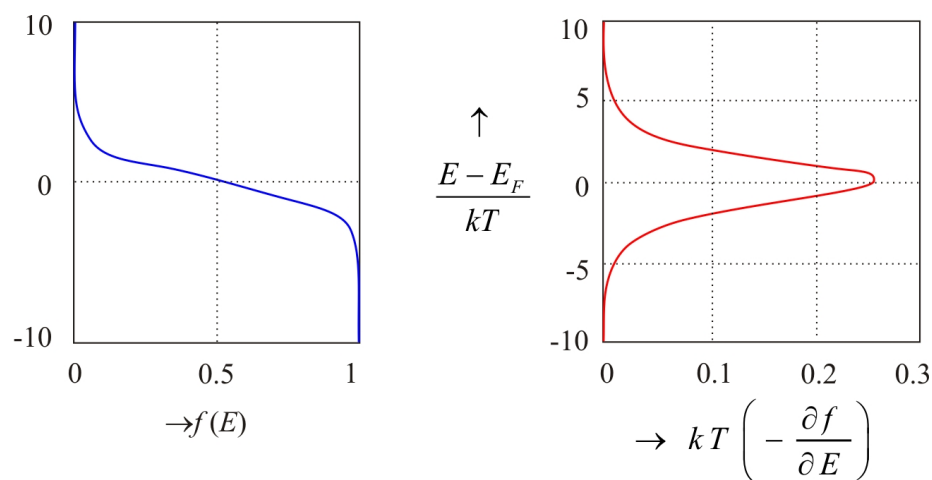


Рис. 1. Функция Ферми и безразмерная нормализованная функция теплового уширения.

Если интегрировать F_T по всему энергетическому диапазону, вся площадь

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

так что можно приближенно визуально представить F_T как прямоугольный импульс, сосредоточенный вокруг $E = E_F$ с пиковым значением $1/4$ и шириной $\sim 4kT$.

Производная $(-\partial f_0 / \partial E)$ известна как функция фермиевского окна проводимости. Хороший или плохой проводник – это определяется наличием энергетических состояний проводника в энергетическом окне $\sim \pm 2kT$ вокруг электрохимического потенциала E_{F0} , который может изменяться в широких пределах от одного материала к другому. Ток обусловлен разностью $f_1 - f_2$ двух контактов, которая при низком смещении пропорциональна производной равновесной функции Ферми (50). Принципы генерирования тока на основе экспериментальных и теоретических результатов современной нано- и мезофизики подробно рассматриваются в [4, 5, 9, 10, 17].

При квазиравновесном допущении для тока (23) вместо самого общего выражения, достоверного для диффузионного и баллистического режима, а также промежуточного

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

получаем

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

при проводимости

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

известной как выражение Ландауэра, справедливое для 1D, 2D и 3D резисторов, если использовать соответствующие выражения для $M(E)$.

Перенос в массивном проводнике

Для баллистического предела $T(E)=1$. Для диффузионного переноса $T(E)$ выражено уравнением (39). Для проводника, который намного длиннее среднего свободного пути уравнение для плотности тока составляет

$$J_x = \frac{\sigma}{q} \frac{d(E_F)}{dx} \quad (56)$$

где электрохимический потенциал E_F также известен как квазиуровень Ферми.

Для 2D проводника удельная проводимость поверхности равна

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

или в другой форме

$$\sigma_s = \int \sigma'_s(E) dE, \quad (58a)$$

где дифференциальная удельная проводимость

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

Аналогичные выражения могут быть записаны для 1D и 3D резисторов.

Другой способ записать проводимость – квант проводимости умножить на коэффициент прохождения и на число мод в фермиевских окнах:

$$G = \frac{2q^2}{h} \langle \langle T \rangle \rangle \langle M \rangle, \quad (59a)$$

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

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

Еще один способ записать проводимость в переводе на дифференциальную проводимость $G'(E)$

$$G = \int G'(E) dE, [S] \quad (60a)$$

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

Модель ЛДЛ для термотока и термоэлектрических коэффициентов

Электроны переносят и заряд, и тепло. Зарядный ток приведен в уравнении (53). Для получения уравнения теплового потока, заметим, что электроны в контактах протекают с энергией $E \approx E_F$. Для вхождения в режим $M(E)$ в резисторе электроны должны поглощать (при $E > E_F$) или выделять (при $E < E_F$) тепловую энергию $E - E_F$. Мы приходим к выводу, что для получения уравнения теплового потока необходимо вставить $(E - E_F)/q$ в интеграл. Полученный термоток

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

С практической точки зрения важно, что оба выражения – для электрического тока (53) и термотока (61) подходят для анализа проводимости любых материалов от металлов и полупроводников до современных наноконструкций [18].

При наличии перепада напряжения и температуры на резисторе необходимо разложить разность Ферми ($f_1 - f_2$) в ряд Тейлора по напряжению и температуре и получить

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

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

Теперь получить общее уравнение неравновесного тока просто. Общий ток является суммой вкладов каждой энергетической моды

$$I = \int I'(E) dE, \quad (63a)$$

где дифференциальный ток равен

$$I'(E) = \frac{2q}{h} T(E) M(E) (f_1 - f_2). \quad (63b)$$

Используя уравнение (62), получим

$$I'(E) = G'(E) \Delta V + S'_T(E) \Delta T, \quad (64a)$$

где

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

дифференциальная проводимость и

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

есть коэффициент Соре для электротермической диффузии в дифференциальной форме. Заметим, что $S'_T(E)$ является отрицательным для мод выше E_F (n -резисторов) и положительным для мод с энергией ниже E_F (p -резисторов).

Теперь интегрируем уравнение (64a) по всем энергетическим модам и найдем

$$I = G \Delta V + S_T \Delta T, \quad (65a)$$

$$I_Q = -T S_T \Delta V - K_0 \Delta T, \quad (65b)$$

с тремя коэффициентами переноса – проводимостью, выраженной в уравнении (60), коэффициентом электротермической диффузии $S_{\sigma T}$

$$S_{\sigma T} = \int S'_{\sigma T}(E) dE = -\frac{k}{q} \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) G'(E) dE, \quad (65\text{в})$$

и электронной теплопроводностью в режиме короткого замыкания ($\Delta V = 0$)

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

где ток I считается положительным, когда попадает снаружи в контакт 2 с электронами, идущими навстречу. Тепловой ток I_Q является положительным, когда вытекает в направлении $+x$ из контакта 2.

Уравнения (65) для длинных диффузионных резисторов могут быть записаны в общей форме, используемой для описания объемного переноса как

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - s_T \frac{dT}{dx}. \quad (66\text{а})$$

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

с тремя специфическими коэффициентами переноса

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

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

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

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

Эти уравнения имеют одинаковую форму для 1D и 2D резисторов, но разные единицы для различных членов.

На практике предпочтение часто отдается инвертированной форме уравнений (65), а именно:

$$\Delta V = RI - S\Delta T, \quad (67\text{а})$$

$$I_Q = -\Pi I - K\Delta T, \quad (67\text{б})$$

где

$$S = S_T / G, \quad (67\text{в})$$

$$\Pi = TS, \quad (67\text{г})$$

$$K = K_0 - \Pi SG. \quad (67\text{д})$$

В этой форме уравнений вклады от каждой энергетической моды не суммируются, например

$$R \neq \int R(E)dE.$$

Аналогично этому, в инвертированной форме объемные уравнения переноса (66) становятся

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

$$J_{Qx} = TSJ_x - \kappa \frac{dT}{dx} \quad (68\text{б})$$

с коэффициентами переноса

$$\rho = \frac{1}{\sigma}, \quad (68\text{в})$$

$$S = \frac{S_T}{\sigma}, \quad (68\text{г})$$

$$\kappa = \kappa_0 - S^2 \sigma T, \quad (68\text{д})$$

Таким образом, если дана зонная структура, количество мод можно определить из уравнений (18) а если можно выбрать модель среднего свободного пути для обратного рассеяния $\lambda(E)$, тогда квазиравновесные коэффициенты переноса можно определить, используя выражения, приведенные выше.

Теплоперенос за счет фононов

Электроны переносят и заряд, и тепло. Электроны переносят большую часть тепла в металлах. В полупроводниках электроны переносят лишь часть тепла, а основную часть тепла переносят фононы.

Тепловой поток фононов пропорционален температурному градиенту

$$J_{Qx}^{ph} = -\kappa_L \frac{dT}{dx} \quad (69)$$

где коэффициент κ_L известен как удельная решеточная теплопроводность. Такой исключительный проводник тепла как алмаз имеет $\kappa_L \approx 2 \cdot 10^3 \text{ W} / \text{m} \cdot \text{K}$, а такой плохой

проводник тепла как стекло имеет $\kappa_L \approx 1 \text{ W} / \text{m} \cdot \text{K}$. Заметим, что электропроводность твердых тел может изменяться более чем на 20 порядков величины, а теплопроводность твердых тел может изменяться в диапазоне всего 3 – 4 порядков величины. Мы убедимся, что та же методика, которая применяется для описания переноса электронов, может использоваться и для переноса фононов. Мы также рассмотрим различия между переносом электронов и фононов.

Для описания потока фононов нам понадобится выражение, как для потока электронов (63), написанное в следующем виде

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

Для электронов состояния в контактах заполнялись согласно равновесным функциям фермиевского окна проводимости, но фононы подчиняются статистике Бозе, поэтому фононные состояния в контактах заполняются согласно равновесному распределению Бозе-Эйнштейна

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

Пусть температуры для левого и правого контактов T_1 и T_2 . Что касается электронов, оба контакта полагаются идеальными. Таким образом, фононы, поступающие в контакт, не способны отражаться обратно, и коэффициент прохождения $T_{ph}(E)$ описывает прохождение фононов по всему каналу.

Теперь легко переписать уравнение (70) для фононного теплового потока. Энергию электронов E мы заменим энергией фононов $\hbar\omega$. В потоке электронов мы имеем заряд q , движущийся в канале, в случае потока фононов вместо него движется квант энергии $\hbar\omega$; таким образом, мы заменяем q в (70) на $\hbar\omega$ и перемещаем его внутри интеграла. Коэффициент 2 в (70) отражает спиновое вырождение электрона. В случае фононов мы удаляем этот коэффициент, и вместо числа типов фононной поляризации, способствующих тепловому потоку, включим в число фононных мод $M_{ph}(\hbar\omega)$. В результате, тепловой поток за счет фононов равен

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

В режиме линейного отклика по аналогии с (50)

$$n_1 - n_2 \approx -\frac{\partial n_0}{\partial T} \Delta T, \quad (73)$$

где производная согласно (71)

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

при

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

Теперь уравнение (72) при небольших перепадах температуры становится

$$Q = -K_L \Delta T, \quad (76)$$

где теплопроводность

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

Уравнение (52) – это просто закон Фурье, констатирующий, что тепло протекает вниз к температурному градиенту. Полезно также заметить, что теплопроводность (53) демонстрирует определенное сходство с электрической проводимостью

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

Производная

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

известна как функция фермиевского окна проводимости, которая вырезает моды проводимости, вносящие вклад лишь в электрический ток. Электронная функция окна проводимости нормализована:

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

В случае фононов член в квадратных скобках в уравнении (53) действует как функция окна проводимости, определяя, какие моды переносят тепловой поток. После нормализации

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

таким образом

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

при

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

известном как квант теплопроводности, впервые экспериментально наблюдаемый в 2000 [19].

Сравнивая уравнения (54) и (58), можно заметить, что электрическая проводимость и теплопроводность даются схожими уравнениями: обе проводимости пропорциональны соответствующему кванту проводимости, умноженному на интеграл от произведения коэффициента прохождения на число мод проводимости и на фермиевское окно проводимости.

Функции теплового уширения для электронов и фононов имеют аналогичную форму шириной несколько kT каждая. В случае электронов эта функция дана в уравнении (22) или

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

при $x \equiv (E - E_F) / kT$ и показана на рис. 2. Эта функция для фононов дана в уравнении (57)

или

$$F_T^{ph}(x) \equiv \frac{3}{p^2} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (85)$$

при $x \equiv \hbar\omega / kT$. Обе функции нормализованы до единицы и приведены на рис. 2.

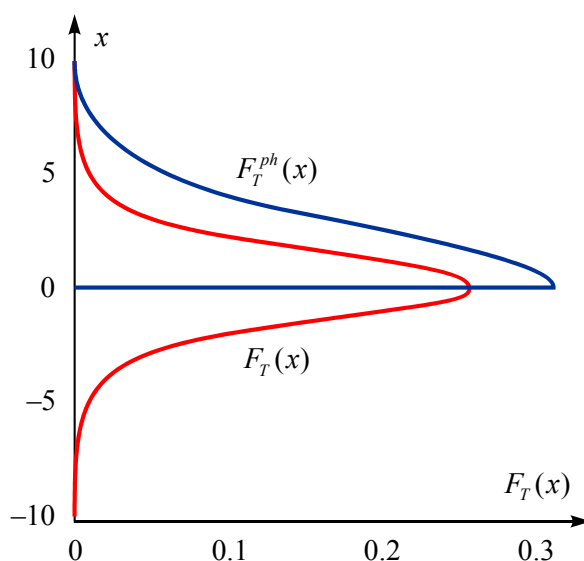


Рис. 2. Функция уширения для фононов в сравнении с функцией уширения для электронов.

Наряду с числом мод, определяемых дисперсионным соотношением, эти две функции окна проводимости играют ключевую роль в определении электро- и теплопроводности.

Выводы

Таким образом, мы видим, что принцип Ландауэра-Датты-Лундстррома, используемый для описания переноса электронов, можно обобщить для фононов. В обоих случаях подход Ландауэра, обобщенный и расширенный Дата и Лундстромом, дает правильное качественное описание процессов переноса для резисторов любого размера и масштаба в баллистическом, квазибаллистическом и диффузионном режимах линейного отклика при наличии перепада напряжения и температуры на концах устройства. Мы убедились, что решеточная теплопроводность может быть записана в форме, очень близкой к электрической проводимости, но есть два важных различия.

Первое различие между электронами и фононами состоит в различии ширины полос их дисперсии. Для электронов дисперсия $BW \gg kT$ при комнатной температуре, поэтому заняты только низкоэнергетические состояния. Для фононов $BW \approx kT$, поэтому при комнатной температуре заняты все акустические моды по всей зоне Бриллюэна. В результате, простое приближение Дебая до дисперсии акустических фононов не работает, почти так же, как и простое приближение эффективной массы по дисперсии электронов.

Второе различие между электронами и фононами состоит в том, что для электронов популяции мод контролируются функцией окна проводимости, которая зависит от положения уровня Ферми и температуры. Для фононов функция окна проводимости зависит только от температуры. В результате, при изменении положения уровня Ферми электропроводность изменяется на много порядков величины, а решеточная проводимость изменяется всего на несколько порядков величины.

Литература

1. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* 1, 223 (1957).
2. R. Landauer, *J. Math. Phys.* 37, 5259 (1996).
3. R. Landauer, *Philos. Mag.* 21, 863 (1970).
4. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (World Scientific, Singapore, 2012).
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. Yu.A. Kruglyak, *ScienceRise*, 5: N 3(5), 21 (2014).

8. C. Gang, *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford University Press, New York, 2005).
9. Yu.A. Kruglyak, N.Yu. Kruglyak, M.V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.* 9: N 4, 5 (2012).
10. Yu.A. Kruglyak, *J. Nano- Electron. Phys.* 5: N 1, 01023 (2013).
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. L.I. Anatyshuk, P.V. Gorsky, V.P. Mikhalchenko, *J. Thermoelectricity*, N 1, 5 (2014).
19. K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, *Nature*, 404, 974 (2000).

Поступила в редакцию 21.11.2014