

УДК 537.32

DOI: 10.15587/2313-8416.2015.45700

НАНОЭЛЕКТРОНИКА «СНИЗУ – ВВЕРХ»: ВОЗНИКНОВЕНИЕ ТОКА, ОБОБЩЕННЫЙ ЗАКОН ОМА, УПРУГИЙ РЕЗИСТОР, МОДЫ ПРОВОДИМОСТИ, ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСТВО

© Ю. А. Кругляк

В рамках концепции «снизу – вверх» современной наноэлектроники рассматриваются общие вопросы электронной проводимости, причины возникновения тока и роль электрохимических потенциалов и фермиевских функций, модель упругого резистора, баллистический и диффузионный транспорт, моды проводимости, проводники n- и p-типа, а также графен и дается новая обобщенная формулировка закона Ома. Далее рассматриваются термоэлектрические явления Зеебека и Пельтье, показатели качества и оптимизация термоэлектриков, баллистический и диффузионный транспорт фононов и его роль в теплопроводности

Ключевые слова: наноэлектроника, упругий резистор, моды проводимости, обобщенный закон Ома, графен, термоэлектрики

General questions of electronic conductivity, current generation with the use of electrochemical potentials and Fermi functions, elastic resistor model, ballistic and diffusion transport, conductivity modes, n- and p-conductors and graphene, formulation of the generalized Ohm's law, thermoelectric phenomena of Seebeck and Peltier, quality indicators and thermoelectric optimization, ballistic and diffusive phonon heat current are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics

Keywords: nanoelectronics, elastic resistor, conductivity modes, Ohm's law, graphene, thermoelectric phenomena

1. Введение

Бурное развитие наноэлектроники в последние 10–15 лет привело не только к созданию и широкому использованию нанотранзисторов и других разнообразных наноразмерных устройств электроники, но и к более глубокому пониманию причин возникновения тока, обмена и диссипации энергии и принципов работы устройств в целом как наноразмерных, так и привычных электронных приборов [1–4].

Исторически все более глубокое понимание физической природы электрической проводимости приходило «сверху – вниз»: от массивных макроскопических проводников до транзисторов молекулярных и даже атомных размеров. Еще лет 15–20 лет тому назад были обычными рассуждения о том, как понимать концепцию об электрическом сопротивлении, если размер проводника приближается к атомным размерам. Несмотря на исключительные достижения в области экспериментальной мезо- и нанофизики, и поныне при обсуждении проводимости доминирует концепция «сверху – вниз» вместо более естественной концепции «снизу – вверх», что делает анализ и обсуждение устройств наноэлектроники подчас нелепо сложными. Мы должны сегодня привести

новые перспективы в университетское и инженерное образование для изучения возможностей и решения конкретных задач современных нанотехнологий. Шестдесят лет назад электроника столкнулась с аналогичной проблемой в связи с изобретением транзистора и эффективно справилась с ситуацией: было обучено целое поколение физиков и инженеров, на плечи которых легко создание современной электронной промышленности.

Сегодня мы стоим перед необходимостью совершить аналогичную революцию в высшем образовании, как и в исследовательской и инженерной работе. Еще с момента становления физики твердого тела вещества описывались с помощью таких феноменологических свойств как подвижность носителей тока или коэффициентов поглощения в оптике, которые использовались как исходные данные при построении и анализе макроскопических моделей различных электронных и оптических устройств. Эта концепция «сверху – вниз» и поныне широко используется даже применительно к наноструктурированным материалам. Мы полагаем, что такой подход не в полной мере адекватен современным возможностям и перспективам, открывающимся в результате интен-

сивного развития нанофизики и нанотехнологий. Необходим интегрированный подход, включающий в себя новое мышление и новые модели, порожденные подчас исключительными и даже революционными результатами в различных направлениях нанонаук, и приложение их к таким неравновесным задачам как наноразмерные транзисторы, нано- и мезоустройства преобразования энергии и нанобиосенсоры. Эта новая концепция «снизу – вверх» применительно к новым электронным устройствам и новым материалам, пожалуй, наиболее успешно демонстрируется в Сети вычислительной нанотехнологии (Network for Computational Nanotechnology) Университета Пердью, США [5].

Согласно закону Ома, сопротивление R и проводимость G проводника длины L с площадью поперечного сечения A даются выражениями

$$\begin{aligned} R &\equiv V/I = \rho L/A, \\ 1/R &\equiv G = \sigma A/L, \end{aligned} \quad (1)$$

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

При обычном диффузионном движении электронов по проводнику среднее значение длины свободного пробега в полупроводниках меньше $1 \mu\text{м}$ и изменяется в широких пределах в ту и в другую стороны в зависимости от температуры и природы материала, из которого сделан проводник. Длина канала проводимости в современных полевых транзисторах $\sim 30 \text{ нм}$, что соответствует нескольким сотням атомов. Вполне уместно задаться вопросом: а если длина проводника меньше диффузионной длины свободного пробега, то движение электрона станет баллистическим? Будет ли сопротивление подчиняться закону Ома в привычной записи? А если уменьшить длину канала проводимости до нескольких атомов? Имеет ли смысл в этом случае говорить о сопротивлении как таковом? Все эти вопросы были предметом жарких дискуссий еще лет 15–20 назад. Сегодня ответы на эти вопросы даны и надежно подкреплены многочисленными экспериментальными данными. Измерено даже сопротивление молекулы водорода [6].

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что впечатляющие успехи экспериментальной нанoeлектроники практически не повлияли на то как мы думаем, обучаем и объясняем понятия сопротивления, проводимости и работу электронных устройств в целом. И поныне, по-видимому, по историческим причинам доминирует привычная концепция «сверху – вниз», от массивных проводников до молекул. Такой подход был вполне приемлем до тех пор, пока не было достаточного массива экспериментальных данных по измерению проводимости наноразмерных проводников. В последнее десятилетие ситуация изменилась. Накоплены обширные экспериментальные

данные и для больших и для предельно малых проводников. Началась разработка концепции проводимости «снизу – вверх» [7–11], которая не только оказалась комплементарной концепции «сверху – вниз», но и привела к переосмысливанию принципов работы обычных электронных устройств. Вспомним, что в квантовой механике с самого начала доминировала концепция «снизу – вверх»: от атома водорода в направлении твердого тела.

Есть еще один круг задач в нанoeлектронике, для решения которых концепция «снизу – вверх» особенно привлекательна. Это – транспортные задачи. В обычной электронике транспорт частиц описывается законами механики – классической или квантовой. Транспорт по массивному проводнику сопровождается выделением тепла, что описывается законами термодинамики – обычной или статистической. Процессы в механике обратимы, а в термодинамике – необратимы. Разделить эти два процесса – движения электронов и выделения тепла – строго говоря, невозможно. Совсем другая ситуация в нанoeлектронике. Здесь процессы движения электронов и выделения тепла пространственно разделены: электроны движутся упруго, баллистически («упругий резистор»), а выделение тепла происходит лишь на границах контакта проводника с электродами. Концепция упругого резистора была предложена Ландауэром в 1957 году [12–14] задолго до ее экспериментального подтверждения в нанотранзисторах. Концепция «упругого резистора», строго говоря, является идеализацией, но она надежно подтверждена многочисленными экспериментальными данными для ультрамалых нанотранзисторов. Развитие концепции «снизу – вверх» [10] привело к созданию единой картины транспортных явлений в электронных устройствах как наноразмерных, так и макроразмерных.

В настоящем обзоре в рамках концепции «снизу – вверх» рассматриваются причины возникновения тока и роль электрохимических потенциалов и фермиевских функций в этом процессе. Далее рассматривается модель упругого резистора и дается новая обобщенная формулировка закона Ома. В рамках концепции «снизу – вверх» будут также рассмотрены общие вопросы электронной проводимости, в том числе на примере графена. Далее рассматриваются термоэлектрические явления Зеебека и Пельтье, показатели качества и оптимизация термоэлектриков, баллистический и диффузионный транспорт фононов и его роль в теплопроводности.

2. Причина возникновения электрического тока

На вопрос о причине возникновения тока при приложении разности потенциалов к концам проводника обычно ссылаются на связь плотности тока \vec{j} с внешним приложенным электрическим полем \vec{E} :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (2)$$

другими словами, причиной возникновения тока обычно считают внешнее электрическое поле. Ответ, в лучшем случае, не полный. Еще до подключения проводника к клеммам источника напряжения на

электроны проводника действуют сильные электрические поля, создаваемые ядрами атомов, а ток тем не менее не возникает. Почему сильные внутренние электрические поля не вызывают движение электронов, а намного более слабое внешнее электрическое поле электрической батареи вызывает движение электронов? Обычно говорят, что внутренние микроскопические поля не могут вызвать движение электронов, необходимо приложить внешнее макроскопическое поле. Трудно признать такое объяснение удовлетворительным. В современных экспериментах по измерению проводимости отдельных молекул невозможно с определенностью вычлнить отдельно внутренние и внешние электрические поля. Приходится считаться с этим уроком, преподнесенным нам современной экспериментальной наноэлектроникой, и заново задаться вопросом почему же движутся электроны при подключении батареи к концам проводника.

Для ответа на вопрос о причине возникновения тока нам с самого начала потребуются два понятия – плотности состояний на единицу энергии $D(E)$, занятых электронами и свободных и электрохимического потенциала μ_0 (рис. 1).

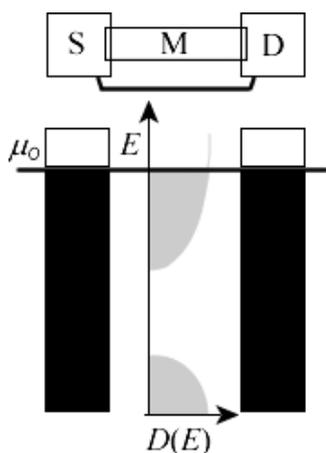


Рис. 1. Первым шагом в объяснении работы любого электронного устройства должно быть задание плотности состояний $D(E)$ как функции энергии E внутри проводника M и определение равновесного значения электрохимического потенциала μ_0 , отделяющего заполненные электронами состояния от пустых состояний

Простоты ради, что никак не скажется на окончательных выводах, будем пользоваться точечной моделью проводника (канала переноса электронов), которая предполагает неизменность плотности состояний $D(E)$ при движении вдоль проводника. Если система, включающая исток (S/Source), проводник M и сток (D/Drain), находится в равновесии (закорочена), то электрохимический потенциал μ_0 везде одинаков и все состояния с $E < \mu_0$ заполнены электронами, а состояния с $E > \mu_0$ пустые (рис. 1).

При включении в цепь источника напряжения (рис. 2) разность потенциалов V понижает все энергии на положительном контакте D на величину qV , где

q – заряд электрона, в результате чего на контактах создается разность электрохимических потенциалов

$$\mu_1 - \mu_2 = qV. \quad (3)$$

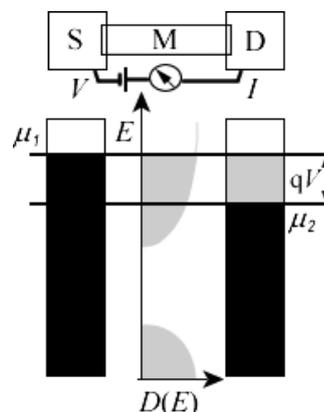


Рис. 2. При подаче напряжения V на контакты проводника потенциал анода D понижается на величину qV , создавая разность электрохимических потенциалов на концах проводника $\mu_1 - \mu_2 = qV$

Каждый контакт стремится привести токовый канал в равновесие с собой путем заполнения электронами всех состояний канала с энергией, меньшей электрохимического потенциала μ_1 , и опорожнения состояний канала с энергией, большей потенциала μ_2 . Рассмотрим токовый канал с состояниями, энергия которых меньше μ_1 , но больше μ_2 . Контакт 1 стремится заполнить эти состояния, поскольку их энергия меньше μ_1 , а контакт 2 стремится опорожнить эти состояния, поскольку их энергия больше μ_2 , что и приводит к непрерывному движению электронов от контакта 1 к контакту 2.

Рассмотрим теперь состояния канала с энергией, большей μ_1 и μ_2 . Оба контакта стремятся опорожнить эти состояния, но они и так пустые и не дают вклада в электрический ток. Аналогична ситуация с состояниями, энергия которых одновременно меньше обоих потенциалов μ_1 и μ_2 . Каждый из контактов стремится заполнить их электронами, но они уже заполнены, и вклада в ток дать не могут, а точнее не могут в пределах нескольких kT от ширины окна проводимости, в чем мы убедимся позже.

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

2. 1. Роль фермиевских функций

Итак, утверждалось, что в равновесии все состояния с энергией $E < \mu_0$ заполнены электронами, а состояния с энергией $E > \mu_0$ пустые. Это справедли-

во только в пределе абсолютного нуля температуры. Более точно, в чем мы убедимся ниже, переход от полностью заполненных состояний к пустым совершается в зазоре $\sim \pm 2kT$, охватывающем значение $E = \mu_0$, где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Математически этот переход описывается функцией Ферми

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}. \quad (4)$$

График функции Ферми показан на рис. 3 слева, возможно, в несколько непривычном виде с энергией в безразмерных единицах по вертикальной оси, что позволит нам позже при объяснении причины возникновения тока совместить функцию Ферми с графиком плотности состояний $D(E)$.

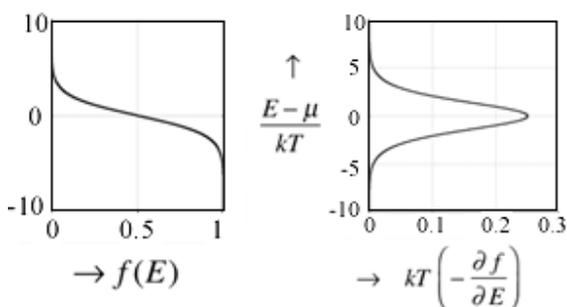


Рис. 3. Графики функции Ферми и нормированной функции теплового уширения

Функция Ферми играет ключевую роль в статистической механике, однако же для наших целей достаточно понимать, что состояния с низкой энергией всегда заняты ($f = 1$), тогда как состояния с высокой энергией всегда пусты ($f = 0$), а переход от $f = 1$ к $f = 0$ происходит в узком интервале энергии $\sim \pm 2kT$, охватывающем значение $E = \mu_0$.

Действительно, на рис. 3 также показана производная от функции Ферми, помноженная на kT с тем, чтобы сделать ее безразмерной:

$$F_T(E, \mu) = kT \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right). \quad (5)$$

Подставляя выражение для функции (4), видим, что

$$F_T(E, \mu) = \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}, \quad (6)$$

где $x \equiv (E - \mu)/kT$. Из (6) сразу видно, что

$$F_T(E, \mu) = F_T(E - \mu) = F_T(\mu - E), \quad (7)$$

а из (6) и (4) следует, что

$$F_T = f(1 - f). \quad (8)$$

Интегрирование функции (8) во всем интервале изменения энергии дает площадь, равную kT :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE F_T(E, \mu) = kT \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = kT [-f]_{-\infty}^{+\infty} = kT(1 - 0) = kT, \quad (9)$$

так что функцию F_T можно приблизительно представить себе в виде прямоугольного «импульса», центрированного относительно значения $E = \mu$ с высотой, равной $1/4$ и шириной $\sim 4kT$.

2. 2. Выход из равновесия

Когда рассматриваемая система (рис. 1) находится в равновесии, электроны распределяются по имеющимся состояниям в соответствии с функцией Ферми. При выходе из равновесия нет простых правил для вычисления функции распределения электронов. Все зависит от конкретной задачи, решать которую нужно методами неравновесной статистической механики.

В нашем специальном случае выхода из равновесия (рис. 2) можно надежно утверждать, что оба контакта S и D настолько велики по сравнению с каналом переноса электронов, что они не могут выйти из равновесия. Каждый из контактов локально находится в равновесии со своим собственным электрохимическим потенциалом, порождая две фермиевские функции (рис. 4)

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_1)/kT} + 1} \quad (10)$$

и

$$f_2(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_2)/kT} + 1}. \quad (11)$$

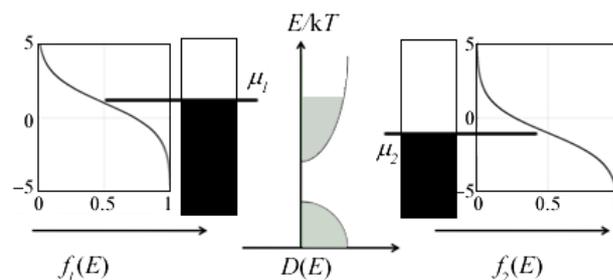


Рис. 4. При выходе из равновесия электроны в контактах занимают доступные им состояния в соответствии с фермиевскими распределениями и значениями электрохимических потенциалов

Подводя итоги, утверждается, что причиной появления тока является различие в подготовке равновесных состояний контактов, отображаемое их соответствующими фермиевскими функциями $f_1(E)$ и $f_2(E)$. Качественно это справедливо для любых проводников – и наноразмерных и макроразмерных. Однако, для наноразмерных проводников ток при любых значениях энергии электронных состояний в проводнике пропорционален разности

$I(E) \sim f_1(E) - f_2(E)$ фермиевских распределений в обоих контактах. Эта разность зануляется, если энергия E больше μ_1 и μ_2 , поскольку в этом случае обе функции Ферми равны нулю. Эта разность также зануляется, если энергия E меньше μ_1 и μ_2 , поскольку в этом случае обе фермиевские функции равны единице. Ток возникает лишь в окне $\mu_1 - \mu_2$, если в этом окне есть хотя бы одно электронное состояние проводника.

2.3. Линейный отклик

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

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

$$F(E) = \frac{f_1(E) - f_2(E)}{qV/kT}, \tag{12}$$

где

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \mu_0 + (qV/2) \\ \mu_2 &= \mu_0 - (qV/2) \end{aligned} \tag{13}$$

Функция разности $F(E)$ сужается по мере того, как напряжение V , помноженное на заряд электрона, становится все меньше величины kT (рис. 5).

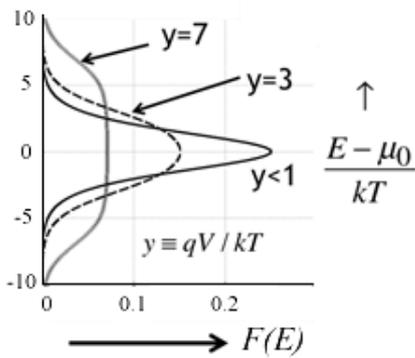


Рис. 5. График функции разности $F(E)$ в зависимости от значения $(E - \mu_0)/kT$ для различных значений $qV/kT \equiv y$

Отметим также, что по мере того, как kT начинает превосходить энергию qV , функция $F(E)$ все больше приближается к функции теплового уширения (5):

$$F(E) \rightarrow F_T(E)|_{qV/kT \rightarrow 0},$$

так что из (12) следует, что

$$f_1(E) - f_2(E) = \frac{qV}{kT} F_T(E, \mu_0) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV, \tag{14}$$

если приложенное напряжение, помноженное на заряд электрона $\mu_1 - \mu_2 = qV$, становится намного меньшим kT .

Нам потребуется также следующее выражение

$$f(E) - f_0(E) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} (\mu - \mu_0), \tag{15}$$

которое, как и (14), можно получить следующим образом.

Для функции Ферми

$$f(x) \equiv \frac{1}{e^x + 1}, \quad x \equiv \frac{E - \mu}{kT} \tag{16}$$

имеем

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

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = \frac{df}{dx} \frac{\partial x}{\partial \mu} = -\frac{df}{dx} \frac{1}{kT}, \tag{17}$$

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

откуда

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = -\frac{\partial f}{\partial E}, \tag{18}$$

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

Уравнение (15) получается из разложения функции Ферми вблизи точки равновесия в ряд Тейлора

$$f(E, \mu) \approx f(E, \mu_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} (\mu - \mu_0). \tag{19}$$

Из уравнения (18) следует

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{\mu=\mu_0} = \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{\mu=\mu_0}. \tag{20}$$

Пусть $f(E)$ соответствует $f(E, \mu)$, а $f_0(E)$ соответствует $f(E, \mu_0)$, тогда

$$f(E) \approx f_0(E) + (\mu - \mu_0) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right), \tag{21}$$

что после перегруппировки дает искомое ур-е (15), которое справедливо при $\mu - \mu_0 \ll kT$.

Подведем предварительные итоги. Проводимость веществ может меняться более чем в 10^{20} раз, переходя, например, от серебра до стекла – веществ, весьма удаленных друг от друга в шкале проводимости. Стандартное объяснение различия в их проводимости якобы состоит в том, что плотность «свободных электронов» в этих веществах существенно отличается. Подобное объяснение немедленно требует

пояснения, какие электроны свободные, а какие нет. Это различие становится все более абсурдным по мере перехода к наноразмерным проводникам.

Концепция «снизу – вверх» предлагает следующий простой ответ. Проводимость зависит от плотности состояний в окне шириной нескольких kT , охватывающих равновесный электрохимический потенциал μ_0 , определяемый функцией F_T (ф-ла (5), рис. 3), которая отлична от нуля в небольшом промежутке шириной несколько kT вокруг равновесного значения электрохимического потенциала.

Дело не в суммарном числе электронов, которое одно порядка как в серебре, так и в стекле. Ключевым моментом является наличие электронных состояний в области значений электрохимического потенциала μ_0 , что в корне отличает одно вещество от другого.

Настоящий ответ нельзя назвать новым, и он хорошо известен специалистам в области нанoeлектроники. Тем не менее обсуждение проводимости и поныне обычно начинается с теории Друде [15], которая сыграла важнейшую историческую роль в понимании природы тока. К сожалению, подход Друде породил два недоразумения, которые следовало бы преодолеть и прежде всего в преподавании физики, а именно:

- (1) ток порождается внешним приложенным электрическим полем и
- (2) ток зависит от числа «свободных» электронов.

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

Уроки, преподнесенные нам экспериментальной нанoeлектроникой, показывают, что ток порождается «подготовкой» двух контактов $f_1(E) - f_2(E)$, и эта разница не нулевая только в окне вокруг равновесного значения электрохимического потенциала μ_0 . Проводимость канала высокая или низкая зависит только от наличия электронных состояний в этом окне. К этому выводу обычно приходят на основе транспортного уравнения Больцмана [16] или формализма Кубо [17], тогда как используемая нами концепция «снизу – вверх» сразу дает физически корректную картину возникновения тока.

3. Модель упругого резистора

Итак, ток порождается «подготовкой» двух контактов 1 и 2 с фермиевскими функциями $f_1(E)$ и $f_2(E)$. Отрицательному контакту 1 соответствует большее значение электрохимического потенциала, а положительному – меньшее значение. Отрицательный контакт стремится передать электроны в канал проводимости, а положительный контакт стремится извлечь электроны из канала проводимости. Это справедливо для любых проводников – и наноразмерных и макроразмерных.

Модель упругого резистора служит полезной идеализацией, обеспечивающей физически коррект-

ное объяснение работы наноразмерных проводников и открывающей возможности для новой интерпретации работы макроразмерных устройств. Концепция «упругого резистора» была предложена Рольфом Ландауэром в 1957 году [12–14] задолго до ее экспериментального подтверждения в нанотранзисторах [1]. Концепция «упругого резистора», строго говоря, является идеализацией, но она надежно подтверждена многочисленными экспериментальными данными для ультрамалых нанотранзисторов [3]. Развитие концепции упругого резистора [6–8, 12] привело к созданию единой картины транспортных явлений в электронных устройствах любой размерности и любого масштаба.

В модели упругого резистора электроны проскакивают канал проводимости от истока S до стока D упруго, без потери или приобретения энергии (рис. 6).

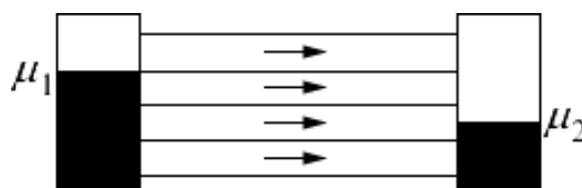


Рис. 6. В упругом резисторе электроны движутся баллистически по каналам с постоянной энергией

В упругом резисторе ток в промежутке с энергией от E до $E + dE$ отделен от каналов с другими значениями энергии, что позволяет нам записать для тока в дифференциальной форме

$$dI = dE G(E)(f_1(E) - f_2(E)), \quad (22)$$

а после интегрирования получить выражение для полного тока. Используя далее выражение (14), получим выражение для низковольтной проводимости (линейный отклик)

$$G \equiv \frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E), \quad (23)$$

в котором отрицательную производную $(-\partial f_0/\partial E)$ можно представить себе в виде прямоугольного импульса, площадь которого равна единице при ширине $\sim \pm 2kT$ (рис. 3). Согласно (23), функция проводимости $G(E)$ для упругого резистора, будучи усредненной по интервалу $\sim \pm 2kT$, включающему значение электрохимического потенциала μ_0 , дает экспериментально измеряемую проводимость G . При низких температурах можно просто использовать значение $G(E)$ при $E = \mu_0$.

Такой энергетический подход к проводимости в модели упругого резистора дает существенное упрощение в понимании причин возникновения тока, хотя и звучит парадоксально, поскольку мы традиционно связываем ток I , текущий по проводнику с сопротивлением R , с джоулевым теплом $I^2 R$. Как можно говорить о сопротивлении, если движущиеся по проводнику электроны не теряют энергию?

Ответ на этот вопрос следующий [18, 19]: поскольку электроны не теряют энергию при движении по упругому резистору, потеря энергии происходит на границах проводника с истоком и стоком, на которых и происходит диссипация джоулева тепла. Иначе говоря, упругий резистор, характеризуемый сопротивлением R канала проводимости, диссипирует джоулево тепло $I^2 R$ за пределами канала проводимости. На это указывают различные многочисленные экспериментальные измерения, косвенные и прямые, на наноразмерных проводниках [3, 4], не говоря уже о том, что диссипация тепла, будь она шла бы на одиночной молекуле или на нанопроводнике привела бы к их сгоранию, и общее мнение сейчас таково, что сгорания в реальных экспериментах не происходит, поскольку подавляюще большая часть тепла генерируется на контактах, которые достаточно массивны и тем самым с достаточной легкостью диссипируют тепло.

В понятие упругого резистора не вкладывается обязательного следования электроном по прямолинейной траектории от истока к стоку, допускается и «диффузионное» движение с переменным вектором импульса, но без изменения энергии.

Модель упругого резистора вводится не только в качестве полезного понятия для объяснения работы наноразмерных устройств, но также и потому, что эта модель позволяет объяснить такие транспортные свойства как проводимость в макроразмерных проводниках. Именно эта модель делает концепцию «снизу – вверх» [9, 10] столь эффективной в объяснении транспортных явлений в целом. Еще вернемся к этому утверждению позже, а сейчас получим выражение для проводимости упругого резистора.

3.1. Проводимость упругого резистора

Следуя духу концепции «снизу – вверх», рассмотрим простейший упругий резистор с одним каналом энергии ε , с которой электрон проскакивает от истока к стоку (рис. 7).

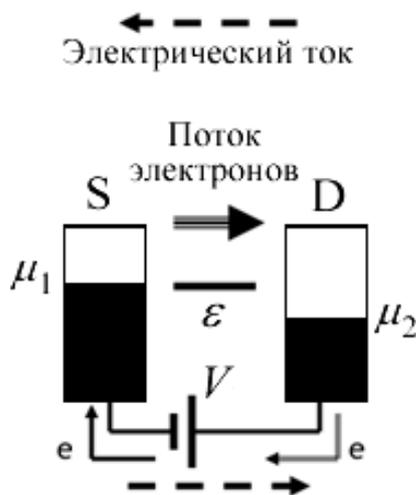


Рис. 7. Одноуровневая модель упругого резистора с энергией в канале ε

Напомним, что в результате приписывания электрону отрицательного заряда, что уже изменить

невозможно, контакт с большим напряжением D имеет меньший электрохимический потенциал, а движение электрона по каналу происходит от большего значения электрохимического потенциала к меньшему, так что направление тока противоположно реальному движению электронов от истока S к стоку D. В этой и следующих публикациях всегда имеется в виду, что речь идет о токе реальных электронов, а не о токе в привычном понимании.

Результирующий одноканальный ток будет

$$I = \frac{q}{t} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)), \tag{24}$$

где t есть время, затрачиваемое электроном на прощолк от истока к стоку. Теперь можно выражение (24) обобщить на произвольный упругий резистор (рис. 6) с произвольной плотностью состояний $D(E)$, имея в виду, что все энергетические каналы в упругом резисторе проводят независимо друг от друга и в параллельном режиме. Выпишем вначале выражение для тока в канале с энергией от E до $E + dE$:

$$dI = dE \frac{D(E)q}{2t} (f_1(E) - f_2(E)), \tag{25}$$

в котором учтено, что в таком канале имеется $D(E)dE$ состояний, из которых только половина дает вклад в ток от истока к стоку. Интегрируя, получаем выражение для тока по упругому резистору

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dEG(E) (f_1(E) - f_2(E)), \tag{26}$$

где

$$G(E) = \frac{q^2 D(E)}{2t(E)}. \tag{27}$$

Если разность $\mu_1 - \mu_2 = qV$ за счет напряжения на контактах V намного меньше, чем kT , мы вправе воспользоваться ур-ем (14) и написать

$$I = V \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E), \tag{28}$$

что и приводит к ур-ю (23). В общем случае

$$G(E) = \frac{q^2 D(E)}{2t(E)}, \tag{29}$$

однако, нужно помнить, что плотность состояний D и время пролета t в общем случае зависят от энергии и должны быть усреднены в пределах $\sim \pm 2kT$, включающих электрохимический потенциал μ_0 . Это выражение представляется правильным и на интуитивном уровне. Оно утверждает, что проводимость определяется двумя факторами, а именно: наличием энергетических состояний (D) и легкостью, с которой электрон преодолевает расстояние от истока к стоку ($1/t$). Это ключевой результат для дальнейшего обсуждения. Сейчас же мы перейдем к более подробному рассмотрению диссипации тепла упругим резистором.

3. 2. Диссипация тепла упругим резистором

Сопротивление R упругого резистора определяется каналом, а соответствующее тепло I^2R выделяется вне канала проводимости. Рассмотрим подробнее эту ситуацию на примере одноуровневой модели упругого резистора с энергией в канале ε (рис. 7). Каждый раз когда электрон из истока баллистически проскакивает канал, он оказывается в состоянии «горячего электрона» на стоке с энергией ε , превышающей электрохимический потенциал стока μ_2 (рис. 8).

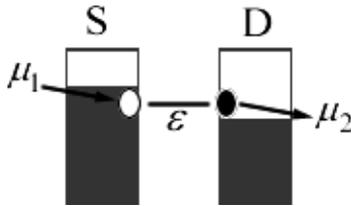


Рис. 8. Мгновенная картина после проскока электрона с истока на сток с энергией в канале ε , превышающей электрохимический потенциал стока μ_2

Диссипационные процессы в стоковом контакте быстро рассеивают избыток энергии $\varepsilon - \mu_2$. Подобным же образом на истоковом контакте «дырка» с энергией ε , меньшей электрохимического потенциала истока μ_1 заполняется электроном, а избыток энергии $\mu_1 - \varepsilon$ диссипирует на истоке (рис. 9).

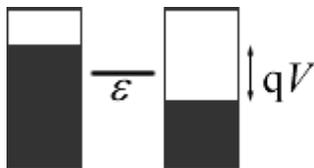


Рис. 9. После баллистического пролета электрона с истока на сток по каналу с энергией ε , на истоке выделяется энергия $\mu_1 - \varepsilon$, а на стоке – энергия $\varepsilon - \mu_2$, и контакты снова находятся в равновесии

Суммарная энергия, диссипирующая на контактах, равна $\mu_1 - \mu_2 = qV$. Если N электронов проскакивают с истока на сток за время t , то на контактах диссипирует мощность

$$P = V \cdot I = qV \cdot N / t. \tag{30}$$

Таким образом, тепло, выделяемое при прохождении тока по упругому резистору, рассеивается на контактах, чему уже достаточно имеется экспериментальных подтверждений на нано- и мезоразмерных проводниках [20]. Привлекательность модели упругого резистора состоит в том, что механические и термодинамические процессы пространственно разделены.

3. 3. Модель упругого резистора и макропроводники

Естественно задаться вопросом о применимости и пользе модели упругого резистора для объяс-

нения и понимания физики явлений протекания тока в обычных макропроводниках, движение электронов в которых очевидно неупругое. В макропроводниках неупругие процессы совмещены с упругими и беспорядочно распределены по всему проводнику (рис. 10).

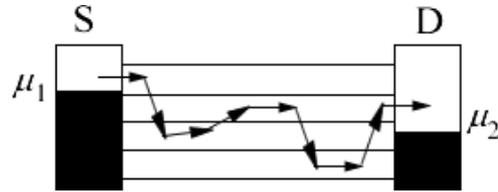


Рис. 10. В макропроводниках неупругие процессы совмещены с упругими

Разобьем такой макропроводник с беспорядочно распределенными неупругими столкновениями на последовательность упругих резисторов (рис. 11) длины l , намного меньшей длины L реального макропроводника и с перепадом напряжения между соседними упругими резисторами, составляющим лишь незначительные доли от разности потенциалов на концах реального проводника $\mu_1 - \mu_2 = qV$.

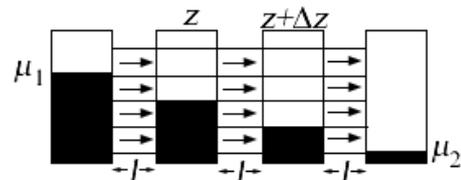


Рис. 11. Гипотетическое разбиение реального макропроводника на последовательность упругих резисторов

В разбиении длины l должны быть меньше длины λ , представляющей собой среднюю длину пробега электрона до очередного неупругого столкновения. Кроме условия $l < \lambda$ при разбиении должно соблюдаться также требование падения напряжения между соседними упругими резисторами $\Delta V < kT/q$.

Разбиение крупного проводника на упругие резисторы требует некоторой осторожности. Как будет показано ниже, стандартное выражение для закона Ома следует заменить на

$$R = \rho(L + \lambda) / A, \tag{31}$$

где A – площадь поперечного сечения проводника и в котором дополнительное сопротивление $\rho\lambda/A$ не зависит от длины проводника и может быть интерпретировано как пограничное сопротивление, возникающее на границе канал/контакт. В выражении (31) λ есть средняя длина свободного пробега, так что такая модификация закона Ома существенна лишь для баллистических проводников ($L \sim \lambda$) и не существенна для крупных проводников ($L \gg \lambda$). Однако, концептуально это дополнительное сопротивление окажется исключительно важным, если пользо-

ваться гипотетической структурой на рис. 11 для объяснения реальной ситуации на рис. 10. Структура на рис. 11 имеет много пограничных поверхностей раздела, отсутствующих в реальной ситуации (рис. 10), так что следует избавиться от этих виртуальных границ. Например, если каждая секция длины l на рис. 11 характеризуется сопротивлением (31), то правильным выражением для проводника на рис. 10, например, длины $3l$ будет

$$R = \rho(3l + \lambda) / A, \tag{32}$$

а не

$$R = \rho(3l + 3\lambda) / A. \tag{33}$$

Таким образом, для получения корректного выражения для проводимости длинного проводника в рамках модели упругого резистора следует аккуратно отделить пограничное сопротивление от сопротивления проводника, зависящего от его длины.

4. Баллистический и диффузионный транспорт

Как мы видели выше, проводимость упругого резистора дается выражением (29).

Покажем, что время пролета t через резистор длины L при диффузионном режиме с длиной свободного пробега λ связано с временем пролета при баллистическом режиме t_B соотношением

$$t = t_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right). \tag{34}$$

Подставим (34) в (29), учтем, что

$$G_B \equiv q^2 D / 2t_B \tag{35}$$

и окончательно для проводимости в диффузионном режиме получим

$$G = \frac{G_B \lambda}{L + \lambda}. \tag{36}$$

Обращая проводимость (36), для закона Ома в обобщенной формулировке получаем

$$R = \frac{\rho}{A} (L + \lambda), \tag{37}$$

где

$$\frac{\rho}{A} = \frac{1}{\sigma A} = \frac{1}{G_B \lambda}. \tag{38}$$

До сих пор речь шла о трехмерном резисторе с площадью поперечного сечения A (рис. 12).

Разнообразные эксперименты выполняются на двумерных проводниках шириной W с одномерным поперечным сечением. Для таких 2d-резисторов соответствующие выражения для закона Ома, очевидно, имеют вид

$$R = \frac{\rho}{W} (L + \lambda), \tag{39}$$

где

$$\frac{\rho}{W} = \frac{1}{\sigma W} = \frac{1}{G_B \lambda}. \tag{40}$$

Наконец, для одномерных проводников имеем

$$R = \rho (L + \lambda), \tag{41}$$

где

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{G_B \lambda}. \tag{42}$$

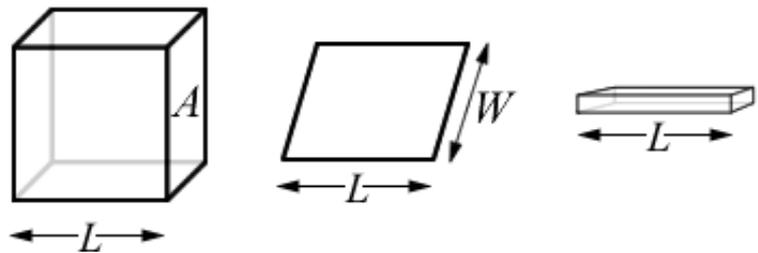


Рис. 12. Проводники размерности 3d, 2d и 1d

Запишем обобщенный закон Ома компактно для проводников всех трех размерностей

$$R = \rho (L + \lambda) \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \tag{43}$$

где

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = G_B \lambda \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \tag{44}$$

Выражение в фигурных скобках соответствует 1d-, 2d- и 3d-проводникам. Заметим, что удельные сопротивление и проводимость имеют разную размерность в зависимости от размерности проводника, а проводимость и длина по-прежнему измеряются в сименсах и метрах.

Стандартный закон Ома утверждает, что сопротивление стремится к нулю при уменьшении длины проводника до нуля. Никто, конечно, не ожидает, что сопротивление обратится в нуль, но обычное общее мнение таково, что сопротивление стремится к некому пограничному сопротивлению, которое можно сделать произвольно малым по мере совершенствования измерительной техники. Что сейчас надежно установлено экспериментально, так это то, что при наиболее тщательно приготовленных контактах наименьшее наблюдаемое сопротивление связано с каналом проводимости и не зависит от контактов [2]. Обобщенный закон Ома отражает это обстоятельство: даже при приближении длины проводника к нулю остается остаточное сопротивление, связанное с эффективной длиной λ . Уместно, однако, спросить себя, какой смысл имеет говорить о ненулевой длине λ при нулевой длине проводника. Ответ состоит в том, что для наноразмерных проводников ни удельное сопротивление ρ , ни длина

λ не имеют смысла порознь, существенно только их произведение.

Рассмотрим как плотность состояний D и время пролета t в выражении для проводимости (29) соотносится с размерами канала в массивных проводниках. Что касается плотности состояний, то это аддитивное свойство. В два раза больший канал имеет в два раза больше электронных состояний, так что плотность состояний для крупных проводников должна быть пропорциональна объему проводника $A \cdot L$.

Что касается времени пролета t , обычно рассматривают два транспортных режима: баллистический с $t \sim L$ и диффузионный с $t \sim L^2$. Баллистическая проводимость пропорциональна площади поперечного сечения A проводника и, согласно (29), не зависит от длины проводника. Такое «неомическое» поведение действительно наблюдается в наноразмерных проводниках [21]. Что же касается проводников с диффузионным транспортным режимом, то они демонстрируют нормальное «омическое» поведение проводимости $G \sim A/L$.

Различие в двух транспортных режимах можно пояснить следующим образом. В баллистическом режиме время пролета от истока к стоку

$$t_B = \frac{L}{\bar{u}}, \quad (45)$$

где

$$\bar{u} = \langle |v_z| \rangle \quad (46)$$

есть среднее значение скорости электронов вдоль оси z , направления движения электронов от истока к стоку.

В случае диффузионного режима время t зависит от длины проводника квадратично

$$t = \frac{L}{\bar{u}} + \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (47)$$

где величина \bar{D} в рамках теории случайных блужданий [22] есть коэффициент диффузии

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle, \quad (48)$$

где τ есть время свободного пробега.

Используя определение (45), перепишем ур-е (47) в виде

$$t = t_B \left(1 + \frac{L\bar{u}}{2\bar{D}} \right), \quad (49)$$

которое вместе с ур-ем (34) для длины λ дает значение

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}}. \quad (50)$$

Для вычисления констант \bar{u} по ур-ю (46) и \bar{D} по ур-ю (48) требуется усреднить скорость электронов в направлении их движения (ось z) по всем угловым переменным в зависимости от размерности проводника $d = \{1, 2, 3\}$. Простые вычисления дадут для

$$1d\text{-проводника: } \langle |v_z| \rangle = v \text{ и } \langle |v_z^2| \rangle = v^2; \quad (51)$$

$$2d\text{-проводника: } \langle |v_z| \rangle = 2v/\pi \text{ и } \langle |v_z^2| \rangle = v^2/2; \quad (52)$$

$$3d\text{-проводника: } \langle |v_z| \rangle = v/2 \text{ и } \langle |v_z^2| \rangle = v^2/3, \quad (53)$$

так что в итоге

$$\bar{u} = \langle |v_z| \rangle = v(E) \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}, \quad (54)$$

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle = v^2 \tau(E) \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3} \right\}, \quad (55)$$

или окончательно для длины среднего свободного пробега λ имеем

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}} = v\tau \left\{ 2, \frac{\pi}{2}, \frac{4}{3} \right\}. \quad (56)$$

Подчеркнем, что длина λ включает численный множитель, зависящий от размерности проводника, сравнительно с ее стандартным значением $\lambda = v\tau$. Можно ли просто использовать это стандартное значение λ . Можно, но тогда в обобщенной формулировке закона Ома (43) нужно не просто заменять L на $L + \lambda$, а на L прибавить λ , помноженное на численный фактор, зависящий от размерности проводника, либо пользоваться определением длины λ по (56). Любопытно, что этот фактор даже для одномерного проводника не равен единице, а равен двум. Величина τ есть среднее время свободного пробега до очередного столкновения. Поскольку рассеяние предполагается изотропным, только половина актов столкновения ведет электрон от истока к стоку. С учетом обратного рассеяния значение длины λ для 1d-проводника оказывается равным $2v\tau$ [23].

Теперь получим уравнение для баллистической проводимости. Из уравнений (35) и (45) имеем

$$G_B \equiv \frac{q^2 D \bar{u}}{2L}, \quad (57)$$

а после подстановки ур-я (54) получим

$$G_B \equiv \frac{q^2 D v}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}. \quad (58)$$

Окончательно, подставляя в (44) уравнения (56) и (58) и учитывая (55) для удельной проводимости получаем

$$\sigma = q^2 \bar{D} \frac{D}{L} \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (59)$$

Итак, на основе общего выражения для проводимости (29) и времен пробега (45) и (47) получены выражения для проводимости в баллистическом режиме (59) и в диффузионном режиме (36).

5. Моды проводимости

Из уравнения (58) видно, что баллистическая проводимость пропорциональна плотности состоя-

ний на единицу длины проводника D/L . Поскольку плотность состояний пропорциональна объему, то можно ожидать, что баллистическая проводимость пропорциональна площади поперечного сечения A 3d-проводника или ширине W 2d-проводника.

Многочисленные эксперименты показывают [21], что для наноразмерных проводников баллистическая проводимость не изменяется линейно с их площадью поперечного сечения, а кратна кванту проводимости

$$G_B \equiv \frac{q^2}{h} M. \quad (60)$$

Другими словами, реальный проводник можно рассматривать как M независимых мод проводимости, дающих в сумме баллистическую проводимость. Учитывая (58), для числа мод проводимости получаем

$$M \equiv \frac{hDv}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\}, \quad (61)$$

а из уравнений (44) и (60) удельная проводимость выражается через число мод проводимости M и среднюю длину свободного пробега λ

$$\sigma = \frac{q^2}{h} M \lambda \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (62)$$

Более подробно концепцию мод проводимости рассмотрим ниже.

6. Фундаментальное соотношение

Стандартное выражение для удельной проводимости дается формулой Друде [15], связывающей проводимость σ с электронной плотностью n , эффективной массой m и временем свободного пробега τ :

$$\sigma \equiv \frac{1}{\rho} = \frac{q^2 n \tau}{m}, \quad (63)$$

или используя понятие подвижности

$$\bar{\mu} = \frac{q\tau}{m}, \quad (64)$$

имеем

$$\sigma = qn\bar{\mu}. \quad (65)$$

С другой стороны, для удельной проводимости в рамках концепции «снизу – вверх» получаются два эквивалентных выражения, одно из которых выражает проводимость через произведение плотности состояний D и коэффициента диффузии \bar{D} (59), а другое – через произведение числа мод M в канале проводимости и средней длины пробега λ (62).

Как и проводимость

$$G \equiv \frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E),$$

удельную проводимость по уравнениям (59) и (62) нужно усреднить по энергии в области нескольких

kT , включающей $E=\mu_0$, с помощью функции теплового уширения, а именно:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \sigma(E). \quad (66)$$

Уравнение (59) хорошо известно, выводится в стандартных учебниках по физике твердого тела [15], чего нельзя сказать об эквивалентном ему уравнении (62), вывод которого обычно требует использования статистической термодинамики необратимых процессов, например, формализма Кубо [16, 17].

По поводу модели Друде хотелось бы подчеркнуть следующее. Применимость модели Друде весьма ограничена, в то время как уравнения для проводимости (59) и (62) имеют самое общее значение. Например, эти уравнения применимы к графену [24, 25] с непараболическим поведением зон и «безмассовыми» электронами – свойствами, описание которых невозможно в модели Друде. Один из уроков, преподнесенных нам наноэлектроникой, – широкая применимость уравнений для проводимости (59) и (62).

Фундаментальное различие между уравнениями (59) и (62) и теорией Друде состоит в том, что усреднение (66) делает проводимость свойством фермиевской поверхности: проводимость определяется уровнями энергии, близкими к $E=\mu_0$. А согласно уравнениям (63)–(65) теории Друде проводимость зависит от общей электронной плотности, суммированной по всему спектру энергий, что и приводит к ограниченной применимости этой модели. Проводимость веществ меняется в очень широких пределах несмотря на то, что число электронов приблизительно одинаково. Низкая проводимость стекла объясняется не тем, что в стекле мало так называемых «свободных» электронов, а потому, что для стекла характерна очень низкая плотность состояний и числа мод вблизи $E=\mu_0$. Понятие же «свободных» электронов относится к интуитивным понятиям.

Для произвольных проводников, как с кристаллической структурой, так и аморфных, так и для молекулярных проводников, следуя [10], покажем, что независимо от функциональной зависимости $E(p)$ плотность состояний $D(E)$, скорость $v(E)$ и импульс $p(E)$ связаны с числом электронных состояний $N(E)$ с энергией, меньшей значения E , соотношением

$$D(E)v(E)p(E) = N(E) \cdot d, \quad (67)$$

где d – размерность проводника. Используя (67) для вычисления проводимости (59) с учетом коэффициента диффузии (55)

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle,$$

для 3d-проводника получаем

$$\sigma(E) = q^2 \frac{N(E) \tau(E)}{A \cdot L m(E)}, \quad (68)$$

где масса определена как

$$m(E) = \frac{p(E)}{v(E)}. \quad (69)$$

Легко убедиться, что фундаментальное соотношение (67) справедливо и для параболической зависимости $E(p)$ и для линейной, как в графене. Для параболической зависимости масса носителя тока от энергии не зависит, что в общем случае не так.

Формула (68) выглядит как выражение (63) теории Друде, если $N(A \cdot L)$ считать электронной плотностью n . При низких температурах это действительно так, поскольку усреднение (66) при $E = \mu_0$ дает

$$\sigma = \left(q^2 \frac{N}{A \cdot L} \cdot \frac{\tau}{m} \right)_{E=\mu_0} = q^2 n \tau / m, \quad (70)$$

так как $N(E)$ при $E = \mu_0$ есть полное число электронов (рис. 13).

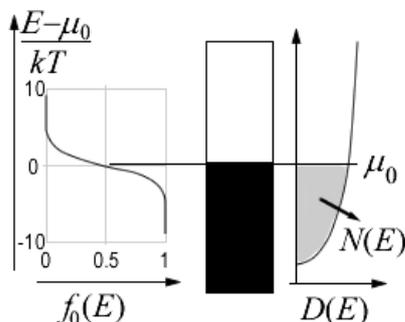


Рис. 13. Равновесная функция Ферми $f_0(E)$. Плотность состояний $D(E)$ и полное число электронов $N(E)$

При ненулевой температуре ситуация тем более сложнее, если плотность состояний непараболическая. Отметим, что ключевым моментом в сведении общего выражения для проводимости (59) к выражению (68), похожему на формулу Друде (63), есть фундаментальное выражение (67), связывающее плотность состояний $D(E)$, скорость $v(E)$ и импульс $p(E)$ для данного значения энергии с полным числом состояний $N(E)$, полученных интегрирование плотности

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dE D(E). \quad (71)$$

Каким образом полное число состояний $N(E)$ по (71) может быть однозначно связано с плотностью состояний $D(E)$, скоростью $v(E)$ и импульсом $p(E)$ для конкретного значения энергии? Ответ состоит в том, что уравнение (67) удовлетворяется только в том случае, когда уровни энергии вычисляются однозначно из выражения для $E(p)$. Оно может не выполняться в области энергий перекрывающихся зон или, например, для аморфных тел, когда не известна зависимость $E(p)$. В этих случаях уравнения (59) и (62) не эквивалентны ур-ю (68) и пользоваться можно только первыми.

Теперь посмотрим, как одиночные зоны, описываемые различными дисперсионными соотношениями $E(p)$ приводят к фундаментальному уравнению (67) и таким образом откроется возможность

установления связи между выражениями для проводимости (59) и (62) и формулами Друде (63)–(65). Это приведет также к новой интерпретации мод $M(E)$, введенных выше, и к объяснению их целочисленности.

6.1. Дисперсии $E(p)$ для кристаллических твердых тел

Пусть стандартно связь энергии с импульсом параболическая (рис. 14)

$$E(p) = E_c + \frac{p^2}{2m}, \quad (72)$$

где под m подразумевается эффективная масса. Будем пользоваться соотношениями $E(p)$ вместо $E(k)$, хотя всегда можно перейти к волновому вектору $k = p/\hbar$. Дисперсия (72) широко используется для различных веществ – и для металлов и для полупроводников.

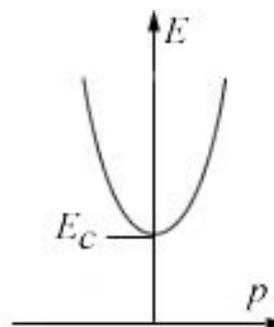


Рис. 14. Параболическая дисперсия

Но это не единственная возможность. Для графена имеет место линейная зависимость энергии от импульса (рис. 15):

$$E = E_c + v_0 p, \quad (73)$$

где v_0 – константа, равная приблизительно 1/300 от скорости света.

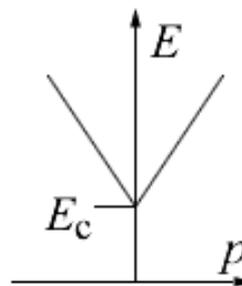


Рис. 15. Линейная дисперсия

Здесь и ранее под импульсом p подразумевается его абсолютное значение. Другими словами, подразумевается, что зависимость $E(p)$ изотропная

Для изотропных $E(p)$ скорость сонаправлена с импульсом, а величина ее равна

$$v \equiv \frac{dE}{dp}. \quad (74)$$

Подсчитаем число состояний для проводников разной размерности. На длине резистора L должно

укладываться целое число де-бройлевских волн с длиной $\lambda=h/p$:

$$\frac{L}{h/p} = \text{целому числу или } p = \text{целое число} \times (h/L).$$

Это означает, что разрешенные состояния однородно распределены для данного значения p и каждое из состояний занимает промежуток

$$\Delta p = \frac{h}{L}. \tag{75}$$

Определим функцию $N(p)$ как полное число состояний со значениями импульса, меньшими, чем заданное значение p . Для одномерных проводников 1d (рис. 16) эта функция равна отношению доступной длины $2p$ (от $-p$ до $+p$) к промежутку Δp

$$N(p) = \frac{2p}{h/L} = 2L \left(\frac{p}{h} \right). \tag{76}$$

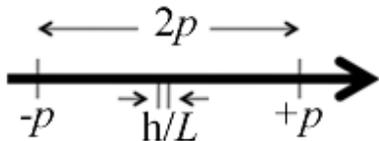


Рис. 16. К подсчету числа состояний для 1d-проводника

Для 2d-проводников (рис. 17) нужно разделить площадь поперечного сечения πp^2 на промежутки по длине h/L и по площади поперечного сечения h/W , так что окончательно

$$N(p) = \frac{\pi p^2}{(h/L)(h/W)} = \pi W \cdot L \left(\frac{p}{h} \right)^2. \tag{77}$$

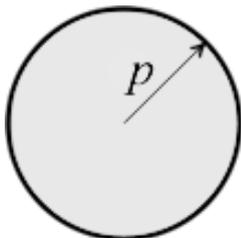


Рис. 17. К подсчету числа состояний для 2d-проводника

Для 3d-проводников объем сферы радиуса p делится на произведение промежутков $(h/L) \times (h/W_1) \cdot (h/W_2)$, где площадь поперечного сечения $A=W_1 \cdot W_2$, так что окончательно

$$N(p) = \frac{(4\pi/3) p^3}{(h/L)(h^2/A)} = \frac{4\pi}{3} A \cdot L \left(\frac{p}{h} \right)^3, \tag{78}$$

или собирая все вместе для $d=\{1, 2, 3\}$ имеем

$$N(p) = \left\{ 2 \frac{L}{h/p}, \pi \frac{L \cdot W}{(h/p)^2}, \frac{4\pi}{3} \frac{L \cdot A}{(h/p)^3} \right\}. \tag{79}$$

Задаввшись законом дисперсии $E(p)$, теперь можно вычислить зависимость числа состояний $N(E)$ с энергией, меньшей заданного значения E .

6. 2. Плотность состояний $D(E)$

Полученная таким образом функция числа состояний $N(E)$ должна быть равна плотности состояний $D(E)$, проинтегрированной вплоть до энергии состояний E

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dE D(E),$$

так что плотность состояний

$$D(E) = \frac{dN}{dE}, \tag{80}$$

а с использованием ур-я (79) получается

$$D(E) = \frac{dN}{dp} \frac{dp}{dE} = \frac{dp}{dE} \frac{p^{d-1} d}{h^d} \left\{ 2L, \pi LW, \frac{4}{3} \pi LA \right\}. \tag{81}$$

Воспользовавшись (74) и (79), окончательно получим искомое фундаментальное уравнение (67), независимое от закона дисперсии.

7. Формула Друде

Как уже было показано, используя (67) для вычисления проводимости (59) для 3d-проводника получаем выражение (68), в котором зависящая от энергии масса определена уравнением (69). Также было показано, что ур-е (68) сводится к формуле Друде (63) при температурах, близких к нулю. Теперь рассмотрим проводники n-типа и p-типа отдельно при температурах, отличных от нуля, а также рассмотрим графен.

Проводники n-типа. Используя уравнение (68) и предполагая в нем независимость от энергии массы m и времени τ , получаем

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{1}{A \cdot L} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E). \tag{82}$$

Интегрируя по частям, имеем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) &= \\ &= \left[-N(E) f_0(E) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E) = \\ &= [0 - 0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E) f_0(E) = \\ &= \text{полному числу электронов,} \end{aligned} \tag{83}$$

поскольку произведение $dE \cdot D(E) \cdot f_0(E)$ есть число электронов в области энергий от E до $E + dE$. Таким образом, уравнение (82) сводится к формуле Друде

$$\sigma = \frac{q^2 \tau}{m} \frac{N}{A \cdot L}, \quad (83)$$

имея в виду, что $N/(A \cdot L) = n$.

Проводники р-типа. Любопытная ситуация имеет место для р-проводников с ниспадающей дисперсией, например,

$$E(p) = E_c - \frac{p^2}{2m}. \quad (84)$$

Вместо числа состояний по (71) мы теперь имеем (рис. 18)

$$N(E) = \int_E^{+\infty} dE D(E) \quad (85)$$

что дает

$$D(E) = -\frac{dN}{dE}. \quad (86)$$

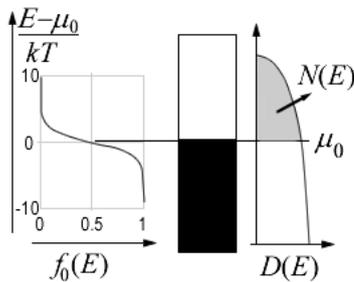


Рис. 18. Равновесная функция Ферми $f_0(E)$, плотность состояний $D(E)$ и число состояний $N(E)$ для р-проводника с дисперсией (85)

Так получается потому, что функция $N(E)$ определяется через функцию $N(p)$, которая дает полное число состояний с импульсом, меньшим заданного значения p , что соответствует энергиям, большим чем заданное значение E согласно дисперсионному соотношению (85).

Если, как и прежде, проинтегрировать по частям

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) =$$

$$= \left[-N(E) f_0(E) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E), \quad (87)$$

теперь первое слагаемое не зануляется, поскольку и $N(E)$ и $f_0(E)$ в нижнем пределе не нули.

Обойти эту ситуацию можно следующим образом: вместо производной от f_0 брать производную от $(1-f_0)$:

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

$$= \left[-N(E)(1-f_0(E)) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} (1-f_0(E)) =$$

$$= [0-0] + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E)(1-f_0(E)) =$$

= полному числу «дырок».

$$(88)$$

Другими словами, для проводников р-типа можно пользоваться формулой Друде

$$\sigma = q^2 n \tau / m, \quad (89)$$

если под значением n понимать число «дырок»: большему значению n соответствует меньшее число электронов.

Графен. Как подсчитывать значение n в случае, когда зоны распространяются в обоих направлениях как в графене с дисперсией $E = \pm v_0 p$ [24, 25] (рис. 15). Нельзя не признать изобретательным разбивать зоны в графене на зону n-типа и зону р-типа (рис. 19) так, что

$$D(E) = D_n(E) + D_p(E), \quad (90)$$

а затем пользоваться формулами Друде.

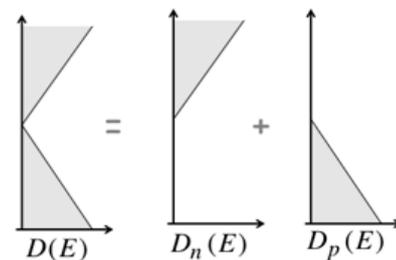


Рис. 19. Искусственное разбиение зонной структуры графена на зоны n- и р-типа

Хотелось бы подчеркнуть, что нет нужды для подобной изобретательности, поскольку уравнения (59) и (62) применимы во всех случаях и корректно отражают физику проводимости.

8. Пропорциональна ли проводимость электронной плотности?

Экспериментальные измерения проводимости часто ведутся в зависимости от электронной плотности, которые, согласно теории Друде, связаны линейно, так что отклонения от линейности трактуют как проявления зависимости времени свободного пробега от энергии. При этом не учитывают, что для непараболических дисперсий масса носителя тока, сама определяемая как p/v , может зависеть от энергии и тем самым приводить к нелинейности проводимости от плотности электронов.

Сначала определим электронную плотность из уравнения (79):

$$n(p) = \left\{ 2 \frac{p}{h}, \pi \frac{p^2}{h^2}, \frac{4\pi}{3} \frac{p^3}{h^3} \right\}, \quad (91)$$

где плотность n равна N/L , $N/W \cdot L$ и $N/A \cdot L$ для $d = 1, 2$ и 3 . Перепишем (92) в виде

$$n(p) = K p^d, \quad (92)$$

где коэффициент пропорциональности

$$K = \{2/h, \pi/h^2, 4\pi/3h^3\}.$$

Теперь для проводимости (70) с учетом (69) имеем

$$\sigma = q^2 \frac{n(p)\tau(p)}{m(p)} = q^2 K p^{d-1} v(p)\tau(p). \quad (93)$$

Если известна или выбрана зависимость скорости и времени свободного пробега от энергии, а стало быть и от импульса, в уравнениях (93) и (94) можно избавиться от зависимости от импульса и таким образом установить связь между проводимостью σ и электронной плотностью n .

Например, в случае графена $E = \pm v_0 p$, скорость dE/dp постоянна и равна v_0 и не зависит от импульса. Полагая время свободного пробега не зависящим от энергии, проводимость от плотности электронов из уравнений (93) и (94) с учетом ур-я (56) для длины свободного пробега

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{\bar{u}} = v\tau \left\{ 2, \frac{\pi}{2}, \frac{4}{3} \right\}$$

получается следующей:

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4n}{\pi}} \quad (94)$$

или с учетом g -фактора (для графена $g=4$)

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{4gn}{\pi}}. \quad (95)$$

Таким образом, проводимость в графене получается пропорциональной \sqrt{n} , а не как обычно предполагается $\sim n$, и с временем свободного пробега, не зависящим от энергии. Вычисления по формуле (96) с $\lambda = 2\mu\text{м}$ и $\lambda = 300\text{нм}$ (рис. 20) согласуются с экспериментальными данными [26].

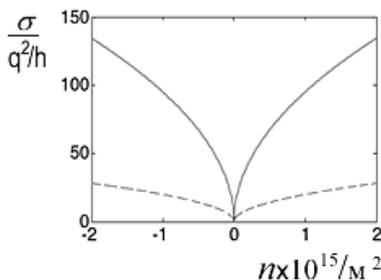


Рис. 20. Проводимость графена по ур-ю (96) как функция электронной плотности для значений $\lambda = 2\mu\text{м}$ (сплошная) и $\lambda = 300\text{нм}$ (пунктир) согласуется с экспериментальными данными (рис. 1 в [26])

9. Квантование проводимости и моды проводимости

Баллистическая проводимость квантуется:

$$G_B \equiv \frac{q^2}{h} M.$$

где для низкоразмерных проводников при низких температурах число M – целое. Выше было получено выражение для числа мод

$$M \equiv \frac{hDv}{2L} \left\{ 1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right\} \quad (96)$$

через произведение плотности состояний D и скорости электронов v , и совершенно не очевидна целочисленность выражения (97). Пользуясь выражениями для дисперсии $E(p)$ оказывается возможным дать иную интерпретацию $M(p)$, свидетельствующую о целочисленной природе числа мод проводимости M .

Используя (67), перепишем (97) в виде

$$M = \frac{hN(p)}{2Lp} \left\{ 1, \frac{4}{\pi}, \frac{3}{2} \right\}, \quad (97)$$

где $N(p)$ есть полное число состояний с импульсом, меньшим заданного значения p . С использованием (79) преобразуем (98) к виду:

$$M(p) = \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, \pi \frac{A}{(h/p)^2} \right\}. \quad (98)$$

Так же как число состояний $N(p)$ дает нам число де-бройлевских длин волн, укладывающихся в проводнике, так и $M(p)$ дает нам число мод, укладывающихся в поперечном сечении проводника, причем это число не зависит от закона дисперсии, поскольку при выводе (99) нигде не использовался какой-либо конкретный закон дисперсии.

При оценке чисел $N(p)$ и $M(p)$ в конкретной задаче на практике получаются, конечно, дробные числа. Однако, по физическому смыслу эти числа должны быть целыми. В больших проводниках при низких температурах квантование $M(p)$ смазывается, однако, в мезо- и наноразмерных проводниках наблюдается целочисленная природа числа мод $M(p)$ и квантование проводимости. Поэтому (99) правильнее переписать в виде

$$M(p) = \text{Int} \left\{ 1, 2 \frac{W}{h/p}, \pi \frac{A}{(h/p)^2} \right\}, \quad (99)$$

где под $\text{Int}\{x\}$ подразумевается наибольшее целое число, меньшее значения x .

В одномерных проводниках число мод совпадает с g -фактором, равным числу долин, умноженным на вырождение по спину, равное 2. Сопротивление баллистических проводников $\sim M \cdot h/q^2$, так что сопротивление баллистического 1d-проводника приблизительно равно $25K\Omega$, деленных на g , что и наблюдается экспериментально [1]: большинство металлов и полупроводников типа GaAs имеют $g = 2$ и баллистическое сопротивление 1d-образцов $\sim 12.5K\Omega$, а углеродные нанотрубки двухдолинные с $g=4$ и их баллистическое сопротивление $\sim 6.25K\Omega$.

10. Термоэлектрические явления

Измерения проводимости сами по себе не несут никакой информации о физической природе

проводимости в том или ином проводнике. В замкнутой цепи электроны всегда движутся от отрицательно заряженного контакта через проводник к положительно заряженному контакту какая бы ни была физико-химическая природа проводника. Это верно для любых проводников и поэтому измерения проводимости ничего не говорят нам о самом проводнике.

Термоэлектрические же явления, под которыми понимается, в частности, генерация тока за счет разности температур в замкнутой цепи, предоставляют возможность судить о физической природе проводимости в изучаемом проводнике. Простейшим примером могут служить проводники n- и p-типа. В проводниках n-типа электроны движутся от горячего контакта через проводник к холодному контакту, а в проводниках p-типа направление движения электронов обратное. Почему? Часто объясняют таким образом, мол, в проводниках p-типа носители тока (так называемые «дырки») заряжены противоположно заряду электрона и поэтому направление движения тока обратное. Выше уже обратилось внимание на то, что в проводниках p-типа плотность состояний $D(E)$ нисходящая с ростом энергии, а в n-типа – восходящая (рис. 21).

Для проводников p-типа электроны движутся с энергиями вблизи верхушки зоны, отслеживать удобно пустые состояния выше значения электрохимического потенциала μ , а не занятые состояния ниже значения μ . Эти пустые состояния называют, «дырками», поскольку в этих состояниях нет электронов и ведут они себя как положительно заряженные «объекты». Подобное объяснение нельзя признать удовлетворительным, поскольку в реальности движутся только электроны. «Дырки» же являются, в лучшем случае, концептуальным понятием, а измеряемые на практике эффекты вызваны движением электронов и не могут зависеть от субъективных, хотя и очень удобных, договоренностей. Мы ниже убедимся в том, что объяснение различия между n- и p-проводниками не требует никаких новых концепций кроме очевидного утверждения, что ток порождается различием между фермиевскими функциями на контактах проводника. Существенно лишь то, чем отличаются n- и p-проводники друг от друга: для первых плотность энергии растет с ростом энергии, а для вторых – падает. Для молекул в роли проводников вообще нет понятия дисперсии $E(p)$, а в этой роли молекулы обнаруживают весьма заметные термоэлектрические эффекты [27].

Начнем с выражения для тока:

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) (f_1(E) - f_2(E)). \quad (101)$$

Если ранее различие между фермиевскими функциями порождалось различием между электрохимическими потенциалами при одинаковой температуре контактов, то с таким же успехом это различие может порождаться и различием в температуре контактов, поскольку фермиевские функции зависят как от μ , так и от T :

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_1)/kT_1} + 1}, \quad f_2(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_2)/kT_2} + 1}. \quad (102)$$

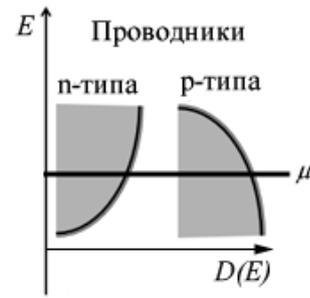


Рис. 21. В проводниках n-типа электрохимический потенциал μ расположен ближе к дну зоны, а в p-типа – ближе к верхушке зоны. Плотность состояний для проводников n-типа растет с ростом энергии, а для p-типа – падает

Почему же при различии температур контактов движение тока противоположное в проводниках n- и p-типа? Причина кроется в поведении разности фермиевских функций горячего и холодного контактов (рис. 22).

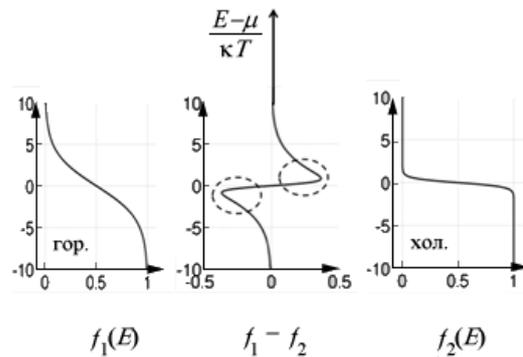


Рис. 22. Два контакта, горячий и холодный, с одним и тем же значением μ : разность фермиевских функций положительна для $E > \mu$ и отрицательна для $E < \mu$

В канале n-типа проводимость $G(E)$ – возрастающая функция энергии, так что в суммарном токе доминируют состояния с $E > \mu$, электроны движутся от левого контакта к правому, от горячего к холодному (рис. 23). В p-каналах ситуация противоположная. Проводимость $G(E)$ – убывающая функция энергии, так что в суммарном токе доминируют состояния с $E < \mu$, электроны движутся от правого контакта к левому, от холодного к горячему (рис. 23).

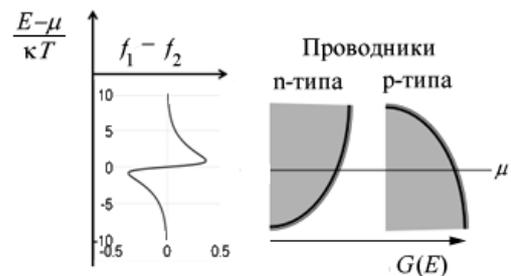


Рис. 23. Для n-проводников ток для $E > \mu$ доминирует над током для $E < \mu$, а для p-проводников наоборот – ток для $E < \mu$ доминирует над током для $E > \mu$

10. 1. Коэффициент Зеебека

Для вычисления тока за счет различия в температуре контактов можно пользоваться формулой (101) напрямую, не вводя никаких упрощений. Однако, в случае небольших различий в температуре контактов, как это уже было продемонстрировано выше для случая небольшой разницы между электрохимическими потенциалами, что соответствует участку линейного отклика вольт-амперной характеристики, можно воспользоваться разложением разности фермиевских функций в (101) в ряд Тейлора и ограничиться линейным членом. Тогда можно записать

$$I = G(V_1 - V_2) + G_S(T_1 - T_2). \tag{103}$$

Отсюда видно, что электроны движутся от горячего контакта через n-проводник к холодному контакту, а в p-проводниках наоборот. Перепишем (103) иначе:

$$\Delta V = I/G + (-G_S/G)\Delta T, \tag{104}$$

где V_1 и V_2 определены как μ_1/q и μ_2/q , а проводимость G дается формулой Ландауэра

$$G = \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mu} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E), \tag{105}$$

тогда как зеебековская проводимость

$$G_S = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) \left(\frac{\partial f_0}{\partial T} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - \mu_0}{qT} G(E). \tag{106}$$

Коэффициентом Зеебека S в уравнении (104) называют отношение

$$S = -G_S/G. \tag{107}$$

Уравнение (106) математически выражает тот факт, что состояния с энергией, большей и меньшей электрохимического потенциала, дают вклад с разными знаками в термоэлектрический коэффициент Зеебека S . Из этого же уравнения ясно, что при подборе материала с наилучшим коэффициентом Зеебека следует выбирать такой материал, в котором вся плотность состояний сосредоточена по одну сторону от электрохимического потенциала μ_0 , поскольку даже небольшая часть состояний по другую сторону от μ_0 лишь ухудшит коэффициент Зеебека.

Соотношения (103) и (104) можно проиллюстрировать двумя электрическими цепями (рис. 24): короткозамкнутой с током (слева на рисунке)

$$I_{sc} = G_S(T_1 - T_2) \tag{108}$$

и незамкнутой (справа на рис. 24), которая обычно и используется в термоэлектрических измерениях и дающая напряжение

$$V_{oc} = -\frac{I_{sc}}{G} = -\frac{G_S}{G}(T_1 - T_2). \tag{109}$$

К примеру, для n-проводников зеебековская проводимость положительна, так что напряжение V_{oc} отрицательное, если $T_1 > T_2$. Это означает, что контакт с более высокой температурой заряжен отрицательно

(положительно в общепринятом смысле). По договоренности, коэффициент Зеебека

$$S \equiv \frac{V_{oc}}{T_1 - T_2} = -\frac{G_S}{G}. \tag{110}$$

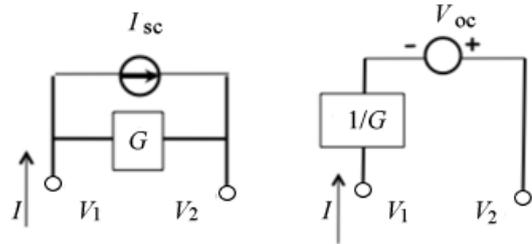


Рис. 24. Короткозамкнутая sc (short circuit) и незамкнутая oc (open circuit) цепи, иллюстрирующие уравнения (103) и (104). Для направления тока (потока электронов) и знака напряжения используются естественные представления, которые противоположны обычно условно принятым

11. Показатели качества термоэлектрических устройств и материалов

Термоэлектрический эффект в прикладном отношении интересен тем, что избыточное тепло может быть конвертировано в электрический ток [28]. Максимальная мощность P_{max} генерируется тогда, когда нагруженное сопротивление $R_L = 1/G$ (рис. 25):

$$P_{max} = V_{oc}^2 G / 4 = S^2 G (T_1 - T_2)^2 / 4. \tag{111}$$

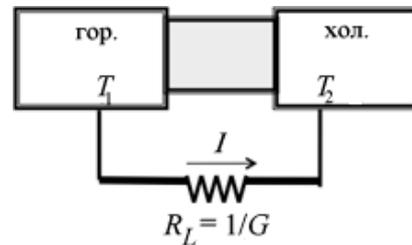


Рис. 25. Термоэлектрический генератор создает ток за счет разности температур

Отношение максимальной генерируемой мощности к мощности внешнего источника называют к.п.д. устройства:

$$\eta \equiv \frac{P_{max}}{G_K(T_1 - T_2)} = \frac{S^2 G T}{G_K} \frac{T_1 - T_2}{4T}, \tag{112}$$

где G_K – теплопроводность проводника, а T есть средняя температура $(T_1 + T_2)/2$. Стандартный показатель качества термоэлектрического материала ZT пропорционален отношению $S^2 G$ к G_K :

$$ZT \equiv \frac{S^2 G T}{G_K} = \frac{S^2 \sigma T}{k}, \tag{113}$$

где удельная теплопроводность k связана с теплопроводностью G_K материала проводника:

$$G_K = k \cdot A/L \tag{114}$$

так же, как проводимость связана с удельной проводимостью через длину проводника L и площадь его поперечного сечения A . Закон Фурье для теплопроводности, аналог закона Ома для электропроводности, в случае применения к нанопроводникам нуждается в такой же коррекции ($L \Rightarrow L + \lambda$) как и закон Ома выше.

Если электрическая проводимость определяется исключительно переносом электронов, то теплопроводность включает также существенную фононную составляющую. Сейчас же рассмотрим перенос тепла только электронами.

12. Перенос тепла электронами

До сих пор при обсуждении термоэлектрических явлений проводимость материала могла быть произвольной $G(E)$. Модель упругого резистора привлекательна тем, что моды проводимости при разных энергиях проводят электроны одновременно и в параллельном режиме, так что можно рассмотреть проводимость при некотором одном значении энергии, а затем отсуммировать по всему спектру энергий. Рассмотрим небольшой промежуток энергии между значениями энергии E и $E + dE$, расположенный как выше значения электрохимического потенциала μ_0 (моды n-типа), так и ниже его (моды p-типа) (рис. 26). Как уже обсуждалось выше, вклады этих двух разных типов мод в зеебековскую проводимость будут противоположны по знаку.

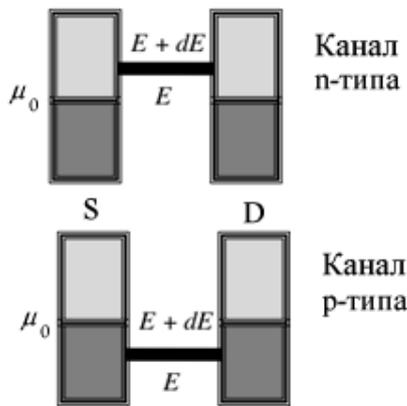


Рис. 26. Простейшая одномодовая проводимость $G(E)$ с каналом проводимости между энергиями E и $E + dE$ ($dE \ll kT$) выше (канал n-типа) и ниже (канал p-типа) значения электрохимического потенциала

В упругом резисторе при прохождении тока джоулево тепло I^2R диссипирует на контактах проводника с истоком S и стоком D. В системах n- и p-типа на рис. 26 тепло на контактах не выделяется, поскольку тока в каналах нет (одинаковые электрохимические потенциалы на истоке и стоке). Рассмотрим, однако, ситуацию на рис. 27 с разными электрохимическими потенциалами на истоке и на стоке, что соответствует, например, контакту двух разных металлов.

Каждый раз, когда электрон переносится с истока на сток по каналу n-типа исток охлаждается, а

сток нагревается, а по каналу p-типа наоборот – исток нагревается, а сток охлаждается (эффект Пельтье), однако, каждый раз суммарный эффект равен $\mu_1 - \mu_2 = qV$ с выделением джоулева тепла. Зарядовый ток I дается выражением (101). Помня о том, что в окне $\mu_1 - \mu_2$ электрон теряет энергию $E - \mu_1$ на истоке и отдает энергию $E - \mu_2$ на стоке, выпишем энергетические вклады термотокков отдельно для истока и стока

$$I_{Q1} = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{E - \mu_1}{q} G(E)(f_1(E) - f_2(E)) \quad (115)$$

и

$$I_{Q2} = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\mu_2 - E}{q} G(E)(f_1(E) - f_2(E)). \quad (116)$$

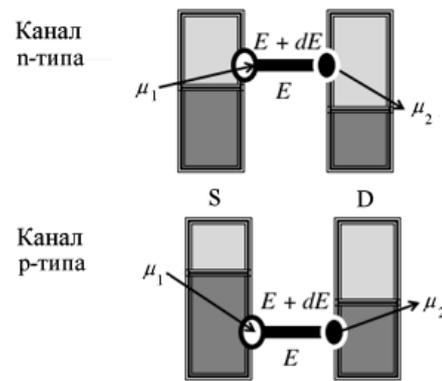


Рис. 27. Контакт двух металлов с разными значениями электрохимических потенциалов (эффект Пельтье)

Энергия, извлекаемая из внешнего источника напряжения,

$$I_E = \frac{\mu_1 - \mu_2}{q} I = V \cdot I, \quad (117)$$

так что закон сохранения энергии соблюдается

$$I_{Q1} + I_{Q2} + I_E = 0. \quad (118)$$

12. 1. Линейный отклик

Линеаризуем уравнения (115) и (116) точно так же, как было получено ур-е (103) из ур-я (101), и получим

$$I_Q = G_p(V_1 - V_2) + G_Q(T_1 - T_2), \quad (119)$$

где

$$G_p = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - \mu_0}{q} G(E) \quad (120)$$

и

$$G_Q = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{(E - \mu_0)^2}{q^2 T} G(E) \quad (121)$$

представляют собой стандартные выражения для термоэлектрических коэффициентов, которые обычно получают путем применения таких изощренных

подходов как техника транспортного уравнения Больцмана [16] или формализма Кубо [17]. Речь пока идет об электронных вкладах в термоэлектрические коэффициенты.

Следует иметь в виду, что величина G_Q не есть теплопроводность G_K материала проводника, обычно используемая в стандартном показателе качества (113) термоэлектрического материала ZT . Одна из причин этого, как уже упоминалось, состоит в том, что в теплопроводности G_K есть фононный вклад, который пока что не учитывался нами. Но есть еще одна, совершенно другая причина.

Величина G_K определяется как теплопроводность проводника в условиях незамкнутой электрической цепи ($I = 0$):

$$G_K = \left(\frac{\partial I_Q}{\partial (T_1 - T_2)} \right)_{I=0}, \quad (122)$$

тогда как величина G_Q есть теплопроводность проводника в условиях короткозамкнутой цепи ($V = 0 : V_1 = V_2$):

$$G_Q = \left(\frac{\partial I_Q}{\partial (T_1 - T_2)} \right)_{V_1=V_2}. \quad (123)$$

Можно, однако, переписать уравнения (103) и (119) таким образом, чтобы в явном виде выделялись коэффициенты, обычно экспериментально измеряемые в условиях незамкнутой электрической цепи:

$$(V_1 - V_2) = \frac{1}{G} I - \frac{G_S}{G} (T_1 - T_2), \quad (124)$$

$$I_Q = \frac{G_P}{G} I + \left(G_Q - \frac{G_P G_S}{G} \right) (T_1 - T_2), \quad (125)$$

имея, конечно, в виду, что V и I есть напряжение μ/q и ток, отличающиеся по знаку от общепринятых значений, где $-G_S/G$ есть коэффициент Зеебека (110), коэффициент Пельтье

$$\Pi = -G_P / G, \quad (126)$$

а теплопроводность

$$G_K = G_Q - G_P G_S / G. \quad (127)$$

Если обратиться к уравнениям (106) и (120), коэффициенты Зеебека и Пельтье в уравнениях (124) и (125) оказываются связанными соотношением Кельвина

$$\Pi = TS, \quad (128)$$

которое является частным случаем фундаментальных соотношений Онзагера [29].

12. 2. Дельта-термоэлектрик

Иногда дельта-термоэлектрик называют одноуровневым или одномодовым термоэлектриком. Это гипотетическое вещество с узким каналом проводимости при энергии ε шириной $\Delta\varepsilon \ll kT$ (рис. 28).

Полезно рассмотреть термоэлектрические коэффициенты для такого гипотетического вещества.

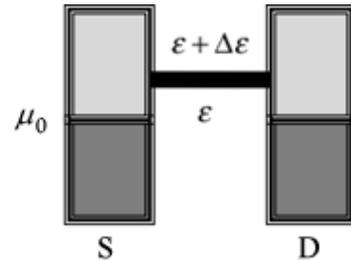


Рис. 28. Модель дельта-термоэлектрика

Выпишем сводку ранее уже полученных термоэлектрических коэффициентов:

$$G = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E),$$

$$G_S = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - \mu_0}{qT} G(E),$$

$$G_P = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{E - \mu_0}{q} G(E),$$

$$G_Q = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{(E - \mu_0)^2}{q^2 T} G(E).$$

Проводимость $G(E)$ в подынтегральном выражении отлична от нуля в очень узкой области энергии, а множители $(E - \mu_0)$ практически постоянны и могут быть вынесены из под знака интеграла, что дает

$$G = G(\varepsilon) \Delta\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)_{E=\varepsilon}, \quad (129)$$

$$G_S = \frac{\varepsilon - \mu_0}{qT} G, \quad (130)$$

$$G_P = \frac{\varepsilon - \mu_0}{q} G, \quad (131)$$

$$G_Q = \frac{(\varepsilon - \mu_0)^2}{q^2 T} G, \quad (132)$$

так что из уравнений (124) и (125) теперь легко получаются термоэлектрические коэффициенты для дельта-термоэлектрика:

$$S = -\frac{G_S}{G} = -\frac{\varepsilon - \mu_0}{qT}, \quad (133)$$

$$\Pi = -\frac{G_P}{G} = -\frac{\varepsilon - \mu_0}{q}, \quad (134)$$

$$G_K = G_Q - \frac{G_P G_S}{G} = 0. \quad (135)$$

Нулевая теплопроводность G_K для дельта-термоэлектрика заслуживает обсуждения. Однако,

сначала обсудим физический смысл коэффициентов Зеебека (133) и Пельтье (134) для дельта-термоэлектрика. Коэффициент Зеебека (133) есть напряжение в незамкнутой цепи, обеспечивающее нулевой ток. Дельта-термоэлектрик проводит только при энергии $E = \varepsilon$. Чтобы тока не было, фермиевские функции при этой энергии должны быть одинаковы: $f_1(\varepsilon) = f_2(\varepsilon)$, что в свою очередь дает

$$\frac{\varepsilon - \mu_1}{kT_1} = \frac{\varepsilon - \mu_2}{kT_2} = \frac{(\varepsilon - \mu_1) - (\varepsilon - \mu_2)}{k(T_1 - T_2)} = -\frac{\mu_1 - \mu_2}{k(T_1 - T_2)}. \quad (136)$$

Поскольку же коэффициент Зеебека при нулевом токе

$$S = \left. \frac{(\mu_1 - \mu_2)/q}{T_1 - T_2} \right|_{I=0}, \quad (137)$$

окончательно получаем

$$S = -\frac{\varepsilon - \mu_1}{qT_1} = -\frac{\varepsilon - \mu_2}{qT_2} = -\frac{\varepsilon - \mu_0}{qT}, \quad (138)$$

что согласуется с ранее полученным выражением (133).

Выражение (134) для коэффициента Пельтье дельта-термоэлектрика также легко понять, если помнить, что каждый электрон в дельта-термоэлектрике переносит тепло $(\varepsilon - \mu_0)$, так что отношение перенесенного тепла к заряду электрона $(-q)$ должно быть

$$(\varepsilon - \mu_0) / (-q).$$

В итоге имеет место нулевая теплопроводность (135), что свидетельствует о том, что в дельта-термоэлектрике в условиях незамкнутой цепи (нет транспорта электронов) перенос тепла не происходит. Вроде бы так. Однако, все же если нет электрического тока, может ли иметь место перенос тепла? Если бы модель дельта-термоэлектрика была достаточной для описания реального термоэлектрика, то не должен был бы наблюдаться перенос тепла в любом термоэлектрике.

Чтобы разобраться в этой ситуации, усложним модель и рассмотрим двухуровневый термоэлектрик с перепадом температур (рис. 29).

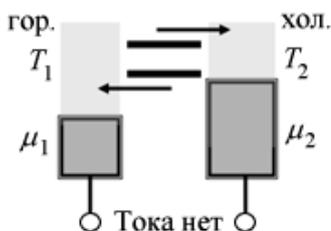


Рис. 29. Двухуровневый термоэлектрик с перепадом температур в режиме незамкнутой цепи

В этом случае между двумя контактами с $\mu_1 < \mu_2$ возникает разность потенциалов. Хотя сум-

марный ток нулевой, но индивидуальные токи отличны от нуля на разных уровнях. Они одинаковы по величине, но противоположны по направлению, так что суммарный ток равен нулю. Однако, потоки тепла на обоих уровнях не компенсируют друг друга, поскольку по уровню с большей энергией переносится больше тепла, чем по уровню с меньшей энергией. Таким образом, нулевой электрический ток не означает нулевой перенос тепла в реальных термоэлектриках, разве что это имеет место лишь в дельта-термоэлектрике.

Поскольку дельта-термоэлектрик имеет нулевую теплопроводность, то стандартный показатель качества термоэлектрического материала ZT (113) для дельта-термоэлектрика должен быть очень большим с претензией на идеальный термоэлектрик. Как уже упоминалось выше, даже при нулевом переносе тепла электронами имеет место перенос тепла фононами, что не позволяет показателю качества термоэлектрика ZT принимать слишком большие значения. Роль фононов мы подробно рассмотрим позже.

13. Оптимизация силового коэффициента

Обсудим факторы, которые могли бы максимизировать силовой коэффициент S^2G в выражении (111) для максимальной мощности P_{max} . Если стремиться к максимально возможному коэффициенту Зеебека, то энергию ε в (133) нужно выбирать как можно дальше от химпотенциала μ_0 . Это, однако, приводит к неприемлемо низкому значению проводимости G (129), поскольку множитель $(-\partial f_0 / \partial E)$ затухает очень быстро при удалении E от μ_0 .

Из уравнений (133) и (129) имеем

$$\begin{aligned} S^2G &= G(\varepsilon)\Delta\varepsilon \left(\frac{\varepsilon - \mu_0}{qT} \right)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)_{E=\varepsilon} = \\ &= G(\varepsilon) \frac{\Delta\varepsilon}{kT} \left(\frac{k}{q} \right)^2 x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}, \end{aligned} \quad (139)$$

где $x \equiv (\varepsilon - \mu_0) / kT$, а зависимость силового коэффициента от x дается функцией $F(x) = x^2 e^x / (e^x + 1)^2$, график которой показан на рис. 30.

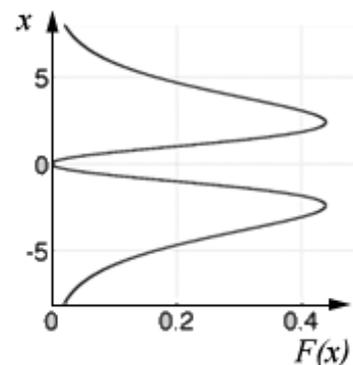


Рис. 30. График функции $F(x) = x^2 e^x / (e^x + 1)^2$

Максимум функции $F(x)$ лежит при $x \sim \pm 2$, т. е. в идеальном случае энергия в канале проводника должна лежать выше или ниже значения химпотенциала на величину, равную приблизительно $2kT$. Соответствующие значения коэффициента Зеебека и силового коэффициента приблизительно равны:

$$S \approx 2 \frac{k}{q}, \tag{140}$$

$$S^2 G \approx 0.5 \left(\frac{k}{q} \right)^2 G(\varepsilon) \frac{\Delta \varepsilon}{kT}. \tag{141}$$

Наилучшие термоэлектрики характеризуются коэффициентами Зеебека, не сильно отличающимися от значения $2(k/q) = 170 \mu V/K$, ожидаемого согласно ур-ю (140). Они обычно проектируются таким образом, чтобы химпотенциал μ_0 находился чуть ниже дна зоны проводимости, так что произведение $G(E)$ и $(-\partial f_0 / \partial E)$ выглядит как дельта-функция, центрированная при $E = \varepsilon$ и лежащая чуть выше дна зоны проводимости, как показано на рис. 31.

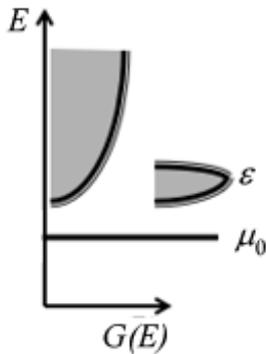


Рис. 31. К проектированию наилучших термоэлектриков

Проблема, однако, в том, что при таком проектировании (рис. 31) проводимость недостаточно велика, какой она могла бы быть, если бы химпотенциал μ_0 располагался бы повыше (рис. 32), что характерно для металлов.

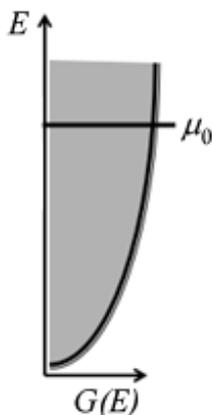


Рис. 32. К увеличению проводимости термоэлектрика

Однако, металлы являются плохими термоэлектриками, потому что их коэффициенты Зеебе-

ка намного меньше k/q , поскольку их электрохимические потенциалы лежат ближе к середине зоны, так что выше μ_0 находится приблизительно так же много состояний, как и ниже. По этой причине среди хороших термоэлектриков доминируют полупроводники, которые характеризуются достаточно высокими значениями силовых коэффициентов. Вместе с тем, силовой коэффициент определяет только числитель показателя качества термоэлектрика ZT (113). Как уже упоминалось, теплопроводность в знаменателе ур-я (113) существенно зависит от транспорта тепла фононами, физика которого весьма отличается от электронного транспорта.

14. Транспорт тепла фононами

Фононная составляющая, как хорошо известно, наряду с электронной составляющей играет исключительно важную роль в формировании термических свойств веществ [28]. Не входя сколько-нибудь подробно в физику фононов [15], покажем лишь как легко модель упругого транспорта электронов, изложенная выше, может быть переписана применительно к фононам.

В отличие от электронов, которые подчиняются статистике Ферми, равновесное распределение фононов описывается функцией Бозе

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} + 1}. \tag{142}$$

Полученное выше выражение для электрического тока

$$I = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{M\lambda}{L + \lambda} \right)_{el} (f_1(E) - f_2(E)) \tag{143}$$

где фермиевские функции (102) записаны для разности потенциалов на электродах $V = (\mu_1 - \mu_2)/q$ и для разных температур, переписывается в фононный поток тепла

$$I_Q = \frac{1}{h} \int_0^{+\infty} d(\hbar\omega) \left(\frac{M\lambda}{L + \lambda} \right)_{ph} (\hbar\omega)(n_1(\omega) - n_2(\omega)) \tag{144}$$

просто путем замены $q \rightarrow \hbar\omega$, фермиевских функций (102) на бозевские функции

$$n_1(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT_1) - 1},$$

$$n_2(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT_2) - 1} \tag{145}$$

и нижнего предела интегрирования в (143) на нулевой.

Стандартная линеаризация выражения (144) дает

$$I_Q \approx G_K (T_1 - T_2), \tag{146}$$

где теплопроводность, обязанная фононам,

$$G_K = \frac{k^2 T}{h} \int_0^{\infty} dx \left(\frac{M\lambda}{L + \lambda} \right)_{ph} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}, \quad x \equiv \frac{\hbar\omega}{kT}. \tag{147}$$

Обратим внимание на то, что как и модель упругого резистора для электронов не учитывает эффекты неупругого рассеяния мод проводимости, так и изложенная выше фоновая модель не учитывает ангармоничность взаимодействия фононов, которая вынуждает фононы менять свою частоту [30]. В отличие от достаточно хорошо изученных устройств на баллистическом транспорте электронов, и поныне немного известно об устройствах на баллистическом транспорте фононов [31–33].

14. 1. Баллистический транспорт фононов

Баллистическая фоновая проводимость записывается обычно в форме, напоминающей закон Стефана-Больцмана для фотонов.

Из уравнения (147) для баллистической теплопроводности ($L \ll \lambda$) имеем

$$[G_K]_{bl} = \frac{k^2 T}{h} \int_0^\infty dx M_{ph} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}. \tag{148}$$

Как и для случая электронов, число мод для фононов

$$M_{ph} = \frac{3\pi A}{\lambda_{ph}^2}, \tag{149}$$

где учтены три разрешенных направления поляризации фононов, а

$$\lambda_{ph} = \frac{c_s}{\omega/2\pi}, \tag{150}$$

где c_s – скорость фононов, так что

$$M_{ph} = \frac{3\omega^2 A}{4\pi c_s^2} = \frac{3k^2 T^2 A}{4\pi \hbar^2 c_s^2} x^2, \tag{151}$$

и окончательно из (148) имеем

$$[G_K]_{bl} = \frac{3k^4 T^3}{8\pi^2 \hbar^3 c_s^2} \int_0^\infty dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{\pi^2 k^4 T^3}{10 \hbar^3 c_s^2}, \tag{152}$$

где интеграл слева равен $4\pi^4/15$. Теперь из ур-я (146) для баллистического потока тепла имеем

$$[I_Q]_{bl} = \frac{\pi^2 k^4 T^3}{10 \hbar^3 c_s^2} \Delta T, \tag{153}$$

где $\Delta T = T_1 - T_2$, а поскольку $T^3 \Delta T = \Delta(T^4/4)$, окончательно

$$[I_Q]_{bl} = \frac{\pi^2 k^4}{40 \hbar^3 c_s^2} (T_1^4 - T_2^4). \tag{154}$$

Аналогичный результат для фотонов известен как закон Стефана-Больцмана, отличающийся от баллистического потока фононов (154) коэффициентом $2/3$, поскольку в случае фотонов число разрешенных поляризаций равно двум.

Теперь рассмотрим диффузионный транспорт фононов.

14. 2. Теплопроводность

Фоновая теплопроводность определяется уравнением (147) и связана обычным образом со своим удельным значением

$$G_K = \frac{\kappa A}{L + \lambda}, \tag{155}$$

так что окончательно удельная фоновая теплопроводность

$$\kappa = \frac{k^2 T}{h} \int_0^\infty dx \left(\frac{M \lambda}{A} \right)_{ph} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{156}$$

подобна удельной электронной проводимости

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \int_{-\infty}^\infty dx \left(\frac{M \lambda}{A} \right)_{el} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}. \tag{157}$$

Функция уширения в электронных транспортных коэффициентах (12)

$$F_T(x) \equiv \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} \tag{158}$$

отличается от аналогичной функции в фоновых транспортных коэффициентах

$$F_T^{ph}(x) \equiv \frac{3}{\pi^2} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}, \tag{159}$$

однако, схожесть их налицо (рис. 33).

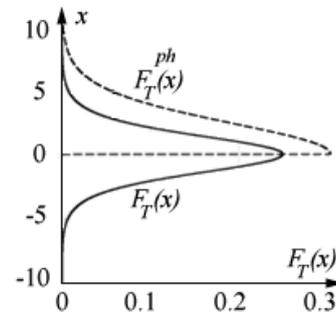


Рис. 33. Сравнение функций уширения в электронных и фоновых транспортных коэффициентах. Множитель $3/\pi^2$ в (159) нужен для того, чтобы площади под кривыми были одинаковы и равны единице как в электронной функции $F_T(x)$

Таким образом, по крайней мере качественно, электропроводность и теплопроводность можно описывать схожим образом. Так, если удельная электрическая проводимость для 3D-проводника дается выражением (62):

$$\sigma = \frac{q^2}{h} \left(\frac{M \lambda}{A} \right), \tag{160}$$

где коэффициент $q^2/h \approx 38 \text{ мкС}$ есть обратное значение фундаментальной константы Клитцинга, то удельная теплопроводность дается выражением

$$\kappa_{ph} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k^2 T}{h} \left(\frac{M\lambda}{A} \right)_{ph}, \quad (161)$$

где коэффициент $(\pi^2/3)(k^2T/h) \approx 325 \text{ nVm/K}$ с множителем $\pi^2/3$, обратным тому значению, которое необходимо для нормировки функции уширения для фононов, а число мод на единицу поперечного сечения проводника M/A и средняя величина свободного пробега λ оцениваются в зазоре частот $h\omega$, равном приблизительно нескольким kT . Поляризационный g -фактор $g=3$ предполагается учтенным в значении числа мод M .

Для термоэлектрика с коэффициентом Зеебека $S \sim 2(k/q)$ и доминирующей фононной составляющей удельной теплопроводности (161) для показателя качества термоэлектрика ZT можно написать

$$ZT \approx 4 \frac{k^2 T}{q^2} \frac{\sigma}{\kappa + \kappa_{ph}} \approx 4 \frac{k^2 T}{q^2} \frac{\sigma}{\kappa_{ph}} \quad (162)$$

или иначе, используя (160) и (161),

$$ZT \approx \frac{M\lambda/A}{(M\lambda/A)_{ph}}, \quad (163)$$

где опущен множитель $12/\pi^2 \sim 1$. Это полезное выражение свидетельствует о том, что как только термоэлектрик оптимизирован по коэффициенту Зеебека S соответствующее ему значение ZT приближенно показывает отношение $M\lambda/A$ для электронов и фононов.

В стремлении повысить коэффициент Зеебека S мы тем самым понижаем удельное значение числа мод M/A для электронов. С другой стороны, отношение M/A для фононов часто намного больше, а именно, $\sim 1 \text{ нм}^{-2}$, так что их отношение в уравнении (163) всего ~ 0.1 или даже меньше. Однако, у электронов средняя длина свободного пробега больше, благодаря чему в наилучших термоэлектриках $ZT \sim 1$. В настоящее время представляется, что наиболее многообещающий путь улучшить значение ZT заключается в подавлении средней длины пробега для фононов, не затрагивая при этом поведение электронов (т. наз. PGEC/Phonon-Glass-Electron Crystals [34, 35]).

Уже длительное время не удается выйти за пределы $ZT \sim 1-3$. Эксперты утверждают, что термоэлектрики с $ZT \sim 4-10$ обеспечили бы существенный прогресс в решении прикладных задач. Надежды возлагают на наноструктурированные материалы. Так это или не так покажут только экспериментальные исследования.

Настоящая работа явилась результатом посещения мною курсов лекций «Fundamentals of Nanoelectronics: Basic Concepts», прочитанного онлайн в январе – феврале 2012 года и в марте – мае 2015 года проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U [36, 37].

Литература

1. Mitin, V. V. Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications [Text] / V. V. Mitin, V. A. Kochelap, M. A. Stroschio. – Cambridge: Cambridge University Press, 2012. – 346 p.
2. Hoefflinger, B. Chips 2020: A Guide to the Future of Nanoelectronics (Frontiers Collection) [Text] / B. Hoefflinger. – Berlin: Springer-Verlag, 2012. – 505 p.
3. Мартинес-Дуарт, Дж. М. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники [Текст] / Дж. М. Мартинес-Дуарт, Р. Дж. Мартин-Палма, Ф. Агулло-Пуеда. – Москва: Техносфера, 2007. – 368 с.
4. Драгунов, В. П. Основы нанозлектроники [Текст] / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. – Москва: Логос, 2006. – 496 с.
5. Network for Computational Nanotechnology [Electronic Resource]. – Available at: <http://nanohub.org/>
6. Smit, R. H. M. Measurement of the conductance of a hydrogen molecule [Text] / R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, N. D. Lang, M. C. van Hemert, J. M. van Ruitenbeek // Nature. – 2002. – Vol. 419, Issue 6910. – P. 906–909. doi: 10.1038/nature01103
7. Supriyo, D. Electronic Transport in Mesoscopic Systems [Text] / D. Supriyo. – Cambridge: Cambridge University Press, 2001. – 377 p.
8. Supriyo, D. Quantum Transport: Atom to Transistor [Text] / D. Supriyo. – Cambridge: Cambridge University Press, 2005. – 404 p.
9. Electronics from the Bottom Up: A New Approach to Nanoelectronic Devices [Electronic Resource]. – Available at: <http://nanohub.org/topics/ElectronicsFromTheBottomUp>
10. Supriyo, D. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport [Text] / D. Supriyo. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. – 473 p. – Available at: <http://nanohub.org/courses/FoN1>
11. Lundstrom, M. Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications [Text] / M. Lundstrom, C. Jeong. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2013. – Available at: <http://nanohub.org/resources/11763>
12. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction [Text] / R. Landauer // IBM Journal of Research and Development. – 1957. – Vol. 1, Issue 3. – P. 223–231. doi: 10.1147/rd.13.0223
13. Landauer, R. Electrical resistance of disordered onedimensional lattices [Text] / R. Landauer // Philosophical Magazine. – 1970. – Vol. 21, Issue 172. – P. 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472
14. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction [Text] / R. Landauer // Journal of Mathematical Physics. – 1996. – Vol. 37, Issue 10. – P. 5259. doi: 10.1063/1.531590
15. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела. Т. 1 [Текст] / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М: Мир, 1979. – 400 с.
16. Sears, F. W. Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics [Text] / F. W. Sears, G. L. Salinger. – Boston: Addison-Wesley, 1975. – P. 331–336; 355–361.
17. Kubo, R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems [Text] / R. Kubo // Journal of the Physical Society of Japan. – 1957. – Vol. 12, Issue 6. – P. 570–586. doi: 10.1143/jpsj.12.570
18. Кругляк, Ю. О. Уроки нанозлектроніки: Виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу-вгору» [Текст] / Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стріха // Сенсор. електр. мікросист. техн. – 2012. – Т. 9, № 4. – С. 5–29.
19. Кругляк, Ю. А. Обобщенная модель транспорта электронов и тепла Ландауэра-Датты-Лундстрорма в микро-

и нанoeлектронике [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2014. – Т. 5, № 3 (5). – С. 21–38. doi: 10.15587/2313-8416.2014.30726

20. Lundstrom, M. Nanoscale Transistors: Physics, Modeling, and Simulation [Text] / M. Lundstrom, J. Guo. – Berlin: Springer, 2006. – 300 p.

21. Nazarov, Y. V. Quantum Transport. Introduction to nanoscience [Text] / Y. V. Nazarov, Y. M. Blanter. – Cambridge: Cambridge University Press, 2009. – 590 p.

22. Berg, H. C. Random walks in biology [Text] / H. C. Berg. – Princeton: Princeton University Press, 1993. – 152 p.

23. Кругляк, Ю. А. Учет рассеяния в транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрема [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 3, № 2 (8). – P. 99–107. doi: 10.15587/2313-8416.2015.38848

24. Стріха, М. В. Фізика графену: стан і перспективи [Текст] / М. В. Стріха // Сенсор. електр. мікросист. техн. – 2010. – Т. 7, № 3. – С. 5–13.

25. Кругляк, Ю. А. Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы [Текст] / Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк // Вісник Одеського держ. еколог. ун-ту. – 2012. – Вып. 13. – С. 207–218.

26. Bolotin, K. I. Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene [Text] / K. I. Bolotin, K. J. Sikes, J. Hone, P. Kim, H. L. Stormer // Physical Review Letters. – 2008. – Vol. 101, Issue 9. doi: 10.1103/physrevlett.101.096802

27. Baheti, K. Probing the Chemistry of Molecular Heterojunctions Using Thermoelectricity [Text] / K. Baheti, J. A. Malen, P. Doak, P. Reddy, S.-Y. Jang., T. D. Tilley, A. Majumdar, R. A. Segalman // Nano Letters. – 2008. – Vol. 8, Issue 2. – P. 715–719. doi: 10.1021/nl072738l

28. Анатыхчук, Л. И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства [Текст] / Л. И. Анатыхчук. – Киев: Наукова думка, 1979. – 768 с.

29. Onsager, L. Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I [Text] / L. Onsager // Physical Review. – 1931. – Vol. 37, Issue 4. – P. 405–426. doi: 10.1103/physrev.37.405

30. Hopkins, P. E. Anharmonic Phonon Interactions at Interfaces and Contributions to Thermal Boundary Conductance [Text] / P. E. Hopkins, J. C. Duda, P. M. Norris // Journal of Heat Transfer. – 2011. – Vol. 133, Issue 6. – P. 062401. doi: 10.1115/1.4003549

31. Chen, G. Thermal conductivity and ballistic-phonon transport in the cross-plane direction of superlattices [Text] / G. Chen // Physical Review B. – 1998. – Vol. 57, Issue 23. – P. 14958–14973. doi: 10.1103/physrevb.57.14958

32. Chiu, H.-Y. Ballistic Phonon Thermal Transport in Multi-Walled Carbon Nanotubes [Text] / H.-Y. Chiu, V. V. Deshpande, H. W. Ch Postma., C. N. Lau, C. Mikó, L. Forró, M. Bockrath // Physical Review Letters. – 2005. – Vol. 95, Issue 22. – P. 226101. doi: 10.1103/physrevlett.95.226101

33. Zuckerman, N. Atomistic Visualization of ballistic phonon transport [Text] / N. Zuckerman, J. R. Lukes // ASME/JSME 2007 Thermal Engineering Heat Transfer Summer Conference. – 2007. – Vol. 2. – P. 825–833. doi: 10.1115/ht2007-32674

34. Nolas, G. S. SKUTTERUDITES: A Phonon-Glass-Electron Crystal Approach to Advanced Thermoelectric Energy Conversion Applications [Text] / G. S. Nolas, D. T. Morelli, T. M. Tritt // Annual Review of Materials Science. – 1999. – Vol. 29, Issue 1. – P. 89–116. doi: 10.1146/annurev.matsci.29.1.89

35. Min, G. A serious limitation to the phonon glass electron crystal (PGEC) approach to improved thermoelectric materials [Text] / G. Min, D. M. Rowe // J. Mater. Sci. Lett. – 1999. – Vol. 18, Issue 16. – P. 1305–1306.

36. Nanohub group [Electronic resource]. – 2012. – Available at: <https://nanohub.org/groups/u>

37. PurdueX [Electronic Resource]. – 2015. – Available at: <https://www.edx.org/school/purdue>

References

1. Mitin, V. V., Kochelap, V. A., Stroschio, M. A. (2012). Introduction to Nanoelectronics: Science, Nanotechnology, Engineering, and Applications. Cambridge: Cambridge University Press, 346.

2. Hoefflinger, B. (2012). Chips 2020: A Guide to the Future of Nanoelectronics (Frontiers Collection). Berlin: Springer-Verlag, 505.

3. Martines-Duart, Dzh. M., Martin-Palma, R. Dzh., Agullo-Rueda, F. (2007). Nanotehnologii dlia mikro- i optoelektroniki. Moskva: Tehnosfera, 368.

4. Dragunov, V. P., Neizvestnyi, I. G., Gridchin, V. A. (2006). Osnovy nanoelektroniki. Moscow: Logos, 496.

5. Network for Computational Nanotechnology. Available at: <http://nanohub.org/>

6. Smit, R. H. M., Noat, Y., Untiedt, C., Lang, N. D., van Hemert, M. C., van Ruitenbeek, J. M. (2002). Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. Nature, 419 (6910), 906–909. doi: 10.1038/nature01103

7. Supriyo, D. (2001). Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 377.

8. Supriyo, D. (2005). Quantum Transport: Atom to Transistor. Cambridge: Cambridge University Press, 404.

9. Electronics from the Bottom Up: A New Approach to Nanoelectronic Devices. Available at: <http://nanohub.org/topics/ElectronicsFromTheBottomUp>

10. Supriyo, D. (2012). Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 473. Available at: <http://nanohub.org/courses/FoN1>

11. Lundstrom, M., Jeong, C. (2013). Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. Available at: <https://nanohub.org/resources/11763>

12. Landauer, R. (1957). Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. IBM Journal of Research and Development, 1 (3), 223–231. doi: 10.1147/rd.13.0223

13. Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. Philosophical Magazine, 21 (172), 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472

14. Landauer, R. (1996). Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction (and comment). Journal of Mathematical Physics, 37 (10), 5259. doi: 10.1063/1.531590

15. Ashcroft, N., Mermin, N. (1979). Fizika tverdogo tela. Vol. 1. Moscow: Mir, 400.

16. Sears, F. W., Salinger, G. L. (1975). Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. Boston: Addison-Wesley, 331–336; 355–361.

17. Kubo, R. (1957). Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. Journal of the Physical Society of Japan, 12 (6), 570–586. doi: 10.1143/jpsj.12.570

18. Krugliak, Iu. O., Krugliak, N. Iu., Striha, M. V. (2012). Uroki nanoelektroniki: Viniknennia strumu, formuluvannia zakonu Oma i modi providnosti v kontseptsii «znizuvgoru». Sensor. elektr. mikrosist. tehn, 9 (4), 5–29.

19. Krugliak, Iu. A. (2014). Obobshchennaia model' transporta elektronov i tepla Landauera-Datty-Lundstroma v mikro- i nanoelektronike. ScienceRise, 5/3 (5), 21–38. doi: 10.15587/2313-8416.2014.30726

20. Lundstrom, M., Guo, J. (2006). Nanoscale Transistors: Physics, Modeling, and Simulation. Berlin: Springer, 300.

21. Nazarov, Y. V., Blanter, Y. M. (2009). Quantum Transport. Introduction to nanoscience. Cambridge: Cambridge University Press, 590.

22. Berg, H. C. (1993). Random walks in biology. Princeton: Princeton University Press, 152.

23. Krugliak, Iu. A. (2015). Uchet rasseianiia v transportnoi modeli Landauera-Datty-Lundstroma. ScienceRise, 3/2 (8), 99–107. doi: 10.15587/2313-8416.2015.38848
24. Striha, M. V. (2010). Fizyka grafenu: stan i perspektyvy. Sensor. elektr. mikrosyst. tehn., 7 (3), 5–13.
25. Krugliak, Iu. A., Krugliak, N. E. (2012). Metodicheskie aspekty rascheta zonnnoi struktury grafena s uchetom σ -ostova. Teoreticheskie osnovy. Visnik Odes'kogo derzh. ekolog. un-tu., 13, 207–218.
26. Bolotin, K. I., Sikes, K. J., Hone, J., Stormer, H. L., Kim, P. (2008). Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene. Physical Review Letters, 101 (9). doi: 10.1103/physrevlett.101.096802
27. Baheti, K., Malen, J. A., Doak, P., Reddy, P., Jang, S.-Y., Tilley, T. D., Segalman, R. A. (2008). Probing the Chemistry of Molecular Heterojunctions Using Thermoelectricity. Nano Lett., 8 (2), 715–719. doi: 10.1021/nl072738l
28. Anatyshuk, L. I. (1979). Termoelementy i termoelktricheskie ustroistva. Kiev: Naukova dumka, 768.
29. Onsager, L. (1931). Reciprocal Relations in Irreversible Processes I. Physical Review, 37 (4), 405–426. doi: 10.1103/physrev.37.405
30. Hopkins, P. E., Duda, J. C., Norris, P. M. (2011). Anharmonic Phonon Interactions at Interfaces and Contributions to Thermal Boundary Conductance. Journal of Heat Transfer, 133 (6), 062401. doi: 10.1115/1.4003549
31. Chen, G. (1998). Thermal conductivity and ballistic-phonon transport in the cross-plane direction of superlattices. Physical Review B, 57 (23), 14958–14973. doi: 10.1103/physrevb.57.14958
32. Chiu, H.-Y., Deshpande, V. V., Postma, H. W. C., Lau, C. N., Mikó, C., Forró, L., Bockrath, M. (2005). Ballistic Phonon Thermal Transport in Multiwalled Carbon Nanotubes. Physical Review Letters, 95 (22). doi: 10.1103/physrevlett.95.226101
33. Zuckerman, N., Lukes, J. R. (2007). Atomistic Visualization of ballistic phonon transport. ASME/JSME 2007 Thermal Engineering Heat Transfer Summer Conference, 2, 825–833. doi: 10.1115/ht2007-32674
34. Nolas, G. S., Morelli, D. T., Tritt, T. M. (1999). Skutterudites: A Phonon-Glass-Electron Crystal Approach to Advanced Thermoelectric Energy Conversion Applications. Annual Review of Materials Science, 29 (1), 89–116. doi: 10.1146/annurev.matsci.29.1.89
35. Min, G., Rowe, D. M. (1999). A serious limitation to the phonon glass electron crystal (PGEC) approach to improved thermoelectric materials. J. Mater. Sci. Lett, 18 (16), 1305–1306.
36. Nanohub group (2012). Available at: <https://nanohub.org/groups/u>
37. PurdueX (2015). Available at: <https://www.edx.org/school/purdueX>

*Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.
Дата надходження рукопису 22.06.2015*

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