

УДК 538.935 PACS numbers: 71.15.Mb, 71.20.-b,
73.22.Pr, 73.23.Ad, 84.32.Ff, 85.35.-p

РОЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИКИ И КОНТАКТОВ В КОНЦЕПЦИИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ «СНИЗУ – ВВЕРХ»

Ю.А. Кругляк, проф.
Л.В. Ременяк, старш. преп.

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, quantumnet@yandex.ua

В рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники, рассматривается диффузионно-дрейфовая модель тока на основе транспортного уравнения Больцмана, роль внешнего электрического поля при выходе за пределы режима линейного отклика, полевой транзистор и ток насыщения, роль зарядания проводника, точечная и расширенная модели проводника, роль контактов, модели $p - n$ переходов, генерация тока в проводнике с асимметричными контактами.

Ключевые слова: нанofизика, нанoeлектроника, молекулярная электроника, диффузионно-дрейфовая модель, ток насыщения, роль контактов.

1. ВСТУПЛЕНИЕ

До сих пор, ни при изложении причин возникновения электрического тока [1], ни при обсуждении уравнения диффузии для описания баллистического транспорта электронов [2], не привлекалось внешнее электрическое поле в качестве причины, создающей разность потенциалов на концах проводника, хотя именно оно и в поныне практикуемом стандартном изложении объявляется причиной, порождающей электрический ток. Может показаться парадоксальным, что фактически вся теория электрической проводимости была построена [1, 3] без привлечения понятия внешнего электрического поля.

Сами электрические поля удобно представлять в виде градиента электростатического потенциала U/q . Мы же при объяснении причины возникновения электрического тока пользовались электрохимическим потенциалом μ . Различие между этими двумя потенциалами следующее:

$$\mu = (\mu - U) + U, \quad (1)$$

где первое слагаемое обычно называют электрохимическим потенциалом, а второе – электростатическим потенциалом. Соотношение между потенциалами и их связь с плотностью состояний показана на рис. 1.

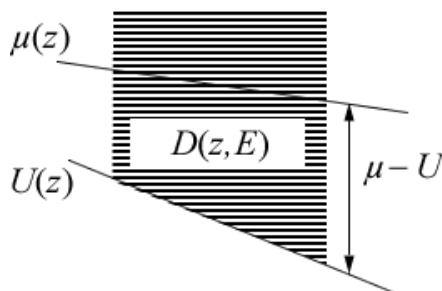


Рис. 1 – Качественная картина изменения электрохимического μ/q и электростатического U/q потенциалов вдоль длины проводника z . Разность между ними есть варьируемая вдоль длины проводника плотность состояний $D(z, E)$.

Электрохимический потенциал μ фиксирует энергию, вплоть до которой включительно заполнены электронные состояния проводника, а электростатический потенциал U определяет сдвиг всех доступных электронных состояний проводника, так что их разность $\mu - U$ есть мера заполненности уровней энергии электронами и просто равна числу электронов.

Уравнение диффузии, связывающее электрический ток с градиентом электрохимического потенциала, было получено ранее (ур-е (A1.1) в [2]), а именно:

$$\frac{I}{A} = -\sigma \frac{d(\mu/q)}{dz}, \quad (2)$$

где σ – удельная проводимость проводника [1] с площадью поперечного сечения A . Однако, фактически в [2] мы получили уравнение

$$\frac{I}{A} = -\sigma \frac{d(\mu - U)/q}{dz} \quad (3)$$

в предположении, что внешнее электрическое поле $d(U/q)/dz$ равно нулю. Каким же должно быть уравнение диффузии, если мы хотим учесть отличное от нуля внешнее электрическое поле?

2. ДИФфуЗИЯ И ДРЕЙФ

На первый взгляд кажется, что для вывода такого уравнения потребуется с самого начала учесть влияние электрического поля $d(U/q)/dz$ на все электроны проводника. Однако, необходимости решать такую задачу «с нуля» нет, поскольку согласно постулатам равновесной статистической механики электрический ток отсутствует, если электрохимический потенциал μ на обоих концах проводника один и тот же, точно так же как и отсутствует поток тепла, если температура на обоих концах проводника одна и та же. Поэтому уравнением диффузии и при отличном от нуля

внешнем электрическом поле должно быть уравнение (2), которое удобно переписать в виде суммы двух вкладов

$$\frac{I}{A} = -\sigma \frac{d(\mu - U)/q}{dz} - \sigma \frac{dU/q}{dz}, \quad (4)$$

первый из которых описывает диффузию, а второй – дрейф. При этом оба вклада пропорциональны одному и тому же значению удельной проводимости – требование, ведущее к соотношению Эйнштейна между диффузией и дрейфом заряженных частиц [4–6]. Именно поэтому мы можем найти электрическую проводимость σ , рассматривая лишь диффузию электронов в отсутствие внешнего электрического поля ($U = 0$), заменив ур-е (3) уравнением (2), которое, как оказывается, уже все учитывает. Нет нужды отдельно рассматривать задачу о дрейфе. Другими словами, диффузионное уравнение (2) является на самом деле уравнением, описывающим и диффузию и дрейф, хотя сам дрейф в явном виде не рассматривается.

А не могли бы мы вместо изложенного выше подхода пренебречь в уравнении (4) диффузионным вкладом и учесть лишь дрейфовую составляющую? Ведь в этой модели ток действительно порождается внешним электрическим полем и нет нужды обращаться к электрохимическим потенциалам. Проблема с таким подходом, однако, состоит в том, что теперь надо привлекать некие мистические силы, чтобы объяснить почему внешнее электрическое поле действует лишь на некоторые электроны проводника, а не на все электроны. В развиваемом Даттой [3] подходе энергетическое окно для транспорта электронов определяется функцией F_T (ф-ла (11) и рис. 3 в [1]), возникающей естественным образом как результат «подготовки» двух контактов (уравнения (20) и (21) в [1]):

$$f_1(E) - f_2(E) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\mu_1 - \mu_2). \quad (5)$$

Ниже мы обоснуем пренебрежение дрейфовой составляющей в (4) опираясь на транспортное уравнение Больцмана (ТУБ), более известное в русскоязычной литературе как кинетическое уравнение Больцмана, которое обычно является отправной точкой при обсуждении любых задач транспорта частиц. Мы уже обращались к ТУБ в связи с эффектом Холла [7]. Как и прежде, не вдаваясь в детали, покажем лишь, что в режиме линейного отклика ток действительно зависит лишь от градиента электрохимического потенциала $d\mu/dz$, а не от градиента электростатического потенциала dU/dz . Покажем также, что в случае динамического, переменного во времени транспорта пренебрежение учетом электрических полей может привести к ошибочным результатам. Даже в условиях динамического равновесия электрические поля играют важную роль в описании всей вольт-амперной характеристики, как только мы выходим за пределы

режима линейного отклика.

3. ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

При рассмотрении токов в режиме неравновесных потенциалов [2] были введены функции распределения f^+ и f^- и соответствующие электрохимические потенциалы μ^+ и μ^- , которые описывают токи I^+ и I^- , берущие свое начало на истоке и стоке, соответственно (рис. 2).

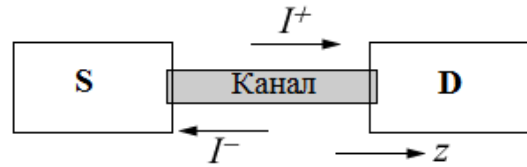


Рис. 2 – Токи I^+ и I^- , порождаемые, соответственно, истоком S и стоком D.

Токи I^+ и I^- , а рассматриваем мы, как и прежде, упругие резисторы [1], формируются электронами, движущимися под разными углами по отношению к оси проводника и таким образом имеющих различные значения z -проекции импульса p_z , хотя полный импульс у них сохраняется и энергия электронов постоянна. Для учета влияния электрического поля на такой проводник нужны функции распределения $f^+(z, p_z, t)$ и $f^-(z, p_z, t)$ с учетом зависимости от импульса в явном виде. Такие функции даются решениями ТУБ

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + F_z \frac{\partial f}{\partial p_z} = S_{op} f \quad (6)$$

и показывают они заселенность состояний с заданными значениями скорости v_z и импульса p_z , в точке проводника z в момент времени t , где F_z есть сила, действующая на электрон в тот же момент времени t , а под символом S_{op} подразумевается соответствующий оператор рассеяния, распределяющий электроны по состояниям со всеми возможными значениями скорости.

Если в уравнении (6) правую часть занулить (рассеяние отсутствует)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + F_z \frac{\partial f}{\partial p_z} = 0, \quad (7)$$

то такое уравнение полностью эквивалентно описанию набора частиц с импульсами $p_z(t)$ в точках проводника $z(t)$, динамика которых описывается законами классической механики

$$v_z \equiv \frac{dz}{dt} = \frac{\partial E}{\partial p_z}, \quad (8)$$

$$F_z \equiv \frac{dp_z}{dt} = -\frac{\partial E}{\partial z}, \quad (9)$$

где $E(z, p_z, t)$ – полная энергия, с одним лишь отличием: если уравнения (8) и (9) описывают динамику одиночной частицы, положение и импульс которой меняются со временем, то в ур-и (7) все три переменных z, p_z, t равноправны и независимы друг от друга, в результате чего достигается описание коллективно-транспортного процесса.

Для вывода ур-я (7) из уравнений (8) и (9) обратим внимание прежде всего на то, что в отсутствии рассеяния

$$f(z, p_z, t) = f(z - v_z \Delta t, p_z - F_z \Delta t, t - \Delta t), \quad (10)$$

что отражает следующий очевидный факт: любой электрон с импульсом p_z в положении z в момент времени t должен иметь импульс $p_z - F_z \Delta t$ в положении $z - v_z \Delta t$ в более ранний момент времени $t - \Delta t$.

Далее поступим просто: разложим уравнение (10) в ряд Тейлора и ограничимся лишь первым порядком:

$$f(z, p_z, t) = f(z, p_z, t) - \frac{\partial f}{\partial z} v_z \Delta t - \frac{\partial f}{\partial p_z} F_z \Delta t - \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t, \quad (11)$$

сократим подобные и получим ТУБ в отсутствии рассеяния (7).

Далее для наших целей достаточно рассеяние $S_{op} f$ в (6) учесть лишь в приближении времени релаксации (ВР) [7, 8]

$$S_{op} f \cong - \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (12)$$

которое предполагает, что эффект от влияния рассеяния просто пропорционален отклонению искомой функции распределения f от ее равновесного значения f_0 . Такой подход надо считать квазиклассическим. И вот почему. Само ур-е (6) можно считать классическим в том смысле, что электроны рассматриваются в нем как частицы. Но оно не совсем классическое применительно к электронам, поскольку оператор рассеяния S_{op} в принципе имеет квантовую природу, а кроме того в левой части уравнения фактически учитывается дисперсионное соотношение. Для графена, например, оно имеет вид

$$\vec{E} = \pm v_0 \vec{p},$$

следующий из его зонной структуры [9, 10], также имеющей квантовую природу. Если согласиться с квазиклассической природой транспортного уравнения Больцмана применительно к электронам, то многие транспортные свойства графена получают свое правдоподобное объяснение [11 – 16], чего сам Людвиг Больцман [17] в 1872 году предвидеть, конечно, не мог.

4. УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ КАК СЛЕДСТВИЕ ТУБ

Из полного ТУБ (6) в приближении ВР (12) в условиях динамического равновесия ($\partial/\partial t = 0$)

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} + F_z \frac{\partial f}{\partial p_z} = - \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (13)$$

Полная энергия в присутствии внешнего электрического поля

$$E(z, p_z) = \varepsilon(p_z) + U(z), \quad (14)$$

где дисперсионное соотношение $\varepsilon(p_z)$ испытывает сдвиг со стороны внешнего поля $U(z)$, как это показано на рис. 3.

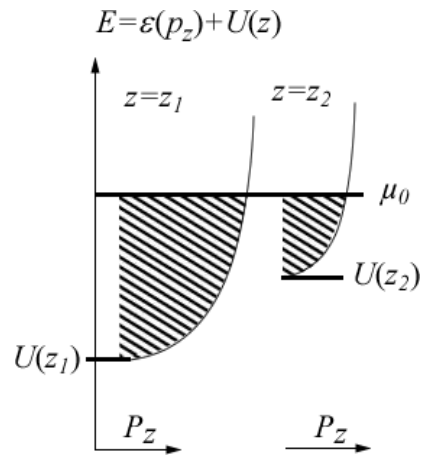


Рис. 3 – Дисперсия при $U = 0$ ($z = z_1$) испытывает сдвиг при включении поля $U = U(z_2) - U(z_1)$. В состоянии равновесия электрохимический потенциал $\mu_0 = \text{Const}$.

Сначала обратим внимание на то, что равновесное распределение

$$f_0(z, p_z) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E(z, p_z) - \mu_0}{kT}\right) + 1} \quad (15)$$

при постоянном значении электрохимического потенциала μ_0 удовлетворяет ТУБ (13). Правая часть ур-я (13) очевидно равна нулю. Убедимся, что и левая часть ур-я (13) также равна нулю. Для этого введем новую переменную

$$X_0 \equiv E(z, p_z) - \mu_0 = \varepsilon(p_z) + U(z) - \mu_0 \quad (16)$$

и учтем соотношения (8) и (9), а именно

$$v_z \frac{\partial f_0}{\partial z} + F_z \frac{\partial f_0}{\partial p_z} = \left(\frac{\partial f_0}{\partial X_0}\right) \left(v_z \frac{\partial X_0}{\partial z} + F_z \frac{\partial X_0}{\partial p_z}\right) = \left(\frac{\partial f_0}{\partial X_0}\right) \left(v_z \frac{\partial E}{\partial z} + F_z \frac{\partial E}{\partial p_z}\right) = 0. \quad (17)$$

Ситуация в отсутствие равновесия качественно показана на рис. 4.

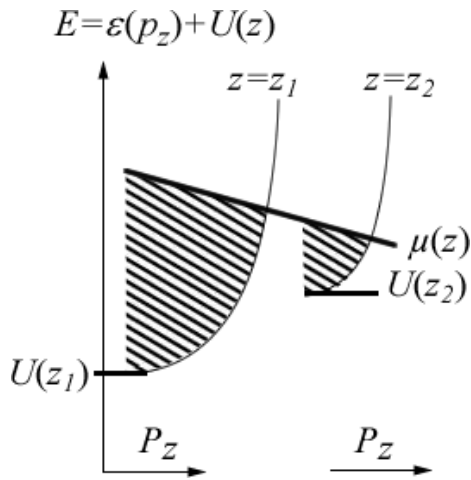


Рис. 4 – В отсутствие равновесия электрохимический потенциал изменяется вдоль проводника: $\mu = \mu(z)$.

Пусть функция распределения в отсутствие равновесия имеет тот же вид (15), но с пространственно переменным электрохимическим потенциалом:

$$f(z, p_z) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E(z, p_z) - \mu(z)}{kT}\right) + 1} \quad (18)$$

Введем с учетом (16) новую переменную

$$X \equiv E(z, p_z) - \mu(z) = X_0(z, p_z) + \mu_0 - \mu(z), \quad (19)$$

в которой фигурирует отличие текущего значения электрохимического потенциала $\mu(z)$ от его равновесного значения μ_0 . С новой переменной левая часть ур-я (13) оказывается равной

$$\left(\frac{\partial f}{\partial X}\right) \left(v_z \frac{\partial X}{\partial z} + F_z \frac{\partial X}{\partial p_z} \right) = \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right) \left(-v_z \frac{\partial \mu}{\partial z} \right), \quad (20)$$

в чем убедиться можно следующим образом: в левую часть (20) подставим вместо скорости и силы уравнения (8) и (9) и возьмем производные от новой переменной X (19); в результате сократится слагаемое $(\partial E / \partial z)(\partial E / \partial p_z)$ и останется лишь $-v_z d\mu / dz$.

В условиях малости отклонения электрохимического потенциала $\mu(z)$ от его равновесного значения μ_0 переменные (19) и (16) близки друг к другу, так что правую часть ур-я (20) можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)_{X=X_0} \left(-v_z \frac{\partial \mu}{\partial z} \right), \quad (21)$$

чему равна левая часть исходного ур-я (13). В его правой части стандартно перейдем от функций распределения к электрохимическим потенциалам (ф-ла

(25) в [1]):

$$-\frac{f - f_0}{\tau} \cong \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)_{X=X_0} \frac{\mu(z) - \mu_0}{\tau}. \quad (22)$$

Сравнивая левую (21) и правую (22) части исходного ТУБ (13), получаем искомое уравнение диффузии

$$v_z \frac{d\mu}{dz} = -\frac{\mu(z) - \mu_0}{\tau}. \quad (23)$$

Введем отдельные электрохимические потенциалы μ^+ и μ^- для электронов, движущихся слева направо ($v_z > 0$) и справа налево ($v_z < 0$) (рис. 2):

$$\frac{d\mu^+}{dz} = -\frac{\mu^+ - \mu_0}{v_z \tau}, \quad \frac{d\mu^-}{dz} = \frac{\mu^- - \mu_0}{v_z \tau}. \quad (24)$$

Выбрав равновесное значение химического потенциала как полусумму $\mu_0 = (\mu^+ + \mu^-) / 2$, имеем:

$$\frac{d\mu^+}{dz} = -\frac{\mu^+ - \mu^-}{\lambda} = \frac{d\mu^-}{dz}, \quad (25)$$

где $\lambda = 2v_z \tau$. Комбинируя (25) с уравнениями для тока (ур-я (A1.23) в [2]) окончательно получаем диффузионные уравнения для тока (A1.23) в [2], приведенные в [2] без доказательства.

Обратим внимание на методически важное обстоятельство: при выводе уравнений (25) мы в явном виде учитывали внешнее электрическое поле и показали, что его влияние оказывается нулевым: внешнее приложенное электрическое поле не влияет на низковольтную проводимость (режим линейного отклика). Вместе с тем, любые поля, встроенные в проводник, находящийся в условиях равновесия электрохимического потенциала, влияют на низковольтную проводимость. Интересное обсуждение этого важного вопроса, роли гетероструктур и транспорта во внешнем переменном электрическом поле можно найти в [3, 18].

5. РОЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИКИ

Внешнее электрическое поле играет важную роль как только мы выходим за пределы режима линейного отклика. Роль внешнего электростатического потенциала и соответствующего электрического поля мы продемонстрируем на примере простейшего полевого нанотранзистора, вольт-амперная характеристика которого за пределами режима линейного отклика контролируется приложенным электростатическим потенциалом.

Ток в модели упругого резистора дается формулой (32) из [1], а именно:

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

При учете внешнего электростатического потенциала U

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E-U) (f_1(E) - f_2(E)), \quad (26)$$

при этом на первых порах будем пользоваться точечной моделью канала переноса электронов, которая предполагает неизменность плотности состояний $D(E)$ при движении вдоль проводника. Позже перейдем к стандартной расширенной модели проводника, учитывающей градиент $D(E)$ при переходе вдоль проводника от истока к стоку.

5.1 Полевой транзистор

В простейшем варианте это трехтерминальное устройство (рис. 5) (исток/source/S – сток/drain/D – затвор/gate/G), при этом затвор отделен от канала проводимости диэлектрической прокладкой, так что ток через затвор не идет: потенциал затвора V_G позволяет контролировать ток $I(V_D)$ в канале проводимости.

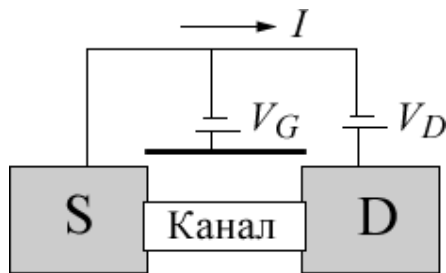


Рис. 5 – Простейший трехтерминальный полевой транзистор.

Характерная вольт-амперная характеристика полевого транзистора показана на рис. 6.

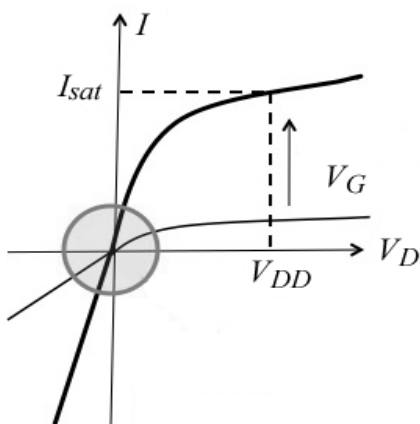


Рис. 6 – Типичная вольт-амперная характеристика $I(V_D)$ полевого транзистора и ее изменение с ростом потенциала затвора V_G . Кругом показана область режима линейного отклика.

Все ясно с низковольтной проводимостью. Однако, с ростом V_D происходит нарушение закона Ома и появляются эффекты, требующие пересмотра и дополнения уже привычных представлений.

Пусть потенциал на затворе нулевой, а в щели $\mu_1 - \mu_2$ нет электронных состояний проводника (рис. 7): тока нет.

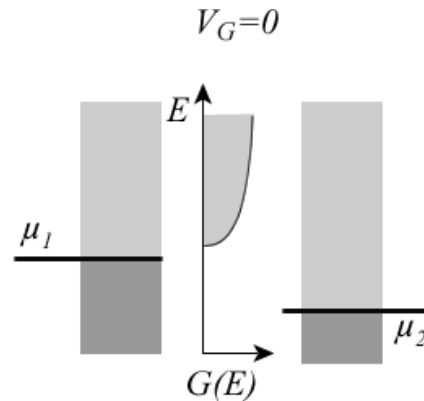


Рис. 7 – В проводнике нет тока.

При подаче положительного потенциала на затвор $V_G > 0$ все уровни энергии проводника понижаются, ток увеличивается тем больше, чем больше положительный потенциал на затворе (рис. 8), в чем можно убедиться подставляя $U = qV_G$ в ур-е (26).

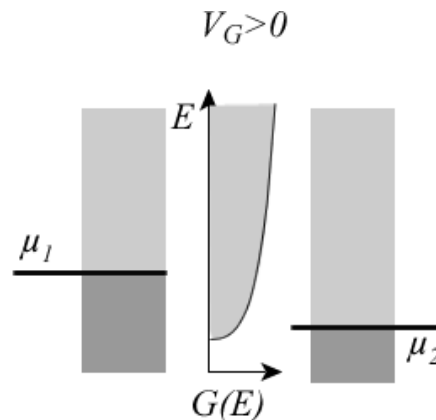


Рис. 8 – Положительный потенциал на затворе понижает все уровни энергии проводника. Ток увеличивается тем больше, чем больше положительный потенциал на затворе.

Такова ситуация для n -проводников. Для проводников p -типа плотность состояний нисходящая с ростом энергии [19] и возрастание положительного потенциала на затворе ведет к противоположному эффекту по току. Далее будем рассматривать только проводники n -типа.

5.2 Ток стремится к насыщению

По мере роста напряжения V_D ток не возрастает линейно согласно закону Ома, а стремится к насыщению (рис. 6). Причина очевидна. Как только электрохимический потенциал стока μ_2 опустился ниже дна зоны проводимости (рис. 9), увеличение тока произойти уже не может.

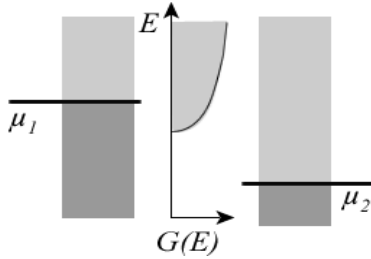


Рис. 9 – Ток испытывает насыщение как только электрохимический потенциал стока μ_2 оказывается ниже дна зоны проводимости.

Величина тока насыщения определяется из ур-я (26), а именно:

$$I_{sat} = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E-U) f_1(E), \quad (27)$$

где фермиевская функция на стоке опущена, поскольку предполагается, что для всех отличных от нуля мод проводимости фермиевская функция на стоке нулевая.

Если бы ток насыщения определялся бы только значением потенциала на затворе

$$U^{(1)} = -qV_G, \quad (28)$$

то насыщение было бы полным (горизонтальная полочка) как только μ_2 окажется на несколько kT ниже дна зоны проводимости. В реальных же экспериментах ток продолжает расти с увеличением V_D (рис. 6). Причина заключается в том, что увеличение потенциала на стоке V_D не только ведет к понижению электрохимического потенциала μ_2 , но и к понижению всех уровней энергии проводника (рис. 10) подобно тому, как это происходит при увеличении потенциала на затворе V_G .

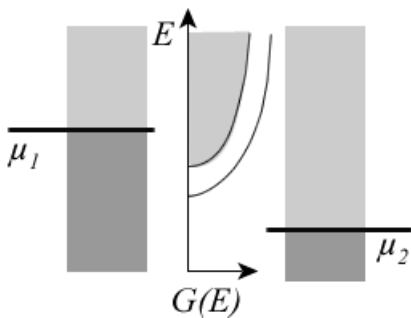


Рис. 10 – При понижении μ_2 , что соответствует росту потенциала на стоке V_D , понижаются также все уровни в зоне проводимости проводника.

В конечном результате ток продолжает несколько возрастать по мере того, как проводимость $G(E)$ ползет вниз по энергии на некоторую долю α ($\alpha < 1$) от потенциала на стоке V_D , что и отражено ниже в более точной модели для тока насыщения:

$$U^{(2)} = \alpha(-qV_D) + \beta(-qV_G) \equiv U_L. \quad (29)$$

Задача создания хорошего полевого транзистора сводится к тому, чтобы величину α сделать как можно меньшей и тем самым влияние потенциала на стоке V_D свести к минимуму. Если величина α окажется нулевой, ток выйдет на полное насыщение (рис. 11), что и соответствует идеальному полемому транзистору: в таком транзисторе ток насыщения полностью определяется потенциалом на затворе V_G и никак не зависит от потенциала на стоке V_D .

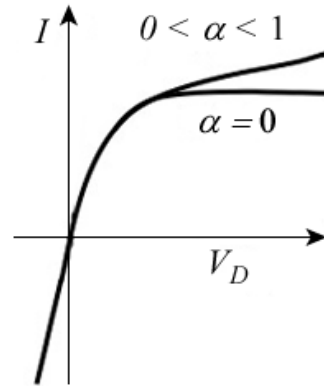


Рис. 11 – Ток в полевым транзисторе испытывает полное насыщение, если он в режиме насыщения не подвержен влиянию потенциала на стоке V_D .

Чтобы гарантировать существенно преобладающий контроль над каналом проводимости со стороны затвора по сравнению со стоковым терминалом, нужно толщину диэлектрической прокладки затвора сделать существенно меньшей длины проводника. При типичной длине проводника в современных транзисторах в несколько сот атомов, толщина диэлектрической прокладки должна быть лишь несколько атомов, чтобы обеспечить нужное малое значение α . Поразительно, как такая толщина с высокой надежностью контролируется в производстве современных нобутоков.

5.3 Роль заряжения проводника

Есть еще один эффект, который ведет к увеличению тока насыщения сверх того значения, которое получается при использовании (29) в (26). В проводнике под напряжением заселенность состояний проводника меньше по сравнению с заселенностью проводника в состоянии динамического равновесия, когда оба контакта стремятся максимально заполнить доступные состояния проводника. Тогда как под напряжением исток стремится пополнить электронами состояния проводника, а сток стремится электронами удалить из проводника. Уменьшение максимально возможной заселенности электронами состояний проводника под напряжением ведет к заряданию проводника положительным зарядом, что в свою очередь ведет к понижению всех состояний проводника (рис. 10) и даже в случае идеального транзистора ($\alpha = 0$) увеличивает ток.

Учесть эффект заряжания в рамках точечной модели проводника можно путем добавления к потенциалу проводника U_L (29) еще одного слагаемого

$$U = U_L + U_0(N - N_0), \quad (30)$$

которое учитывает отличие равновесного числа электронов в проводнике N_0 от его неравновесного значения N в условиях нахождения проводника под напряжением, где U_0 есть вклад в потенциал проводника в пересчете на один электрон.

Равновесное число электронов в проводнике N_0 вычисляется через равновесное значение фермиевской функции $f_0(E)$:

$$N_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E - U) f_0(E), \quad (31)$$

а соответствующее неравновесное значение

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E - U) \frac{f_1(E) + f_2(E)}{2} \quad (32)$$

в предположении, что проводник с обоими контактами взаимодействует одинаково хорошо.

Как только найден потенциал проводника U , удовлетворяющий одновременно уравнениям (30) – (32), ток вычисляется по (26) или по эквивалентному ему уравнению

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) (f_1(E + U) - f_2(E + U)). \quad (33)$$

Вычисление потенциала проводника U , сводится к итерационному процессу, принципиальная блок-схема которого показана на рис. 12.

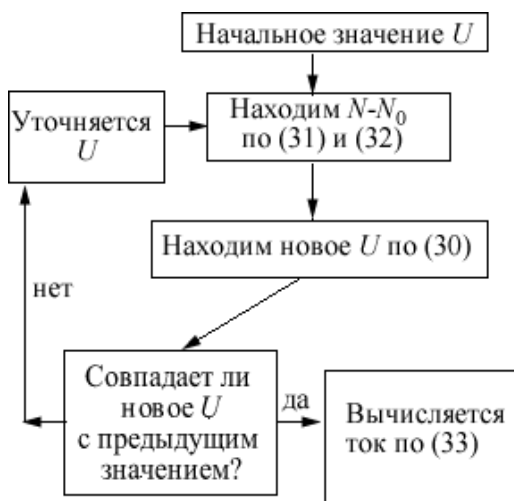


Рис. 12 – Самоогласованная процедура вычисления потенциала проводника U и тока в точечной модели проводника.

Простая точечная модель проводника оказывается вполне приемлемой по сравнению с более строгими подходами [20].

5.4 Расширенная модель проводника

Точечная модель проводника не учитывает градиент электрического поля в канале проводимости и предполагает, что плотность состояний $D(E)$ остается постоянной на всем протяжении проводника от истока до стока. В реальности электрическое поле понижает уровни энергии проводника вблизи стока в большей мере по сравнению с истоком, в результате чего наблюдается градиент плотности состояний $D(z, E)$ (рис. 13). Как это влияет на ток?

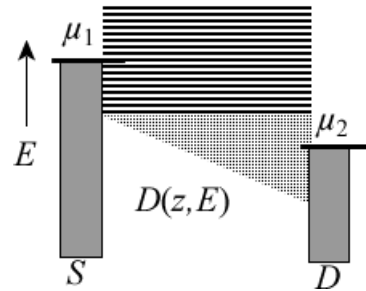


Рис. 13 – Ненулевое электрическое поле в канале проводимости больше понижает состояния проводника ближе к стоку по сравнению с истоком.

На первый взгляд кажется, что в случае упругого резистора «косоидущие состояния» не могут дать вклад в проводимость, поскольку в упругом резисторе вклад в проводимость могут дать лишь состояния с постоянной энергией, начинающиеся на истоке и заканчивающиеся на стоке. Однако, даже для идеального упругого резистора должно иметь место увеличение тока, поскольку число мод вблизи стока больше числа мод у истока (рис. 14).

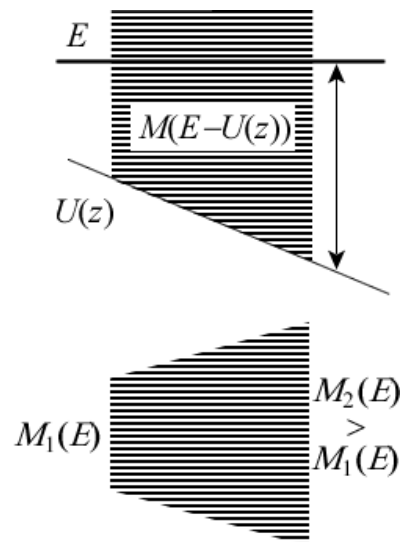


Рис. 14 – Градиент электрического поля в канале проводимости приводит к большему числу мод вблизи стока по сравнению с истоком.

Вызвано это тем, что число мод с энергией E зависит от того, насколько далеко эта энергия находится от дна зоны проводимости, положение которого определяется потенциалом $U(z)$, значение которого

ниже у стока по сравнению с истоком (рис. 14).

Структура спектра состояний проводника выглядит как бы более растянутой у стока по сравнению с истоком. Это не существенно для баллистического проводника, а вот для проводника, длина которого L намного больше средней длины свободного пробега λ , уширение спектра на стоке может увеличить проводимость.

В общем случае можно написать, что

$$\frac{q^2}{h} \frac{M_1 \lambda}{L + \lambda} \leq G(E) \leq \frac{q^2}{h} M_1. \quad (34)$$

Этот эффект не существенен для квазибаллистических упругих каналов, поскольку для таких каналов минимальные и максимальные значения проводимости по (33) фактически одинаковы. На самом деле увеличение проводимости можно приписать зависимости средней длины свободного пробега от электрического поля, чем можно пренебречь в режиме линейного отклика, чем мы фактически и пользовались.

Как учесть градиент электрического поля количественно? Для этого в диффузионном уравнении (2) учтем пространственное изменение удельной проводимости вдоль длины проводника:

$$\frac{I}{A} = - \frac{\sigma(z)}{q} \frac{d\mu}{dz}. \quad (35)$$

Если ранее удельная проводимость усреднялась по энергии в пределах фермиевского окна проводимости шириной в несколько kT в окрестности $E = \mu_0$:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sigma(E) \left(- \frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=\mu_0}, \quad (36)$$

то теперь переменный вдоль длины проводника электростатический потенциал $U(z)$ сдвигает состояния проводника по энергии (рис. 1), в результате чего усреднение нужно вести в окрестности $E = \mu(z) - U(z)$:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sigma(E) \left(- \frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=\mu(z)-U(z)}. \quad (37)$$

Обратим внимание на то, что использование уравнений (35) и (37) требует вычисления $\mu(z) - U(z)$ из итерационной процедуры решения уравнения Пуассона

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon \frac{dU}{dz} \right) = q^2 (n - n_0), \quad (38)$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость прокладки затвора, а n_0 и $n(z)$ – электронная плотность на единицу длины в канале проводимости в состоянии равновесия и вне равновесия, которые можно вычислить согласно определению, а именно:

$$n(z) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{D(E-U(z))}{L} \frac{1}{e^{(E-\mu(z))/kT} + 1}, \quad (39)$$

$$n_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{D(E)}{L} \frac{1}{e^{(E-\mu_0)/kT} + 1}. \quad (40)$$

Принципиальная блок-схема вычисления тока в расширенной модели проводника показана на рис. 15.



Рис. 15 – Самоогласованная процедура вычисления потенциала проводника U и тока в расширенной модели проводника.

Нужно иметь в виду, что изложенный выше подход основан на модели локальных электрохимических потенциалах $\mu^\pm(z)$, описывающих транспорт электронов направо и налево, среднее значение которых фигурирует в уравнении диффузии (23). В общем же случае распределение электронов может настолько сильно отличаться от фермиевского, что концепция электрохимических потенциалов окажется неадекватной и потребуются решать транспортное уравнение Больцмана, что является несравненно более сложной задачей. Несмотря на значительные успехи в этом направлении, уравнение диффузии, основанное на концепции локальных химпотенциалах, попрежнему остается главным инструментом в моделировании электронных устройств.

Концепция «снизу – вверх» расширяет область применимости уравнений диффузии (23) и (35). Ими можно пользоваться и для моделирования баллистических каналов, если только должным образом модифицировать граничные условия с целью учесть граничные сопротивления (ур-я (A1.16) в [2]).

6. КОНТАКТЫ

Закон Ома в новой формулировке [1, 3], применимой и для нанотранзисторов и для макропроводников,

$$R = \frac{\rho(L + \lambda)}{A} \quad (41)$$

содержит дополнительное сопротивление $\rho\lambda/A$, которое определяется только свойствами канала проводимости и не может быть устранено лучшим подбором терминальных контактов.

Как показано в Приложении 1 работы [2], ключе-

вым моментом в идентификации этого дополнительного сопротивления как граничного было различие между электрохимическими потенциалами μ^+ и μ^- , соответствующих модам проводимости слева – направо и справа – налево (рис. 16).

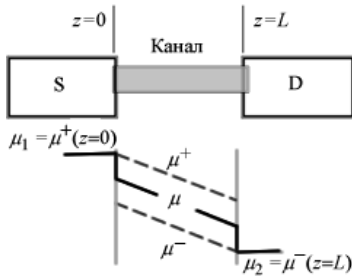


Рис. 16 – Профиль электрохимических потенциалов μ^+ и μ^- в канале проводимости.

Из уравнений (A1.15) и (A1.23) работы [2], и помня о том, что $\mu_1 - \mu_2 = qV$, для разности между потенциалами μ^+ и μ^- имеем:

$$\delta\mu \equiv \mu^+ - \mu^- = \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + L/\lambda}. \quad (42)$$

Контакты, поддерживаемые при различных химических потенциалах μ_1 и μ_2 , выводят из равновесия моды проводимости, связанные с истоком и со стоком, тогда как процессы обратного рассеяния, контролируемые величиной λ , стремятся восстановить равновесие. Результат конкуренции этих двух тенденций описывается уравнением (42).

Подчеркнем, что соотношение различных электрохимических потенциалов к разным модам состояний проводника повсеместно используется при анализе и конструировании электронных устройств. Примером могут служить $p-n$ переходы.

6.1 $p-n$ переходы

На рис. 17 показано характерное изменение плотности состояний $D(z, E)$ в $p-n$ переходе. Положительный потенциал приложен справа, так что $\mu_2 < \mu_1$.

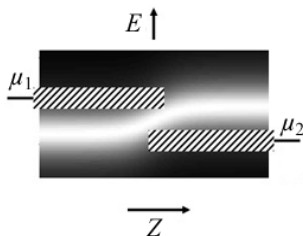


Рис. 17 – Типичная картина пространственного изменения плотности состояний в $p-n$ переходе.

Левый контакт взаимодействует с модами проводимости шириной в несколько kT , показанными штриховкой слева в районе значения μ_1 , а правый контакт – с модами проводимости, показанными штриховкой справа в районе значения μ_2 . Можно

представить себе идеализированную диаграмму этих двух групп мод, идущих от одного контакта, но не приходящих к другому контакту (рис. 18).

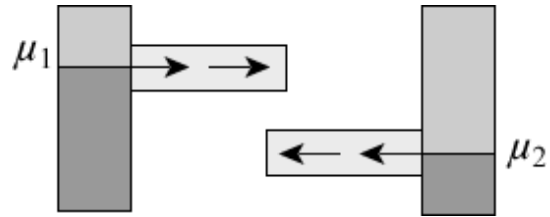


Рис. 18 – Идеализированная модель $p-n$ перехода на рис. 17.

На самом деле ни левая, ни правая группы мод не изолированы полностью от противоположного контакта. Разработчикам электронных устройств, для достижения максимально возможной изоляции часто приходится существенно удлинять проводник.

Возможен ли ток в подобном устройстве? Безусловно нет, если речь идет об упругом резисторе: нет канала проводимости, который позволил бы электрону пролететь баллистически от одного контакта к другому. Но ток действительно имеет место и обеспечивается он неупругими процессами в зоне перехода, которые позволяют электрону изменить свою энергию и достичь противоположного контакта (рис. 19).

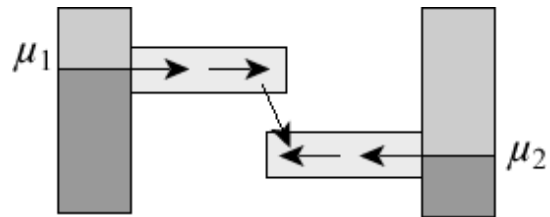


Рис. 19 – Ток в идеализированной модели $p-n$ перехода (рис. 18) обеспечивается неупругими процессами в зоне перехода.

Именно таким образом ток преодолевает $p-n$ переходы: с верхних по энергии мод на нижние по энергии моды за счет неупругих RG-процессов (Recombination / Generation), название которых берет свое начало со все еще широко распространенных представлений об электронно-дырочных взаимодействиях в $p-n$ переходах.

Физически корректно обе группы мод рассматривать порознь путем введения разных для них химических потенциалов, перечисляемых специальным индексом:

$$I_n = -\frac{\sigma_n}{q} \frac{d\mu_n}{dz}. \quad (43)$$

Все токи увязаны друг с другом неупругими RG-процессами в области $p-n$ перехода

$$\frac{dI_n}{dz} = \sum_m \{ [RG]_{m \rightarrow n} - [RG]_{n \rightarrow m} \}, \quad (44)$$

которые электроны из одной группы мод m перебра-

сывают в другую группу мод n и наоборот. Именно так моделируют $p-n$ переходы.

Ток в $p-n$ переходе дается выражением вида [21]

$$I = I_0 (e^{qV/kT} - 1), \quad (45)$$

где значения ν и I_0 определяются природой неупругих RG-процессов. Проводимости σ_n в (43) обеих групп мод практически не играют никакой роли в токе $p-n$ перехода (45). Физическая причина этого очевидна. Лимитирующую стадию тока $p-n$ перехода определяют неупругие процессы, перебрасывающие электроны из одной группы мод в другую группу, а транспорт электронов в пределах каждой из групп добавляет лишь дополнительное сопротивление в электронную схему соответствующего устройства. Ниже мы дадим вывод вольт-амперной характеристики $p-n$ перехода (45) для частного случая $\nu = 1$.

До сих пор мы рассматривали только лишь проводимость однородных p - и n -проводников. И этого может быть достаточно для анализа и моделирования многих электронных устройств, например, полевых транзисторов. Другая ситуация, однако, с устройствами, в которых используются $p-n$ переходы. Здесь иные вольт-амперные характеристики и фактически другая физика лежит в их основе.

6.2 Вольт-амперные характеристики

Рассмотрим устройство (рис. 20), в котором верхняя группа мод A кластеризуется вокруг энергии ε_A , а нижняя B – вокруг энергии ε_B .

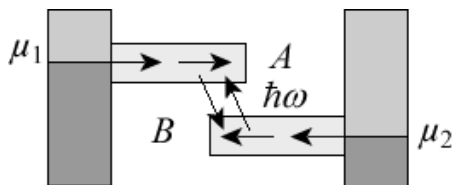


Рис. 20 – Та же самая ситуация, что и на рис. 19, с двумя группами мод, обозначенными буквами A и B и увязанными неупругими взаимодействиями.

Физика подобных устройств описывается не уравнениями типа (43), а уравнениями (44), которые для двухуровневой ситуации (рис. 20) можно переписать в виде

$$I \sim D_{B \leftarrow A} f_A(\varepsilon_A) [1 - f_B(\varepsilon_B)] - D_{A \leftarrow B} f_B(\varepsilon_B) [1 - f_A(\varepsilon_A)], \quad (46)$$

где коэффициенты $D_{B \leftarrow A}$ и $D_{A \leftarrow B}$ характеризуют интенсивность неупругих процессов, индуцирующих переходы из A в B и наоборот из B в A.

Любопытно, что эти две скорости $D_{B \leftarrow A}$ и $D_{A \leftarrow B}$ в общем случае не одинаковы: $D_{A \leftarrow B}$ соответствует поглощению энергии в количестве

$$\hbar\omega = \varepsilon_A - \varepsilon_B, \quad (47)$$

тогда как $D_{B \leftarrow A}$ соответствует выделению такого же количества энергии. А фундаментальный принцип равновесия в статистической механике гласит: если система с неупругими взаимодействиями находится в равновесии при температуре T_0 , то всегда труднее отнять энергию от такой системы, чем передать ей энергию, и отношение этих двух противоположных процессов дается выражением (помним о том, что направление перехода определяется от второго индекса к первому):

$$\frac{D_{A \leftarrow B}}{D_{B \leftarrow A}} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT_0}\right). \quad (48)$$

Теперь для тока из (46) можно написать

$$I \sim D_{A \leftarrow B} f_B(\varepsilon_B) (1 - f_A(\varepsilon_A)) (X - 1), \quad (49)$$

где

$$X \equiv \frac{D_{B \leftarrow A}}{D_{A \leftarrow B}} \frac{f_A(\varepsilon_A)}{1 - f_A(\varepsilon_A)} \frac{1 - f_B(\varepsilon_B)}{f_B(\varepsilon_B)}. \quad (50)$$

Используя (49), (50) и очевидное свойство ферми-евской функции

$$\frac{1 - f_0(\varepsilon)}{f_0(\varepsilon)} = \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_0}{kT}\right), \quad (51)$$

перепишем (50) следующим образом:

$$X = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT_0} - \frac{\hbar\omega}{kT}\right) \exp\left(\frac{\mu_A - \mu_B}{kT}\right). \quad (52)$$

Поскольку группа мод A берет свое начало на контакте 1, а группа мод B – на контакте 2, и если работают слабые неупругие взаимодействия, перебрасывающие электроны с A на B, то можно считать, что моды A практически находятся в равновесии с контактом 1, а моды B – с контактом 2, так что

$$\mu_A - \mu_B \cong \mu_1 - \mu_2 = qV. \quad (53)$$

Если $T_0 = T$, то согласно (49), ток

$$I \sim (X - 1) \sim e^{qV/kT} - 1. \quad (54)$$

Таким образом, мы получили стандартное выражение для вольт-амперной характеристики $p-n$ перехода (45) для частного случая $\nu = 1$. Для значений ν , отличных от 1, требуется учитывать разнообразные RG-процессы в явном виде.

Обратим внимание на то обстоятельство, что устройства на $p-n$ переходах могут быть использованы для генерирования энергии. Если температура T_0 в зоне $p-n$ перехода отличается от температуры T , при

которой поддерживается само устройство ($T_0 \neq T$), то можно получить ток даже в отсутствие приложенного напряжения, например, в короткозамкнутой цепи (short circuit/sc)

$$I_{SC} \equiv I|_{V=0} \sim \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k}\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right) - 1. \quad (55)$$

Таким образом, устройства на $p-n$ переходах принципиально пригодны для конвертации разности температур в электрический ток. Ток в короткозамкнутых цепях меняет направление на обратное при переходе от $T_0 > T$ к $T_0 < T$ [19].

Из уравнения (49) также следует, что в условиях незамкнутой ($I = 0$) цепи (open circuit/oc) должно быть $X = 1$, так что ур-е (52) дает

$$\frac{qV_{oc}}{\hbar\omega} = 1 - \frac{T}{T_0}. \quad (56)$$

Левая часть равенства (56) есть доля энергии в пересчете на один фотон, сгенерированной в условиях пренебрежимо малого тока (практически незамкнутой цепи), а правая часть есть коэффициент полезного действия Карно тепловой машины в виде, скажем, солнечного фотозлемента. Поскольку обычно $T_0 \gg T$, то КПД такой солнечной ячейки может быть очень большим.

Контакты играют фундаментальную роль во всех устройствах наноэлектроники, как впрочем и во многих устройствах микроэлектроники. Получить ток в незамкнутой цепи с симметричными одинаковыми контактами невозможно (рис. 21).

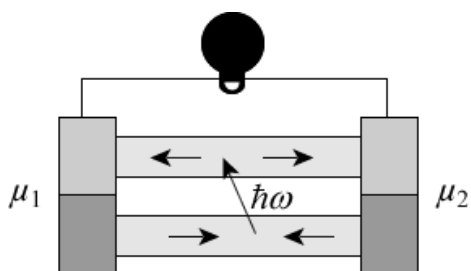


Рис. 21 – Незамкнутая цепь с симметричными контактами генерировать ток не может.

Если в такой же цепи контакты асимметричны и дискриминированы (рис. 22), внешнее воздействие, например, солнечный свет, может электрон с мод В перебросить на одну из мод А и направить далее во внешнюю цепь через левый контакт, тогда как вакансии, образовавшаяся в одной из мод В заполнится электроном, прибывшим через нагрузку на правый контакт.

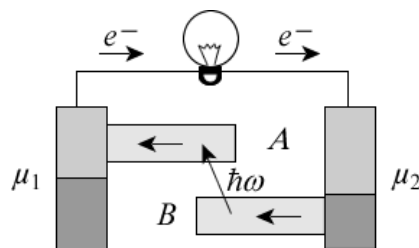


Рис. 22 – Возможность получить ток во внешней цепи, если контакты асимметричны и дискриминированы как в $p-n$ переходах.

Именно асимметрия контактов в $p-n$ переходах принципиально отличает соответствующие устройства от, например, полевых транзисторов, что проявляется не только в вольт-амперных характеристиках, но и в самой физике $p-n$ переходов.

7. ВЫВОДЫ

Подведем итоги. Диффузионно-дрейфовая модель электрического тока рассмотрена на основе транспортно уравнения Больцмана, показана роль внешнего электрического поля при выходе за пределы режима линейного отклика, рассмотрена работа полевого транзистора и показана роль тока насыщения и заряжения проводника, проанализирована точечная и расширенная модели проводника, а также роль контактов, рассмотрены модели $p-n$ переходов, а также генерация тока в проводнике с асимметричными контактами.

Настоящая работа явилась результатом посещения одним из нас (ЮАК) курса лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts», прочитанного он-лайн в январе – апреле 2012 года проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках инициативы Purdue University/ nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стриха М.В. Уроки наноэлектроники. Виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsys. Tech., 2012, vol.9, no.4, pp. 5-30.
2. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стриха М.В. Уроки наноэлектроники. Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsys. Tech., 2013, vol.10, no.2. pp. 5-37.
3. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company., 2012, pp. 473; www.nanohub.org/courses/FoN1.
4. Einstein A. Über die von der molekularinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen // Ann. Physik. 1905, vol.322, no.8, pp. 549-560.
5. Lindsay Stuart. Introduction to Nanoscience. – Oxford, England: Oxford University Press., 2009, pp. 472.
6. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела, тома 1 и 2. – М: Мир. – 1979.

7. Кругляк Ю.О., Стриха М.В. Уроки нанoeлектроники. Эффект Хола і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2014, vol.11, no.1, pp. 5-27.
8. Sears F.W., Salinger G.L. *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics*. – Boston: Addison-Wesley, 1975.
9. Кругляк Ю.А. Графен в транспортной модели Ландауэра – Датты – Лундстрема // *ScienceRise*, 2015, T.2: no.2(7), pp. 93-106.
10. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы // *Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту*. – 2012, В. 13. – С. 207 – 218.
11. Rabi M., Mensah S.Y., Abukari S.S. General Scattering Mechanism and Transport in Graphene // *Graphene2013*, vol.2, no.1, pp. 49-54.
12. Bode N., Mariani E., von Oppen F. Transport properties of graphene functionalized with molecular switches // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2012, vol.24, pp. 394017/1-10.
13. Dong H.M., Xu W., Peeters F.M. High-field transport properties of graphene // *J. Appl. Phys*2011, vol.110, pp. 063704/1-6.
14. Chauhan J., Guo Jing. Inelastic Phonon Scattering in Graphene FETs // *IEEE Trans. Electron Dev.* 2011, vol.58, no.11, pp. 3997-4003.
15. Peres N.M.R. The transport properties of graphene. An introduction // *Rev. Mod. Phys.* 2010, vol.82, no.3, pp. 2673-2700.
16. Barreiro A., Lazzeri M., Moser J., Mauri F., Bachtold A. Transport properties of graphene in the high-current limit // *Phys. Rev. Lett.* 2009, vol.103, pp. 076601/1-4.
17. Больцман Людвиг. Избранные труды. – М: Мир. – 1984. – 590 с.
18. Salahuddin S., Lundstrom M., Datta S. Transport Effects on Signal Propagation in Quantum Wires // *IEEE Trans. Electron Dev.*, 2005, vol.52, no.8, pp. 1734-1742.
19. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стриха М.В. Уроки нанoeлектроники: Термоелектричні явища в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2013, vol.10, no.1, pp. 6-21.
20. Rahman A., Guo Jing, Datta S., Lundstrom M. Theory of Ballistic Nanotransistors // *IEEE Trans. Electron Dev.*, 2003, vol.50, no.9, pp. 1853-1864.
21. Pierret Robert F. *Semiconductor Device Fundamentals*. – Reading, MA: Addison-Wesley. 1996, pp. 791.
4. Einstein A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Ann. Physik*, 1905, vol.322, no.8, pp. 549-560.
5. Lindsay Stuart. *Introduction to Nanoscience*. – Oxford, England: Oxford University Press, 2009, 472 p.
6. Ashcroft N.W., Mermin N.D. *Фізика твердого тела, тома 1 і 2 [Solid State Physics]*. Moscow, Mir, 1979.
7. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E., Strikha M.V. Uroky nanoelektroniki. Efekt Khola i vymiryuvannya elektrokhimichnykh potentsialiv v kontseptsiyi «znyzu – vhoru» [Lessons of Nanoelectronics: The Hall Effect and Measurement of Electrochemical Potentials by «Bottom – Up» Approach]. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2014, vol.11, no.1, pp. 5-27.
8. Sears F.W., Salinger G.L. *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics*. Boston: Addison-Wesley, 1975.
9. Kruglyak Yu.A., Hrafen v transportnoy modeli Landauэра – Датты – Lundstroma [Graphene in the Landauer - Datta - Lundstrom Transport Model]. *ScienceRise*, 2015, T.2: no.2(7), pp. 93-106.
10. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E. Metodicheskie aspekty rascheta zonnoy struktury grafena s uchetom σ -ostova. Teoreticheskie osnovy [Methodical Aspects in Computation of Graphene Band Structure with an Account of σ -Core. Theoretical Basis]. *Visnyk Odes'koho derzhavnoho ekolohichnoho universytetu - Visn. Odes. derz. ekol. univ.*, 2012, vol.13, pp. 207-218.
11. Rabi M., Mensah S.Y., Abukari S.S. *General Scattering Mechanism and Transport in Graphene*. *Graphene*, 2013, vol.2, no.1, pp. 49-54.
12. Bode N., Mariani E., von Oppen F. Transport properties of graphene functionalized with molecular switches. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2012, vol.24, pp. 394017/1-10.
13. Dong H.M., Xu W., Peeters F.M. High-field transport properties of graphene. *J. Appl. Phys.* 2011, vol.110, pp. 063704/1-6.
14. Chauhan J., Guo Jing. Inelastic Phonon Scattering in Graphene FETs. *IEEE Trans. Electron Dev.* 2011, vol.58, no.11, pp. 3997-4003.
15. Peres N.M.R. The transport properties of graphene. An introduction. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, vol.82, no.3, pp. 2673-2700.
16. Barreiro A., Lazzeri M., Moser J., Mauri F., Bachtold A. Transport properties of graphene in the high-current limit. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, vol.103, pp. 076601/1-4.
17. Ludwig Boltzmann. *Izbrannye trudy* [Selected Works]. Moscow: Mir, 1984, 590 p.
18. Salahuddin S., Lundstrom M., Datta S. Transport Effects on Signal Propagation in Quantum Wires. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 2005, vol.52, no.8, pp. 1734-1742.
19. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E., Strikha M.V. Uroky nanoelektroniki: Termoelektrychni yavyshecha v kontseptsiyi «znyzu – vhoru» [Lessons of Nanoelectronics: Thermoelectric Phenomena in «Bottom – Up» Approach]. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2013, vol.10, no.1, pp. 6-21.
20. Rahman A., Guo Jing, Datta S., Lundstrom M. Theory of Ballistic Nanotransistors. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 2003, vol.50, no.9, pp. 1853-1864.
21. Pierret Robert F. *Semiconductor Device Fundamentals*. – Reading, MA: Addison-Wesley, 1996, 791 p.

REFERENCES

1. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E., Strikha M.V. Uroky nanoelektroniki. vynyknennya strumu, formulyuvannya zakonu Oma i mody providnosti v kontseptsiyi «znyzu – vhoru» [Lessons of Nanoelectronics: Current generation, Ohm's Law Formulation and Conduction modes in «Bottom – Up» Approach]. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2012, vol.9, no.4, pp. 5-30.
2. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E., Strikha M.V. Uroky nanoelektroniki. Spintronika v kontseptsiyi «znyzu – vhoru» [Lessons of Nanoelectronics: Spintronics in «Bottom – Up» Approach]. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2013, vol.10, no.2, pp. 5-37.
3. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012, pp. 473; www.nanohub.org/courses/FoNI.

THE ROLE OF ELECTROSTATICS AND CONTACTS IN THE «BOTTOM – UP» APPROACH OF NANOELECTRONICS

Yu.A. Kruglyak, prof.
L.V. Remenyak, sen. lect.

Odessa State Environmental University, 15, Lvivska St., 65016 Odessa, Ukraine

The theory of electrical conduction is developed in the framework of the "bottom - up" approach without invoking the concept of an external electric field generated by a potential difference applied to the conductor. Within the concept of «bottom – up» approach of modern nanoelectronics the diffusion-drift model of a current on the basis of the Boltzmann transport equation is described. There are also discussed the role of the external electric field beyond the linear response regime, field-effect transistor and saturation current, the role of conductor charging, the point and extended models of a conductor, the role of contacts, the model of *p-n* junctions, the generation of a current in a conductor with asymmetric contacts.

In summary, we conclude, that when a band structure is given, number of modes can be evaluated and, if a model for the mean-free-pass for backscattering can be chosen, then the near-equilibrium transport coefficients can be evaluated. Next, the new generalized Ohm's law was formulated and used which provides a quite different view of resistivity in terms of the number of modes per unit area and the mean-free-path. Finally, the transport model given is equally well applied either to nanoresistors or as well to micro- and macroconductors made of any kind of materials.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, diffusion-drift model, saturation current, role of contacts.

РОЛЬ ЕЛЕКТРОСТАТИКИ І КОНТАКТІВ В КОНЦЕПЦІЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

Ю.О. Кругляк, проф.
Л.В. Ременяк, старш. викл.

Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, 65016 Одеса, Україна,

У рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки розглядається дифузійно-дрейфова модель струму на основі транспортного рівняння Больцмана, роль зовнішнього електричного поля при виході за межі режиму лінійного відгуку, польовий транзистор і струм насичення, роль заряджання провідника, точкова і розширена моделі провідника, роль контактів, моделі *p – n* переходів, генерація струму в провіднику з асиметричними контактами.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, дифузійно-дрейфова модель, струм насичення, роль контактів.

Дата першого представлення: 07.04.2015

Дата поступлення окончательной версии: 07.05.2015

Дата опублікування статті: 24.09.2015