

**Міністерство освіти і науки України
Запорізька державна інженерна академія**



**С.І. Павлик
Є.І. Зубко**

Основи наноелектроніки
Навчально-методичний посібник
для студентів спеціальності 6.050801
«Мікро- та наноелектроніка»

Запоріжжя
2012

**Міністерство освіти і науки України
Запорізька державна інженерна академія**

**С.І. Павлик
Є.І. Зубко**

Основи наноелектроніки
Навчально-методичний посібник
для студентів спеціальності 6.050801
«Мікро- та наноелектроніка»

*Рекомендовано до видання
на засіданні кафедри ФБМЕ
протокол №19 від 07.05.2012*

Запоріжжя
2012

*С.І. Павлик, к.ф.-м.н. – доцент
Є.І. Зубко - асистент*

Відповідальний за випуск: *завідувач кафедру ФБМЕ
професор Швець Є.Я.*

Рецензенти:

*Г.В. Корніч, д.ф.м.н, професор, завідувач кафедру системного аналізу та
обчислювальної математики ЗНТУ;*

Міхайлін В.М. д.т.н. професор, ЗДІА

Павлик С.І., Зубко Є.І.

Основи наноелектроніки. Навчально-методичний посібник для студентів спеціальності 6.05080102 «Мікро-та наноелектроніка»/ С.І. Павлик, Є.І. Зубко - Запоріжжя: ЗДІА, 2012. – 50с.

Навчально-методичний посібник призначено для студентів спеціальності 6.05080102 «Мікро-та наноелектроніка» по дисципліні «Основи наноелектроніки». В даному посібнику викладено базові сучасні відомості по теорії електронної провідності наноелектронних пристроїв.

Зміст

ВСТУП.....	4
1. ЕЛЕМЕНТИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ.....	5
1.1. СВІТЛО. КВАНТУВАННЯ	6
1.2. ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ	7
1.3. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА	9
1.4. СТАН ОДНІЄЇ ЧАСТИНКИ.....	11
1.5. РОЗСПІВАННЯ НА ПОТЕНЦІЙНОМУ БАР'ЄРІ.....	17
2. ЕЛЕКТРОННА ПРОВІДНІСТЬ НАНОСТРУКТУР	19
2.1. МОДЕЛЬ ДРУДЕ. КЛАСИЧНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОЇ ПРОВІДНОСТІ	20
2.2. КВАНТОВА МОДЕЛЬ ВІЛЬНИХ ЕЛЕКТРОНІВ.....	22
2.3. РЕЖИМИ ПЕРЕНОСУ ЗАРЯДУ В НАНОСТРУКТУРАХ	29
2.4. ОПІР БАЛІСТИЧНОГО ПРОВІДНИКА	30
2.5. КВАНТОВИЙ КРАПКОВИЙ КОНТАКТ	39
2.6. ОПІР НАНОПРОВІДНИКА. ФОРМУЛА ЛАНДАУЕРА.....	41
2.7. НАНОПРОВІДНИК З БАГАТЬМА ДОМІШКАМИ.....	45
ВИСНОВОК.....	48
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	50

Вступ

Сучасна технологія відрізняється упором на мініатюризацію. Мабуть, самим яскравим прикладом є електроніка, де чудовий технічний прогрес насамперед пов'язаний зі скороченням розмірів транзисторів, що приводить до можливості збільшення числа транзисторів на інтегральній мікросхемі. Чим більше транзисторів на чипі, тим більше складні інтегральні схеми. За останні 35 років інженери збільшили складність інтегральних схем більш ніж на п'ять порядків. Це чудове досягнення змінило сучасне суспільство. Зокрема, найчастіше різноманітні механічні пристрої мають половину своєї вартості саме в електроніці. †

Тенденції в електроніці до стійкого росту складності відзначив Гордон Мур, один із засновників корпорації Intel. Одноименний закон Мура говорить, що складність інтегральних схем, стосовно мінімальної вартості компонентів, подвоюється приблизно через 18 місяців. Як видно з малюнка 1(а), згодом «закон» Мура виявила себе дуже добре.

Тенденція до мініатюризації приводить до зменшення розмірів транзисторів і провідників, вивчення й розрахунок яких вимагає залучення більше просунутих теоретичних концепцій. Оскільки розмір сучасних електронних компонентів виходить на нанорівень ($1\text{нм}=10^{-9}\text{м}$), стає важливим облік хвильових властивостей окремих носіїв заряду, що призводить до більш широкого застосування методів квантової механіки. Отже, наноелектроніка - електроніка на наномасштабах.

У даному посібнику викладено базові відомості, що стосуються методів розрахунку наноструктур. Основну увагу зосереджено на розгляді електричної провідності. Оскільки тут вже працює квантова механіка, яка стає робочим інструментом сучасного інженера, ми виклали ряд її основних положень.

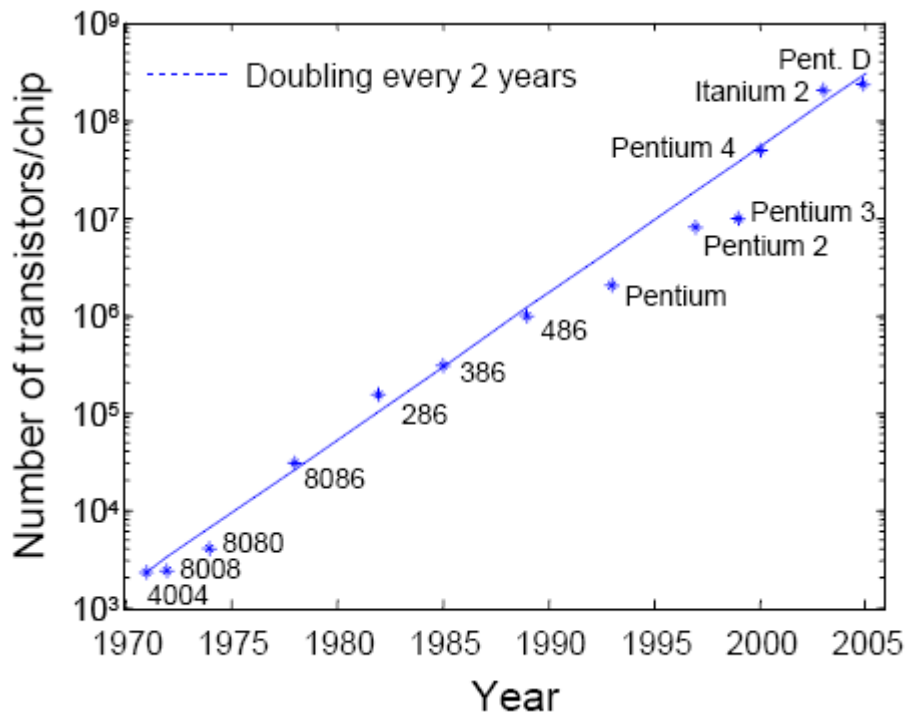


Рис. 1(а). Кількість транзисторів у процесорах фірми INTEL як функція часу

1. Елементи квантової механіки

У введенні було зазначено, що розмір сучасних електронних пристроїв виходить на нанорівень. Так деякі процесори виготовлені по 20 нм технології й менш. Це не означає, що, наприклад, такий розмір має кожний структурний елемент схеми. Отут скоріше говориться про масштаби провідників і контактів. Проте, якщо говорити про подібні масштаби, то для опису виникаючих явищ необхідно керуватися іншими правилами, ніж закони класичної фізики. Тут уже працює квантова механіка. Квантова механіка - фундаментальна наука, що вивчає властивості дрібних часток речовини. Її закони описують поведження електронів, атомів або молекул і здаються досить дивними, непоясненими з погляду здорового глузду. Те, що справедливо у світі звичайних тіл, з якими ми маємо справу в техніку або повсякденному житті, нерідко виявляється невірним у світі атомів.

Донедавна інженери - розроблювачі електронних приладів - у своїх розрахунках використовували тільки закони класичної фізики. І це було

цілком виправдано, оскільки, наприклад, у звичайному кінескопі телевізора електрони рухаються так само, як класичні матеріальні крапки - біліардні кулі або м'ячі. У сучасному мікропроцесорі комп'ютера рух мікроскопічних електронів також подібно руху класичних тел. Однак ситуація міняється. Логіка розвитку сучасної напівпровідникової електроніки така, що інтегральні схеми стають усе більше складними й поєднують все більше число елементів. Дотепер виготовлювачам інтегральних схем вдавалося збільшувати щільність розміщення транзисторів, діодів і інших елементів за рахунок зменшення їхніх розмірів. Імовірно, що в недалекому майбутньому ці розміри стануть порядку декількох часток мікрона. У той момент, коли це відбудеться, опис мовою класичної фізики втратить усякий зміст і творці електронних приладів будуть змушені звернутися до квантової механіки.

Не чекаючи цього моменту, фізики вже нагромадили великий досвід у розробці приладів, дія яких засноване на квантовомеханічних принципах. Укладаючи атоми з точністю до одного-двох шарів, вони можуть створювати штучні кристали, молекули й навіть атоми із заданими властивостями. Такі напівпровідникові структури мають розміри в кілька нанометрів або кілька десятків ангстрем. Хоча зазначені розміри ще перевищують розміри справжніх атомів, електрони в цих структурах поведуться як квантові об'єкти. Можна виділити три основних типи мікроструктур: *квантові ями, нитки й крапки*, причому останні іноді називають штучними атомами. Вивчення цих структур не тільки відкриває нові сторінки електронної інженерії, але й супроводжується відкриттями фундаментального характеру.

1.1. Світло. Квантування

Світло – електромагнітна хвиля. Напруженість електричного поля хвилі, яка розповсюджується $\propto e^{i(kx-\omega t)}$, де $k = 2\pi/\lambda$ - хвильове число, λ -

довжина хвилі, $\omega = 2\pi\nu$ - частота ($[\nu] = \text{Гц}$), $\nu = c/\lambda$, c - швидкість світла. Насправді, хвильове число – векторна величина, що показує напрямок поширення хвилі. Знайдемо швидкість хвилі. Для цього фіксуємо крапку постійної фази $\varphi = kx - \omega t$ й будемо стежити за її переміщенням. За час Δt ця крапка перемістилася на відстань Δx , при цьому, у силу умови сталості фази, $\Delta\varphi = 0$. Таким чином, $\Delta\varphi = 0 = k\Delta x - \omega\Delta t$ або $\Delta x/\Delta t = \omega/k > 0$ - фазова швидкість хвилі. Як легко переконатися, для електромагнітної хвилі швидкість дорівнює швидкості світла. Хвиля поширяється праворуч, оскільки $\omega/k > 0$. З іншого боку, хвиля $e^{-i(kx+\omega t)}$ - ліворуч.

У квантовій механіці енергія електромагнітної хвилі приймає ряд дискретних значень $nh\nu = n\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$ - кількість квантів, $h = 4,1357 \cdot 10^{-15} \text{ еВ} \cdot \text{с}$ – постійна Планка ($\hbar = h/2\pi$). Квант електромагнітного поля (фотон) має енергію $\hbar\omega$ й імпульс $\hbar k = h/\lambda$. Звичайно вважається, що в елементарних процесах число квантів змінюється на ± 1 . Наприклад, електрон в атомі переходить із більше високого рівня з енергією E_2 на більше низький E_1 , народжується один фотон $\hbar\omega = E_2 - E_1$. Далі, використовуючи аналогію з картиною квантування світла, перейдемо до опису квантового миру матеріальних часток.

1.2. Хвильова функція

При проходженні світла через дві щілини, які вирізано в площині, на екрані спостерігається картина із темних та світлих смуг, що виникають через інтерференцію двох хвильових пучків. Як виявилось, така ж картина буде спостерігатися при розсіюванні електронів на двох щілинах (див. Рис. 1.).

Таким чином, електрони демонструють, поряд з корпускулярними, хвильові властивості. Це так званий «корпускулярно-хвильовий дуалізм».

Для опису хвильових властивостей електронів необхідно ввести підходящий математичний апарат - квантову механіку.

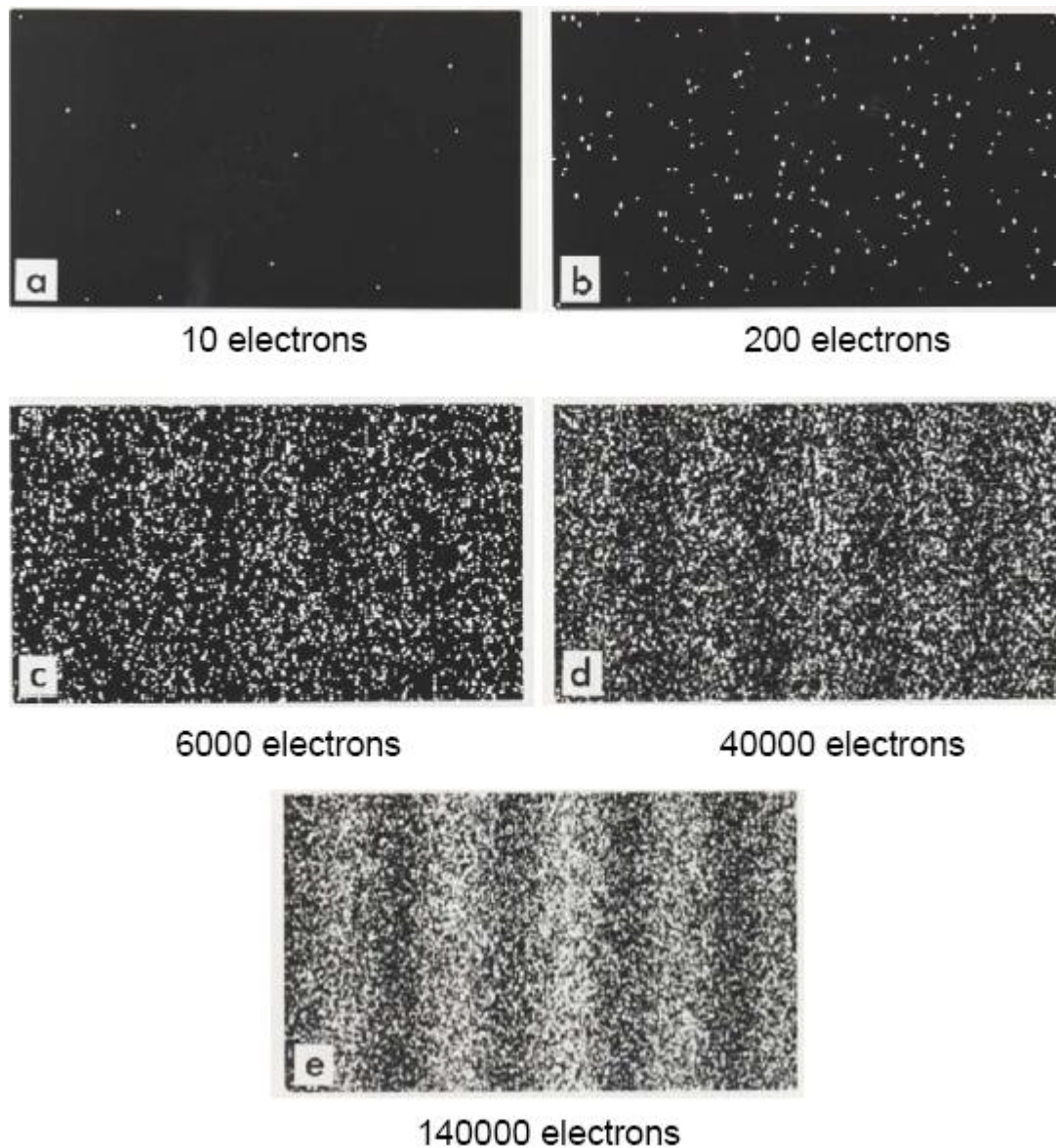


Рис 1. Розподіл електронів залежно від їхньої кількості при проходженні через дві вертикальні щілини.

Дотримуючись законів квантової механіки, уведемо хвильову функцію - $\psi(x,t)$. Це комплексна функція, причому квадрат модуля $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$ - є щільність імовірності розподілу електронів у крапці x в момент часу t . Якщо хвильова функція описує один

електрон, імовірність знаходження електрона в системі буде дорівнює одиниці. Звідси витікає умова нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1. \quad (1)$$

Далі, природно припустити, що хвильова функція $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ описує електрон з енергією $E = \hbar\omega$ й імпульсом $p_x = \hbar k = h/\lambda$. У загальному випадку, вектор $\vec{p} = \hbar(k_x, k_y, k_z)$, тоді під експонентою коштує скалярний добуток $\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z = |\vec{k}| |\vec{r}| \cos \theta$, і хвильова функція описує електрон, який рухається в напрямку вектора \vec{k} .

1.3. Рівняння Шредінгера

Тепер, коли ми ввели поняття хвильової функції, необхідно визначити рівняння, якому воно підкоряється. У попередньому розділі наведено вираз для хвильової функції вільної частки $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$, використовуючи яке можна трактувати досвіди із спостереження інтерференції на двох щілинах. Давайте подивимося, як одержати із хвильової функції імпульс $p_x = \hbar k = h/\lambda$ і енергію $E = \hbar\omega$. Нагадаємо, що для вільної частки кінетична енергія $E = mv^2/2 = p^2/2m$, де v - швидкість. Для цього помітимо, що

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) &= \hbar k A e^{i(kx-\omega t)} = p \psi(x,t), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} A e^{i(kx-\omega t)} = \frac{p^2}{2m} \psi(x,t) = E \psi(x,t), \end{aligned} \quad (2)$$

Таким чином,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hbar \omega A e^{i(kx - \omega t)} = E \psi(x,t), \quad (2a)$$

Порівнюючи (2) і (2a), одержимо рівняння Шредінгера для вільної частки

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (3)$$

Зовнішня потенційна енергія приводить до зміни повної енергії частинки $E = mv^2/2 + U(x) = p^2/2m + U(x)$. У результаті маємо рівняння Шредінгера для частинки в потенційному полі $U(x)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x,t) = E \psi(x,t) \quad (4)$$

Помітимо, що (4) - стаціонарне рівняння Шредінгера, оскільки потенційна енергія не залежить від часу, при цьому залежність хвильової функції від часу має вигляд: $e^{-i(E/\hbar)t}$. Узагальнення на простір більш високої розмірності (наприклад, 3D - тривимірне): $\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$.

Якщо задано потенціал, рішення рівняння (4) можна знайти аналітично або чисельно. У результаті, знаходимо власні функції $\psi(x,t)$ й набір власних значень E . Рівняння Шредінгера – диференціальне рівняння другого порядку. Щоб одержати рішення, необхідно задати систему граничних умов для самої хвильової функції і її першої похідної.

1.4. Стан однієї частинки

Для вільної частинки граничні умови, що накладаються на хвильову функцію, задаються залежно від фізичної картини досліджуваного об'єкта. Поки що ми розглянемо, у яких станах може перебувати одна частинка, а в наступних розділах перейдемо до питання про заселення цих станів. Оскільки в рамках елементарної картини передбачається, що електрони не взаємодіють один з одним, то питання про знаходження хвильової функції й енергії електронів має першорядну важливість.

У наноелектроніці звичайно зіштовхуються із трьома типами приладів, структурна геометрія яких зводиться до показаного на рис. 2.

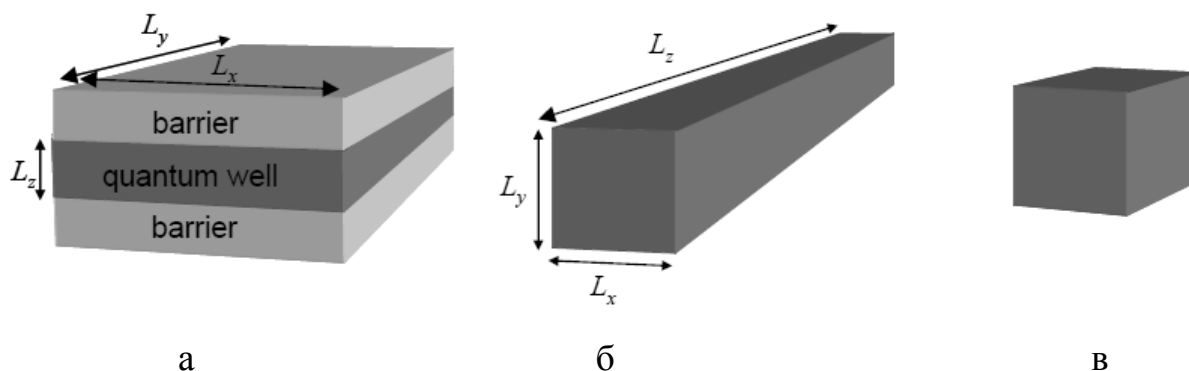


Рис. 2. (а) - квантова яма; (б) - квантовий провідник; (в) - квантова крапка.

Квантова яма. У квантових ямах (а), рух електронів обмежено тільки в одному вимірі (у цьому випадку по осі z). Квантові ями звичайно одержують шляхом напильовання на шар речовини (звичайно, напівпровідник) інших матеріалів з більше меншою шириною забороненої зони (див. рис. 3.).

На рис. 3. показано рельєф потенційної енергії, що відповідає дну зони провідності, нижче якої перебуває заборонена зона. Привернемо увагу, що на малюнку зображено дві потенційні ями, на основі сполук GaAs і $Al_xGa_{1-x}As$.

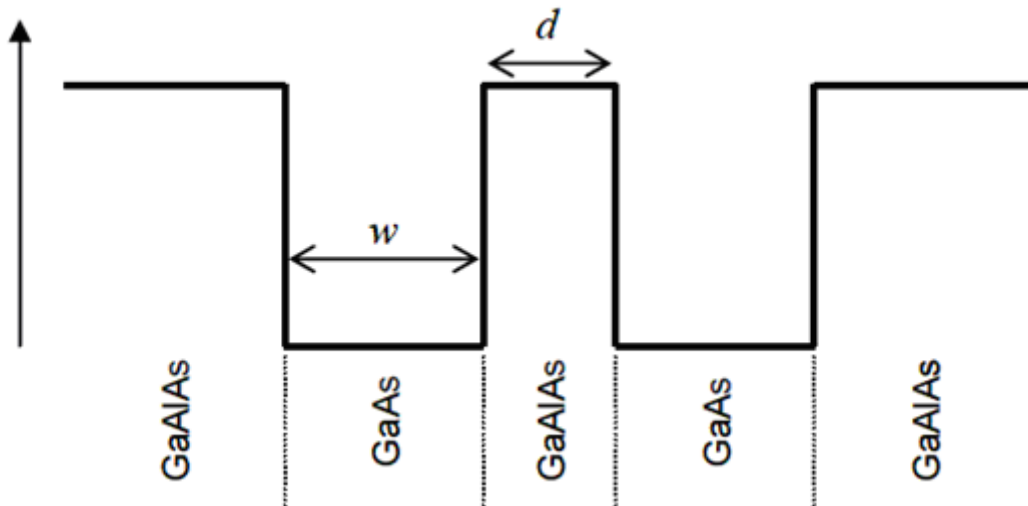


Рис. 3. Структура квантових ям.

Така шарувата структура (гетероструктура) звичайно вирощується за допомогою молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) або Мос-Гібридної епітаксії (газофазна епітаксія з металоорганічних сполук). Відомо, що ширина забороненої зони GaAs при кімнатній температурі близько 1.5 eV (точніше, 1.424 eV), а для потрібного розчину $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ зростає до 2.2 eV з ростом концентрації алюмінію x . Таким чином, якщо електрон попадає в область матеріалу з меншою шириною забороненої зони (GaAs), він там і утримується, вільно переміщаючись у поперечній до осі Z площині. Попутно нагадаємо, що по ряду деяких параметрів арсенід галію набагато перевершує інші напівпровідники сучасної електроніки, так, наприклад, він має більш високу рухливість електронів, що дозволяє приладам працювати на частотах до 250 ГГц. На жаль, по іншим фізичним характеристикам GaAs — більше тендітний і менш теплопровідний матеріал, чим кремній. Підложки з арсеніду галію набагато складніші для виготовлення й приблизно вп'ятеро дорожче, ніж кремнієві, що обмежує застосування цього матеріалу. До того ж токсичні властивості арсеніду галію детально не досліджені, але продукти його гідролізу токсичні (і канцерогенні).

Отже, розрахуємо поведження електрона у квантовій ямі, зображеної на рис. 2. У поперечному напрямку, площина XY, рух вільний, а в напрямку Z - обмежено потенційними бар'єрами. Природно припустити, що хвильова функція на границі яма-бар'єр повинна дорівнювати нулю. Іншими словами, імовірність знаходження частинки усередині бар'єра дорівнює нулю. Найбільш підходящий кандидат для такого рішення - $\sin k_z z$. Дійсно, синус у нулі є нуль. Отже, використовуючи хвильову функцію для вільної частинки з попереднього розділу, одержимо хвильову функцію частки у квантовій ямі

$$\psi(x, y, z) = A e^{i(k_x x + k_y y)} \sin k_z z, \quad (5)$$

де A визначається з умови нормування, див. (1). Із граничної умови $\psi(x, y, L_z) = \psi(x, y, 0) = 0$ витікає $k_z L_z = n_z \pi$, де $n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$. Відзначимо, що n_z всі позитивні, таким чином, позитивне й відповідне хвильове число. Це наслідок того, що негативні значення відповідають тому ж самому рішення.

Інша картина для хвиль, що біжать: $e^{ik_x x}$ рішення відрізняється від $e^{-ik_x x}$, та й фізична інтерпретація для них різна - одна хвиля поширюється в позитивному напрямку, у теж час як інша - у негативному. Оскільки поперечні розміри в шарі значно перевищують поздовжні (по Z), варто очікувати слабку залежність рішення рівняння Шредінгера від структури граничних умов у цих напрямках. Звичайно використовуються періодичні граничні умови: рішення на границі збігаються. А саме, $\psi(-L_x/2, y, z) = \psi(L_x/2, y, z)$, і аналогічно по осі Y. У цьому випадку $e^{-ik_x L_x/2} = e^{ik_x L_x/2}$, або $e^{ik_x L_x} = 1$, $k_x L_x = 2n_x \pi$, де $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$.

Ми вже обчислювали енергію вільної частинки, див. рівняння (2). Вираз для енергії частки у квантовій ямі перебуває шляхом узагальнення й використання, отриманих із граничних умов, значень хвильових чисел. У результаті маємо

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{2\hbar^2\pi^2}{m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \frac{n_z^2}{L_z^2}. \quad (6)$$

Помітимо, що оскільки поперечні розміри значно перевищують поздовжній, другий доданок у сумі при однакових числах n_x, n_y, n_z буде значно більше першого.

Квантове проведення (б). Це вже модель провідника. Нам надалі знадобиться обчислити провідність такого роду структур, тому необхідно вивчити квантову механіку окремого електрона. Хвильова функція й спектр власних значень визначаються граничними умовами. У цьому випадку рух електрона обмежено із двох сторін і по одному напрямку провідник має значно більшу довжину. У зв'язку цим, хвильова функція звертається в нуль на границях і в поздовжньому напрямку - періодичні граничні умови. Енергія електронів

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) + \frac{2\hbar^2\pi^2}{m} \frac{n_z^2}{L_z^2}, \quad (7)$$

де $n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, а інші квантові числа позитивні. Перший доданок в (7) - поперечні моди. Тут можна привести аналогію з збудженням електромагнітних коливань у витягнутому резонаторі або хвилеводі. Як видно, через те що поперечні розміри малі в порівнянні з поздовжніми, енергетичні масштаби поперечних мод значно перевищують поздовжні. Стани одного електрона будуть визначатися значенням хвильових чисел $k_z = 2n_z\pi/L_z$; відстань між сусідніми значеннями буде $2\pi/L_z$. Якщо взяти «довжину» Δk_z , легко підрахувати число станів. Для цього повну довжину

необхідно розділити на відстань між сусідніми значеннями. У результаті маємо

$$\text{«кількість станів»} = \frac{\Delta k_z}{\left(\frac{2\pi}{L_z}\right)} = L_z \frac{\Delta k_z}{2\pi} = L_z \frac{\Delta p_z}{2\pi\hbar} \quad (8)$$

де ми використовували зв'язок між імпульсом і хвильовим числом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Для поперечних мод не буде двійки в знаменнику, відстань між поперечними рівнями енергії буде значно більше, ніж між поздовжніми, але не можна забувати, що їхні хвильові числа позитивні, у той час як поздовжні моди можуть поширюватися як у позитивному, так і в негативному напрямку просторової осі.

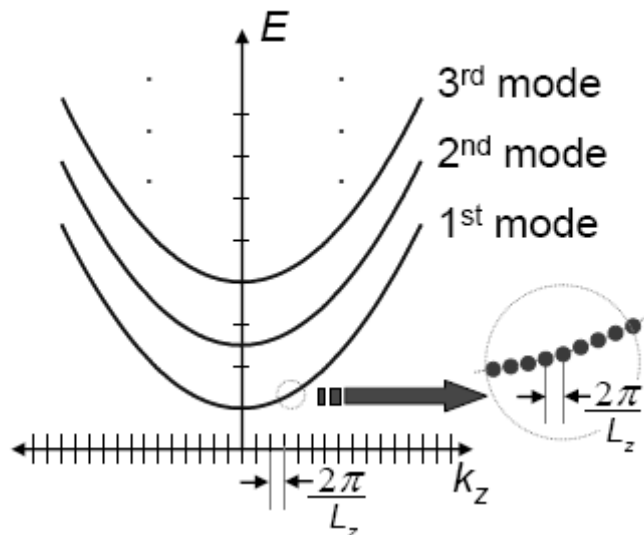


Рис.4. Енергія електронів усередині квантового провідника.

На рис. 4. представлено картину розподілу енергетичних станів відповідно до (7). У кожному стані може перебувати електрон. Поздовжні стани розташовані більш густо, ніж поперечні. Надалі, для розгляду питань провідності необхідно відповісти, у даному контексті, на два питання: 1. Як будуть заселятися стани електронами; 2. Скільки поперечних мод буде задіяно.

На ці питання одержимо питання, коли будемо розглядати розподіл багатьох електронів.

Що стосується **квантової крапки (в)**, електрони утримуються в трьох просторових напрямках. Природно припустити, що хвильова функція буде звертатися в нуль на границях і енергію можна записати у вигляді:

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad (9)$$

Для приклада розрахуємо два кубічних ($L_x = L_y = L_z$) провідники, один із яких має розмір 5нм, іншої – 1мм. Структура енергетичних рівнів визначається з рівняння (9). Знайдемо інтервал між першим і другим рівнем. Для цього треба змінити одне квантове число n на одиницю, залишаючи інші незмінними. Таким чином,

$$\Delta E = E(2, n_y, n_z) - E(1, n_y, n_z) = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2},$$

де ми використовували $\hbar = h/2\pi$. У нанoeлектроніці як одиниця виміру енергії використовується електрон-вольт (eВ) – енергія, що здобуває електрон при проходженні різниці потенціалів 1В. Помноживши електрон-вольти на заряд електрона $|e| = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл, одержимо енергію в Джоулях. Зупинимося докладніше на обчисленні комбінації h^2/m . Нагадаємо, що $mc^2 = 0.512$ МеВ (енергія спокою електрона), де $c = 3 \cdot 10^8$ м/сек - швидкість світла. Отже,

$$\frac{h^2c^2}{mc^2} = \frac{(4.136 \cdot 10^{-15})^2 9 \cdot 10^{16}}{0.512 \cdot 10^6} eB \cdot m^2 = 3 \cdot 10^{-18} eB \cdot m^2.$$

Для 5 нм провідника маємо $\Delta E = 0.015$ eВ, у другому випадку $1.125 \cdot 10^{-12}$ eВ. Таким чином, переходячи до макроскопічних масштабів, одержуємо практично безперервний спектр енергій, у той час як на наномасштабах на

перший план виступає дискретність енергетичних рівнів, які скоріше нагадує рівні ізолюваного атома.

1.5. Розсіювання на потенційному бар'єрі

Ми розглядали стан вільного електрона в різних геометричних структурах. Звичайно, електрони розсіваються на границі, але усередині він вільний. Така ідеалізація не завжди спрацьовує в конкретних наноелектронних об'єктах, коли мають місце неоднорідності, домішки й т.д. Тому опишемо, у яких термінах необхідно описувати такого роду завдання, оскільки вони придадуться, коли перейдемо до вивчення електронної провідності в наноструктурах. Для цього розглянемо завдання про розсіювання квантової частки на потенційному бар'єрі, показаному на рисунку 5(a).

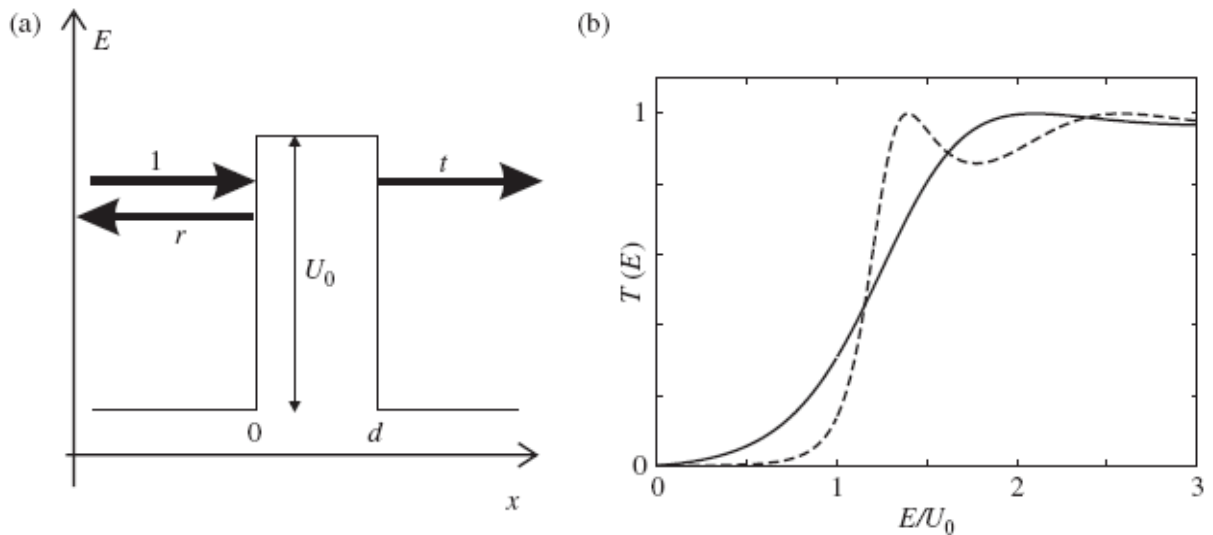


Рис.5. Потенційний бар'єр. (a) Розсіювання електронної хвилі на потенційному бар'єрі. (b) Коефіцієнт проходження для різної товщини потенційного бар'єра, $d\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar}} = 3$ (безперервна лінія) і 5 (пунктир).

Як видно, в областях $x < 0$ і $x > d$ електрон рухається вільно, там немає потенціалу. Висота потенційного бар'єра U_0 , він локалізований в області $0 < x < d$. Проблема одномірна, оскільки немає залежності від координат у поперечному напрямку. Іншими словами, стани, які пов'язано з поперечним квантуванням, не змінюються в процесі розсіювання. Отже, нам треба вирішити рівняння Шредінгера (4) з потенційною енергією у вигляді

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & 0 < x < d \\ 0 & x < 0 \quad x > d \end{cases} \quad (10)$$

На бар'єр падає електрон із заданою енергією $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, хвильове число

дорівнює $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$. Оскільки частинка рухається зліва направо, хвильова

функція має вигляд e^{ikx} . Амплітуда хвилі обрана рівній одиниці. Хвиля розсіюється на потенційному бар'єрі пружно, без зміни енергії. У результаті, частина хвилі re^{-ikx} (вже рухається вліво) відбилася, інша частина te^{ikx} пройшла крізь бар'єр. Усередині потенційного бар'єра енергія вже дорівнює

$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + U_0$. Природно, повна енергія не міняється, а змінилося тільки

хвильове число, тепер воно дорівнює $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}$. Хвильова функція

усередині бар'єра задана у вигляді суперпозиції прямій $Ae^{i\kappa x}$ і зворотній $Be^{-i\kappa x}$ хвилі. Таким чином, загальне рішення має вигляд

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-ikx} + re^{ikx} & x < 0 \\ Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x} & 0 < x < d \\ te^{ikx} & x > d \end{cases} \quad (11)$$

У рішення (11) входять чотири невідомих коефіцієнти й для їхнього визначення необхідно стільки ж умов, а саме: хвильова функція і її похідна по координаті повинні бути безперервними в крапках $x=0$ і $x=d$. Ці умови цілком достатньо для знаходження r, A, B й t . Для нас найбільш важливими є амплітуда розсіювання r й амплітуда проходження t . Коефіцієнт проходження, $T(E)=|t|^2$, визначає частку хвилі, що проходить крізь перешкоду. Треба зазначити, що залежно від енергії падаючої частинки - $E > U_0$ або $E < U_0$ - хвильове число k усередині потенційного бар'єра може бути дійсним або комплексним; у другому випадку рішення є суперпозиція загасаючої й зростаючої хвилі, природно і вираз коефіцієнтів проходження й відбиття буде мінятися в цих випадках. Конкретний вид коефіцієнтів для нас не так важливий, просто треба знати, що для будь-якого потенціалу у принципі їх можна обчислити, якщо не аналітично, те чисельно. Зокрема, для потенціалу (10) залежність коефіцієнта проходження від енергії показано на малюнку 5(b). Варто звернути увагу, що при $E/U_0 > 1$ коефіцієнт проходження прагне до класичної межі $T(E)=1$ незалежно від товщини бар'єра.

2. Електронна провідність наноструктур

Для того, щоб мати можливість одержати уявлення про струм на нанорівні, ми повинні спочатку розглянути, що відбувається в макроскопічних масштабах, а потім побачити ефект від зниження розмірів на нанорівні. Опис звичайних електричних кіл може бути зрозумілим зовсім простою мовою, у той час як на нанорівні є ряд тонких ефектів, які можуть бути зрозумілими тільки в рамках квантової механіки.

На основі експериментальних спостережень в 1820 році Георг Ом сформулював свій знаменитий закон, що говорить: при постійній температурі

струм J , що протікає через провідник, прямо пропорційний різниці потенціалів між його кінцями. Або, $U = R \cdot J$. Коефіцієнт пропорційності між напругою й струмом називається опір, R . Опір, у свою чергу, залежить від геометрії провідників і питомого опору матеріалу ρ , $R = \frac{\rho \cdot L}{S}$, де L й S - довжина й площа поперечного перерізу провідника, відповідно. Як ми побачимо пізніше, коли кожний із розмірів провідника перебуває на нанорівні, питомий опір сам стає залежним від геометрії. Це, зокрема, витікає з тієї обставини, що опір наноконтакта прагне до кінцевої межі при $L \rightarrow 0$; це не можна зрозуміти, виходячи із класичного розгляду, а тільки застосовуючи квантову механіку. Поки ж розглянемо закон Ома більш докладно, із чисто класичної (тобто не квантової) точки зору - модель Друде електронної провідності.

2.1. Модель Друде. Класична модель електронної провідності

Перш ніж провести необхідні зміни, які повинні бути зроблені у відповідність із квантовою механікою, ми хотіли б одержати відповіді на наступні питання: 1. Що таке електричний струм? 2. Чому і як струм залежить від напруги? 3. Які типові значення опору провідника й із чим вони зв'язані? 4. Який ефект від зміни температури?

Щоб відповісти на ці питання, ми повинні розглянути те, що відбувається, коли ми подаємо напругу U на провідник. Напруга приводить до появи локального електричного поля \vec{E} усередині провідника. Це електричне поле пов'язано із діючою на електрони силою $e \cdot \vec{E}$, ($e = -1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл - заряд електрона) у напрямку, протилежному напрямку прикладеного поля. Виходячи із цього можна чекати, що електрони будуть по мірі проходження через провідник прискорюватися. Потік носіїв заряду в провіднику визначає струм, сила струму - кількість заряду (у кулонах), що

проходить через поперечний переріз провідника за секунду. Зокрема, 1А відповідає потоку $3.25 \cdot 10^{18}$ електронів за одну секунду. Насправді, електрони не будуть прискорюватися нескінченно по мірі їхнього проходження через провідник, скоріше, вони дрейфують із кінцевою швидкістю; швидкість дрейфу, як правило, 10^6 м/с. Скінченна величина швидкості дрейфу пов'язана з тим, що електрони випробовують зіткнення з домішками, дефектами й т.д.. Середня відстань і проміжок часу між зіткненнями - є довжина вільного пробігу l й час вільного пробігу τ , відповідно, і порядку 10-50 нм і 10^{-14} секунд для металу при кімнатній температурі. З огляду на те, що сила, яка діє на електрон дорівнює $e \cdot \vec{E}$, із другого закону Ньютона (маса \times прискорення дорівнює силі, $m \cdot \left(\frac{\vec{v}}{\tau}\right) = e \cdot \vec{E}$) знаходимо середню швидкість електронів безпосередньо перед зіткнення $\vec{v} = e\vec{E}\tau/m$. Якщо в провіднику перебуває n електронів в одиниці об'єму (об'ємна щільність), то звідси виходить, що щільність струму (струм через одиницю площі поперечного перерізу провідника) дорівнює

$$\vec{j} = e \cdot n \cdot \vec{v} = \left(ne^2\tau/m \right) \vec{E}. \quad (12)$$

По суті, це і є закон Ома, оскільки він пророкує, що щільність струму пропорційна електричному полю, що, у свою чергу, пропорційно прикладеної напрузі. Коефіцієнт пропорційності між щільністю струму й електричним полем, $\sigma = \left(ne^2\tau/m \right)$, називається питомою провідністю, а $\rho = \sigma^{-1} = \left(m/ne^2\tau \right)$ - питомим опором.

Для дослідження впливу температури нам потрібно лише глянути на наведену вище формулу. При підвищенні температури атоми в провіднику рухаються більш енергійно. Це приводить до зменшення часу вільного

пробігу τ , i , отже, збільшує опір. З іншого боку, коли ми збільшуємо струм, що протікає через провідник, тим самим відбувається збільшення числа зіткнень між електронами й дефектами усередині провідника, що приводить до нагрівання провідника. Далі настає момент, коли це нагрівання викликає збільшення опору. У результаті вольт-амперні характеристики стають нелінійними, на відміну від лінійної залежності в законі Ома.

Отже, ми вивели закон Ома, що є експериментальним фактом, не розглядаючи квантову природу матеріалів. Для того щоб одержати більш глибоке розуміння провідності, необхідно розглянути модель вільних електронів для вивчення електронної провідності.

2.2. Квантова модель вільних електронів

У моделі Друде, яку ми тільки що обговорювали, неявно передбачається наступне: електрони не взаємодіють один з одним і кристалічною решіткою; електрони можуть мати будь-яку швидкість i , отже, енергію; всі електрони в провіднику дають внесок у провідність; статистичний розподіл електронного газу - розподіл Максвелла-Больцмана.

Перше припущення може бути виправдано для більшості металів, де потенціали окремих атомів і взаємодія електронів один з одним ефективно екранується у зв'язку з високою щільністю електронів. Однак для напівпровідників ситуація інша: внаслідок взаємодії електронів з періодичною кристалічною решіткою утворюється заборонена зона. Проте, можна вважати, що в регулярній решітці електрони усередині провідника не взаємодіють один з одним, вони займають певні енергетичні стани, аналогічні станам вільних електронів, а кристалічна решітка приводить до зміни деяких параметрів носіїв заряду. Зокрема, маса електронів міняється на ефективну масу. Таким чином, у більшості випадків добре працює модель вільного електронного газу.

Друге припущення не є життєздатним, тому що квантова механіка говорить нам, що енергія електронів у провіднику буде мати певні, дискретні значення. Нарешті, електрони є ферміонами, і, як відомо, підкоряються статистиці не Максвелла-Больцмана, а Фермі-Дірака. Ці факти в остаточному підсумку приводять до провалу моделі Друде, яка просто не може пояснити велику кількість явищ, наприклад, конкретні теплові властивості матеріалів, електричний опір у наноструктурах, та й багатьох інших.

Основний закон, який управляє електронами, - принцип заборони Паулі. Він говорить: в одному стані може перебувати тільки один електрон. Це незвичайна ситуація з погляду класичної фізики. Так, наприклад, принцип заборони Паулі приводить до того, що в окремому провіднику не можуть перебувати два електрони з однаковими імпульсами (і спінами). В класиці така заборона суперечить здоровому глузду. Частинки, на які поширюється ця заборона, називаються ферміонами (на честь Енріко Фермі, який побудував статистику частинок, що підкоряються принципу заборони). Не можна забувати, що стан частинки може характеризуватися не тільки динамічними характеристиками (імпульс і ін.), але й внутрішніми змінними, такими як, наприклад, спін. Зокрема, нам треба знати, що у електрона є два стани спіна. Іншими словами, число станів збільшується вдвічі. Хоча, якщо помістити електронний газ в сильне зовнішнє магнітне поле, всі спіни будуть орієнтуватися по напрямку поля, таким чином, буде зайнятий тільки один спіновий стан.

Оскільки існує кінцеве число електронів у провіднику, енергетичні стани послідовно заповнюються по мірі зростання енергії до певної величини (енергія Фермі, E_F), як показано на рис. 6.

Нагадаємо, що стани в ідеалізованій одномірній моделі (рис.6. ліворуч)

будуть розташовуватися на параболі $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ з інтервалом по хвильовим

числам $2\pi/L$, де L - розмір системи. Якщо ж $L \rightarrow \infty$, то енергетичні стани будуть практично безупинно розподілені. У тривимірному випадку корисно

вважати, що електронні стани представлено крапками усередині поверхні Фермі (див. рис. 6. праворуч). Однак в нанoeлектроніці найчастіше мають справу з обмеженим набором носіїв заряду, тому на перший план виступає завдання про рахункове число станів, ідучи від безперервної моделі. Звичайно наноструктура складається з контактів, по яких підводять у систему електрони, і властиво приладу.

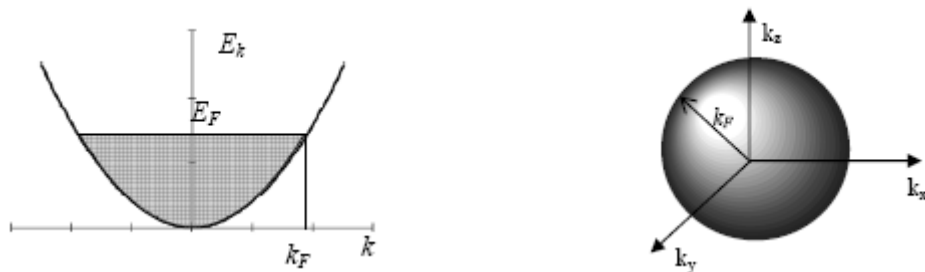


Рис.6. Ліворуч - дисперсійне співвідношення в моделі вільних електронів; праворуч - сфера Фермі в ізотропній моделі.

Таким чином, доцільно підходити до проблеми провідності наноструктур у такий спосіб. Контакти вважаються ізотропними провідниками, що перебувають у рівноважному стані. Іншими словами, явища, що відбуваються усередині наноструктури ніяк не впливають на стан контактів. Потім необхідно розглянути стани вільних електронів усередині наноструктури, виходячи з її геометрії. Далі, електрони попадають із контактів і заповнюють ці внутрішні стани, по яких можна підсумувати і знайти, приміром, струм, який, у свою чергу, буде визначатися станами контактів.

Визначимо енергію й імпульс Фермі для тривимірного ізотропного провідника. Нехай у системі є N електронів. Тоді ці електрони заповнюють всі стани аж до енергії Фермі $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$. «Об'єм» в k -просторі, який займає один стан (періодичні граничні умови) дорівнює $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. Таким чином,

кількість станів можна визначити, розділивши повний об'єм Фермі сфери $\frac{4\pi k_F^3}{3}$ на об'єм одного стану. З огляду на те, що через наявність спіну в кожному стані може перебувати два електрони, маємо

$$N = 2 \frac{\frac{4}{3} \pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V k_F^3}{3\pi^2} \quad (13)$$

де $V = L^3$ - просторовий об'єм системи. У результаті

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}} \Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{2}{3}} \quad (14)$$

де $n = \frac{N}{V}$ - щільність електронів. Наприклад, якщо взяти золото, що має енергію Фермі 5,51 еВ, одержимо, що концентрація (щільність) електронів дорівнює $5,93 \cdot 10^{28} \left(\frac{\text{електронів}}{\text{м}^3}\right)$, що відповідає приблизно одному електрону на атом. Така ситуація - звичайна справа для металів.

Надзвичайно важливою величиною для фізиці твердого тіла, як і в наноелектроніці, є число станів на одиницю енергії в інтервалі dE й в одиничному об'ємі, яку називають щільністю станів $D(E)$ матеріалу. Отже, щільність станів визначається як $\frac{1}{V} \frac{dN}{dE}$ і є диференціальна характеристика.

Для того щоб знайти щільність станів, нагадаємо формулу для елемента об'єму в к-просторі $dV = 4\pi k^2 dk$. Таким чином, число станів в елементі об'єму dV дорівнює

$$dN = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3 k^2 dk}{\pi^2} \quad (15)$$

Або для щільності маємо

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow dk = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{m}{\hbar^2} dE \quad (16)$$

$$D_{3D}(E) = \frac{E^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

У двовимірному випадку, коли є обмеження для руху електронів в одному напрямку, як у квантовій ямі, рівень Фермі визначається в такий спосіб:

$$N = 2 \frac{\pi k_F^2}{(2\pi/L)^2} = \frac{S k_F^2}{2\pi} \Rightarrow k_F = (2\pi n_S)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2 \pi n_S}{m} \quad (17)$$

де n_S - поверхнева щільність електронів, $S = L^2$ - площа. Далі знайдемо щільність станів, що визначається як $\frac{1}{S} \frac{dN}{dE}$. Елемент площі в k -просторі дорівнює $2\pi k dk$ (за аналогією зі звичайним $2\pi r dr$). Площа, яку займає один стан в k -просторі дорівнює $\left(\frac{2\pi}{L} \right)^2$. Щоб знайти кількість станів, треба елемент площі розділити на площу одного стану й не забути про двійку через спина. У результаті

$$dN = 2 \frac{2\pi k dk}{(2\pi/L)^2} = L^2 \frac{k dk}{\pi}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow dk = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{m}{\hbar^2} dE \quad (18)$$

$$D_{2D}(E) = \frac{1}{L^2} \frac{dN}{dE} = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{m}{\pi \hbar^2} = \frac{m}{\pi \hbar^2}$$

На відміну від тривимірного випадку, коли щільність станів зростає з ростом енергії як $E^{\frac{1}{2}}$, для планарних структур (квантових ям і т.д.) щільність взагалі не залежить від енергії.

В одному вимірі, тобто для квантового дріту, кількість станів $dN = 2 \frac{2dk}{(2\pi/L)}$. Додаткова двійка в чисельнику виникла через те, що в нас є два сорти часток – одні рухаються в позитивному напрямку (права галузь параболи $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$), інші, у негативному.

$$dN = 2 \frac{2dk}{(2\pi/L)} = L \frac{2dk}{\pi} \quad (19)$$

$$D_{1D}(E) = \frac{1}{L} \frac{dN}{dE} = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{2m}{\pi \hbar^2} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{E^{\frac{1}{2}}}$$

Припустимо, що в нас є набір енергетичних рівнів $E = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Ми вже

зіштовхувалися з подібною ситуацією, коли розглядали поперечні моди у квантовому дріту. Тоді, як легко переконатися, повторивши математичні викладки, у щільності станів (19) $\frac{1}{E^{\frac{1}{2}}} \rightarrow \frac{1}{(E - E_n)^{\frac{1}{2}}}$, тобто на кожному рівні

щільність станів в одномірному випадку звертається в нескінченність, є сингулярність, показана на рисунку 7.

Дотепер ми не враховували вплив температури, і наш аналіз дійсний тільки при нульовій температурі. Коли температура збільшується, кінетична енергія електронів у провіднику також буде збільшуватися, що приводить до «размиття» поверхні Фермі. Це відбувається внаслідок того, що електрони під дією температури переходять зі станів під поверхнею Фермі у вільні

стани над нею. Якщо раніше ми говорили про чітку границю, що нагадує сходинку, то тепер ця границя згладжується.

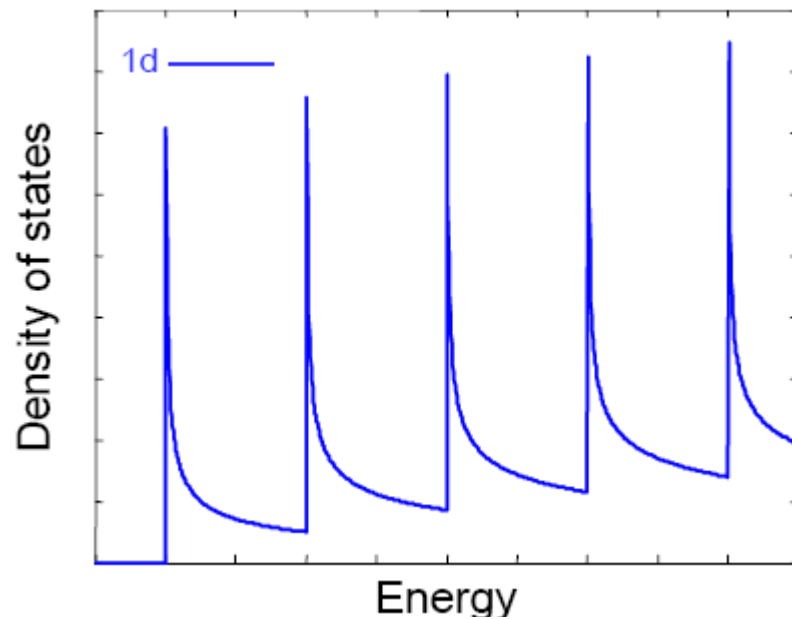


Рис.7. Залежність щільності станів від енергії у квантовому дріту.

З іншого боку, при нульовій температурі ми заповнювали стани за правилом: є вільної незайнятий стан при енергії $E < E_F$, з імовірністю рівній одиниці воно заповнювалося. Іншими словами, уважалося, що всі стани рівноймовірні. Природно, що температура руйнує таку концепцію, приводячи до відмінної від нуля ймовірності $f(E)$ знаходження частинки в стані із заданою енергією. Ця ймовірність і є функція розподілу Фермі-Дірака

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}, \quad (20)$$

де $k_B = 8.617 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$ - постійна Больцмана; μ - хімічний потенціал провідника, що визначається як енергія найвищого заповненого стану при нульовій температурі, так, якщо провідник перебуває під потенціалом U , то $\mu = E_F + eU$. Якщо помножити щільність станів на розподіл Ферми $f(E) \cdot D(E)$, одержимо щільність заповнених станів.

2.3. Режими переносу заряду в наноструктурах

Раніше ми ввели, під час обговорення моделі Друде, концепцію довжини вільного пробігу.

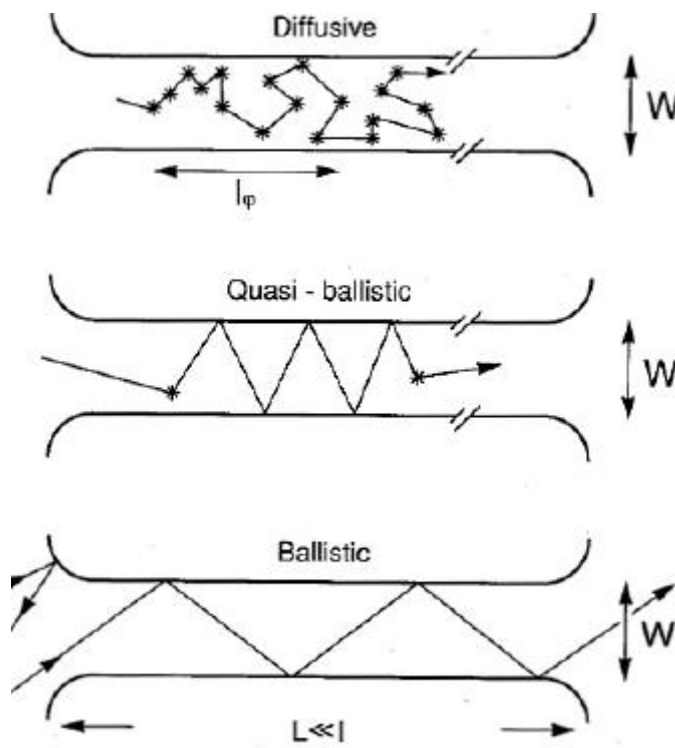


Рис. 8. Електронні траєкторії для дифузійного $l \ll L, W$, квазібалістичний $W < l < L$ й балістичного $l > L, W$ транспортних режимів.

Шляхом порівняння середньої довжини вільного пробігу l з характерними розмірами системи, L і W , можна розрізнити дифузійний, квазібалістичний і балістичний транспорт зарядів (див. рис.8.).

Як правило, нанопровідники виготовлено за допомогою планарної технології. Іншими словами, геометрична модель для них, яка дозволяє просунути в область обчислення провідності, є плоска модель шару, для якого ширина W значно перевищує довжину L . Природно, що більше реалістична модель показана на рисунку 8 (а), проте, для планарних структур висота провідника значно менше інших розмірів, тому доцільно прийняти модель шару рисунка 8(в).

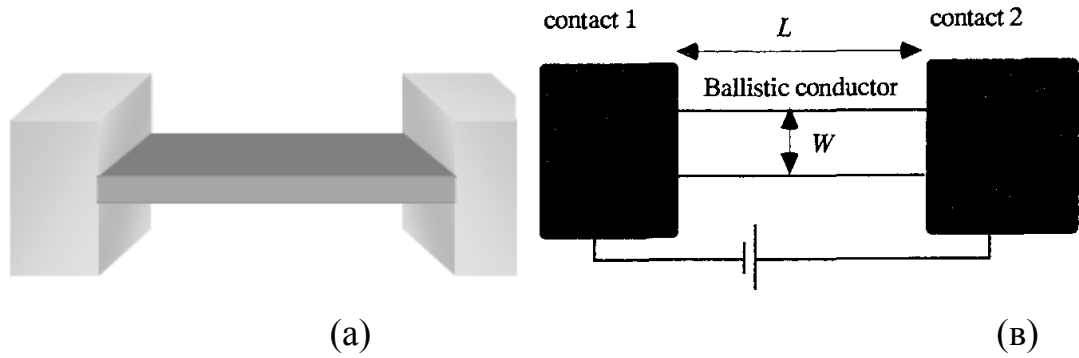


Рис. 9. Модель нанопровідника.

Ми зосередимо нашу увагу на балістичній провідності, яка є більш актуальною в наноструктурах.

2.4. Опір балістичного провідника

Для того щоб вирішити чи використовувати модель балістичної провідності, необхідно знайти довжину хвилі Фермі й зрівняти її з розмірами системи (звичайно поперечними). Якщо довжина хвилі порівнянна із розміром і немає істотних нерегулярностей, то ми перебуваємо в балістичному режимі. Якщо взяти, приміром, GaAs, характерна поверхнева щільність носіїв заряду в якому дорівнює $4 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$, то з формул $k_F = (2\pi n_s)^{\frac{1}{2}}$, $\lambda_F = 2\pi/k_F$ знаходимо $\lambda_F \approx 40 \text{ нм}$.

Розглянемо шматок провідника, що розташовано між двома великими контактними площадками, як показано на рис. 9 (в). Якщо б розміри провідника були великими, то ми знаємо, що його кондактанс (провідність)

буде визначатися як $G = \frac{1}{R} = \frac{\sigma W}{L}$, де σ - питома поверхнева провідність.

Надалі, для цих величин ми будемо використовувати терміни: кондактанс і коефіцієнт провідності. Помітимо, що зараз працюємо з планарними (поверхневими) структурами. Із формули для кондактанса витікає, що якщо

L зменшується, то кондуктанс збільшується необмежено. Експериментально, однак, було показано, що обмірювана провідність наближається до граничного значення G_c й кінцевого опору R , коли довжина провідника стає набагато менше, ніж довжина вільного пробігу.

Звідки виникає цей кінцевий опір? Адже, якщо електрони ні на чому не розсіюються, опір повинен бути дорівнювати нулю. Дійсно, рух електронів у цьому випадку, скоріше нагадує траєкторії більярдних куль. Та й квантова механіка не може дозволити такий парадокс. Ми просто заміняємо електрон на електронну хвилю й, якщо хвилі не на чому розсіюватися, вона буде поширюватися без загасання. Для того щоб знайти вихід з даного протиріччя, природно припустити, що кінцевий опір виникає в результаті взаємодії між провідником і контактними площадками, які складаються з різних матеріалів. Із цієї причини ми будемо думати про цей кінцевий опір балістичного провідника, як про контактний опір. Коли ми говоримо про різні матеріали провідника й контактів, то маємо на увазі, насамперед, геометричні особливості й характерні розміри. Основне завдання контактів – поставляти електрони в провідник із заданим хімічним потенціалом (енергією). У контактах електрони розподілено відповідно до розподілу Фермі-Дірака із певним значенням енергії Фермі. Якщо вважати, що контакти – двовимірні структури, які отримано в результаті напилювання, то електрони розподілено по поздовжнім і поперечним модам однаково, іншими словами, ми бачимо ізотропну картину. У самому ж провіднику енергія електронів має вигляд як на малюнку 4. Є набір поздовжніх станів, структура яких визначається розмірами системи; основна їхня особливість у тім, що вони розміщені дуже густо, відстань між ними в просторі хвильових чисел дорівнює $2\pi/L$. З іншого боку, існують і поперечні моди, які більш сильно рознесені по енергії. Зокрема, $\Delta k_y = \pi/W$ (z - поздовжня координата, y - поперечна). Нагадаємо, що в поперечному напрямку ми приймаємо для хвильової функції умова обігу її в нуль на границі, тому

$k_y = (\pi/W)n_y$, $n_y = 0, 1, 2, \dots$ Таким чином, ми знайшли розходження між контактами й провідником: якщо в провіднику електрони можуть перебувати в станах з більшою кількістю поперечних мод, то в провіднику їх буде кінцеве значення. Іншими словами, існує якась несумірність у розподілі по поперечних модах. У контактах вони розташовані дуже густо, $\Delta k_y = \pi/L_k$, де L_k - характерний розмір контакту, і їх можна вважати нескінченно багату кількість, а в провіднику рідко, внаслідок того що $L_k \ll W$. Отже, можна вважати, що контактний опір - це результат перерозподілу електронів по модах при переході з контакту в провідник. Звичайно, ми позбудемося від цього контактного опору, просто зробивши контакти ідентичними провіднику. Але в цьому випадку ми вийшли б з області наноелектроніки й проблема втратила б зміст. У кожному разі, по розміру контакти набагато більші, ніж нанопровідники. І якщо зробити контакти з нанопровідників, у якому розподіл по модах буде таким же, той контактний опір буде відсутній, але не можна забувати, що ми повинні використовувати ще контакти для наших нових нанокontaktів, до яких можна було б приєднати зовнішнє джерело. Від контактного опору ніяк не піти. Помітимо ще, що якщо подати напругу на систему контакти-нанопровідник, спадання напруги буде зосереджено на переходах контакт-провідник. Для того щоб обчислити струм, треба розглянути, що відбувається на контакті між резервуарами електронів (контакти 1 і 2 на малюнку 9(в)) і, властиво, нанопровідником.

Безвідбивні контакти. Для розрахунку контактного опору ми розглянемо балістичний провідник і розрахуємо струм через нього для даної різниці хімічних потенціалів (енергій) між двома контактами $\mu_D - \mu_S = eU$, при цьому не можна забувати, що заряд електрона негативний, тому якщо напруга джерела $U > 0$, то $\mu_D < \mu_S$. Для розрахунку струму необхідно зрозуміти, що відбувається, коли електрони входять із контакту в провідник. Це складне завдання, що, однак була вирішена в 1989 році шляхом чисельного моделювання проходження електронів з контакту в провідник.

Було показано, що коли електрони виходять із провідника в контакт, то вони розсіваються в перехідній області із дуже малою ймовірністю. Іншими словами, можна вважати, що процес входу в контакт із провідника носить практично безвідбивний характер. З іншого боку, коли електрони виходять із контакту в провідник, вони сильно розсіваються. Це можна зрозуміти з наступних міркувань. У контакті багато вільних станів, це, фактично, макроскопічний об'єкт, основне завдання якого поставляти електрони в провідник, а в провіднику - всі стани (рахункове число) вільні доти, поки не потече струм; у цьому випадку вони будуть зайняті, причому в одному стані буде не більше одного електрона.

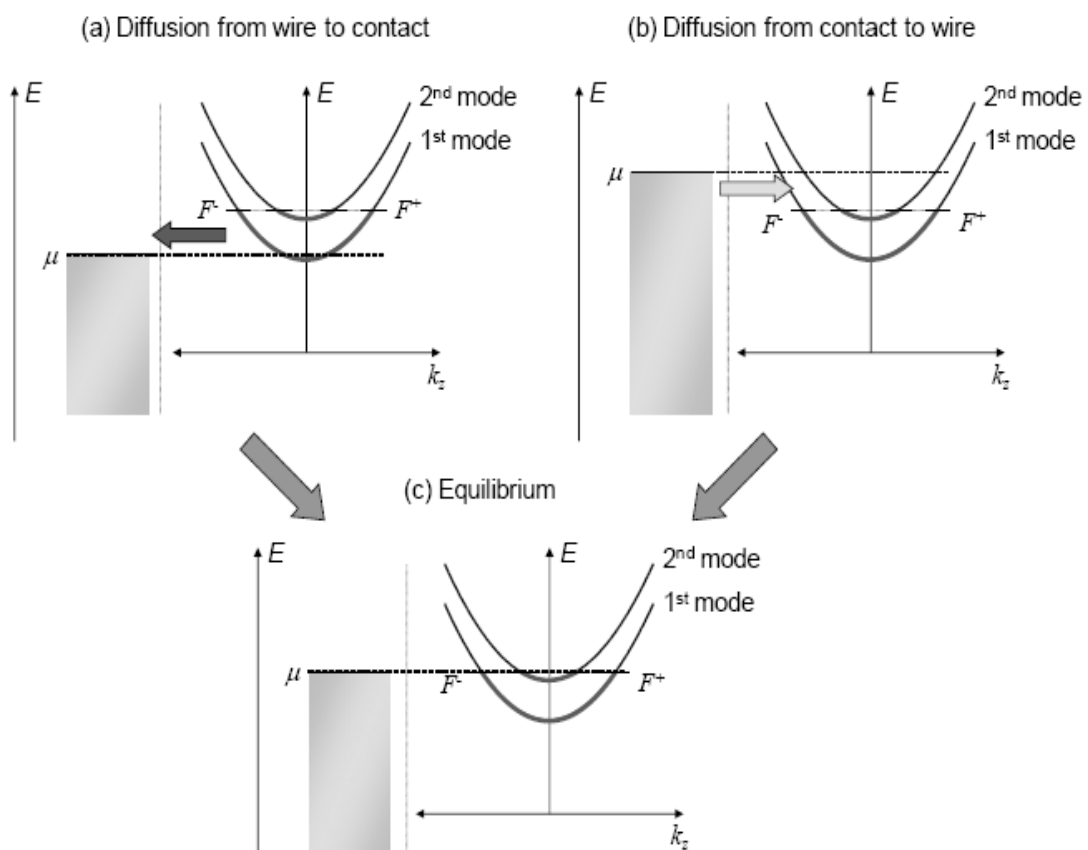


Рис. 10. Випадки встановлення рівноваги між контактом і провідником.

Таким чином, ніщо не буде перешкоджати електрону покинути провідник і зайняти вільні стани в контакті. Інша справа, зворотний процес, коли електрони з контакту намагаються вийти в провідник. Наочно можна уявити собі дві залюднені кімнати, з'єднані вузьким коридором. Людина, що

знаходиться біля коридору, може зайти в нього тільки в тому випадку якщо коридор вільний, а вийти з коридору може безперешкодно в кожному разі. Таким чином, вихід - без опору, а весь опір на вході.

Тепер припустимо, що в провіднику є зайняті електронні стани й приєднаємо до нього один контакт. Подивимося як буде встановлюватися рівновага між контактом і провідником. Наочна картина зображена на рисунку 10.

Ні малюнку 10 показано енергетичні характеристики електронів усередині провідника, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ для кожної поперечної моди. Для простоти думаємо, що їх тільки дві. F^+ і F^- - рівні енергії Фермі для електронів, які рухаються в позитивному й негативному напрямку осі Z , відповідно. μ - хімічний потенціал контакту. Коли $\mu < F^+, F^-$, як на рис 10(а), електрони йдуть із провідника в контакт. При цьому хімічний потенціал контакту не змінюється, а перехід електронів відбувається із кінцевим опором, і скоріше нагадує процес дифузії. Причому йдуть електрони, які рухаються ліворуч, до контакту. У результаті стани F^- спорожніють аж до енергії μ . Таким чином, усередині провідника встановиться асиметричний розподіл електронів, коли стани F^+ не змінюються, а F^- практично спорожніють. Подальшої еволюції не буде, оскільки стани F^+ й F^- не взаємодіють один з одним. Якщо ж $\mu > F^+, F^-$, як на рис 10(в), то електрони будуть входити із контакту в провідник, заповнюючи стани F^+ . Рівноважна ситуація показана на рис.10(с) і не вимагає обговорення.

Приєднаємо два контакти з хімічними потенціалами $\mu_D - \mu_S = eU$. Рівноважний випадок, коли $U = 0$, показано на рис. 11(а). У цьому випадку електрони з лівого контакту заповнюють стани, які поширюються в позитивному напрямку осі Z , до енергії усередині провідника $F^+ = \mu_S$. Аналогічно з електронами із правого контакту, але тільки до $F^- = \mu_D$.

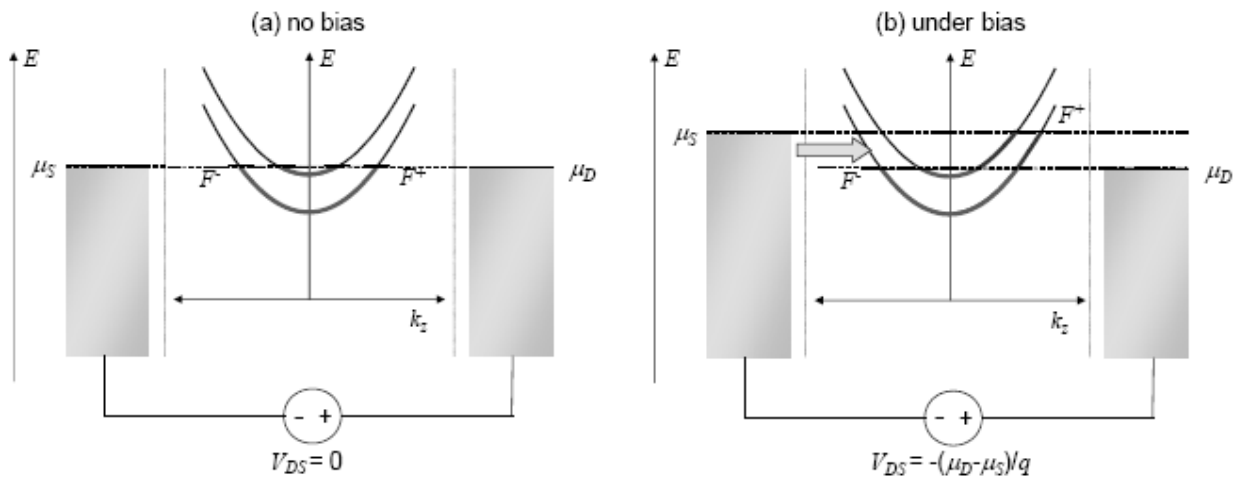


Рис. 11. Два контакти.

Коли подається напруга на контакти, їхні хімічні потенціали змінюються на величину eU . Оскільки $\mu_S > \mu_D$, електронів з локальною енергією Ферми F^+ буде більше чим електронів с. F^- У результаті в системі потече струм, тому що потік електронів у позитивному напрямку буде більше, ніж у негативному. На малюнку 12 зафарбованим прямокутником зображено шар електронів, які, власне кажучи, дають внесок у струм.

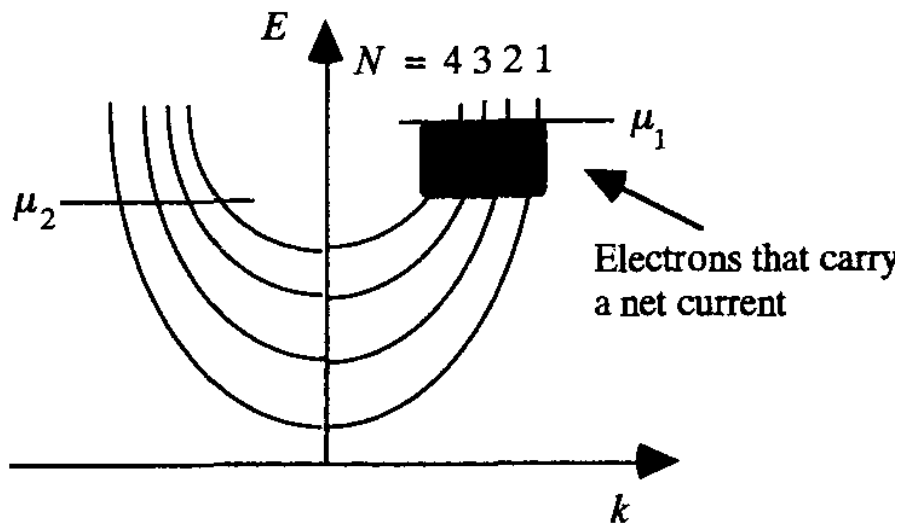


Рис.12. Дисперсійне співвідношення для електронів усередині провідника при заповненні чотирьох поперечних мод. Електрони з лівого

контакту заповнюють стани до μ_1 , а із правого до μ_2 . У зафарбованому прямокутнику електрони, що дають внесок у струм.

Тепер, коли ми познайомилися з питанням про взаємодію провідника з контактами, перейдемо до одержання формули для струму. Нагадаємо, що в даному випадку електрони рухаються в одному напрямку, а облік поперечного руху приводить тільки до необхідності підрахунку числа поперечних мод. Природно, може трапитися, що кожна поперечна мода вносить свій, відмінний від інших, внесок у струм; тоді розрахунок струму значно ускладниться. На щастя, це не так: всі поперечні моди вносять однаковий вклад у струм. Це тим більше дивно, що, дивлячись на мал.11, бачимо, що інтервали станів по хвильових числах k (зафарбований прямокутник) будуть різні для кожної поперечної моди. Але справа в тому, що для струму в одному вимірі є важливим не інтервал по k , а різниця енергій (вертикальна вісь на рис.11), яка для всіх мод однакова.

Визначимо струм для одномірної системи. Нехай електрони входять із лівого контакту в провідник зі швидкістю v_k (швидкість електрона із хвильовим числом k) і залишає його, ідучи в правий контакт. Який струм переносить цей один електрон? З визначення струму, заряд розділений на час, витікає, $I = e/t$ для одного електрона. Проблема у тім, який береться час.

Отут вступає в дію принцип Паулі, а саме, в одному стані – тільки один електрон (без обліку спина). Таким чином, поки електрон у певному стані перебуває в системі, інший електрон у такому ж стані не може влетіти в

провідник. Електрон пролітає провідник довжиною L за час $t = \frac{L}{v_k}$. Звідси

треба, що струм одного електрона дорівнює $I_k = \frac{e}{L} v_k$. Загальний струм

знаходиться підсумовуванням по всіх станах k . Причому, як ми з'ясували раніше, частина електронних станів рухається в позитивному напрямку

$v_k > 0$, інші в негативному $v_k < 0$, їхній внесок у струм компенсує один одного, залишаться тільки електрони які перебувають в інтервалі енергій $\mu_D - \mu_S = eU$. У формулі для струму зараз все відомо, крім швидкості. Тут діє просте правило: якщо електрон має енергію $E(k)$, його швидкість дорівнює

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}. \text{ Дійсно, для квадратичного закону дисперсії } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ маємо}$$

$$v_k = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p_k}{m} = \frac{mv_k}{m}. \text{ Слід зазначити, що формула для знаходження швидкості}$$

працює для будь-якого закону дисперсії, якщо тільки не маємо справу з релятивістськими частинками. Отже, вираз для струму має вигляд

$$I = \sum_k \frac{e}{L} v_k = \frac{e}{L\hbar} \sum_k \frac{dE(k)}{dk}, \quad (22)$$

Де підсумовування поширюється по всіх поперечних модах і попадає в енергетичний інтервал $\mu_D - \mu_S = eU$. У випадку, коли $L \gg 1$, легко перейти

від підсумовування до інтегрування $\sum_k \Rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk$. Застосовуючи цю

формулу, одержуємо для однієї поперечної моди

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{L\hbar} \sum_k \frac{dE(k)}{dk} \Rightarrow \frac{e}{L\hbar} \frac{L}{2\pi} \int \left(\frac{dE(k)}{dk} \right) dk = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{\mu_D}^{\mu_S} dE = \\ &= \frac{e}{2\pi\hbar} (\mu_D - \mu_S) = \frac{e}{2\pi\hbar} eU = \frac{e^2}{2\pi\hbar} U \end{aligned} \quad (23)$$

Що зміниться, якщо в нас є M поперечних мод? Відповідь така: кожна поперечна мода вносить однаковий вклад у струм, оскільки струм, як видно з (23), визначається тільки різницею енергій. При обліку спина остаточне вираження для струму

$$I = \frac{2e^2}{h} MU = G_c U, \quad (24)$$

де G_c кондуктанс (провідність) балістичного провідника. Далі визначимо

опір, що дорівнює $R_c = G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{M}$. Обчислимо опір на одну поперечну

моду, $R_c = \frac{h}{2e^2} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})^2} \approx 12.9 \text{ кОм}$. Це вже значний опір, яким не

можна зневажати при дослідженні нанопровідників. Для макроскопічних провідників цей опір практично не спостережуваний, оскільки ширина провідників така, що ми повинні приймати в розгляд велику кількість поперечних мод, а опір обернено пропорційний кількості поперечних мод.

Обговоримо, як визначити M . Для цього знову повернемося до рис. 9. Як ми вже згадували, відстань у просторі хвильових чисел між поперечними модами дорівнює $\Delta k_y = (\pi/W)$. У контактах же електрони розподілено ізотропно. Таким чином, у провідник вільно влітають електрони, у яких поперечні хвильові числа $0 \leq k_y \leq k_F$, де k_F - хвильове число Фермі

($E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ - енергія Фермі в контактах). Звідси число поперечних мод

$$M = \text{Int} \left[\frac{k_F}{(\pi/W)} \right] = \text{Int} \left[\frac{2\pi}{\lambda_F (\pi/W)} \right] = \text{Int} \left[\frac{W}{(\lambda_F/2)} \right], \quad (25)$$

де λ_F - довжина хвилі Фермі, Int - ціла частина від числа під дужкою, W - ширина провідника.

Для арсеніду галію $\lambda_F = 40$ нм, якщо взяти $W = 1$ мікромметр, то $M = \text{Int} \left[\frac{10^3}{20} \right] = 50$ і контактний опір $\left(\frac{12.9}{50} \right) \text{ кОм} \approx 260 \text{ Ом}$. Для реальних провідників кількість поперечних мод стає дуже великою, тому контактний

опір там не грає особливої ролі, у зв'язку із чим, експериментальне спостереження було не простим завданням.

2.5. Квантовий крапковий контакт

Контактний опір може бути обмірюваним безпосередньо за допомогою крапкових контактів, ширина яких значно менше, ніж довжина вільного пробігу в провіднику. Типова геометрія квантового крапкового контакту показана на рис. 13. Електрони провідності будуть зосереджені в гетерошарі між двома напівпровідниками (квантова яма), по якому потече струм, якщо подати поздовжню напругу. Вузький нанопровідник буде формуватися в області між двома затворами G, якщо подати на них негативну напругу. Таким чином, як показано праворуч на малюнку, електрони будуть рухатися тільки в проміжку між затворами. По ширині W ми можемо визначити ефективне число поперечних мод і виміряти контактний опір.

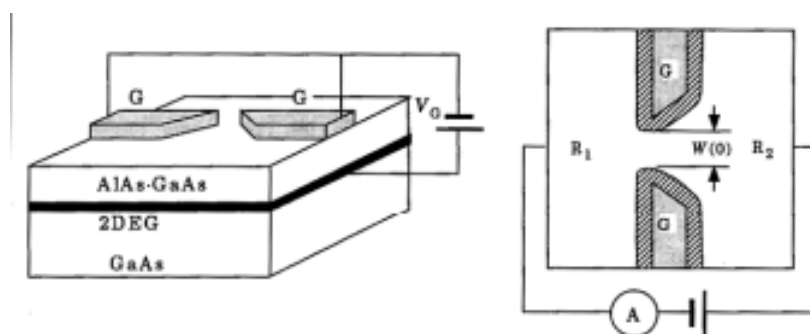


Рис.13. Квантовий крапковий контакт.

Проте, через температурні ефекти прямий вимір цього опору досить складне завдання. Куди простіше змінювати ефективну ширину крапкового контакту шляхом зміни напруги на затворах і дивитися, що відбувається з опором. Це було зроблено наприкінці 1960-х для металів. Слід зазначити, що

в металах довжина хвилі Фермі дуже маленька, порядку відстані між атомами. Це пов'язане з тим, що в металах більша щільність електронів

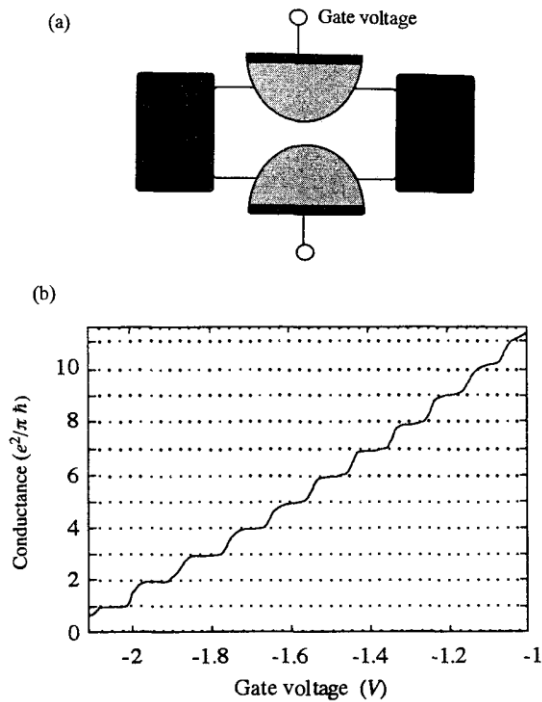


Рис.14. Квантування опору балістичного провідника; (а) схема крапкового контакту; (b) – залежність кондактанса (в одиницях $\frac{2e^2}{h}$) від напруги на затворах (gate voltage).

провідності. Отже, кількість мод M досить велика і контактний опір відносно невеликий. У напівпровідниках, з іншого боку, довжина хвилі Фермі як правило 30 нм, так що кількість поперечних мод можна зробити досить малою і відслідковувати ефекти, які пов'язано з появою окремих поперечних мод.

Перший експеримент на напівпровідниках був зроблений в 1988 році (див. рис. 14).

Оскільки напруга на затворі міняється, змінюється число поперечних мод відповідно до (25). Кожна така зміна приводить до сходинки висотою $\frac{2e^2}{h}$, як треба з рівняння (24). При великій негативній нарузі на затворі, менш -2 вольтів, ширина провідного каналу така маленька, що число поперечних мод дорівнює 1. При збільшенні напруги на затворі, кондактанс

не змінюється доти, поки ефективне число поперечних мод не стане рівним точно двом. Отже ми одержали першу сходинку. При подальшому збільшенні напруги ширина каналу стає такою, що вже задіяно 3 моди, потім 4 і т.д. Очікувані з (24) сходи спостерігаються з дуже великою точністю. Причому точність така, що показана конструкція нагостреного контакту використовується в метрології для точного виміру заряду електрона й постійної Планка. Хоча самі сходи розташовано з дуже великою точністю, перехід між ними не відбувається раптово, як це повинно було б бути. Це пов'язане з тим, що затвори створюють певний розподіл потенціалу в провідному шарі, що досить далеко від ідеального, тому й ширина провідного каналу буде сильно варіюватися в поздовжньому напрямку.

Отже, ми з'ясували, що сам нанопровідник без домішок, має нульовий опір. Кінцевий опір пов'язано з областю переходу з контакту в провідник. Таким чином, якщо до системи, показаної на рис.9(в), приєднати джерело електрорушійної сили, тобто подати різницю потенціалів, то спадання напруги буде повністю зосереджено на вході з контакту в провідник. Вимір спадання напруги усередині провідника між двома довільними крапками дасть нуль, природно, в ідеальному випадку. Проте, сам нанопровідник може мати домішки, на яких електрони будуть розсіюватися. У цьому випадку виникає необхідність в обчисленні опору, пов'язаного з домішками. Слід зазначити, що коли ми говоримо про домішки, то маємо на увазі будь-яке включення в однорідний балістичний провідник. Це може бути й неоднорідність у матеріалі, і потенційний бар'єр, і т.д. Головне полягає в тому, що подібний об'єкт характеризується цілком певними характеристиками розсіювання (коефіцієнт відбиття й т.д.).

2.6. Опір нанопровідника. Формула Ландауера.

Якщо усередині провідника перебуває домішки, для струму справедлива формула Ландауера

$$I = \frac{2e^2}{h} M \cdot T \cdot U, \quad G = \frac{2e^2}{h} M \cdot T, \quad (26)$$

де U - різниця потенціалів, T - коефіцієнт проходження. Фактор T являє собою середню ймовірність того, що електрон, що інжектується з однієї сторони провідника, пройде до іншого кінця. Вище ми обговорювали завдання про розсіювання й підкресливали, що, у принципі, коефіцієнт проходження можна обчислити для будь-якого завдання. Оскільки T - відношення інтенсивності минаючої до падаючої хвилі, то зі струму $I_0 = \frac{2e^2}{h} MU$, що приходить із контакту в провідник, залишиться тільки частина T , інша частина, пропорційна коефіцієнту відбиття, $(1-T)$, відіб'ється від перешкоди. У цьому й складається фізична сутність формули Ландауера. Звичайно, не можна забувати, що коефіцієнт відбиття практично завжди залежить від енергії, тому формула Ландауера повинна модифікуватися з урахуванням щільності станів.

Якщо $T=1$, ми одержимо точне вираження для опору балістичного провідника з урахуванням контактного опору. Варто очікувати, що з довільним коефіцієнтом проходження складається аналогічна ситуація. Обговоримо це питання, розглядаючи провідник з кінцевим коефіцієнтом проходження T , який пов'язано з контактами двома ідеальними балістичними провідниками (LEAD1 і LEAD2), як показано на рис. 15.

Провідники (LEAD1 і LEAD2) передбачаються ідеальними, кожний з яких має M поперечних мод. При цьому передбачається, що електрони входять із провідників у контакти без опору (безвідбивно). Стани з позитивними k в лівому провіднику заповнюються електронами, що приходять із лівого контакту аж до значення енергії рівного його хімічному потенціалу μ_1 . Подібним чином, стани з негативними k в правому провіднику заповнено електронами із правого контакту до μ_2 .

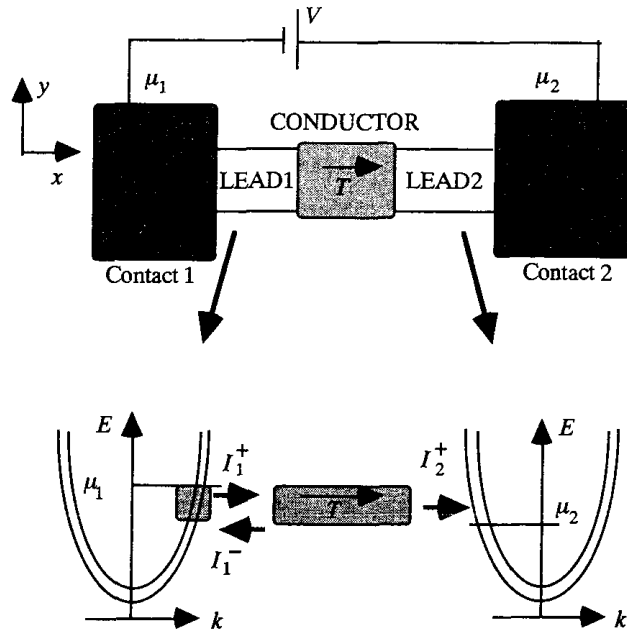


Рис.15. Провідник з коефіцієнтом проходження T , який пов'язано з контактами двома ідеальними провідниками. Унизу показано енергетичний розподіл в ідеальних балістичних провідниках.

Струмові стани зосереджено в інтервалі $(\mu_1 - \mu_2) = eU$. Потік електронів, що падають на провідник (із домішками й ін.) з коефіцієнтом проходження T , визначає силу струму

$$I_1^+ = \frac{2e^2}{h} MU, \quad (27)$$

де U - різниця потенціалів. Через домішку проходить струм

$$I_2^+ = \frac{2e^2}{h} MTU. \quad (28)$$

Електрони, що залишилися, відбиваються й ідуть у лівий контакт. При цьому, із закону збереження струму (перший закон Кірхгофа) треба, щоб

$$I_1^- = I_1^+ - I_2^+ = \frac{2e^2}{h} M(1-T)U . \quad (29)$$

Таким чином, струм у будь-якій крапці провідника буде постійним

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e^2}{h} MTU , \quad (30)$$

що збігається з формулою Ландауера (26). Отже, якщо подати на прилад напругу U , по ньому потече струм, обумовлений рівнянням (30).

Відзначимо, що повний опір системи контакти-провідники-домішка витікає з рівнянь (26), (30) і дорівнює $R = G^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{1}{T}$. Цей опір буде дорівнювати сумі опорів на контактах і на домішці. Як ми обговорювали раніше, опір на контакті зв'язано тільки з переходом електронів з контакту в провідник; цей процес не залежить від домішки. Контактний опір, див. рівняння (24), визначається як $R_c = G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2 M}$. Оскільки $R = R_c + R_T$, де R_T - опір домішки (будь-який об'єкт із коефіцієнтом проходження T), то

$$R_T = R - R_c = \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{1-T}{T} . \quad (31)$$

Якщо згадати, що $(1-T)$ - коефіцієнт відбиття, фізичний зміст формули для опору, який пов'язано з домішкою в провіднику стає більш ясным: при відсутності відбиття (повне проходження), $(1-T)=0$, електричний опір, а разом з ним і спадання напруги, на домішці звертається в нуль. У протилежному випадку, якщо вимірювати спадання напруги, одержимо, що вольтметр буде показувати кінцеве спадання напруги в областях переходу з контакту в провідник і, властиво, на домішці. При цьому треба знати, куди

спрямовано потік електронів, оскільки електрони входять у провідник з кінцевим опором, а виходять із нульовим. Для домішки це не має ніякого значення. Таким чином, дисипація енергії відбувається на вхідних контактах і на домішці, зокрема, потужність, виділювана на домішці дорівнює

$$I^2 R_T = \left(\frac{2e^2}{h} M T U \right)^2 \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{1-T}{T} = \frac{2e^2}{h} M T (1-T) \cdot U^2. \text{ Відзначимо, що } U -$$

зовнішня напруга й тепло на домішці не виділяється, якщо немає відбиття $(1-T) = 0$.

Отже, стає зрозумілим продуктивність формули Ландауера: у будь-якій ситуації питання про знаходження провідності балістичного провідника зводиться до розгляду завдання розсіювання, з якого визначається коефіцієнт проходження. Іншими словами, коли ми розглядаємо нанoeлектронну структуру, необхідно розбити її на ряд блоків, що складаються з ідеальних балістичних провідників, контактів і об'єктів, на яких відбувається розсіювання електронів. Останні можуть мати яку завгодно внутрішню структуру (своєрідний чорний ящик), і єдине, що нам треба знати, так це їхній коефіцієнт проходження, який можна визначити з експерименту або чисельного моделювання, якщо є неможливим його аналітичний розгляд.

У реальній ситуації домішок може бути багато, тому необхідно розглянути, як при цьому можна змінити формулу Ландауера. До цього питання ми переходимо в наступному розділі, стартуючи із завдання про дві послідовно розташовані домішки.

2.7. Нанопровідник з багатьма домішками

Розрахуємо дві домішки, два потенційних бар'єри, в ідеальному балістичному провіднику з коефіцієнтами пропускання T_1 й T_2 , відповідно. Дана ситуація зображена на рис. 16.

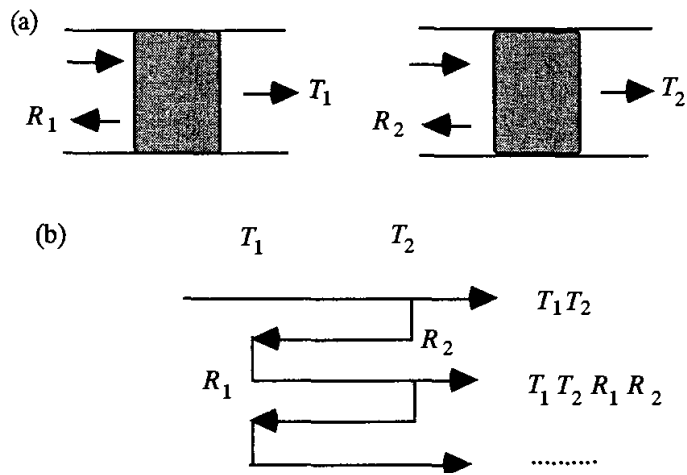


Рис.16. (а) Два бар'єри з коефіцієнтами проходження T_1 й T_2 , і коефіцієнтами відбиття $R_1 = 1 - T_1$ й $R_2 = 1 - T_2$; (б) проходження через два бар'єри може бути обчислено підсумовуванням ймовірностей проходження без відбиття, із двома відбиттями, чотирма відбиттями.

Передбачається, що систему з'єднано із зовнішніми контактами за допомогою ідеальних провідників. Очевидно, що струм визначається по формулі Ландауера (26), але для двох домішок основне завдання полягає в обчисленні коефіцієнта проходження T_{12} , що не буде збігатися з наївним вираженням $T_{12} = T_1 T_2$, оскільки останнє вираження відповідально за послідовне проходження електронної хвилі через дві домішки без обліку відбиттів від потенційних бар'єрів.

Отже, для того щоб обчислити коефіцієнт проходження T_{12} , необхідно підсумовувати по ряду процесів, що відбуваються в проміжку між бар'єрами (див. рис. 16). Перший процес: падаючий зліва направо електрон послідовно проходить через два бар'єри без відбиттів; коефіцієнт проходження при цьому $T_{12}^{(0)} = T_1 T_2$. Другий процес: електрон проходить перший бар'єр із внеском у коефіцієнт проходження T_1 , потім відбивається від другого бар'єра - R_2 , після відбиття відбивається від першого - R_1 , і проходить через другий - T_2 . У сумі це дає $T_{12}^{(1)} = T_1 R_2 R_1 T_2$. Неважко переконатися, якщо між бар'єрами

відбувається вже чотири внутрішніх відбиття, то $T_{12}^{(2)} = T_1 R_2 R_1 R_2 R_1 T_2$. Ці процеси треба підсумовувати аж до нескінченності. У результаті маємо

$$T_{12} = T_{12}^{(0)} + T_{12}^{(1)} + T_{12}^{(2)} + \dots = T_1 T_2 + T_1 T_2 R_2 R_1 + T_1 T_2 (R_2 R_1)^2 + \dots =$$

$$\left(1 + R_2 R_1 + (R_2 R_1)^2 + \dots\right) = \frac{T_1 T_2}{1 - R_2 R_1} \quad (32)$$

де ми використовували формулу суми геометричної прогресії

$$\sum_{i=0}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x}, \quad (x = R_1 R_2).$$

Відзначимо, що результат можна переписати в більш наочній формі (нагадаємо, $R_1 = 1 - T_1$ і $R_2 = 1 - T_2$)

$$\frac{1 - T_{12}}{T_{12}} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}$$

Таким чином, якщо розглядаємо каскад із двох бар'єрів, величина $\frac{1 - T_1}{T_1}$

входить адитивним чином. Це означає, що коефіцієнт проходження $T(N)$ через N однакових бар'єрів (домішок), кожний з яких має коефіцієнт проходження T , задається наступним виразом:

$$\frac{1 - T(N)}{T(N)} = N \frac{1 - T}{T} \Rightarrow T(N) = \frac{T}{N(1 - T) + T} \quad (33)$$

Для провідності (кондактанса), за умови, що кількість поперечних M

каналів є однаковою для всіх домішок, одержуємо $G(N) = \frac{2e^2}{h} M \cdot T(N)$.

Якщо припустити, що домішки рівномірно розподілено по довжині

провідника L , то $N = \nu L$, де ν - кількість домішок на одиниці довжини. Далі комбінуємо:

$$T(N) = \frac{T}{N(1-T) + T} = \frac{T}{\nu L(1-T) + T} = \frac{L_0}{L + L_0} \equiv T(L) \quad , \quad (34)$$

де $L_0 = \frac{T}{\nu(1-T)}$ має сенс довжини вільного пробігу – середня відстань, яку

проходить електрон між двома розсіюваннями на домішках.

Висновок

У цьому посібнику ми познайомилися з концептуальними основами методів, які використовуються в наноелектроніці. Особливу увагу було приділено теорії електронної провідності, було розглянуто найпростіші приклади розрахунку. На основі цих методів можна перейти до безпосереднього розрахунку конкретних наноелектронних приладів, таких як: балістичні нанотранзистори, транзистори на основі вуглецевих нанотрубок та інші. Конкретний розрахунок - складна задача, яка знаходиться на передньому краї сучасної електроніки. Тим не менш, принципи, які закладено в основу, такі ж прості, як і в даному підручнику. Іншими словами, знаючи основи, можна розібратися практично з усіма методиками розрахунку. З іншого боку, ми не торкалися таких важливих питань, як квантова поведінка електронів в зовнішньому магнітному полі (квантовий ефект Хола), облік та маніпуляція із спіновими ступенями свободи (спінтроніка), можливості квантових обчислень (квантові комп'ютери). Всі ці питання знаходяться ще в стадії розробки, і вимагають додаткового учбового посібника.

У висновку наведемо надихаючі слова видатного фізика Річарда Фейнмана, знаменита лекція якого (1960 рік), відома під назвою «Там, внизу,

ще багато місця» вважається сьогодні стартовою точкою у боротьбі за підкорення наносвіту.

«...Я думаю про створення системи з електричним управлінням, в якій використовуються виготовлені звичайним способом «обслуговуючі роботи» у вигляді зменшених у чотири рази копій «рук» оператора. Такі мікромеханізми зможуть легко виконувати операції в зменшеному масштабі. Я говорю про крихітних роботах, забезпечених серводвигунами і маленькими «руками», які можуть закручувати настільки ж маленькі болти і гайки, свердлили дуже маленькі отвори і т. д. Коротше кажучи, вони зможуть виконувати всі роботи в масштабі 1:4. Для цього, звичайно, спочатку треба виготовити необхідні механізми, інструменти і руки-маніпулятори в одну четверту звичайної величини (насправді, ясно, що це означає зменшення всіх поверхонь контакту в 16 разів). На останньому етапі ці пристрої будуть обладнані серводвигунами (із зменшеною в 16 раз потужністю) і приєднані до звичайної системи електричного управління. Сфера застосування таких мікророботів, а також мікромашин може бути досить широкою....

...При переході до вивчення самих маленьких об'єктів пропонованого типу (наприклад, електричних ланцюгів, складених з декількох атомів) ми стикаємося з багатьма різноманітними явищами, створюють нові можливості. Поведінка окремих атомів підкоряється законам квантової механіки і не має аналогів в макроскопічному масштабі, тому «внизу» ми будемо постійно спостерігати нові закономірності і ефекти, які передбачають нові варіанти виконання. Наприклад, дуже можливо, що в світі атомів, замість звичних електричних ланцюгів, ми навчимося працювати з квантовими рівнями енергії, з взаємодіючими квантовими спінами...»

Рекомендована література

1. Датта С. Квантовый транспорт: от атома к транзистору. – Москва: ИКИ, 2009. – 532 с.
2. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. Физика низкоразмерных систем. - Санкт-Петербург: Наука, 2001. - 160 с.
3. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику. – Москва: Физматлит, 2002. – 304 с.
4. Андриевский, Р. А. Наноструктурные материалы: учеб. пособие для вузов / Р. А. Андриевский, А. В. Рагуля. - М. : Академия, 2005. - 187 с.
5. Задорожня Г. П. Стан і перспективи розвитку нанотехнологій в Україні та світі: Аналіт. огляд / Г. П. Задорожня, Т. К. Кваша, Н. В. Березняк ; УкрІНТЕІ. - К. : , 2007. - 36 с.
6. Кац Е. А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры: Родословная форм и идей / Е. А. Кац. - 2-е изд. - М. : Кн. дом "Либроком", 2009. - 294 с.
7. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию: пер. с яп. / Н. Кобаяси. - 2-е изд. - М. : Бином; Лаборатория Знаний, 2008. - 134 с.
8. Кузнєцова І. М. Нанорозмірні та мономолекулярні електронні структури: навч.-метод. посібник для студ. ЗДІА спец. 6.090804 "ФБМЕ" : навч. посібник / І. М. Кузнєцова ; ЗДІА. - Запоріжжя : ЗДІА, 2009. - 120 с.
9. Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников : учеб. пособие для вузов / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. - М. : Наука, 1990. - 685 с.