

Ю. А. Кругляк

НАНОЭЛЕКТРОНИКА
«СНИЗУ – ВВЕРХ»

$$I = \frac{2q}{h} \int T(E) M(E) (f_1(E; E_{F1}, T_1) - f_2(E; E_{F2}, T_2)) dE$$

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{F1})/kT_1} + 1} \quad f_2(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{F2})/kT_2} + 1}$$

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L} \Rightarrow \begin{cases} L \gg \lambda & ; & T \ll 1 \\ L \approx \lambda & ; & T < 1 \\ L \ll \lambda & ; & T \rightarrow 1 \end{cases}$$

$$M(E) = \begin{cases} M_{1D}(E) = \frac{h}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{1D}(E) \\ WM_{2D}(E) = W \frac{h}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E) \\ AM_{3D}(E) = A \frac{h}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E) \end{cases}$$

$$G \equiv \frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E) \quad R = \rho(L + \lambda) \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}$$

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

Ю. А. Кругляк

**НАНОЭЛЕКТРОНИКА
«СНИЗУ-ВВЕРХ»**

**Одесса
ТЭС
2015**

ББК 22.332

УДК 537.32

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

К 840 Кругляк, Юрий Алексеевич

Нанoeлектроника «снизу - вверх» /Ю.А.Кругляк. - Одесса: ТЭС, 2015 - 536 стр.; 276 рис.; 3 табл.; 505 лит.

ISBN 978-617-7337-15-6

Книга посвящена современной нанoeлектронике в концепции «снизу - вверх», основы которой были заложены еще Рольфом Ландауэром, а ныне активно развиваемой Суприе Даттой, Марком Лундстромом и другими исследователями. Подробно рассмотрена обобщенная модель транспорта электронов и переноса тепла в микро- и нанoeлектронике, одинаково пригодная для 0D, 1D, 2D и 3D резисторов произвольного масштаба, характеризуемых любой наперед заданной дисперсией и работающих в баллистическом, диффузионном и промежуточных режимах. В первой части рассматривается классический транспорт, а во второй — квантовый, включая начала спинтроники, магнетроники и молекулярной электроники, на основе метода неравновесных функций Грина в матричном представлении вплоть до квантовой природы классики.

Книга предназначена прежде всего для студентов, магистрантов, аспирантов и преподавателей университетов естественно-научного профиля, как физиков, химиков, так и будущих электроинженеров. Чтобы сделать книгу доступной даже студентам младших курсов, пожалуй, достаточно знать лишь основы линейной алгебры и дифференциальных уравнений, а в области физики понадобятся лишь самые начальные сведения из квантовой механики. Вместе с тем в книге используются новые подходы в преподавании весьма сложных разделов общей физики, что позволило включить в книгу новейшие результаты в области нанofизики, в частности, спинтроники, мало известные русскоязычной университетской аудитории.

ББК 22.332

УДК 537.32

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

ISBN 978-617-7337-15-6

Содержание

Предисловие

I. Обобщенная модель транспорта электронов и переноса тепла в микро- и нанoeлектронике

Глава 1. Обобщенная модель электронного транспорта

1.1. Концепция «снизу - вверх» в современной нанoeлектронике	15
1.2. Причины возникновения электрического тока	19
1.2.1. Роль фермиевских функций	22
1.2.2. Квазиравновесный транспорт электронов	24
1.3. Модель электронного транспорта Ландауэра - Датты - Лундстрема	27
1.3.1. Число электронов и ток в проводнике	28
1.3.2. Моды проводимости	31
1.3.3. Коэффициент прохождения	36
1.3.4. Режим линейного отклика	39
1.3.5. Транспорт в массивных проводниках	40
1.3.6. Баллистический и диффузионный режимы проводимости	43
1.3.6.1. 2D Баллистические резисторы	44
1.3.6.2. Широкие 2D баллистические резисторы при $T=0^\circ K$	46
1.3.6.3. Широкие 2D баллистические резисторы при $T>0^\circ K$	46
1.3.6.4. Интегралы Ферми-Дирака	48
1.3.6.5. 2D диффузионные резисторы	49
1.3.6.6. Широкие 2D диффузионные резисторы при $T=0^\circ K$	49
1.3.6.7. Широкие 2D диффузионные резисторы при $T>0^\circ K$	50
1.3.7. О понятии подвижности электронов	51
1.3.8. Способы записи 2D проводимости	54
1.3.9. Диссипация мощности в баллистических резисторах	56
1.3.10. Падение напряжения в баллистических резисторах	57
1.3.11. 1D и 3D резисторы	58
1.3.12. Модель упругого резистора в концепции Ландауэра - Датты	61
1.3.12.1. Диссипация тепла упругим резистором	65
1.3.12.2. Модель упругого резистора и макропроводники	66
1.3.12.3. Баллистический и диффузионный режимы	67
1.3.12.4. О модах проводимости в общем случае	71
1.3.12.5. Фундаментальное соотношение	72

1.3.12.6. Дисперсии $E(p)$ для кристаллических твердых тел	75
1.3.12.7. Еще раз о формуле Друде	77
1.3.12.8. Пропорциональна ли электропроводимость электронной плотности?	80
1.3.12.9. Квантование проводимости и целочисленность мод проводимости	82
Литература	84
Глава 2. Обобщенная модель переноса тепла	
2.1. Термоэлектрические явления и устройства	89
2.1.1. Эффект Зеебека	90
2.1.2. Эффект Пельтье	94
2.1.3. Термоэлектрические устройства	98
2.2. Термоэлектрические коэффициенты	104
2.2.1. «Движущие силы» электрического тока	105
2.2.2. Ток в массивных проводниках	109
2.2.3. Перенос тепла электронами	110
2.2.4. Обращенная форма транспортных уравнений	111
2.2.5. Транспортные коэффициенты для 1D проводников	112
2.2.6. Закон Видемана - Франца и числа Лоренца	117
2.2.7. Полупроводники p-типа и биполярная проводимость	118
2.2.8. Транспортные коэффициенты для 3D проводников в диффузионном режиме	120
2.2.9. Коэффициент Зеебека в вырожденном пределе: формула Мотта	127
2.2.10. Анализ экспериментальных данных для Ge: коэффициент Зеебека и термоэлектрические коэффициенты	123
2.2.11. Термоэлектрические коэффициенты для 1D, 2D и 3D проводников с параболической дисперсией	126
2.2.11.1. Термоэлектрические коэффициенты для 1D баллистических резисторов	127
2.2.11.2. Термоэлектрические коэффициенты для 1D диффузионных резисторов	127
2.2.11.3. Термоэлектрические коэффициенты для 2D баллистических резисторов	128
2.2.11.4. Термоэлектрические коэффициенты для 2D диффузионных резисторов	128

2.2.11.5. Термоэлектрические коэффициенты для 3D баллистических резисторов	129
2.2.11.6. Термоэлектрические коэффициенты для 3D диффузионных резисторов	129
2.3. Перенос тепла фононами	130
2.3.1. Элементарная физика фононов	130
2.3.2. Обобщенная модель переноса тепла фононами	133
2.3.2.1. Теплопроводность массивных проводников	137
2.3.2.2. Удельная теплоемкость	138
2.3.2.3. Средняя длина свободного пробега и коэффициент прохождения	139
2.3.2.4. Плотность фононных состояний и фононные моды	142
2.3.2.5. Дебаевская модель	146
2.3.2.6. Рассеяние фононов	148
2.3.2.7. Температурная зависимость теплопроводности	149
2.3.2.8. Различие между решеточной теплопроводностью и электрической проводимостью	150
2.3.2.9. Квантование теплопроводности	150
2.3.3. Термоэлектричество «снизу - вверх» в концепции Ландауэра - Датты	
2.3.3.1. Еще раз о коэффициенте Зеебека	154
2.3.3.2. О показателях качества ТЭ устройств и материалов	156
2.3.3.3. Перенос тепла электронами в концепции «снизу - вверх»	157
2.3.3.4. Квазиравновесный режим	159
2.3.3.5. Дельта-термоэлектрик	160
2.3.3.6. Оптимизация силового коэффициента	163
2.3.3.7. О транспорте тепла фононами в концепции «снизу - вверх»	165
2.3.3.8. Баллистический транспорт фононов	166
2.3.3.9. Фононная теплопроводность	167
Литература	170
Глава 3. Графен	
3.1. Элементарная теория зонной структуры графена	176
3.1.1. Обратная решетка и зона Бриллюэна графена	181
3.2. Плотность состояний и плотность носителей тока	183
3.3. Число мод и проводимость	184

3.4. Рассеяние в графене	185
3.5. Подвижность и формула Друде	187
3.6. Циклотронная частота в графене	187
3.7. Эффективная масса в графене	190
3.8. Плотность фононных состояний в графене	192
3.9. Вклад электронов и фононов в теплопроводность графена	193
3.10. Максимальная электрическая проводимость графена	195
3.11. Термоэлектрические коэффициенты графена	196
3.11.1. Баллистический режим	196
3.11.2. Диффузионный режим	197
Литература	198
Глава 4. Учет рассеяния в обобщенной транспортной модели	
4.1. Качественные аспекты физики рассеяния электронов	201
4.2. Коэффициент прохождения и средняя длина свободного пробега	206
4.3. Средняя длина свободного пробега и время рассеяния	208
4.4. Оценка усредненного значения средней длины свободного пробега из экспериментальных измерений	209
4.5. Оценка длины свободного пробега из коэффициента диффузии	210
4.6. Связь длины свободного пробега с подвижностью	212
4.7. Усредненная длина среднего свободного пробега для степенного закона рассеяния	213
4.8. Подвижность при постоянном значении времени рассеяния	213
4.9. Анализ экспериментальных данных для Si MOSFET	214
Литература	218

Глава 5. Обобщенная модель переноса и транспортное уравнение Больцмана

5.1. Транспортное уравнение Больцмана	219
5.2. Решение уравнения Больцмана в режиме динамического равновесия	223
5.3. Вычисление транспортных коэффициентов	224
5.4. Учет магнитного поля	230
Литература	237

Глава 6. Измерение электрофизических свойств

6.1. Методы измерения сопротивления (проводимости)	241
6.2. Измерение эффекта Холла	243
6.2.1. Пример анализа результатов холловского эксперимента	245
6.3. Метод измерений ван дер Пау	246
6.4. Температурные измерения	251
6.4.1. Температурный артефакт при измерении эффекта Холла (эффект Нернста)	253
6.5. Измерения в сильных магнитных полях	255
6.5.1. Осцилляции Шубникова - де Гааза	259
Литература	261

Глава 7. Роль электростатики и контактов

7.1. Диффузия и дрейф	264
7.2. Уравнение диффузии для баллистического транспорта	265
7.3. Электрохимические потенциалы вдали от равновесия	271
7.4. Токи в режиме неравновесных потенциалов	274
7.5. Сопротивление R_{int} на границе контакта двух проводников с разным числом мод	275
7.6. Уравнение диффузии как следствие уравнения Больцмана	277
7.7. Эффекты при распространении тока по квантовой проволоке	282

7.8. Роль электростатики	287
7.8.1. Полевой транзистор	288
7.8.2. Ток стремится к насыщению	290
7.8.3. Роль заряжания проводника	292
7.8.3.1. Электростатический «выпрямитель»	295
7.8.4. Расширенная модель проводника	297
7.9. Контакты	300
7.9.1. <i>p-n</i> Переходы	301
7.9.2. Вольт-амперные характеристики	303
Литература	307
Глава 8. Термодинамика проводника с током	
8.1. Термодинамика проводника с током с учетом окружающей среды	309
8.2. Асимметрия процессов поглощения и излучения энергии	311
8.3. Энтропия	314
8.3.1. Энтропия всегда растет	316
8.3.2. Свободная энергия всегда уменьшается	317
8.4. Универсальный закон равновесия Больцмана	318
8.5. Состояния в пространстве Фока	320
8.5.1. Фермионы	320
8.5.2. Бозоны	321
8.5.3. Взаимодействующие электроны	322
8.6. Альтернативное выражение для энтропии	323
8.6.1. Равновесное распределение из минимума свободной энергии	325
8.7. Глобальная ценность информации	326
8.8. Информационно-управляемый аккумулятор	329
8.8.1. Важно знать детальную информацию	332
8.9. Принцип Ландауэра о минимуме энергии, необходимом для стирания одного бита информации	333
8.10. Демон Максвелла	334
Литература	336

II. Квантовый транспорт, спинтроника, магнетроника, молекулярная электроника и смежные вопросы

Глава 9. Спинтроника и магнетроника

9.1. Введение	339
9.2. Граничное сопротивление и несовпадение мод проводимости	343
9.3. Спиновые потенциалы	346
9.3.1. Разность нелокальных спин-потенциалов	349
9.4. Спиновый момент	352
9.5. Уравнение Ландау — Лифшица - Гильберта	353
9.5.1. Выделенная ось магнита	355
9.6. Обращение намагниченности спиновым током	357
9.7. Поляризаторы и анализаторы спинового тока	358
Литература	360

Глава 10. Метод неравновесных функций Грина

10.1. Квантовый транспорт	363
10.2. Уравнения метода НРФГ в матричном представлении	366
10.3. Одноуровневый резистор: полуклассический подход	369
10.4. Одноуровневый резистор: квантовый подход	371
10.5. Квантовое уширение	374
10.6. Интерференция источников поступления электронов в резистор	375
10.7. Квантовый транспорт по многоуровневому проводнику	376
10.8. Функция проводимости для когерентного транспорта	381
10.9. Модельные транспортные задачи	383
10.9.1. Моделирование 1D проводника	383
10.9.1.1. Баллистический 1D проводник	387
10.9.1.2. Плотность состояний 1D проводника	388
10.9.1.3. 1D проводник с одним рассеивающим центром	389

10.9.2. Моделирование однородного 2D проводника	392
10.9.2.1. Контактные собственные энергии для 2D проводника	398
10.9.3. Графен как пример неоднородного 2D проводника	400
10.9.4. Общий подход к построению контактных матриц	404
10.9.5. Баллистическая проводимость графена	408
10.10. Дефазировка	409
10.10.1. Упругая дефазировка	411
10.10.2. 1D проводник с двумя и более рассеивающими центрами	413
10.10.3. Скачок потенциала на дефектах	417
Литература	421
Глава 11. Эффекты Холла, измерение электрохимических потенциалов, транспорт спинов в модели НРФГ и квантовая природа классики	
11.1. Эффекты Холла	425
11.2. Почему отличаются между собой <i>n</i> - и <i>p</i> -проводники?	429
11.3. Пространственный профиль электрохимического потенциала	430
11.4. Измерение электрохимических потенциалов	434
11.4.1. Формулы Ландауэра	438
11.4.2. Формула Бюттекера	441
11.4.2.1. Не тривиально ли уравнение Бюттекера?	445
11.5. Измерение потенциала Холла	446
11.6. Квантовый эффект Холла и краевые состояния в графене	449
11.7. Формула Кубо	457
11.7.1. Формула Кубо для упругого резистора	460
11.8. Невзаимные электрические цепи	463
11.8.1. Соотношения Онзагера	464
11.9. Спиновое представление	466
11.9.1. Одноуровневый спиновый вентиль	470
11.9.2. Вращение магнитных контактов	474
11.10. Спиновые гамильтонианы	476
11.10.1. Гамильтониан с зеэмановским расщеплением	476
11.10.2. Гамильтониан Рашбы	477

11.11. Спиноры и векторы	478
11.12. Прецессия спина	482
11.13. Квантовый спиновый эффект Холла	485
11.14. Метод НРФГ и диффузионный транспорт	486
11.14.1. Электронная плотность в матричном представлении	487
11.14.2. Измерение спинового потенциала	488
11.14.3. Транспорт спинов в четырехкомпонентном формате	489
11.15. Квантовая природа классики	492
11.15.1. Спиновая когерентность	492
11.15.2. Псевдоспин	494
11.15.3. Квантовая энтропия	496
11.15.4. Сколько информации переносит один электрон?	497
11.15.5. Увеличивает ли энтропию взаимодействие частиц?	498
11.15.6. Спины и магниты	499
Литература	500
Глава 12. Кулоновская блокада и одноэлектронный нанотранзистор на молекуле бензола	
12.1. За пределами метода НРФГ	505
12.2. Кулоновская блокада в одноэлектронике	506
12.2.1. Вольт-амперные характеристики	509
12.2.2. Моделирование заряжания проводника в пространстве Фока	510
12.2.3. Вычисление тока в фоковском пространстве	513
12.3. Одноэлектронный транзистор на молекуле бензола	515
12.3.1. Элементарная теория SET	517
12.3.2. Условия переноса электрона с истока на сток	520
12.3.3. Формализм теории функционала плотности	521
12.3.3.1. Учет внешнего электростатического поля	524
12.3.4. Результаты расчетов	526
Литература	532