

Баллистическая модель движения электронов над потенциальным барьером.

Ордин С.В.

1. Линейная фенология.

Макроскопические процессы описываются в рамках линейной фенологии, связывающей термодинамические потоки Q_i с обобщёнными термодинамическими силами F_j - градиентами потенциалов $\Delta\varphi_j$. Для электрического E , температурного T и концентрационного N поля в канонической форме обобщенные силы имеют следующий вид:

$$F_E = -\frac{\Delta\varphi_E}{T}, \quad F_T = -\frac{\Delta T}{T^2} = -\frac{\Delta\varphi_T}{T}, \quad F_N = -\frac{\Delta N}{T^2} = -\frac{\Delta\varphi_N}{T}$$

При этом в общей фенологии описываются как прямые эффекты, типа электропроводность, теплопроводность и диффузия, являющиеся коэффициентами линейной связи потока с градиентом сопряжённого потенциала: $Q_i = L_{ii} \cdot F_i$ ($i = j$), так и перекрёстные эффекты, являющиеся коэффициентами линейной связи потока с градиентами других потенциалов: $Q_i = L_{ij} \cdot F_j$ ($i \neq j$).

Коэффициенты линейной связи L_{ij} называются кинетическими коэффициентами и соответствуют коэффициентам трения различных солитонов: электронных, фононных, концентрационных и т. д. и т.п. Макроскопические термоэлектрические процессы, по определению перекрёстные, исторически описываются с помощью двух коэффициентов: Зеебека и Пельтье: α и π , которые, как показал Онзагер – симметрично вырождены.

В рамках квантово-механических представлений разработаны модели (содержащие много предположений), которые позволили рассчитать (весьма грубо) макроскопические кинетические коэффициенты. На масштабах меньше длины свободного пробега эти модели, естественно, в принципе, и теоретически не работают, и не описывают результаты экспериментов. В данной работе, оставаясь в рамках разработанных для макроскопических кристаллов квантово-механических моделей, были проведены расчёты, учитывающие баллистические эффекты, естественно, за рамками приближения времени релаксации, и получена общая связь потоков и потенциалов для прямых эффектов.

2. Электропроводность.

Для расчёта электропроводности электронов над симметричным прямоугольным потенциальным барьером, длина которого меньше длины свободного пробега электрона используем закон дисперсии свободных электронов. Использованная прямоугольная форма барьера в дальнейшем, конечно, потребует уточнения, т.к. уже на микро-масштабе необходимо учитывать, что реальные барьеры, как показали расчёты на базе потенциалов атомов, далеки от идеального. Но прямоугольный барьер был использован во многих ранее проведённых расчётах и, поэтому, качественные отличия баллистического тока от диффузного он позволяет наглядно продемонстрировать. При приложении к барьеру электрического поля тянущего слева на право электроны, правый край барьера и дно

электронной зоны опускаются на величину, равную разнице потенциалов на барьере (рис. 1а).

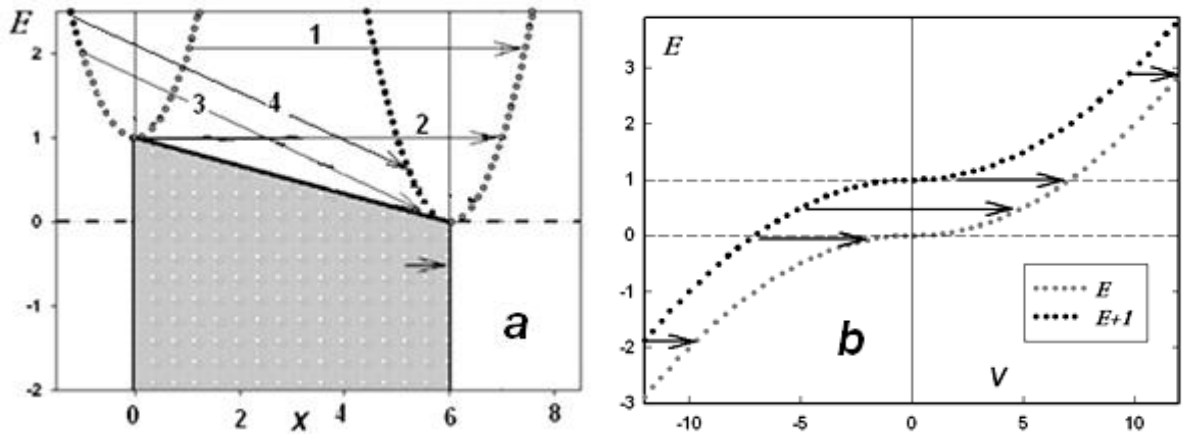


Рис.2.1. Электронные переходы над барьером под действием электрического поля при рассмотрении в рамках: а - стандартного подхода, б - в рамках модифицированного, учитывающего полярность, закона дисперсии подхода.

При этом, для расчётов потока электронов над барьером обычно используют формулу Ричардсона-Дешмана. Её квантово-механический расчёт основан на предположении выхода в область над барьером всех электронов имеющих положительную компоненту скорости в направлении границы барьера. При этом берётся интеграл от половины объёма электронной зоны, изображённой на границе барьера. В одномерном Q_R^{1D} и трёхмерном случаях Q_R^{3D} поток Ричардсона без учёта высоты барьера φ равен

$$Q_R^{1D} = \int_0^{\infty} e^{-\frac{V_x^2}{b}} V_x dV_x = \frac{b}{2}, \quad Q_R^{3D} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(V_x^2+V_y^2+V_z^2)}{b}} V_x dV_z dV_y dV_x = \frac{b^2 \pi}{2}$$

$$Q_R^{3D} / Q_R^{1D} = b\pi, \quad \text{где } b = \frac{2kT}{m}$$

А с учётом высоты барьера φ поток Ричардсона равен

$$Q_R^{1D} = \int_0^{\infty} e^{-\frac{V_x^2}{b}} e^{-\frac{\varphi}{kT}} V_x dV_x = \frac{b}{2} \cdot e^{-\frac{\varphi}{kT}}, \quad Q_R^{3D} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(V_x^2+V_y^2+V_z^2)}{b}} e^{-\frac{\varphi}{kT}} V_x dV_z dV_y dV_x = \frac{b^2 \pi}{2} \cdot e^{-\frac{\varphi}{kT}}$$

Полученный ричардсоновский ток насыщения $J_R = e \cdot Q_R$, естественно, не зависит от приложенного электрического поля E . Для получения зависимости тока от поля берут разницу токов насыщения Ричардсона с двух обкладок барьера с учётом высоты потенциального барьера:

$$\Delta J_R(U) = J_R \left(1 - e^{-\frac{eU}{k_B T}} \right) = J_R \left(1 - e^{-eU^*} \right) \approx eU^* \cdot J_R$$

Таким образом, получают линейную зависимость тока при напряжениях $eU \leq k_B T$, что соответствует независимой от приложенного напряжения электропроводности:

$$\sigma = \frac{\Delta J_R(U)}{U} = \frac{e \cdot J_R}{kT} \rightarrow \quad \sigma^{1D} = \frac{e^2}{m} \quad \text{и} \quad \sigma^{3D} = \frac{e^2}{m} \frac{2kT}{m} \pi$$

При мысленном изначальном, в отсутствие электрического поля, эксперименте Ричардсона бессмысленно рассматривать электроны с отрицательными компонентами скорости относительно направления в сторону границы барьера. Но при изначальном учёте в рассмотрении электрического поля нет никаких разумных оснований их не учитывать. Более того, как будет показано ниже, для получения выражений для тока над барьером, работающих как при малых перепадах потенциала на нано- и микро-барьерах, так и при больших, это необходимо.

Воспользуемся методом, аналогичным расчёту поглощения при оптических переходах. Но, в отличие, от обычно рассматриваемого в оптических переходах изотропного воздействия света, для кинетических явлений на микро/нано уровне требуется учесть полярность (относительно

внешнего электрического поля) кинетической энергии электронов $\varepsilon_c^* = \text{Sign}[V_x] \cdot \frac{mV_x^2}{2}$. Тогда

законы дисперсии электронов на границах барьеров трансформируются как показано на рис.2.1б, а электронные переходы как для положительных скоростей, так и для отрицательных скоростей отображаются горизонтальными линиями. При этом, как показано на рисунке, из модифицированного закона сохранения энергии:

$$\varepsilon_c^*[x] = \varepsilon_c^*[0] + eEx \quad \rightarrow \quad \text{Sign}[V_x[x]] \cdot \frac{mV_x^2[x]}{2} = \text{Sign}[V_x[0]] \cdot \frac{mV_x^2[0]}{2} + eEx$$

следует, что изменение (приращение) скорости электронов сильно зависит от их начальной скорости V_0 . Их конечную скорость над барьером V_x получим, решив уравнение для модифицированного закона сохранения энергии:

$$V_x = \text{Sign} \left[\text{Sign}[V_0] V_0^2 + A \right] \sqrt{\text{Abs} \left[\text{Sign}[V_0] V_0^2 + A \right]}, \quad \text{где} \quad A = \frac{2eEx}{m} = \frac{2kT}{m} \cdot e \frac{Ex}{kT} = b \cdot eU^*.$$

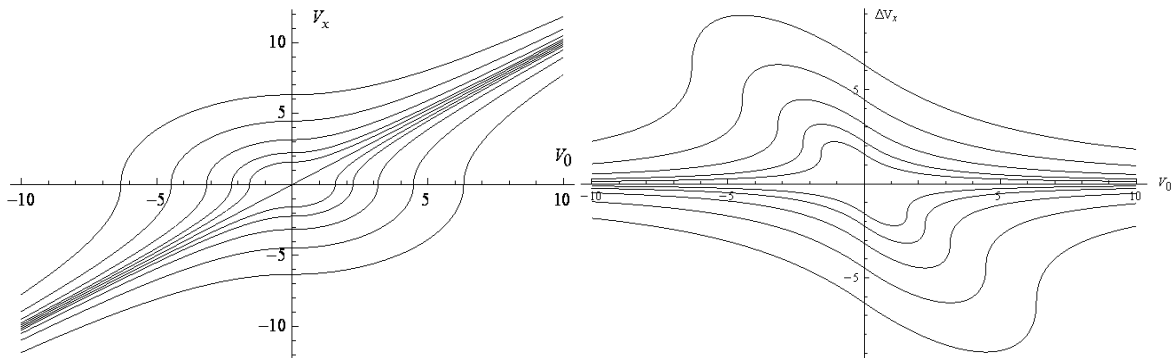


Рис.3. Зависимости конечной скорости электронов V_x (а) и её приращения ΔV_x (б) от их начальной тепловой скорости V_0 . Для соседних кривых разность потенциалов меняется в 2 раза.

Так как при нулевой разнице потенциалов интеграл по всем начальным скоростям (на рис.3а – прямая линия) равен нулю, то общее выражение для суммарного тока электронов можно получить, проинтегрировав приращения скорости (рис.3б).

С учетом больмановского распределения электронов по энергиям для одномерного случая

$$Q^{1D} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{V_x^2}{b}} \left(\left(\text{Sign}[\text{Sign}[V_x]V_x^2 + beU^*] \right) \sqrt{\left(\text{Abs}[\text{Sign}[V_x]V_x^2 + beU^*] \right)} - V_x \right) dV_x$$

Получим $Q^{1D}(eU^*) = Q_R^{1D} \cdot K^{1D}(eU^*)$, где

$$K^{1D} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\begin{array}{l} 2\text{HypergeometricU}\left[-\frac{1}{2}, 0, eU^*\right] - \text{MeijerG}\left[\left\{\left\{\right\}, \left\{\frac{3}{2}\right\}\right\}, \left\{\left\{0, 1\right\}, \left\{\right\}\right\}, eU^*\right] \\ + e^{-\frac{eU^*}{2}} \sqrt{\pi} \left(\text{BesselI}\left[0, \frac{eU^*}{2}\right] + \text{BesselI}\left[1, \frac{eU^*}{2}\right] \right) eU^* \end{array} \right)$$

Зависимость полученного полного баллистического потока от приведённого напряжения на барьере показана на рис.4. Как видно из рисунка, этот поток существенно нелинейный при малых напряжениях и превышает ричардсоновский.

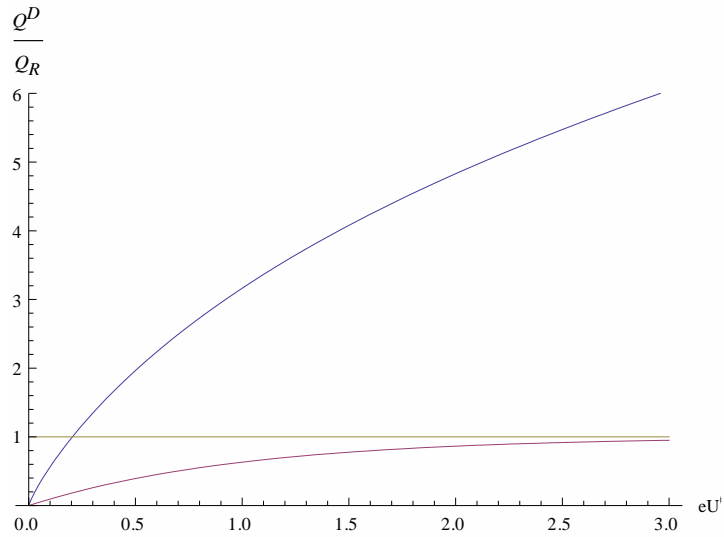


Рис.4. Зависимости разностного ричардсоновского потока (нижняя кривая) и полного потока (верхняя кривая) в приведённых к потоку Ричардсона единицах от приведённой разности потенциалов на барьере.

Качественно данное превышение суммарного микроскопического тока над ричардсоновским (полученным с использованием как принято при макроскопическом подходе средних значений) связано с тем, что при $eU^* \ll 1$ основной вклад даёт слой низкоэнергетических электронов, который имеет и максимальную концентрацию, и максимальное приращение скорости, а при $eU^* \geq 1$ - то, что насыщения тока не происходит.

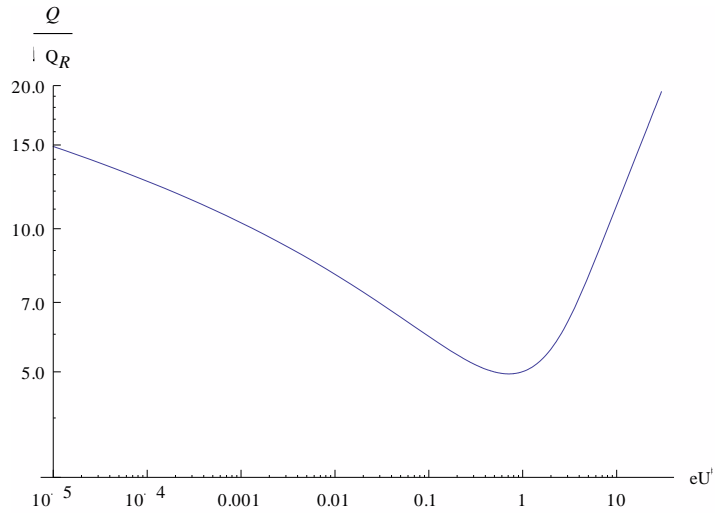


Рис.5. Зависимость отношение суммарного тока к току Ричардсона от эффективного напряжения на барьере.

Отношение полученных потоков в двойном логарифмическом масштабе (рис.5) демонстрирует, что при $eU^* = kT$ имеется минимум и неограниченное возрастание этого отношения при напряжениях больше/меньше kT .

Полученное отношение микроскопического тока и ричардсоновского сохраняется и для 3х-мерного случая,

$$J_x^{3D} = e \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x [v_{x0}, x] 2 \left(\frac{m}{h} \right)^3 e^{-\left(\frac{m}{2kT} (v_{x0}^2 + v_{y0}^2 + v_{z0}^2) + \frac{\varphi}{kT} \right)} dv_{z0} dv_{y0} dv_{x0}$$

Проведя интегрирование, получим аналитическое выражение для зависимости тока от приложенного напряжения (рис. 10), которое является обобщённой и исправленной формулой для разностного тока Ричардсона:

$$J_x^{3D} = J_R \cdot \Phi_x^{3D} [eU^*]$$

где:

$$\begin{aligned} \Phi_x^{3D} [eU^*] &= \sqrt{\pi} \left(\text{Hypergeometric}U \left[-\frac{1}{2}, 0, eU^* \right] - \frac{1}{2} \text{Meijer}G \left[\left\{ \left\{ \right\}, \left\{ \frac{3}{2} \right\} \right\}, \left\{ \left\{ 0, 1 \right\}, \left\{ \right\} \right\}, eU^* \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} e^{-\frac{eU^*}{2}} \sqrt{\pi} \left(\text{Bessel}I \left[0, \frac{eU^*}{2} \right] + \text{Bessel}I \left[1, \frac{eU^*}{2} \right] \right) eU^* \right) \\ \Phi_x^{3D} [eU^*] &= \sqrt{\pi} \left\{ U \left(-\frac{1}{2}, 0, eU^* \right) - \frac{1}{2} G_{1,2}^{2,0} \left(eU^* \left| \begin{matrix} \frac{3}{2} \\ 2 \end{matrix} \right. \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^{-\frac{eU^*}{2}} eU^* \left[I_0 \left(\frac{eU^*}{2} \right) + I_1 \left(\frac{eU^*}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

U - hypergeometric function, G - Meijer Gamma function, I - modified Bessel function.

При равенстве температур электродов, учитывая изменение вероятности перехода электронов за счет их ускорения можно получить более строгое выражение Φ_x^{3D} .

$$\begin{aligned} \Phi_x^{3D} [eU^*] = & \sqrt{\pi} \text{HypergeometricU}[-\frac{1}{2}, 0, eU^*] + \frac{\sqrt{\pi}}{8} (-4 \text{MeijerG}[\{\{\}, \{\frac{3}{2}\}\}, \{\{0, 1\}, \{\}\}, eU^*] \\ & + e^{eU^*} \text{MeijerG}[\{\{\}, \{\frac{3}{2}\}\}, \{\{0, 1\}, \{\}\}, 2eU^*]) + \frac{1}{4} e^{-eU^*} \pi (-1 + 2e^{\frac{eU^*}{2}} (\text{BesselI}[0, \frac{eU^*}{2}] \\ & + \text{BesselI}[1, \frac{eU^*}{2}])) eU^* - \frac{1}{4} (\text{BesselK}[0, eU^*] + \text{BesselK}[1, eU^*]) eU^* \end{aligned}$$

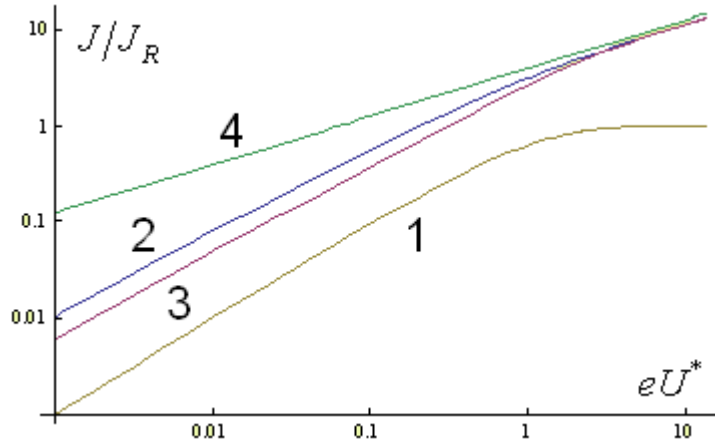


Рис.10. Зависимость тока симметричного барьера от напряжения при равенстве температур на границах барьера: 1 - разностный ток Ричардсона без учета динамической добавки, 2 - с учетом динамической добавки, 3 - с учетом изменения вероятности перехода, 4 - корневая зависимость.

Обобщение на прямые эффекты.

Как известно, диффузность макроскопических кинетических коэффициентов проявляется в их взаимозависимости. В частности, существует соотношение Эйнштейна, устанавливающее связь между подвижностью носителей тока u и коэффициентом их диффузии D_e : $u/D_e = e/kT$ и дающее взаимно-однозначную связь между независимыми от электрического поля электропроводностью и электронной теплопроводностью. Полученное выражение для микроскопического баллистического тока даёт нелинейную, но взаимно-однозначную связь тока и градиента электрического потенциала. Полученное выражение позволяет получить общую прямую связь между любыми градиентами потенциала и соответствующими ему термодинамическими потоками, если градиент электрического потенциала на границах барьера $\Delta\varphi_E$ заменить в выражении $eU^* = \frac{eEx}{kT} = \frac{F_E x}{kT} = -\frac{\Delta\varphi_E}{kT^2}$

на градиенты других потенциалов, а поток взять соответствующий выбранному потенциалу. Для качественного понимания потока концентрации электронов эта замена не вызывает трудностей, т.к. он собственно и получен $Q^{1D} = J/e \rightarrow$

$$Q^{1D}(eU^*) \rightarrow Q^{1D}\left(-\frac{\Delta\varphi_N}{kT^2}\right), \text{ а больцмановское распределение концентрации носителей}$$

наглядно демонстрирует разницу концентраций на границах барьеров при приложении электрического поля на всех уровнях энергии. Но разница концентраций на границах барьера при всех уровнях энергии может быть создана и за счёт разницы температуры на этих границах и аналогично ричардсоновской формуле от напряжения на барьере

$$\Delta J_R(U) = J_R \left(1 - e^{-eU/k_B T} \right) = J_R \left(1 - e^{-eU^*} \right) \approx eU^* \cdot J_R$$

можно получить ричардсоновскую линейную зависимость от перепада температуры, которой соответствует полученная нелинейная зависимость $Q^{1D}(eU^*) \rightarrow Q^{1D} \left(-\frac{\Delta\varphi_T}{kT^2} \right)$.

Справедливость данного соотношения для малых перепадов температуры качественно также прозрачна.

Но в практическом плане проще воспользоваться известным алгоритмом для разностного тока Ричардсона, заменив его на обобщённую формулу Ричардсона.

Перекрёстные баллистические эффекты.

Полученная обобщённая формула Ричардсона позволяет рассчитать, в первом приближении, локальные термо-ЭДС, возникающие на симметричном барьере. Для этого достаточно решить уравнение

$$Q^{1D} \left(\frac{e \cdot (U)}{k(T + \Delta T)} \right) = 0$$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2m} \left(\begin{array}{l} 2 \text{HypergeometricU} \left[-\frac{1}{2}, 0, \frac{eU}{k(T + \Delta T)} \right] \\ - \text{MeijerG} \left[\left\{ \{ \}, \left\{ \frac{3}{2} \right\} \right\}, \left\{ \{0, 1\}, \{ \} \right\}, \frac{eU}{k(T + \Delta T)} \right] \\ + e^{-\frac{eU^*}{2}} \sqrt{\pi} \left(\text{BesselI} \left[0, \frac{eU}{2k(T + \Delta T)} \right] + \text{BesselI} \left[1, \frac{eU}{2k(T + \Delta T)} \right] \right) eU \end{array} \right) = 0$$

Мощности имеющегося в моём распоряжении компьютера оказалось не достаточно для аналитического решения этого уравнения и для одномерного случая. Попытки же численного решения этого уравнения при задании пробных параметров выявили дребезг величины $Q^{1D} \left(\frac{e \cdot (U)}{k(T + \Delta T)} \right)$ при прохождении нуля по траектории $U(\Delta T)$. Возможные причины этого дребезга: строгость полученного аналитического выражения для тока или

строгость вычисления его значений при прохождении нуля, разделить не получилось по той же причине – недостаточная мощность компьютера.