

МОДЕЛЬ ПРОВОДИМОСТИ ЛАНДАУЭРА-ДАТТЫ-ЛУНДСТРОМА В МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ И ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

© Ю. А. Кругляк

Рассматривается роль транспортного уравнения Больцмана (ТУБ) в модели Ландауэра-Датты-Лундстрорма (ЛДЛ) переноса электронов и тепла. В качестве приложения ТУБ обсуждается решение ТУБ в приближении времени релаксации, выводится привычное для модели ЛДЛ выражение для поверхностной проводимости и рассматривается поведение тока во внешнем магнитном поле

Ключевые слова: *нанофизика, наноэлектроника, уравнение Больцмана, время релаксации, поверхностная проводимость, эффект Холла, холловская подвижность, холловский фактор*

The role of the Boltzmann transport equation (BTE) in the Landauer-Datta – Lundstrom (LDL) electron and heat transport model is discussed. As the applications of the BTE there are discussed the BTE in the relaxation time approximation and the behavior of electric current in an external magnetic field as well as expression for the surface conductivity well known in the LDL model is deduced

Keywords: *nanophysics, nanoelectronics, Boltzmann equation, relaxation time, surface conductivity, Hall effect, Hall mobility, Hall factor*

1. Введение

Транспортное уравнение Больцмана (ТУБ) в наноэлектронике [1] решает те же самые задачи, что и транспортная модель Ландауэра-Датты-Лундстрорма (ЛДЛ) [2]. Для одних задач лучше пользоваться ТУБ, а для других – моделью ЛДЛ. При правильной постановке вычислений оба подхода приводят, естественно, к одним и тем же результатам. Настоящий обзор посвящен в первую очередь ТУБ и его роли в концепции ЛДЛ. В качестве приложения ТУБ рассмотрим поведение тока во внешнем магнитном поле.

Основной задачей теории транспортных явлений Больцмана [3] является вычисление функции распределения $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ как вероятности того, что состояние в точке \vec{r} с волновым вектором \vec{k} (или импульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$) занято в момент времени t . В состоянии равновесия ответ известен: это – функция Ферми $f_0(E)$. Нас же в этом обзоре будут интересовать следующие вопросы: как составить уравнение для $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ за пределами равновесия, как решить это уравнение в режиме линейного отклика, другими словами, вблизи равновесия, как увязать полученные таким образом результаты с теми, которые получаются в модели ЛДЛ в диффузионном режиме транспорта, как учесть внешнее магнитное поле и его влияние на электронный транспорт. Более подробное рассмотрение этих вопросов можно найти в [4–8].

2. Обзор транспортного уравнения Больцмана

Электроны в кристалле с медленно меняющимся потенциалом могут рассматриваться как квази-частицы. Ньютоновское уравнение движения

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \vec{F}_e, \tag{1}$$

где сила, действующая на электрон,

$$\vec{F}_e = -\nabla E_c - q\vec{v} \times \vec{B} = -q\vec{E} - q\vec{v} \times \vec{B}. \tag{2}$$

Для нахождения $\vec{k}(t)$ нужно вычислить

$$\hbar\vec{k}(t) = \hbar\vec{k}(0) + \int_0^t \vec{F}_e(\vec{r}(t'), t') dt'. \tag{3}$$

Зная $\vec{k}(t)$, по зонной структуре определяем скорость электронов

$$\vec{v}_g(t) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}(t)) \tag{4}$$

и далее их траекторию

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \int_0^t \vec{v}_g(t') dt'. \tag{5}$$

Уравнения (3) и (5) есть полуклассические уравнения движения электронов в кристаллическом твердом теле. В полуклассическом подходе предполагается, что потенциал $E_c(\vec{r})$ меняется медленно, так что отсутствуют квантовая интерференция и туннелирование и электроны можно рассматривать как частицы. Положение электрона и его импульс одновременно определены, так что квантовомеханическая неопределенность $\Delta r \Delta p \geq \hbar/2$ мала.

Уравнения движения описывают положение электрона в фазовом пространстве. На рис. 1 показана произвольная траектория $T[x(t), p_x(t)]$ движения электрона в 2d-фазовом пространстве (x, p_x) .

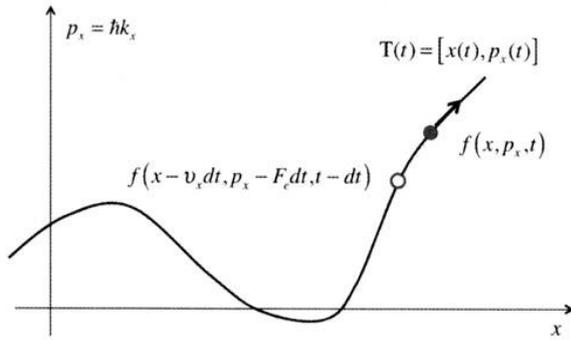


Рис. 1. Траектория движения электрона $T(t) = [x(t), p_x(t)]$ в фазовом пространстве (x, p_x) . Определить нужно вероятность $f(x, p_x, t)$ того, что состояние, обозначенное черным кружком, занято в момент времени t . Эта вероятность должна совпадать с вероятностью того, что предыдущее состояние, обозначенное светлым кружком, также занято в момент времени $t - dt$

Черным кружком на траектории показано состояние, для которого мы хотим определить вероятность $f(x, p_x, t)$ того, что оно занято. Из непрерывности движения электрона вдоль траектории следует, что эта вероятность должна совпадать с такой же вероятностью для предшествующего состояния, показанного светлым кружком, а именно:

$$f(x, p_x, t) = f(x - v_x dt, p_x - F_e dt, t - dt), \quad (6)$$

другими словами, полная производная вдоль траектории равна нулю

$$\frac{df}{dt} = 0. \quad (7)$$

Взяв производную от функции нескольких переменных (цепное правило), получаем

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} v_x + \frac{\partial f}{\partial p_x} F_e = 0, \quad (8)$$

или иначе

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} v_x + \frac{\partial f}{\partial p_x} F_e = 0. \quad (9)$$

В 3d-фазовом пространстве, очевидно, имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{F}_e \cdot \nabla_p f = 0, \quad (10)$$

Где

$$\begin{aligned} \nabla_r f &= \frac{\partial f}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial f}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial f}{\partial z} \hat{z}, \\ \nabla_p f &= \frac{\partial f}{\partial p_x} \hat{p}_x + \frac{\partial f}{\partial p_y} \hat{p}_y + \frac{\partial f}{\partial p_z} \hat{p}_z. \end{aligned} \quad (11)$$

Уравнение (10) иногда называют бесстолкновительным ТУБ. Это уравнение описывает баллистический транспорт или же состояние равновесия, в котором каждый акт столкновения компенсируется

ему противоположным актом в соответствии с принципом детального равновесия.

Поясним последнее утверждение.

Процессы рассеяния увеличивают или уменьшают плотность электронов, приходящуюся на инфинитезимальный объем $d\vec{k}$. Вводят величины

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{in} \text{ и } \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{out}$$

такие, что выражения

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{in} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} dt \text{ и } \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{out} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} dt$$

дают прирост (*in*) или отток (*out*) числа электронов на единицу объема в элементе объема $d\vec{k}$, охватывающего значение \vec{k} в инфинитезимальный временной интервал dt . В состоянии динамического равновесия прирост и отток уравниваются. При полуклассическом подходе к транспорту электронов предполагается, что рассеяние происходит под действием короткодействующих сил настолько быстро, что положение электрона не изменяется в процессе столкновения, изменяется лишь импульс электрона.

При учете рассеяния ТУБ принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{F}_e \cdot \nabla_p f = \hat{S} f, \quad (12)$$

в котором выбор оператора рассеяния \hat{S} определяется постановкой задачи и может быть весьма сложным. При полуклассическом рассмотрении транспорта электронов обычно используется приближение времени релаксации (ВР) [6]

$$\hat{S} f = - \left(\frac{f(\vec{p}) - f_0(\vec{p})}{\tau} \right) = - \frac{\delta f(\vec{p})}{\tau}, \quad (13)$$

где δf есть отклонение функции распределения от ее равновесного значения, а τ есть характеристическое время релаксации импульса [4].

Почувствовать приближение ВР можно на таком простом примере. Пусть мы рассматриваем пространственно однородный материал в отсутствии электрических или магнитных полей. Тогда второе и третье слагаемые в ТУБ (12) зануляются и остается уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\delta f}{\tau}, \quad (14)$$

решением которого является

$$\delta f(t) = \delta f(0) e^{-t/\tau}, \quad (15)$$

согласно которому нарушения в системе, вызванные отклонением от равновесного состояния, распадаются экспоненциально с характеристическим временем τ . Рассеяние восстанавливает равновесие.

Приближение ВР вполне приемлемо для описания квазиравновесного транспорта в режиме линейного отклика, однако, подобное приближение для

интеграла столкновений может быть обосновано лишь вблизи равновесия и только для упругих и/или изотропных процессов рассеяния [4]. Этим приближением широко пользуются для получения результатов в аналитическом виде. Будем далее пользоваться им и мы. Нужно, однако, помнить, что есть немало ситуаций, когда приближение ВР не работает (например, [9]).

3. Решение ТУБ в режиме динамического равновесия

В качестве примера решения ТУБ рассмотрим случай динамического равновесия. Внешнее магнитное поле пока не будем учитывать. В приближении ВР для системы в состоянии динамического равновесия ($\partial f/\partial t = 0$) имеем:

$$\vec{v} \cdot \nabla_r f - q\vec{E} \cdot \nabla_p f = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (16)$$

Решение сводится к равновесному значению $f_0(\vec{r}, \vec{p}, t)$ с учетом малой поправки $\delta f(\vec{r}, \vec{p}, t)$. Естественно предположить, что

$$\begin{aligned} \nabla_r f &\approx \nabla_r f_0, \\ \nabla_p f &\approx \nabla_p f_0. \end{aligned} \quad (17)$$

Тогда для поправки δf из уравнения (16) имеем:

$$\delta f = -\tau (\vec{v} \cdot \nabla_r f_0 - q\vec{E} \cdot \nabla_p f_0). \quad (18)$$

Преобразуем правую часть решения (18) следующим образом. Равновесную функцию Ферми запишем в виде

$$\begin{aligned} f_0(\vec{p}) &= \frac{1}{e^{\Theta} + 1}, \\ \Theta &= \frac{E(\vec{r}, \vec{p}) - E_F(\vec{r})}{kT} = \frac{E_c(\vec{r}) + E(\vec{p}) - E_F(\vec{r})}{kT}, \end{aligned} \quad (19)$$

где $E_F(\vec{r})$ – электрохимический потенциал. Для градиентов равновесной функции Ферми имеем:

$$\nabla_r f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \Theta} \nabla_r \Theta, \quad (20)$$

$$\nabla_p f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \Theta} \nabla_p \Theta,$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \Theta} = kT \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (21)$$

Подставляя (20) и (21) в (18), получаем:

$$\delta f = \tau kT \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \nabla_r \Theta - q\vec{E} \cdot \nabla_p \Theta). \quad (22)$$

С учетом

$$\begin{aligned} \nabla_r \Theta &= \frac{1}{kT} \nabla_r (E_c(\vec{r}) - E_F(\vec{r})), \\ -\nabla_r E_c(\vec{r}) &= -q\vec{E}(\vec{r}), \quad \nabla_p \Theta = \frac{\vec{v}}{kT}, \end{aligned}$$

квазиравновесное решение ТУБ (22) окончательно можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta f &= \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \vec{F}_g), \\ \vec{F}_g &= -\nabla_r E_F(\vec{r}) + T [E_c(\vec{r}) + E(\vec{p}) - E_F(\vec{r})] \nabla_r \left(\frac{1}{T} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Силу \vec{F}_g называют обобщенной силой; именно она выводит систему из состояния равновесия. Обобщенная сила содержит две компоненты: градиент электрохимического потенциала и градиент (обратной) температуры. Именно эти две причины в транспортной модели ЛДЛ выводят систему (проводник) из состояния равновесия и обеспечивают возникновение электрического тока [2, 10]. В модели ЛДЛ это очевидный физический результат, подтвержденный теперь математическим решением ТУБ в квазиравновесном режиме в приближении ВР.

Перейдем к вычислению транспортных коэффициентов.

4. Транспортные коэффициенты

Располагая решением (23) ТУБ в квазиравновесном режиме, можно рассчитать различные свойства проводника. К примеру, для 2D проводника поверхностная плотность электронов

$$n_s(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} [f_0(\vec{r}, \vec{k}) + \delta f(\vec{r}, \vec{k})] = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} f_0(\vec{r}, \vec{k}), \quad (24)$$

где окончательный результат есть следствие того, что функция $\delta f(\vec{r}, \vec{k})$ является нечетной по импульсу и при интегрировании в k -пространстве зануляется. Суммирование в k -пространстве рассматривается во второй лекции курса М. Лундстрема «Электронный транспорт в полупроводниках» [11].

В случае плотности тока в 2D проводнике нужно вычислить только

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} (-q)\vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (25)$$

поскольку существенна только поправка δf , а произведение $\vec{v}f_0$ нечетное в k -пространстве и при интегрировании зануляется, произведение же $\vec{v}\delta f$ в (25) четное и дает вклад в плотность тока.

Плотность энергии электрического тока дается выражением

$$\vec{J}_w(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (26)$$

а термоток

$$\vec{J}_Q(\vec{r}) = \frac{1}{A} \sum_{\vec{k}} (E - E_F) \vec{v}(\vec{k}) \delta f(\vec{k}), \quad (27)$$

где суммарная энергия электрона $E = E_c(\vec{r}) + E(\vec{k})$. Разность $E - E_F$ есть энергия, которую должен поглотить электрон, находящийся в контакте при энер-

гии $E_F < E$, чтобы войти в моду проводника при энергии E [12].

Если вычислять зарядовый ток и термоток опираясь на решение ТУБ (23), для каждого из токов получим двухчленное выражение, поскольку обобщенная сила в (23) дает два вклада – за счет разности электрохимических потенциалов и за счет разности температур контактов. В итоге получаются четыре термоэлектрических коэффициента. Вычислим один из них – поверхностную проводимость σ_s .

Итак, вычисляем зарядовый ток (25) с учетом (23):

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{F}_g) = \\ &= \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v}\vec{v}) \cdot \vec{F}_g, \end{aligned} \quad (28)$$

где произведение $(\vec{v}\vec{v})$ в общем случае есть тензор, так что ТУБ позволяет относительно просто рассматривать анизотропный транспорт, для описания которого потребуются тензорные выражения для транспортных коэффициентов. Упрощая ситуацию, далее рассмотрим ток лишь в направлении x в предположении, что электрохимический потенциал изменяется только в этом направлении и температура вдоль проводника постоянна, а именно:

$$\vec{J}_x(\vec{r}) = \left[\frac{1}{A} \sum_k q v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \right] \frac{dE_F}{dx}, \quad (29)$$

что можно переписать в стандартной форме

$$J_x = \sigma_s \frac{d(E_F/q)}{dx}, \quad (30)$$

где

$$\sigma_s = \frac{1}{A} \sum_k q^2 v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (31)$$

Для вычисления удельной поверхностной проводимости нужно отсуммировать в k -пространстве.

При конечных размерах проводника число электронных состояний в проводнике счетно. Если речь идет о нанопроводнике, число состояний невелико и суммирование в (31) можно выполнить непосредственно. В достаточно объемных проводниках состояния располагаются плотно и суммирование в (31) можно заменить интегрированием. Рецепт простой:

$$\sum_k (\bullet) \rightarrow \int (\bullet) N_k d\vec{k}, \quad (32)$$

где N_k есть плотность состояний в k -пространстве. Для проводников разной размерности окончательно имеем [4, 11]:

$$\begin{aligned} 1D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{L}{2\pi} \right) dk = \frac{L}{\pi} dk, \\ 2D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{A}{4\pi^2} \right) dk_x dk_y = \frac{A}{2\pi^2} dk_x dk_y, \\ 3D: \quad N_k d\vec{k} &= 2 \times \left(\frac{\Omega}{8\pi^3} \right) dk_x dk_y dk_z = \frac{\Omega}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z, \end{aligned} \quad (33)$$

где общая двойка учитывает вырождение по спину. Плотность состояний N_k не зависит от зонной структуры.

Вместо (31) с учетом долиного вырождения g_v имеем:

$$\sigma_s = \frac{1}{A} g_v \frac{A}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} q^2 v_x^2 \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) d\theta k dk. \quad (34)$$

После взятия интеграла по углу с $v_x = v \cos \theta$ имеем:

$$\sigma_s = g_v \frac{q^2}{2\pi} \int_0^\infty v^2 \tau(k) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k dk. \quad (35)$$

Для параболической дисперсии

$$k dk = \frac{m^*}{\hbar^2} dE \quad \text{и} \quad v^2 = \frac{2(E - E_c)}{m^*}.$$

Пусть еще, упрощения ради, характеристическое время рассеяния постоянно: $\tau(E) = \tau_0$. Тогда вместо (35) имеем:

$$\sigma_s = g_v \frac{q^2 \tau_0}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (36)$$

что после взятия интеграла дает

$$\sigma_s = g_v \frac{q^2 \tau_0 kT}{\pi \hbar^2} \mathfrak{F}_0(\eta_F), \quad (37)$$

где интеграл Ферми-Дирака порядка j определяется следующим образом

$$\mathfrak{F}_j(\eta_F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\eta^j}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta,$$

с $\eta_F = (E_F - E_c) / kT$ [13].

Если вспомнить (формула (97) в [13]), что поверхностная плотность электронов

$$n_s = \int_0^\infty D_{2D}(E) f_0(E) dE = g_v \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \mathfrak{F}_0(\eta_F) = N_{2D} \mathfrak{F}_0(\eta_F), \quad (38)$$

то удельная поверхностная проводимость (37) выразится привычным образом:

$$\sigma_s = n_s q \left(\frac{q \tau_0}{m^*} \right) = n_s q \mu. \quad (39)$$

Однако, как общеизвестный результат соотносится с моделью ЛДЛ? Для ответа на этот вопрос нужно вернуться к уравнению (35) и перейти в нем к интегрированию по энергии:

$$\sigma_s = \frac{q^2}{2\pi} \int_0^\infty v^2 \tau(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left(\frac{g_v m^*}{\hbar^2} \right) dE. \quad (40)$$

Поскольку плотность 2D-состояний

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

то вместо (40) имеем:

$$\sigma_s = \frac{q^2}{2} \int_0^\infty (v\tau)vD_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (41)$$

Введем множители $\pi/2$ и $h/4$ и им обратные и переконструируем (41) следующим образом:

$$\sigma_s = \frac{q^2}{2} \frac{4}{h} \int_0^\infty \left(\frac{\pi}{2} v\tau \right) \left[\left(\frac{2}{\pi} v \right) \frac{h}{4} D_{2D}(E) \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (42)$$

В подынтегральном выражении первый сомножитель в круглых скобках, согласно (13) из [14], есть средняя длина свободного обратного рассеяния $\lambda(E)$, сомножитель $2v/\pi$, согласно (30) из [13], есть средняя скорость $\langle v_x^+(E) \rangle$ при энергии E в направлении $+x$, а все выражение в квадратных скобках, согласно (33) из [13], есть ни что иное как число мод проводимости $M_{2D}(E)$. Таким образом, полученное выражение (42) есть хорошо известное в модели ЛДЛ (формула (141) в [13]) выражение для поверхностной проводимости

$$\sigma_s = \frac{2q^2}{h} \int \lambda(E)M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (43)$$

Итак, результатом решения ТУБ в квазиравновесном режиме в приближении ВР, или иначе в диффузионном приближении, для поверхностной проводимости получается привычное для модели ЛДЛ выражение. Показано также [15], что ТУБ в приближении ВР дает точно такие же выражения для коэффициента Зеебека и для электронной теплопроводности, что и транспортная модель ЛДЛ. Преимущество модели ЛДЛ в ее физической прозрачности, а также в том, что она позволяет рассматривать квазибаллистический и баллистический режимы транспорта так же просто, как и диффузионный режим. С другой стороны, без ТУБ не обойтись при изучении анизотропного транспорта. Кроме того, легко учесть магнитное поле в ТУБ, как это будет показано ниже. Не говоря уже о том, что ТУБ позволяет рассматривать транспорт вдали от равновесия [4].

Прежде чем перейти к учету магнитного поля в ТУБ, получим выражение для усредненного времени рассеяния $\langle\langle \tau \rangle\rangle$.

Если при переходе от (35) к (36) сохранить зависимость времени рассеяния от энергии, то

$$\sigma_s = g_v \frac{q^2}{\pi h^2} \int_0^\infty \tau(E)(E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (44)$$

а самый простой путь учесть зависимость времени рассеяния от энергии это выбрать для этой зависимости степенной закон

$$\tau(E) = \tau_0 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^s. \quad (45)$$

Поверхностная проводимость пропорциональна поверхностной плотности электронов

$$n_s = \int_0^\infty D_{2D}(E)f_0(E)dE = \int_0^\infty \left(g_v \frac{m^*}{\pi h^2} \right) f_0(E)dE.$$

Умножая и деля σ_s по (44) на n_s , получаем

$$\sigma_s = q^2 \frac{\int_0^\infty \left(\frac{g_v}{\pi h^2} \right) \tau(E)(E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{m^* \int_0^\infty \left(\frac{g_v}{\pi h^2} \right) f_0(E)dE} n_s, \quad (46)$$

что позволяет записать поверхностную проводимость в виде

$$\sigma_s = n_s q \frac{q \langle\langle \tau \rangle\rangle}{m^*}, \quad (47)$$

где должным образом усредненное время рассеяния

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle \equiv \frac{\int_0^\infty \tau(E)(E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_0^\infty f_0(E)dE}. \quad (48)$$

В предположении степенного закона рассеяния (45)

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \frac{\int_0^\infty \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^s (E - E_c) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int_0^\infty f_0(E)dE}. \quad (49)$$

Интегрирование знаменателя дает $kT\mathfrak{Z}_0(\eta_F)$, а числителя – $kT\Gamma(s+2)\mathfrak{Z}_s(\eta_F)$, так что окончательно

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(s+2)\mathfrak{Z}_s(\eta_F)}{\mathfrak{Z}_0(\eta_F)}. \quad (50)$$

Точно так же выражения для $\langle\langle \tau \rangle\rangle$ можно получить для 1D и 3D проводников. Для невырожденных полупроводников интегралы Ферми-Дирака обращаются в экспоненты, так что для таких проводников

$$\langle\langle \tau \rangle\rangle = \tau_0 \Gamma(s+2). \quad (51)$$

При рассеянии на акустических фононах в 2D проводнике $s=0$, а на заряженных примесях $s \approx 1$. Таким образом, для 2D проводников с такими режимами рассеяния $\langle\langle \tau \rangle\rangle$ превышает τ_0 в 1–2 раза.

5. Учет магнитного поля в ТУБ

Под влиянием магнитного поля транспортные коэффициенты изменяются. Измерение эффекта Холла позволяет полнее охарактеризовать свойства материала проводника [16]. Решение ТУБ с учетом магнитного поля в общем случае вполне достижимо, хотя и подчас требует значительных вычислительных ресурсов. Мы же рассмотрим частный случай измерения проводимости в 2D проводнике, ориентированном в плоскости xu с магнит-

ним полем \vec{B} , направленным перпендикулярно вдоль оси z .

Начнем с приближения ВР для системы в состоянии динамического равновесия ($\partial f/\partial t = 0$) и, простоты ради, предположим пространственную однородность проводника ($\nabla_r f = 0$). Тогда ТУБ (16) с учетом магнитного поля будет:

$$-q\vec{E} \cdot \nabla_p f - q[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \nabla_p f = -\frac{\delta f}{\tau}. \quad (52)$$

Сразу хочется допустить, что

$$\nabla_p f \approx \nabla_p f_0, \quad (53)$$

как это предполагалось ранее в (17), но теперь это невозможно. Приближение (53) вполне пригодно, как мы видели выше, для первого слагаемого с электрическим полем в левой части (52), но не приемлемо для второго слагаемого с магнитным полем. Причина кроется в том, что

$$\nabla_p f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_p E = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v}, \quad (54)$$

и будучи подставленным во второе слагаемое с магнитным полем, получаем $[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \vec{v} = 0$. Чтобы получить решение ТУБ с учетом магнитного поля, уравнение (52) нужно переписать в виде

$$-q\vec{E} \cdot \nabla_p f_0 - q[\vec{v} \times \vec{B}] \cdot \nabla_p (\delta f) = -\frac{\delta f}{\tau}, \quad (55)$$

решить которое, правда, труднее, поскольку δf входит в обе части уравнения. Решить его можно параметрически. Пусть решение имеет вид (23), но обобщенную силу \vec{F}_g в нем заменим на неизвестный вектор \vec{G} , а именно:

$$\delta f = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\vec{v} \cdot \vec{G}), \quad (56)$$

причем искомый вектор \vec{G} не зависит от импульса \vec{p} . После подстановки этого пробного решения в (55) нужно вычислять $\nabla_p (\delta f)$. Учитывая (54) и рассматривая параболическую зонную структуру ($\nabla_p \vec{v} = 1/m^*$), находим, что

$$\nabla_p (\delta f) = \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{\vec{G}}{m^*}. \quad (57)$$

Остается подставить (54), (56) и (57) в (55) и получим:

$$q\vec{E} \cdot \vec{v} - \frac{q\tau}{m^*} (\vec{v} \times \vec{B} \cdot \vec{G}) + \vec{v} \cdot \vec{G} = 0. \quad (58)$$

Пользуясь свойством тройного векторного произведения $(\vec{v} \times \vec{B} \cdot \vec{G}) = (\vec{v} \cdot \vec{B} \times \vec{G})$, переписываем (58) в виде

$$\vec{v} \cdot \left(-q\vec{E} + \frac{q\tau}{m^*} [\vec{B} \times \vec{G}] - \vec{G} \right) = 0. \quad (59)$$

Поскольку (59) должно удовлетворяться для любого \vec{v} , то выражение в круглых скобках должно быть равно нулю, а именно:

$$\vec{G} = -q\vec{E} + \frac{q\tau}{m^*} [\vec{B} \times \vec{G}]. \quad (60)$$

Из справочника находим, что для векторного уравнения $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b} \times \vec{c}$ решением является

$$\vec{c} = \frac{\vec{a} + [\vec{b} \times \vec{a}] + (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{b}}{1 + b^2}. \quad (61)$$

Тогда решением уравнения (60) будет

$$\vec{G} = \frac{-q\vec{E} - (q^2\tau/m^*)[\vec{B} \times \vec{E}] - q(q\tau/m^*)^2(\vec{E} \cdot \vec{B})\vec{B}}{1 + (\omega_c\tau)^2}, \quad (62)$$

где циклотронная частота

$$\omega_c = \frac{qB}{m^*}, \quad (63)$$

а плоскость круговой орбиты электрона перпендикулярна вектору магнитного поля.

Первое слагаемое в числителе дает вклад в проводимость, второе слагаемое ответственно за эффект Холла, третье слагаемое как и знаменатель пропорциональны B^2 и определяют магнитосопротивление.

Рассмотрим стандартную ситуацию при измерении эффекта Холла, когда $\vec{B} \perp \vec{E}$. В этой конфигурации полей третье слагаемое зануляется. Будем предполагать также, что магнитное поле слабое, чему соответствует

$$\omega_c\tau \ll 1. \quad (64)$$

В слабых магнитных полях электрон испытывает много столкновений прежде чем замкнет свою круговую орбиту. Для слабых магнитных полей имеем

$$\vec{G} = -q\vec{E} - (q^2\tau/m^*)[\vec{B} \times \vec{E}]. \quad (65)$$

Вектор $\vec{G} \perp \vec{B}, \vec{E}$, лежит в плоскости xy с проекциями на оси

$$\begin{aligned} G_x &= -qE_x + \left(\frac{q^2\tau}{m^*} \right) E_y B_z, \\ G_y &= -qE_y - \left(\frac{q^2\tau}{m^*} \right) B_z E_x. \end{aligned} \quad (66)$$

Итак, решение ТУБ при наличии магнитного поля в приближении ВР получено. Решением является уравнение (56) с вектором \vec{G} по (62) или же уравнение (65) при $\vec{G} \perp \vec{B}, \vec{E}$. В отсутствие магнитного поля решение дается уравнением (23). Предполагалось, что градиенты плотности электронов и температуры отсутствуют. Если нужно учесть изменение

концентрации электронов по длине проводника или перепад температуры, следует $-q\vec{E}$ заменить обобщенной силой \vec{F}_g (23).

Теперь рассмотрим как будут меняться транспортные коэффициенты в присутствии магнитного поля. Для этого полученные решения нужно подставить в (25) и (27) и посмотреть как изменится зарядовый ток и термоток. Проще всего рассмотреть эту ситуацию на примере проводимости.

Заменим обобщенную силу в уравнении (28) на вектор \vec{G} :

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{G}). \quad (67)$$

Проекция вектора плотности тока получаются следующими:

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_x (v_x G_x + v_y G_y), \quad (68)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_y (v_x G_x + v_y G_y).$$

Слагаемые $v_x v_y = v^2 \cos\theta \sin\theta$ после интегрирования от 0 до 2π дадут ноль, так что вместо (68) запишем

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_x^2 G_x, \quad (69)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_k \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) v_y^2 G_y.$$

В состоянии равновесия $v_x^2 + v_y^2 = v^2$, а после усреднения по углам $v_x^2 = v_y^2 = v^2/2$.

Для параболической дисперсии $m^* v^2/2 = E - E_c$, так что v_x^2 и v_y^2 в $\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{если } i, j, k \text{ все различны и переставляются в циклическом порядке } x, y, z, \\ -1, & \text{если } i, j, k \text{ все различны и переставляются в ациклическом порядке } x, z, y, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$ (69) можно заменить на $(E - E_c)/m^*$:

$$J_x = \frac{(-q)}{A} \sum_k \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G_x, \quad (70)$$

$$J_y = \frac{(-q)}{A} \sum_k \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G_y.$$

Используя выражения для проекций вектора \vec{G} (66), имеем:

$$J_x = \frac{1}{A} \sum_k \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [q^2 E_x - (q^3 \tau / m^*) E_y B_z], \quad (71)$$

$$J_y = \frac{1}{A} \sum_k \frac{(E - E_c) \tau(E)}{m^*} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [q^2 E_y + (q^3 \tau / m^*) B_z E_x].$$

Окончательные выражения для компонент плотности тока получаем делением правых частей (71) на

$$n_s = \frac{1}{A} \sum_k f_0(E) \quad (72)$$

с одновременным умножением их на n_s , так что в конечном итоге базовые токовые уравнения таковы:

$$J_x = \sigma_s E_x - \sigma_s \mu_H E_y B_z, \quad (73)$$

$$J_y = \sigma_s E_y + \sigma_s \mu_H B_z E_x,$$

или в матричной форме

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_s & -\sigma_s \mu_H B_z \\ +\sigma_s \mu_H B_z & \sigma_s \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (74)$$

и в векторном обозначении

$$\vec{J} = \sigma_s \vec{E} - \sigma_s \mu_H [\vec{E} \times \vec{B}]. \quad (75)$$

Позже нам понадобится запись уравнений (73) в индексных обозначениях:

$$J_i = \sum_j \sigma_{ij} (B_z) E_j, \quad (76)$$

где индексы i и j пробегает все координатные оси x, y, z или $1, 2, 3$. Тензор проводимости σ_{ij} представим матрицей 2×2 (74). Запись (76) часто пишут без значка суммирования

$$J_i = \sigma_{ij} (B_z) E_j, \quad (77)$$

имея в виду, что суммирование ведется по повторяющемуся индексу.

Уравнение (75) записано в векторной форме. В индексных же обозначениях

$$J_i = \sigma_s E_i - \sigma_s \mu_H \epsilon_{ijk} B_k E_j, \quad (78)$$

где ϵ_{ijk} есть символ Леви-Чивита, иначе перестановочный единичный тензор

В уравнениях (73)

$$\sigma_s = n_s q \mu \quad (79)$$

и

$$\mu = \frac{q \langle \langle \tau \rangle \rangle}{m^*} \quad (80)$$

с

$$\langle \langle \tau \rangle \rangle \equiv \frac{\sum_k (E - E_c) \tau(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)}{\sum_k f_0(E)}, \quad (81)$$

что то же самое, что и уравнение (48).

Холловская подвижность в (73) определяется в виде

$$\mu_H = \mu r_H \quad (82)$$

через холловский фактор, играющий важную роль в холловских измерениях,

$$r_H \equiv \frac{\langle\langle \tau^2 \rangle\rangle}{\langle\langle \tau \rangle\rangle^2} \quad (83)$$

с

$$\langle\langle \tau^2 \rangle\rangle \equiv \frac{\sum_k (E - E_c) \tau^2(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)}{\sum_k f_0(E)}. \quad (84)$$

Уравнения (73) и есть искомые уравнения для тока в плоском образце в присутствии слабого магнитного поля, направленного перпендикулярно к поверхности образца. Из этих уравнений следует, что в отсутствии магнитного поля электрическое поле в направлении x порождает ток в этом же направлении, а в присутствии магнитного поля, перпендикулярного поверхности образца, ток порождается также и в направлении y . В присутствии магнитного поля электрическое же поле в направлении y порождает ток и в направлении x и в направлении y , проводимость приобретает тензорный характер.

Аналогичным образом можно получить выражения для коэффициента Зеебека и для электронной теплопроводности, и эти оба термические коэффициенты оказываются также имеют тензорную природу [17].

Сделаем одно замечание относительно холловского фактора применительно к 2D проводникам со степенным законом рассеяния.

Для холловского фактора можно получить простое выражение, если рассеяние описывается степенным законом (45). Нам нужно вычислить (84). Поскольку

$$\tau^2(E) = \tau_0^2 \left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^{2s}, \quad (85)$$

то при вычислении (84) результат окажется таким же, как и (51) только лишь с заменой показателя степени s на $2s$, а именно:

$$\langle\langle \tau^2 \rangle\rangle = \tau_0^2 \Gamma(2s + 2), \quad (86)$$

предполагая, что речь идет о невырожденных полупроводниках.

Теперь холловский фактор (83)

$$r_H \equiv \frac{\langle\langle \tau^2 \rangle\rangle}{\langle\langle \tau \rangle\rangle^2} = \frac{\Gamma(2s + 2)}{[\Gamma(s + 2)]^2}. \quad (87)$$

Поскольку при рассеянии в 2D проводнике на акустических фононах и на заряженных примесях показатель степени s в законе рассеяния (45) изменяется в пределах от 0 до 1, то холловский фактор изменяется от 1 до 1.5. При выполнении холловских измерений механизм рассеяния в образце как правило не известен и холловский фактор обычно полагают $r_H = 1$. Нужно, однако, помнить, что такой подход вносит неопределенность в результаты измерений.

В заключение еще раз отметим, что в отсутствие магнитного поля ТУБ и транспортная модель

ЛДЛ приводят к одинаковым результатам для проводников, работающих в квазиравновесном диффузионном режиме. Модель ЛДЛ привлекательна тем, что она физически прозрачна, а также тем, что транспорт в баллистическом и квазibalлистическом режимах описывается так же просто как и транспорт в диффузионном режиме. Кроме того, транспортная модель ЛДЛ не предполагает наличия периодической кристаллической структуры материала проводника, и она успешно применяется к аморфным, поликристаллическим и нанокompозитным материалам. Преимуществом ТУБ является возможность описания анизотропного транспорта и транспорта в магнитном поле. Кроме того ТУБ позволяет описывать транспорт вдали от квазиравновесных условий.

В основу настоящего обзора положены лекции Марка Лундстрема «Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications» [5] и Суприе Датты «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» [18], прочитанных в 2011–2012 годах в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u], а также наша статья [1].

6. Благодарности

Благодарю Н. Е.Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

Литература

1. Кругляк, Ю. О. Уроки нанoeлектроники: Роль электростатики и контактов в концепції "знизу – вгору" [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стрїха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2014. – № 11. – С. 4–5.
2. Kruglyak, Yu. Landauer–Datta–Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics [Text] / Yu. Kruglyak // Journal of Nanoscience. – 2015. – Vol. 2014. – P. 1–15. doi: 10.1155/2014/725420
3. Больцман, Л. Избранные труды [Текст] / Л. Больцман. – М: Мир, 1984. – 590 с.
4. Lundstrom, M. Fundamentals of Carrier Transport [Text] / M. Lundstrom. – Cambridge UK: Cambridge University Press, 2000. – 415 p. doi: 10.1017/cbo9780511618611
5. Lundstrom, M., Jeong C. Near–Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications [Text] / M. Lundstrom, C. Jeong. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. – 227 p. – Available at: www.nanohub.org/resources/11763
6. Sears, F. W. Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics [Text] / F. W. Sears, G. L. Salinger. – Boston: Addison–Wesley, 1975.
7. Займан, Дж. Принципы теории твердого тела [Текст] / Дж. Займан. – М: Высшая школа, 1974. – 468 с.
8. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела [Текст] / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М: Мир, 1979. – 458 с.
9. Pikulin, D. I. Nernst effect beyond the relaxation–time approximation [Text] / D. I. Pikulin, C.-Y. Hou, C. W. J. Beenakker // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84, Issue 3. doi: 10.1103/physrevb.84.035133
10. Кругляк, Ю. О. Уроки нанoeлектроники: Термoeлектричні явища в концепції "знизу – вгору" [Текст] / Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стрїха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2013. – № 10. – С. 1–6.
11. Lundstrom, M. Electronic Transport in Semiconductors [Electronic resource] / M. Lundstrom. – 2011. – Available at: www.nanohub.org/resources/11872

12. Кругляк, Ю. А. Термоэлектрические явления и устройства в концепции Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 1, № 2 (6). – С. 69–77. doi: 10.15587/2313-8416.2015.35891

13. Кругляк, Ю. О. Обобщенная модель электронного транспорта Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стриха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2015. – № 12. – С. 2–5.

14. Кругляк, Ю. А. Учет рассеяния в транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 3, № 2 (8). – С. 99–107. doi: 10.15587/2313-8416.2015.38847

15. Jeong, C. On Landauer versus Boltzman and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients [Text] / C. Jeong, R. Kim, M. Luisier, S. Datta, M. Lundstrom // Journal of Applied Physics. – 2010. – Vol. 107, Issue 2. – P. 023707. doi: 10.1063/1.3291120

16. Кругляк, Ю. О. Уроки наноелектроніки: Ефект Холла і вимірювання електрохімічних потенціалів у концепції "знизу – вгору" [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стриха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2014. – Т. 11, № 1. – С. 5–27.

17. Wolfe, C. M. Physical Properties of Semiconductors [Text] / C. M. Wolfe, N. Holonyak, G. E. Stillman. – Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. Jersey, 1989.

18. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport [Electronic resource] / Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. – 473 p. – Available at: www.nanohub.org/courses/FoN1

References

1. Kruglyak, Yu. A., Strikha, M. V. (2014). Lessons of nanoelectronics: The role of electrostatics and contacts in “bottom – up” approach, Sensor Electronics Microsys. Tech., 11, 4–5.

2. Kruglyak, Y. (2014). Landauer–Datta–Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics. Journal of Nanoscience, 2014, 1–15. doi: 10.1155/2014/725420

3. Bolcman, L. (1984). Izbrannye trudy. Moscow: Mir, 590.

4. Lundstrom, M. (2000). Fundamentals of Carrier Transport. Cambridge UK: Cambridge University Press, 415. doi: 10.1017/cbo9780511618611

5. Lundstrom, M., Jeong, C. (2013). Near–Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 227. Available at: www.nanohub.org/resources/11763

6. Sears, F. W., Salinger, G. L. (1975). Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. Boston: Addison–Wesley.

7. Ziman, J. M. (1964). Principles of the theory of solids, Cambridge University Press, Cambridge, 468.

8. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. (1979). Solid State Physics. Philadelphia: Saunders College, 458.

9. Pikulin, D. I., Hou, C.-Y., Beenakker, C. W. J. (2011). Nernst effect beyond the relaxation-time approximation. Physical Review B, 84 (3). doi: 10.1103/physrevb.84.035133

10. Kruglyak, Yu. A., Kruglyak, N. E., Strikha, M. V. (2013). Lessons of nanoelectronics: Thermoelectric phenomena in “bottom – up” approach, Sensor Electronics Microsys. Tech., 10, 1–6.

11. Lundstrom, M. (2011). Electronic Transport in Semiconductors. Available at: www.nanohub.org/resources/11872

12. Kruglyak, Yu. A. (2015). Thermoelectric phenomena and devices in Landauer–Datta–Lundstrom Conception. ScienceRise, 1/2 (6), 69–77. doi: 10.15587/2313-8416.2015.35891

13. Kruglyak, Yu. A., Strikha, M. V. (2015). Landauer–Datta–Lundstrom generalized electron transport model for micro– and nanoelectronics. Sensor Electronics Microsys. Tech., 12, 2–5.

14. Kruglyak, Yu. A. (2015). Accounting for scattering in Landauer – Datta – Lundstrom transport model, ScienceRise, 3/2(8), 99–107. doi: 10.15587/2313-8416.2015.38847

15. Jeong, C., Kim, R., Luisier, M., Datta, S., Lundstrom, M. (2010). On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients. Journal of Applied Physics, 107 (2), 023707. doi: 10.1063/1.3291120

16. Kruglyak, Yu. A., Strikha, M. V. (2014). Lessons of nanoelectronics: Hall effect and measurement of electrochemical potentials in “bottom – up” approach. Sensor Electronics Microsys. Tech., 11 (1), 5–27.

17. Wolfe, C. M., Holonyak, N., Stillman, G. E. (1989). Physical Properties of Semiconductors. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. Jersey.

18. Datta Supriyo (2012). Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 473. Available at: www.nanohub.org/courses/FoN1

Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.

Дата надходження рукопису 18.02.2015

Кругляк Юрий Алексеевич, доктор химических наук, профессор, кафедра информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, г. Одесса, Украина, 65016
E-mail: quantumnet@yandex.ua