

**В.М. Адамян, В.В. Завальнюк**

# **Теоретичні основи наноелектроніки**

*Конспект лекцій*

**Кафедра теоретичної фізики та астрономії  
Одеського національного університету  
імені І.І. Мечникова**

Одеса  
2016

**В.М. Адамян, В.В. Завальнюк. Теоретичні основи наноелектроніки  
(Конспект лекцій). – КТФА ОНУ імені І.І. Мечникова, 2016**

В лекціях розглядаються основні принципи квантової наноелектроніки, особливості переносу заряду, тепла і спіну та квантові інтерференційні ефекти в електронних наносхемах, простіші моделі базових елементів наноелектроніки.

Посібник призначено для студентів першого курсу магістратури ОНУ імені І.І. Мечникова спеціальності «Фізика та астрономія».  
Публікується за рішенням КТФА ОНУ імені І.І. Мечникова,  
протокол № 5 від 1 грудня 2016 року.

## Зміст

<u>Класичний закон Ома</u>	4
<u>Густина станів та розподіл Фермі</u>	6
<u>Густина станів у тонкому нанопровіднику (проста модель)</u>	11
<u>Опір нанопровідника «ненульового» діаметру</u>	13
<u>Формула Ландауера для опору потенціального бар'єру</u>	17
<u>Врахування хвильових властивостей носіїв</u>	22
<u>Квантовий інтерференційний польовий транзистор</u>	27
<u>Хімічний потенціал та теплоємність провідника</u>	33
<u>Провідність та дифузія</u>	37
<u>Теплові явища</u>	39
<u>Гігантський магнітоопір</u>	42
<u>Інжекція спінів</u>	49
<u>Електро-спіновий модулятор</u>	54
<u>Література</u>	57

# Теоретичні основи наноелектроніки

## Класичний закон Ома

Величезний прогрес напівпровідникових технологій на протязі останніх 50 років призвів до того, що лінійні розміри транзисторів в процесорах ПК вже дійшли до значень  $\sim 10\text{-}15\text{ нм}$ .<sup>1</sup> Згідно з законом Мура, який виконувався в цей період, число транзисторів, що складають одну інтегральну схему, подвоювалося кожні два роки. Обчислювальна потужність мікропроцесорів у той же час зростала ще швидше – подвоювалася приблизно кожні півтора роки (закон Хауса) внаслідок підвищення ефективності та швидкодії окремих транзисторів та вдосконалення базових обчислювальних алгоритмів.

*Зміна розмірів та ступеню інтеграції електронних схем:*

Рік	Характерний розмір елементів транзистора	Число транзисторів
1971	10 $\mu\text{m}$	$\sim 10^3$
1975	3 $\mu\text{m}$	$\sim 10^4$
1982	1.5 $\mu\text{m}$	$\sim 10^5$
1989	0.8 $\mu\text{m}$	$\sim 10^6$
1995	0.35 $\mu\text{m}$	$\sim 10^6\text{-}10^7$
1999	0.18 $\mu\text{m}$	$\sim 10^7$
2002	0.13 $\mu\text{m}$	$\sim 10^8$
2004	90 nm	$\sim 10^8$
2008	45 nm	$\sim 10^9$
2012	22 nm	$\sim 10^9$
2014	14 nm	$\sim 10^9\text{-}10^{10}$
2017	10 nm	$\sim 10^9\text{-}10^{10}$

Якщо припустити, що така тенденція збережеться ще 5 – 6 років, тоді к кінцю цього періоду роль транзисторів і функціональних елементів комп'ютерних пристроїв будуть виконувати окремі атоми або невеличкі молекули. Зрозуміло, що в такій ситуації зміни станів електронних схем і електронний транспорт у таких пристроях буде зводитись к елементарним суто квантовим переходам в їх складових частинах та в них в цілому.

Далі на простих прикладах ми з'ясуємо особливості явищ переносу в квантових електронних нанорозмірних пристроях і схемах, коротше нанопристроях або наносхемах.

---

<sup>1</sup> Нагадаємо, що

$$10^{-3}\text{ м} = 1\text{ мм} \rightarrow 10^{-3}\text{ мм} = 1\text{ мкм} = 1\mu\text{m} \rightarrow 10^{-3}\mu\text{m} = 1\text{ нм} \rightarrow 10^{-3}\text{ нм} = 1\text{ пм} = 10^{-12}\text{ м}.$$

При цьому міжатомні відстані в кристалах мають значення порядку 100 – 400  $\text{pm}$ , а оціночні діаметри атомів хімічних елементів знаходяться в межах 100 – 300  $\text{pm}$ .

В якості базових елементів електронних наносхем в подальшому, якщо не вказано інше, будуть розглядатись польові нанотранзистори – напівпровідникові пристрої, в яких електричний струм між двома електродами: емітером (*source*) та колектором (*drain*) керується допоміжною напругою, прикладеною до третього електроду – затвору (*gate*), що розташований уздовж бази (*channel*) транзистора (далі ми часто називатимемо її каналом, що значно краще відповідає її дійсній функції в польових транзисторах). На відміну від біполярних транзисторів, в яких заряд переноситься як електронами, так і дірками, в польових транзисторах носіями є або лише електрони, або дірки. Далі, для визначеності, будемо розглядати польові нанотранзистори, носіями заряду в яких є саме електрони.



Рух електронів в каналі транзистора може бути дифузійним або балістичним. При дифузійному русі електрон між емітером та колектором багатократно зіштовхується з дефектами, викривленнями кристалічної ґратки та іншими електронами, змінюючи напрям свого руху та, можливо, втрачаючи енергію. В балістичному режимі електрон пролітає між емітером та колектором без зіткнень (відповідно, зберігаючи свій імпульс та енергію).

25 років тому, технологія виробництва транзисторів (їх лінійні розміри та наявність дефектів у внутрішній структурі провідників) повністю виключала балістичний режим прольоту носіїв заряду крізь канал транзистора. Електричний струм в таких транзисторах визначався суто дифузійним рухом носіїв заряду, і зв'язок між силою струму  $I$  крізь прямолінійний циліндричний канал при малій різниці потенціалів  $V$  між електродами визначався законом Ома

$$\frac{V}{I} = R = \rho \frac{L}{W}$$

де  $L$  – довжина каналу (бази) транзистора,  $W$  – площа її поперечного перерізу,  $\rho$  – питомий опір матеріалу бази.

Нагадаємо, що з класичної точки зору густина електричного струму  $j$  вздовж каналу дається виразом  $j = qnv$ , де  $q$  – заряд електрону,  $n$  – густина електронів провідності,  $v$  – середня швидкість електронів провідності вздовж каналу. При відсутності зовнішнього електричного поля  $v = 0$ . Однак, коли поле вздовж каналу  $E \neq 0$ , тоді

кожний електрон у проміжках між вказаними вище послідовними зіткненнями рухається вздовж каналу з прискоренням  $-\frac{q}{m}E$ . Тому

$$v = -\frac{q}{m}Et,$$

де  $\tau$  - середній час між послідовними зіткненнями електрона (так званий середній час вільного пробігу електрона). Відповідно, електричний струм  $I$ , тобто заряд, який протікає за одиницю часу через переріз каналу, визначається виразом

$$I = jW = \frac{q^2 n \tau}{m} EW = \frac{q^2 n \tau}{m} \cdot \frac{W}{L} V.$$

Звідси знаходимо, що

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{nq^2\tau},$$

де  $\sigma$  - електропровідність матеріалу каналу.

Зауважимо, однак, що наведені міркування можна застосувати до будь-якої речовини і, хоча вони до певної межі пояснюють лінійну залежність між струмом і різницею потенціалів між контактами каналу, але не дають ясної відповіді на питання, чому питомі опори різних речовин можуть розрізнятися на багато порядків, і, що є насправді рушійною силою для носіїв електричного заряду в каналі. До того ж при балістичному режимі руху носіїв заряд опір  $R$  каналу, як ми далі побачимо, виявляється ненульовим і взагалі не залежить від його довжини.

Щоб отримати задовільні відповіді на вказані питання необхідно відвернутися від класичних уявлень і далі розглядати електрони каналу як квантові частинки.

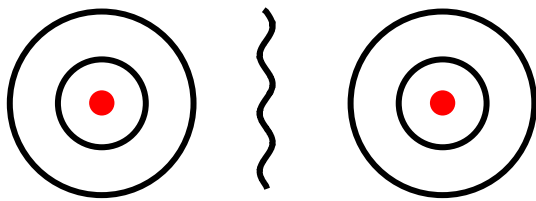
## Густина станів та розподіл Фермі

Нагадаємо, що кожний елементарний або складений квантовий об'єкт і будь-яка система квантових об'єктів характеризуються сукупністю своїх можливих станів. Поняття стану фізичної системи є первісним і його не можливо віднести до більш загального поняття. Умовно стан системи асоціюється з її визначальними ознаками, які можуть виявлятися в конкретних експериментальних умовах. Через високу густину електронів в речовині каналу і внаслідок цього інтенсивну електромагнітну взаємодію електронів з найближчими іонами і між собою може здатися, що електронна підсистема каналу не може розглядатися як ідеальний газ. Однак, це не зовсім так. По-перше, оскільки речовина каналу достатньо щільна і електро-нейтральна, сумарна взаємодія кожного електрона з іншими електронами та іонами в значній мірі компенсована. По-друге, електрони є фермі-частинками. При зростанні густини системи заряджених фермі-частинок їх середня кінетична енергія зростає швидше, ніж потенціальна енергія їх кулонівської взаємодії, і через те останню з деякими застереженнями можна розглядати як мале збурення. Тому найбільш поширене наближення теорії атомів, молекул і твердого тіла, згідно з яким електрони у таких системах утворюють ідеальний фермі-газ у самоузгодженому потенціальному полі, яке утворюється іншими електронами і всіма ядрами, так зване одно-електронне наближення, не здається безпідставним. В подальшому дослідження явищ переносу в нанотранзисторах і електронних наносхемах проводиться в рамках саме одно-електронного наближення.

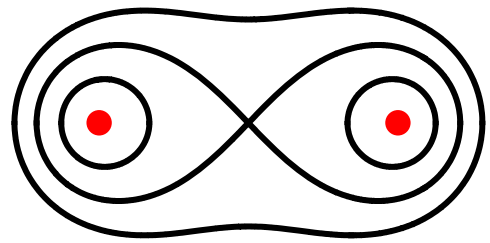
Щоб описати одно-електронні стани в каналі й електродах транзистора, розглянемо спочатку два однакових невзаємодіючих (віддалених один від одного) атоми. Рівні енергії зовнішнього (валентного) електрона кожного з атомів є однаковими внаслідок тотожності атомів. При цьому, кратність виродження рівнів валентних електронів такої системи, складеної з відокремлених однакових атомів є кратною кількості самих атомів, оскільки електрони з енергіями, що відповідають вказаним рівням, можуть з однаковими ймовірностями локалізуватися на будь-якому з цих атомів (іонів).

При зближенні двох атомів внаслідок взаємодії між ними вказані вироджені рівні розщеплюються та починають віддалятися один від іншого. Величина розщеплення залежить від інтенсивності міжатомної взаємодії, тобто від структури електронних оболонок атомів та відстані між ними.

При зближенні трьох та більше однакових атомів спостерігатиметься аналогічна картина: вироджені електронні рівні розщепляються на відповідну кількість окремих рівнів (триплети, квадруплети, тощо).



Власні значення  $E_{val}$   
двократно вироджені



Розщеплення:  
 $E_{val} \pm \delta E$

В кристалах число атомів в одиниці об'єму  $n \sim N_A \sim 10^{23}$ , відповідно, кожен енергетичний рівень розщеплюється на величезне число близько розташованих рівнів. Початкове значення енергії рівня валентного електрона становить  $\sim 10 \text{ eV} \approx 1.6 \times 10^{-18} \text{ Дж}$ . Відповідно характерні відстані (в шкалі енергії) між розщепленими рівнями мають значення порядку  $\frac{10^{-18}}{10^{23}} \text{ Дж} = 10^{-41} \text{ Дж} \ll k_B T$  при будь-яких температурах. Таким чином, замість відокремленого виродженого рівня фактично спостерігається неперервна смуга, яку зазвичай називають зоною дозволених енергій електронних станів. Однак, при цьому число енергетичних рівнів, що знаходяться в заданому малому інтервалі енергій, може бути (і фактично є) різним на різних ділянках всередині зони.

Для конкретного провідника (кристала) число одноелектронних станів з енергіями меншими, ніж  $E$ , називатиме функцією розподілу одноелектронних станів і позначатиме його через  $N(E)$ , а густиною електронних станів називатимемо границю

$$D(E) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{\Delta N(E)}{\Delta E},$$

де  $\Delta N(E) = N(E + \Delta E) - N(E)$  – число станів, що потрапляють в інтервал енергій  $(E; E + \Delta E)$ . Відповідно до означення,  $D(E)$  має розмірність оберненої енергії ( $\text{Дж}^{-1}$ ).

Розглянемо два однакових прямолінійних відокремлених провідники довжини  $L$ . Відповідно, залежності густини електронних станів  $D(E)$  в них збігаються. Проте, якщо розглядати ці провідники як єдину систему, що складається з двох невзаємодіючих частин, число власних електронних станів із заданою енергією  $E$  в об'єднаній системі подвоюється (порівняно з випадком одного такого провідника): електрон в заданому власному стані з енергією  $E$  може знаходитися чи в першому, чи в другому провідникові. Тому в розглянутій об'єднаній системі густина станів дорівнює  $2D(E)$ . Розвиваючи аналогічні міркування можна строго довести, що густина електронних станів лінійного провідника є пропорційною до його довжини, густина станів двовимірної провідної плівки є пропорційною до її площі, а густина станів тривимірною (об'ємного) провідника – пропорційна його об'єму.



При нульовій температурі електронна підсистема провідника знаходиться у стані з найменшою енергією. Заповнення одноелектронних станів відбувається відповідно до принципу Паулі, згідно з яким в кожному одноелектронному стані не може знаходитись більш ніж один електрон. Енергією Фермі (рівнем Фермі)  $E_F$  називається така гранична енергія, що при  $T = 0$  всі дозволені одноелектронні стани з меншими енергіями ( $E < E_F$ ) є заповненими, а всі стани з більшими енергіями ( $E > E_F$ ) – вільні. З наведених визначень випливає, що

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

де  $N$  – загальна кількість електронів провідника.

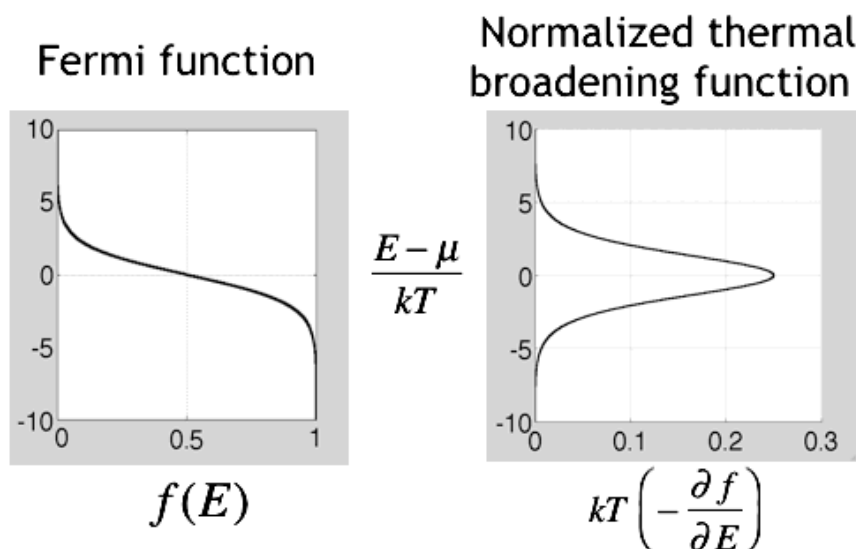
При ненульових температурах ймовірність заповнення кожного з дозволених одноелектронних станів системи визначається розподілом Фермі

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

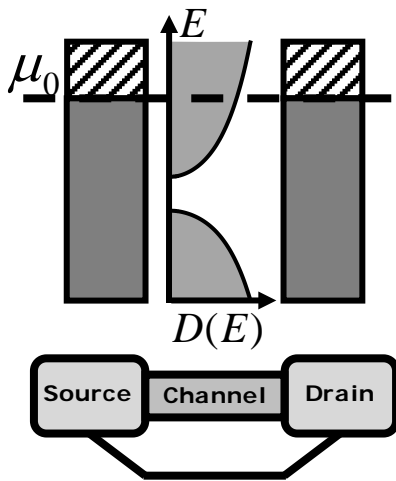
де  $\mu$  – хімічний потенціал. Хімічний потенціал і загальна кількість електронів провідника пов'язані співвідношенням

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} D(E)dE = N .$$

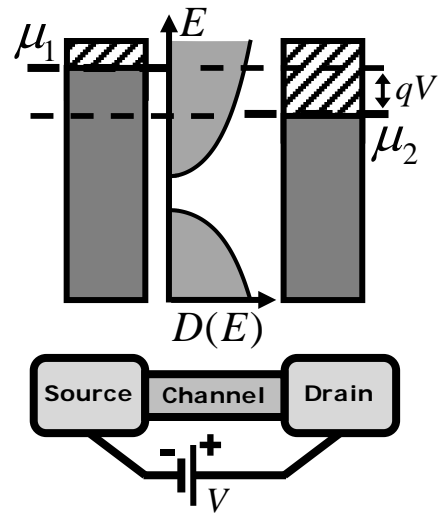
Для металів хімічний потенціал  $\mu$  слабо залежить від температури і при  $T \rightarrow 0$  прямує до енергії Фермі. При низьких температурах числа (ймовірності) заповнення одночастинкових станів з енергіями  $E \sim \mu$  достатньо різко змінюються від 0 до 1.



У рівновазі хімічні потенціали всіх частин наносистеми є рівними. При квазірівновазі, що відповідає різниці потенціалів  $V$  між колектором та емітером, рівні енергії в колекторі зміщуються на  $qV$ . Зміна рівня хімічного потенціалу одного з електродів і є тією рушійною силою, що призводить до утворення потоку електронів (електричного струму) в каналі транзистора. Другою необхідною умовою виникнення цього струму є наявність в каналі незаповнених одноелектронних станів з енергіями у проміжку між хімічними потенціалами емітера  $\mu_1$  та колектора  $\mu_2$ .



*Хімічний потенціал та заповнення електронних станів транзистора у стані рівноваги*



*Хімічний потенціал та заповнення електронних станів транзистора у стані рівноваги*

Розглянемо балістичний рух електронів з емітера до колектору крізь гранично тонкий канал (далі це поняття буде уточнене) як квантовий перехід в каналі між станами хвильових пакетів з енергіями у вузькому інтервалі  $(E; E + \Delta E)$  з приконтатної області емітера у приконтатну область колектора. Тоді, при сталій різниці потенціалів  $V$  між електродами, число таких переходів за одиницю часу визначатиметься виразом

$$\Delta I_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{2t(E)} f_1(E)[1 - f_2(E)] D(E) \Delta E, \quad (1)$$

де  $t(E)^{-1}$  – ймовірність переходу в одиницю часу з приконтатної області емітера у приконтатну область колектора вказаного пакету з одноелектронних станів з відповідними імпульсами, які напрямлені від емітера до колектора; в квазікласичному наближенні обернена величина  $t(E)$  є часом балістичного прольоту вказаного пакету в каналі від емітера до колектора, так що

$$t(E) = \frac{L}{v(E)}, \quad (2)$$

$L$  – довжина каналу,  $v(E)$  – групова швидкість вказаних хвильових пакетів;

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}, \quad f_2(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu+qV)} + 1};$$

$f_1(E)[1 - f_2(E)]$  – ймовірність того, що стан з енергією  $E$  у приконтатній області каналу поблизу емітера є заповненим, а такий самий стан поблизу колектора є вільним,  $D(E)$  – густина одноелектронних станів в каналі. Фактор  $f_1(E)[1 - f_2(E)]$  в (1) обумовлений принципом заборони Паулі, відповідно до якого перехід із заповненого одночастинкового стану з енергією  $E$  поблизу емітера у відповідний

стан поблизу колектора є дозволеним тільки за умови, що останній є незаповненим. Множник  $\frac{1}{2}$  в (1) з'являється внаслідок того, що у лінійному однорідному каналі власному значенню енергії  $E$  електрона відповідають два незалежних власних одноелектронних стани з (квазі)імпульсами, напрямленими уздовж каналу від емітера до колектора та у протилежному напрямку. При підрахунку числа переходів за одиницю часу  $\Delta I_{1 \rightarrow 2}$  приймаються до уваги лише стани з квазіімпульсом, напрямленим від емітера до колектора, густина яких складає лише половину від повної густини електронних станів  $D(E)$  каналу.

Цілком аналогічні міркування призводять до наступного виразу для числа зворотних переходів (з колектора до емітера) за одиницю часу

$$\Delta I_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{2t(E)} f_2(E)[1 - f_1(E)] D(E) \Delta E. \quad (3)$$

Врахуємо, що кожен електрон, долаючи канал в будь-якому з двох вказаних напрямків, переносить заряд  $q$ . Тоді, на підставі (1) та (3), отримуємо вираз для сили струму в каналі за умови сталої різниці потенціалів  $V$  між емітером та колектором

$$I = - \int_{E_{\min}}^{+\infty} dE \frac{qD(E)}{2t(E)} \{f_1(E)[1 - f_2(E)] - f_2(E)[1 - f_1(E)]\} = - \int_{E_{\min}}^{+\infty} dE \frac{qD(E)}{2t(E)} [f_1(E) - f_2(E)], \quad (4)$$

де  $E_{\min}$  – енергія основного одноелектронного стану в каналі.

У тонкому однорідному прямолінійному провіднику разом з енергією  $E$  зберігаються проекція імпульсу електрона  $p$  уздовж провідника та його квазіімпульс  $k$ , пов'язаний з  $p$  співвідношенням  $p = \hbar k$ . Звідси можна зробити висновок, що власні функції оператора енергії у довгому квазіодновимірному провідникові можна обрати таким чином, щоб вони були й власними функціями оператора проекції імпульсу уздовж провідника. Тому  $E = E(k)$ . Якщо при цьому фізичні властивості провідника не змінюються при його дзеркальному відбитті відносно площини, перпендикулярної до нього, то  $E(k) = E(-k)$ . При виконанні вказаних умов можна показати (див. нижче), що, з урахуванням двократного виродження одноелектронних рівнів за спіном, густина одноелектронних станів у тонкому провіднику довжини  $L$  задається виразом

$$D(E) = \frac{2L}{\pi} \left| \frac{dE(k)}{dk} \right|_{k=k(E)}^{-1}, \quad E(k(E)) = E. \quad (5)$$

Одночасно, абсолютне значення групової швидкості пакета хвильових функцій станів з енергіями у вузькому інтервалі  $(E; E + \Delta E)$  визначається виразом

$$v(E) = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{dE(k)}{dk} \right|. \quad (6)$$

Тому, в силу (2), (5) і (6), маємо

$$\frac{D(E)}{2t(E)} = \frac{1}{\pi\hbar} \quad (7)$$

й, остаточно,

$$I = -\frac{q}{\pi\hbar} \int_{E_{\min}}^{+\infty} dE [f_1(E) - f_2(E)] = \frac{q}{\pi\hbar\beta} \ln \left[ \frac{1 + e^{-\beta(E_{\min} - \mu)}}{1 + e^{-\beta(E_{\min} + qV - \mu)}} \right]. \quad (8)$$

Для каналів зі звичайних провідних матеріалів при низьких та кімнатних температурах виконуються умови

$$\mu - E_{\min} \gg k_B T, \quad \mu - qV - E_{\min} \gg k_B T.$$

Згідно з (8) в цих випадках

$$I = \frac{q^2}{\pi\hbar} V = \frac{2q^2}{h} V. \quad (9)$$

Порівнюючи (9) з класичним законом Ома бачимо, що опір гранично тонкого нанопровідника у балістичному режимі провідності не залежить ні від його довжини, ні від специфіки провідного матеріалу та дорівнює універсальній сталій

$$R = \frac{h}{2q^2} \approx 12.9 k\Omega \quad (\text{опір Ландауера}). \quad (10)$$

## Густина станів у тонкому нанопровіднику (проста модель)

Як ілюстрацію наведених вище тверджень розглянемо одноелектронні стани в однорідному прямолінійному циліндричному провіднику дуже малого поперечного перерізу. Провідник за означенням називатимемо *тонким*, якщо відстань  $d$  між двома найвіддаленішими точками його поперечного перерізу, тобто його діаметр, задовольняє умову

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} - \mu > 0,$$

де  $m$  – (ефективна) маса електрона,  $\mu$  – хімічний потенціал електронного газу в цьому провіднику. Зміст цього означення буде виявлений у наступному розділі.

Хвильова функція одноелектронних станів, локалізованих у малому околі тонкого прямолінійного провідника скінченої довжини  $L$ , спрощується в цьому випадку до функції однієї змінної  $\psi(x)$ , де  $x$  – координата електрона вздовж провідника,  $0 \leq x \leq L$ , а стаціонарне рівняння Шредінгера для одночастинкових власних функцій  $\Psi(\mathbf{r})$  електронів з енергією  $E$  в провідникові

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

зводиться при цьому до одновимірною рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - E_0 \psi(x) = E \psi(x),$$

де  $E_0 > 0$  – найменша енергія нелокалізованих електронів в провіднику, або рівняння

$$-\psi''(x) - k^2 \psi(x) = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + E_0),$$

та граничним умовам

$$\psi(0) = \psi(L), \quad \psi'(0) = \psi'(L).$$

Звідси випливає, що

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm ikx}, \quad e^{\pm ikL} = 1,$$

$$k_n L = 2\pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$E(k_n) = -E_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = -E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} n \right)^2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Позначимо через  $\Xi(E)$  число рівнів електронів з енергією меншою за  $E$  в тонкому провіднику. Оскільки

$$n = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} (E_n + E_0)},$$

то при  $E \rightarrow \infty$

$$\Xi(E) = \left[ \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} (E + E_0)} \right],$$

де  $[a]$  – ціла частина числа  $a$ . З урахуванням двократного виродження за хвильовим вектором  $k$  ( $E(k) = E(-k)$ ) та двократного виродження за спіном отримуємо вирази для функції розподілу одноелектронних станів

$$N(E) = 4\Xi(E) \cong \frac{2L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + E_0)}$$

та густини одноелектронних станів

$$D(E) = \frac{\partial N(E)}{\partial E} = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_n + E_0}}$$

в тонкому провіднику.

Імпульс електрона в стані з квазіімпульсом (хвильовим вектором)  $k$  дорівнює  $\hbar k$ , а групова швидкість  $v(k)$  хвильового пакету з власних функцій станів електронів з квазіімпульсами у вузькому інтервалі  $(k; k + \Delta k)$  визначається виразом

$$v(k) = \frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{\hbar}{m} k = \sqrt{\frac{2(E + E_0)}{m}}.$$

Відповідно, густина одноелектронних станів в каналі є пов'язаною з вказаною груповою швидкістю хвильових пакетів  $v(k)$  виразом

$$D(E) = \frac{2L}{\pi \hbar} \frac{1}{v(E)}$$

Вважаючи, що час життя електрона в каналі дорівнює часу його руху крізь канал у балістичному режимі

$$t(E) = \frac{L}{v(E)},$$

робимо, як і раніше, висновок, що електричний опір каналу у вигляді гранично тонкого провідника визначається формулою Ландауера

$$R = \frac{h}{2q^2} \approx 12.906 k\Omega.$$

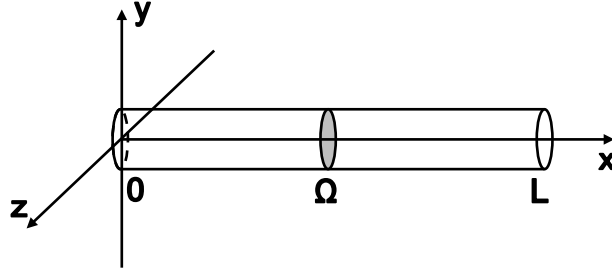
Зазначимо, що подвоєне значення опору  $R$ ,

$$\frac{h}{q^2} \approx 25812.807557(18)\Omega,$$

носить назву константи Клітцинга (von Klitzing) в честь фізика, який вперше (1980) експериментально спостерігав ефект квантування поперечної магнітної провідності в двовимірному електронному газі (*цілочислений квантовий ефект Холла*).

## Опір нанопровідника «ненульового» діаметру

Розглянемо далі циліндричний однорідний прямолінійний нанопровідник з довжиною  $L$ , поперечним перерізом  $\Omega$  та віссю, що співпадає з відрізком  $0 \leq x \leq L$  вісі  $x$ . Вважатимемо, що діаметр  $d$  перерізу нанопровідника є набагато меншим за його довжину  $L$ .



Хвильова функція власних станів носіїв у такому провіднику має вигляд

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x) \Phi(y, z), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (y, z) \in \Omega,$$

де  $|\Phi(y, z)|^2 \left( \int_{\Omega} |\Phi(y, z)|^2 dy dz = 1 \right)$  – густина ймовірності виявлення носія заряду (електрона або дірки) в різних точках поперечного перерізу провідника.

Для власного стану с енергією  $E$  хвильова функція  $\Psi(\mathbf{r})$  задовольняє рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V(x, y, z) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (11)$$

Для простоти вважатимемо, що в середині провідника  $V(x, y, z) = \text{const} = -E_0$ , а на його бічній поверхні  $\frac{\partial \Psi}{\partial n} = 0$ .

На торцях провідника  $x = 0$  та  $x = L$  застосуємо, як і раніше, циклічні крайові умови

$$\begin{cases} \Psi(0, y, z) = \Psi(L, y, z); \\ \frac{\partial \Psi(0, y, z)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi(L, y, z)}{\partial x}. \end{cases}$$

За вказаних припущень задача відшукування власних значень енергії носіїв допускає розділення змінних, тобто власні функції можна записати у вигляді  $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x) \Phi(y, z)$ , де множники  $\Phi$  та  $\psi$  визначаються з системи рівнянь

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right] = \varepsilon \Phi; \\ \left. \frac{\partial \Phi}{\partial n} \right|_{l_{\Omega}} = 0; \end{cases} \quad (12)$$

де  $l_{\Omega}$  – границя області  $\Omega$ ,  $n$  – нормальна складова градієнту на  $\Omega$ ;

$$\begin{cases} -\psi'' - k^2\psi = 0 \\ \psi(0) = \psi(L), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + E_0 - \varepsilon). \\ \psi'(0) = \psi'(L) \end{cases}$$

В обмеженій області  $\Omega$  власні значення (крайової) задачі для визначення  $\Phi$  утворюють дискретний набір  $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots$  (можливо виродження!). При цьому в силу умов на  $l_\Omega$  найменше власне значення  $\varepsilon_0 = 0$ , а відповідна власна функція  $\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{S_\Omega}}$ , де  $S_\Omega$  – площа області  $\Omega$ .

Для циліндричного провідника довжини  $L$  кожному власному значенню  $\varepsilon_p$ ,  $p = 1, 2, 3, \dots$  крайової задачі (12) відповідає серія (зона) власних значень

$$E_p(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_0 + \varepsilon_p, \quad k = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

В якості простого, проте технологічно важливого, прикладу розглянемо випадок провідника прямокутного перерізу

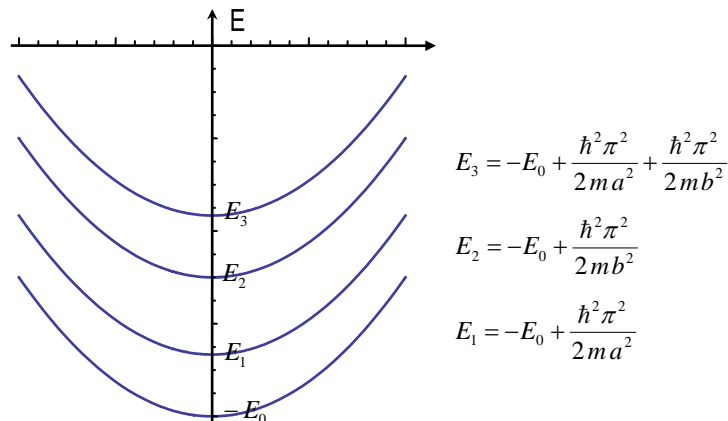
$$\Omega = \begin{cases} 0 \leq y \leq a \\ 0 \leq z \leq b \end{cases}, \quad b \leq a \leq 2b.$$

Для такого перерізу визначення власних значень задачі (12) еквівалентно задачі визначення власних частот прямокутної мембрани з вільними краями, коли

$$p \Rightarrow p(\mu, \nu), \quad \mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\varepsilon_p \Rightarrow \varepsilon_{\mu, \nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\pi^2}{a^2} \mu^2 + \frac{\pi^2}{b^2} \nu^2 \right].$$

Енергетичні зони при цьому мають наступний вигляд:



Число  $N_p(E)$  власних станів електронів у зоні  $E_p(k)$  з енергією  $< E$  визначається виразом

$$N_p(E) = \frac{2L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + E_0 - \varepsilon_p)} \theta(E + E_0 - \varepsilon_p), \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}.$$



Повне число власних станів  $N(E)$  з енергією  $< E$  з усіх зон визначається сумою чисел  $N_p(E)$ :

$$N(E) = \frac{2L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sum_p \sqrt{E + E_0 - \varepsilon_p} \theta(E + E_0 - \varepsilon_p)$$

Енергія Фермі  $E_F$  у провіднику за її визначенням є тією енергією, для якої  $N(E_F)$  дорівнює повному числу  $N$  носіїв у провіднику. Отже, для її обчислення потрібно скористатись рівністю

$$\frac{N}{L} \equiv n = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sum_p \sqrt{E_F + E_0 - \varepsilon_p} \theta(E + E_0 - \varepsilon_p),$$

де  $n$  – число носіїв, що припадають на одиницю довжини провідника.

Якщо між рівнями енергії  $-E_0$  та  $-E_0 + \varepsilon_1$  є достатньо станів, щоб при  $T = 0$  розмістити всі носії, то зони  $E_1(k), E_2(k), \dots$  при нульовій та низьких температурах залишатимуться незаповненими. При цьому ми повертаємося до розглянутого вище простого випадку частково-заповненої зони  $E_0(k)$  (при достатньо низьких температурах енергія Фермі  $E_F$  та хімічний потенціал  $\mu$  відрізняються неістотно, в чому ми далі переконаємося).

Якщо ж між рівнями енергії  $-E_0$  та  $-E_0 + \varepsilon_{l+1}$  є достатньо станів для розміщення всіх електронів провідника при  $T = 0$ , але на рівнях з енергіями  $\leq -E_0 + \varepsilon_l$  таких станів недостатньо, то рівень Фермі буде перетинати всі зони  $E_0(k), \dots, E_l(k)$ , проте знаходитись нижче дна зони  $E_{l+1}(k)$ .

При достатньо низьких температурах те ж саме можна сказати й про хімічний потенціал  $\mu$ .

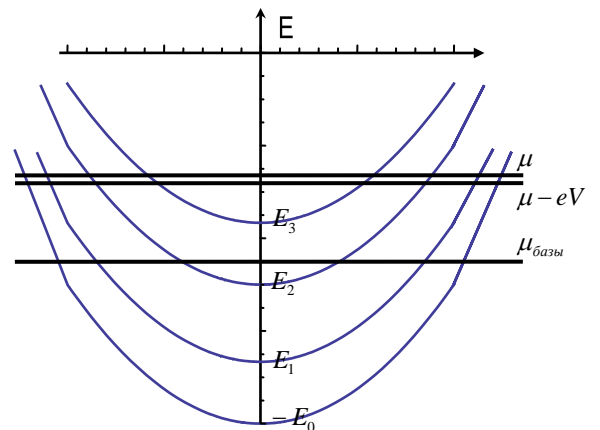
Нагадаємо, що хімічний потенціал визначається з рівняння

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E) \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1},$$

де сумарна густина станів

$$D(E) = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sum_p \frac{\theta(E + E_0 - \varepsilon_p)}{\sqrt{E_F + E_0 - \varepsilon_p}}.$$

При ненульовій різниці потенціалів  $V$  між емітером і колектором, з'єднаних нанопровідником (каналом), електричний струм в останньому, за умови  $\mu > \mu_{\text{каналу}}$ ,



буде обмежуватись числом його частково заповнених зон  $l$ , що перетинаються хімічним потенціалом контактів:

$$I = \sum_{p=0}^l I_p,$$

де

$$I_p = \frac{q^2 D_p(\mu)}{2t_p} V, \quad t_p = \frac{L}{v_p(\mu)} = \frac{L}{\sqrt{2m(\mu + E_0 - \varepsilon_p)}},$$

тобто

$$I_p = \frac{2q^2}{h} V$$

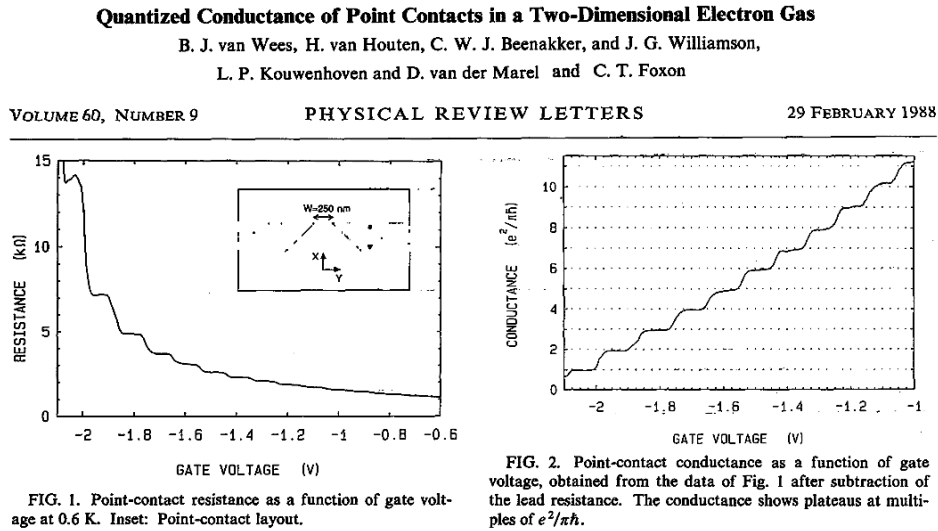
Остаточно, величина електричного струму у нанопровіднику дорівнює

$$I = \frac{2q^2}{h} (l+1) V.$$

Таким чином, формула Ландауера для опору нанопровідника, що не є тонким, набуває вигляду

$$R = \frac{h}{2q^2(l+1)}, \quad (13)$$

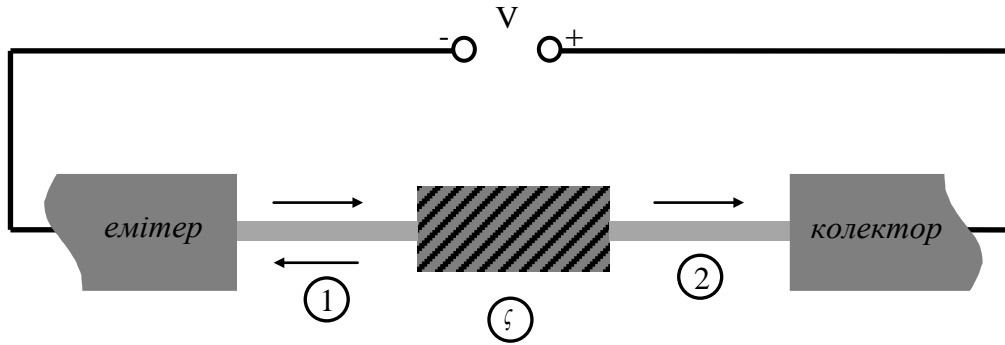
де  $l + 1$  – число зон бази, що перетинаються рівнем хімічного потенціалу емітера та колектора при нульовій різниці потенціалів між ними.



В наведеній роботі Phys. Rev. Lett. **60**, 9 (1988), формула Ландауера (13) була вперше підтверджена експериментально. В ній число зон провідника, що перетинаються рівнем хімічного потенціалу контактів змінювалось за допомогою електричного поля, напрямленого перпендикулярно вісі каналу.

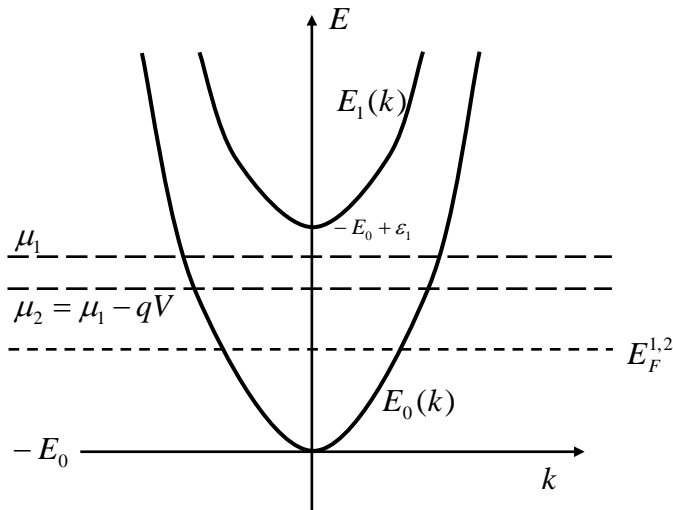
## Формула Ландауера для опору потенціального бар'єру

Розглянемо провідник, приєднаний до контактів (емітера та колектора) за допомогою ідеальних балістичних провідників «1» та «2», як показано на рисунку



Для простоти вважатимемо, що нанопровідники «1» та «2» є ідентичними та тонкими, а їх рівні Фермі  $E_F$  і рівні енергії в інтервалі між хімічними потенціалами емітера  $\mu_1$  та колектора  $\mu_2 = \mu_1 - qV$ , розташовані нижче дна зони

$$E_1(k) = -E_0 + \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$



Власна хвильова функція  $\psi(x, E)$  з енергією  $E$  в каналі задовольняє при цьому ефективне одновимірне рівнянню Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + [V(x) - E_0]\psi(x) = E\psi(x),$$

де  $V(x)$  – потенціал поля, в якому рухаються носії заряду, переходячи з провідника «1» у провідник «с» та далі у провідник «2». Якщо  $l_1$  та  $l_2$  – довжини провідників «1» та «2», відповідно,  $a$  – довжина провідника «с»,  $L = l_1 + l_2 + a$ , то

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l_1 \\ w(x), & l_1 \leq x \leq l_2 \\ 0, & l_1 + a < x < L \end{cases}.$$

Для станів, що відповідають падінню носіїв з квазіімпульсом  $k = \sqrt{\frac{2m(E + E_0)}{\hbar^2}}$  зліва з емітера на провідник « $\zeta$ », тобто потенціальний бар'єр  $w(x)$ , та відбиваються або проходять крізь нього в колектор, хвильові функції  $\psi(x, E)$  задовольнятимуть умови:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A \left\{ e^{ikx} + r(k) e^{-ikx} \right\}, \quad x < l_1 \\ \psi(x) &= A t(k) e^{ikx}, \quad x > l_1 + a.\end{aligned}$$

Коефіцієнти  $r(k)$  та  $t(k)$ , які називають відповідно коефіцієнтами «відбиття» та «проходження», можна визначити зшиваючи вказані розв'язки в провідникові « $\zeta$ » із розв'язками у прилеглих до нього провідниках.

Нагадаємо, що густина потоку ймовірності для власної функції  $\psi(x, E)$

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} [\bar{\psi}(x, E) \psi'(x, E) - \psi(x, E) \bar{\psi}'(x, E)]$$

в усіх точках каналу є однаковою та дорівнює

$$j(x) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} [1 - |r(k)|^2] = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} |t(k)|^2.$$

Звідси, між іншим, виходе, що  $|r(k)|^2 + |t(k)|^2 = 1$ , тобто  $0 \leq |r(k)|^2 \leq 1$ ,  $0 \leq |t(k)|^2 \leq 1$ .

Відношення  $j(x)$  до густини потоку ймовірності в ідеальному нанопровіднику  $j_0 = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$ , збігається з  $|t(k)|^2$ . Останню величину можна інтерпретувати як ймовірність того, що носій, котрий переходить з емітера до провідника «1», подолає бар'єр « $\zeta$ » та потрапить до провідника «2». Аналогічно,  $|r(k)|^2$  – ймовірність відбиття носія від бар'єру « $\zeta$ ».

Якщо розглядати емітер разом із нанопровідником «1» та провідником « $\zeta$ » як єдиний контакт, то при заданій різниці потенціалів  $V$ , струм, що протікає зі складеного контакту крізь провідник «2» в колектор буде відрізнятись множителем  $|t(k)|^2$  від струму, що протікав би з емітера у колектор при їх поєднанні лише ідеальним нанопровідником «1». Звідси випливає, що у розглянутому випадку кондуктанс (провідність) каналу для носіїв з енергіями в інтервалі  $(\mu_1, \mu_2 = \mu_1 - qV)$  дорівнює

$$G = \frac{2q^2}{h} |t(k)|^2.$$

(Вважаємо, що смуга  $(\mu_1, \mu_2)$  є достатньо вузькою, щоб залежність  $|t(k)|^2$  від енергії в межах смуги була незначною). Відповідно, для опору каналу маємо

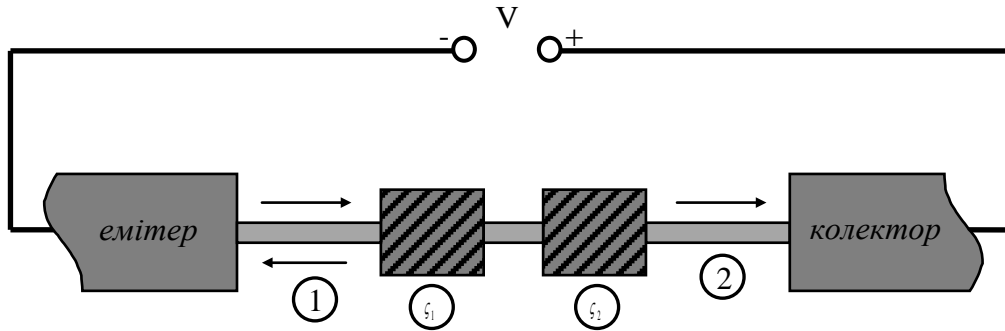
$$R = \frac{h}{2q^2 |t(k)|^2}.$$

Розглядаючи отриманий вираз як суму опорів ідеальних нанопровідників та опору  $R_B$  бар'єру (провідника « $\zeta$ »), а також враховуючи, що опір ідеального провідника дорівнює  $R_I = \frac{h}{2q^2}$ , отримуємо

$$R_B = R - R_I = \frac{h}{2q^2} \left( \frac{1}{|t(k)|^2} - 1 \right) = \frac{h}{2q^2} \frac{1 - |t(k)|^2}{|t(k)|^2} = \frac{h}{2q^2} \frac{|r(k)|^2}{|t(k)|^2}.$$

Ми прийшли до формули Ландауера для опору поодинокого бар'єру.

Узагальнімо отриману формулу Ландауера, вважаючи, що між колектором та емітером розташовані два послідовно з'єднані бар'єри « $\zeta_1$ » та « $\zeta_2$ »:



Нехай  $T_i = |t_i(k)|^2$  та  $R_i = |r_i(k)|^2$ ,  $i=1, 2$ , відповідно, ймовірності проходження крізь  $i$ -й бар'єр та відбиття від нього. Носій, що вилітає з емітера, може

- з імовірністю  $T_1 \cdot T_2$  подолати обидва бар'єри без відбиття;
- з імовірністю  $T_1$  подолати перший бар'єр, потім з імовірністю  $R_2$  відбитися від бар'єру « $\zeta_2$ », після чого знову відбитися, тепер вже від бар'єру « $\zeta_1$ », та, повернувшись до бар'єру « $\zeta_2$ », подолати його (з імовірністю  $T_2$ ).

Ймовірність такого процесу дорівнює добутку  $T_1 R_2 R_1 T_2$ . Відмітимо, що, знаходячись між бар'єрами, носій може відбитися від кожного з бар'єрів двічі (тричі, ..., скільки завгодно велике число разів  $s$ ), перш ніж подолати бар'єр « $\zeta_2$ ». Ймовірності таких процесів, відповідно, дорівнюють

$$T_1 (R_2 R_1)^2 T_2, \quad T_1 (R_2 R_1)^3 T_2, \quad \dots, \quad T_1 (R_2 R_1)^s T_2, \quad \dots$$

Додаючи всі ці ймовірності, знаходимо, що повна ймовірність тунелювання крізь подвійний бар'єр дорівнює

$$T_{12} = \sum_{j=1}^{+\infty} T_1 (R_2 R_1)^j T_2 = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2}$$

Тому, опір каналу (бази) з подвійним бар'єром є рівним

$$R^{(2)} = \frac{h}{2q^2} \frac{1}{T_{12}} = \frac{h}{2q^2} \frac{1 - (1 - T_1)(1 - T_2)}{T_1 \cdot T_2} = \frac{h}{2q^2} \left( \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} - 1 \right),$$

а опір самого подвійного бар'єру дорівнює

$$R_B^{(2)} = R^{(2)} - \frac{h}{2q^2} = \frac{h}{2q^2} \left( \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} - 1 \right) - \frac{h}{2q^2} = \frac{h}{2q^2} \left( \left[ \frac{1}{T_1} - 1 \right] + \left[ \frac{1}{T_2} - 1 \right] \right) = \frac{h}{2q^2} \left( \frac{1-T_1}{T_1} + \frac{1-T_2}{T_2} \right) =$$

$$= \frac{h}{2q^2} \left( \frac{R_1}{T_1} + \frac{R_2}{T_2} \right) = \frac{h}{2q^2} \left( \frac{|r_1(k)|^2}{|t_1(k)|^2} + \frac{|r_2(k)|^2}{|t_2(k)|^2} \right).$$

Далі, вважаючи бар'єр « $\zeta_1$ » складеним (послідовним з'єднанням  $s - 1$  бар'єру), можна по індукції впевнитися в тому, що при послідовному з'єднанні  $s$  бар'єрів « $\zeta_1$ », « $\zeta_2$ », ..., « $\zeta_s$ » опір складеного бар'єру визначатиметься формулою

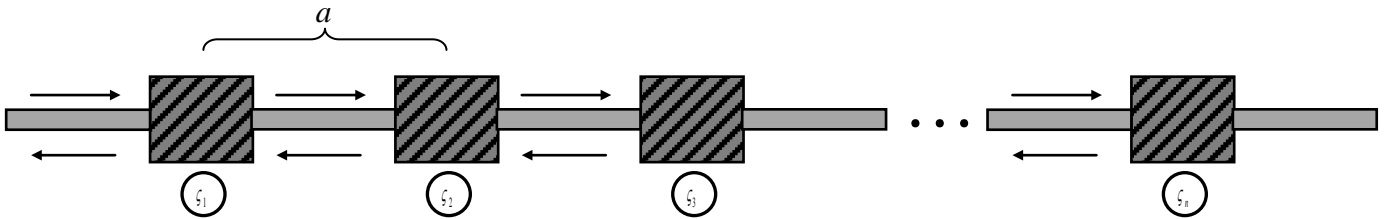
$$R_B^{(n)} = \frac{h}{2q^2} \sum_{j=1}^s \frac{|r_j(k)|^2}{|t_j(k)|^2},$$

де  $r_j(k), t_j(k)$  – коефіцієнти відбиття та проходження для  $j$ -того складового бар'єру.

Якщо всі бар'єри « $\zeta_1$ », ..., « $\zeta_s$ » однакові та розташовані в межах ділянку каналу з довжиною  $L$ , то опір такого складеного бар'єра дорівнюватиме

$$R_B = \frac{h}{2q^2} \frac{|r(k)|^2}{|t(k)|^2} \delta,$$

де  $\delta = L/n$  – середня довжина ділянки каналу, що припадає на один бар'єр.



Припустимо, що ділянка  $L$  каналу є достатньо протяжною, так що  $n = L/\delta \gg 1$ . Тоді величина

$$\lambda = \frac{|t(k)|^2}{|r(k)|^2} \delta = \frac{|t(k)|^2}{1 - |t(k)|^2} \delta$$

є середньою довжиною вільного пробігу носіїв (електронів чи дірок) з імпульсом  $\hbar k$ , що влітають всередину складеного бар'єра. Дійсно, носій

- з імовірністю  $|t(k)|^2 |r(k)|^2$  долає бар'єр « $\zeta_1$ » та відбивається від бар'єру « $\zeta_2$ »;
- з імовірністю  $|t(k)|^4 |r(k)|^2$  долає бар'єри « $\zeta_1$ » та « $\zeta_2$ », після чого відбивається від бар'єру « $\zeta_3$ »;
- з імовірністю  $|t(k)|^{2s} |r(k)|^2$  долає, не відбиваючись,  $s$  бар'єрів, проте відбивається від “ $s+1$ ”-го бар'єру.

При цьому носій

- з імовірністю  $|t(k)|^2|r(k)|^2$  заглиблюється в бар'єрну область в середньому на відстань  $\delta$ ;

- з імовірністю  $|t(k)|^4|r(k)|^2$  заглиблюється в цю область в середньому на відстань  $2\delta$ ;

- з імовірністю  $|t(k)|^{2s}|r(k)|^2$  – в середньому на відстань  $s\delta$ .

Зауважимо, що сума цих ймовірностей (з урахуванням імовірності відбиття вже від першого бар'єра) для нескінченно довгої бар'єрної області дорівнює одиниці:

$$|r(k)|^2 \sum_{n=1}^{\infty} |t(k)|^{2s} = \frac{|r(k)|^2}{1-|t(k)|^2} = \frac{|r(k)|^2}{|r(k)|^2} = 1.$$

тому, середня відстань, яку проходить носій в бар'єрній області, дорівнюватиме

$$\bar{\lambda} = \sum_{l=1}^{\infty} l\delta |t(k)|^{2s} |r(k)|^2 = \delta \frac{|t(k)|^2}{(1-|t(k)|^2)^2} |r(k)|^2 = \delta \frac{|t(k)|^2}{|r(k)|^4} |r(k)|^2 = \delta \frac{|t(k)|^2}{|r(k)|^2}.$$

Таким чином

$$R_B = \frac{h}{2q^2} \frac{L}{\bar{\lambda}}.$$

Бачимо, що повний кондуктанс каналу (бази) дорівнює

$$G = \left[ \frac{h}{2q^2} + R_B \right]^{-1}$$

і тому для довгого каналу при  $L \gg \lambda$  повний опір є пропорційним до довжини каналу.

## Врахування хвильових властивостей носіїв

Якщо характерні розміри неоднорідностей в нанопровідниках, що відіграють роль бар'єрів, та самих нанопровідників порівняні з довжинами хвиль де-Бройля електронів та дірок, які здійснюють перенесення заряду, відповідні носії поширюються крізь нанопровідник не як частинки, а як хвилі, з проявом інтерференційних ефектів. Щоб проаналізувати, наскільки значним є вплив інтерференційних ефектів, розглянемо спрощену модель, в якій потенціал  $w(x)$  задається  $\delta$ -функцією Дірака:

$$w(x) = \gamma \delta(x - x_0), \quad 0 < x_0 < L,$$

де  $\gamma$  – дійсний параметр, що у випадку одновимірного рівняння Шредінгера має розмірність довжини. Хвильова функція  $\psi(x)$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \gamma \psi(x) \delta(x - x_0) = E \psi, \quad (14)$$

ліворуч від точки  $x_0$  задовольняє рівняння для вільної частинки, тобто

$$\psi(x) = a_0^+ e^{ikx} + a_0^- e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad x < x_0.$$

Аналогічно, праворуч від точки  $x_0$  маємо

$$\psi(x) = a_1^+ e^{ikx} + a_1^- e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad x > x_0.$$

Коефіцієнти  $a_0^\pm$  та  $a_1^\pm$  пов'язані співвідношенням, що витікає з умови неперервності хвильової функції у точці  $x_0$

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0) = \psi(x_0)$$

та умови

$$\psi'(x_0 - 0) - \psi'(x_0 + 0) = -\kappa \psi(x_0), \quad \kappa = \frac{2m}{\hbar^2} \gamma,$$

яку можна отримати інтегруванням рівняння (14) по нескінченно малому околу точки  $x_0$ .

Відповідні рівняння для коефіцієнтів  $a_0^\pm$ ,  $a_1^\pm$  мають вигляд

$$a_0^+ e^{ikx_0} + a_0^- e^{-ikx_0} = a_1^+ e^{ikx_0} + a_1^- e^{-ikx_0}$$

$$ik(a_0^+ e^{ikx_0} - a_0^- e^{-ikx_0}) + \kappa(a_0^+ e^{ikx_0} + a_0^- e^{-ikx_0}) = ik(a_1^+ e^{ikx_0} - a_1^- e^{-ikx_0}).$$

Щоб спростити подальші обчислення, зручно записати отриману систему рівнянь у матричній формі:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix}.$$

Множенням обох частин отриманої рівності зліва на матрицю



$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} = -\frac{1}{2ik} \begin{pmatrix} -ik & -1 \\ -ik & 1 \end{pmatrix},$$

після чого – на матрицю

$$\begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix},$$

приходимо до співвідношення

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} &= -\frac{1}{2ik} \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ik & -1 \\ -ik & 1 \end{pmatrix} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \kappa & \kappa \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} - \frac{1}{2ik} \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ik & -1 \\ -ik & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \kappa & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} + \frac{\kappa}{2ik} \begin{pmatrix} 1 & e^{-2ikx_0} \\ -e^{2ikx_0} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-2ikx_0} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{2ikx_0} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

яке пов'язує коефіцієнти  $a_0^\pm$  та  $a_1^\pm$  при переході частинки крізь  $\delta$ -подібний бар'єр.

У випадку задачі розсіяння  $a_0^+ = 1$ ,  $a_0^- = r(k)$ ,  $a_1^+ = t(k)$ ,  $a_1^- = 0$ .

Зокрема, співвідношення  $a_1^- = 0$  призводить до

$$r(k) = -\frac{d_{21}}{d_{22}} = \frac{\kappa}{\kappa - 2ik} e^{2ikx_0},$$

де  $d_{21}, d_{22}$  – елементи матриці

$$\mathbf{T}_{(1)}(k) = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-2ikx_0} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{2ikx_0} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix}.$$

Враховуючи, що детермінант матриці  $\mathbf{T}_{(1)}(k)$  дорівнює одиниці, отримуємо, що

$$t(k) = d_{11} + d_{12} r(k) = d_{11} - d_{12} \frac{d_{21}}{d_{22}} = \frac{d_{11}d_{22} - d_{12}d_{21}}{d_{22}} = \frac{1}{d_{22}} = \frac{1}{1 - \frac{\kappa}{2ik}}.$$

Відповідно до встановленого вище співвідношення, опір поодинокого  $\delta$ -подібного бар'єру дорівнює

$$R_{(1)} = \frac{h}{2q^2} \left[ \frac{1}{|t(k)|^2} - 1 \right] = \frac{h}{8q^2} \frac{\kappa^2}{k^2}.$$

Тепер розглянемо складений бар'єр, утворений двома однаковими  $\delta$ -подібними бар'єрами, розташованими в точках  $x_0$  та  $x_1 = x_0 + a$ ,  $a > 0$ . Якщо ліворуч від бар'єру в точці  $x_0$  хвильова функція має (як і раніше) вигляд  $\psi(x) = a_0^+ e^{ikx} + a_0^- e^{-ikx}$ , то при переході крізь правий бар'єр коефіцієнти  $a_0^\pm$  замінюються на коефіцієнти  $a_1^\pm$ :

$$\begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{(1)}(k) \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix}.$$

Далі, праворуч від другого бар'єру (розташованого в точці  $x_1$ ), коефіцієнти  $a_1^\pm$  перетворюються на коефіцієнти  $a_2^\pm$ :

$$\begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{(2)}(k) \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-2ikx_1} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{2ikx_1} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix}.$$

Бачимо, що при переході крізь подвійний бар'єр коефіцієнти  $a_0^\pm$  хвильової функції перетворюються на коефіцієнти  $a_2^\pm$  відповідно до виразу

$$\begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{\Sigma(2)}(k) \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{(2)}(k) \mathbf{T}_{(1)}(k) \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix}.$$

(Взагалі, для довільного бар'єру, складеного з  $N$   $\delta$ -подібних бар'єрів, розташованих в точках  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , маємо вираз

$$\begin{pmatrix} a_N^+ \\ a_N^- \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{\Sigma(N)}(k) \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix} = \left( \prod_{j=N}^1 \mathbf{T}(x_j, \kappa_j, k) \right) \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix},$$

де

$$\mathbf{T}(x_j, \kappa_j, k) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa_j}{2ik} & \frac{\kappa_j}{2ik} e^{-2ikx_j} \\ -\frac{\kappa_j}{2ik} e^{2ikx_j} & 1 - \frac{\kappa_j}{2ik} \end{pmatrix}, \quad \kappa_j = \frac{2m}{\hbar^2} \gamma_j,$$

$\gamma_i$  – введені вище параметри  $\delta$ -подібних бар'єрів)

Вважаючи, як і раніше, що  $a_0^+ = 1$ ,  $a_0^- = r(k)$ ,  $a_2^+ = t(k)$ ,  $a_2^- = 0$  та враховуючи рівність

$$\det(\mathbf{T}_{(2)}(k) \mathbf{T}_{(1)}(k)) = \det(\mathbf{T}_{(2)}(k)) \det(\mathbf{T}_{(1)}(k)) = 1,$$

переконаємося в тому, що

$$t(k) = \frac{1}{d_{22}^\Sigma(k)},$$

де  $d_{22}^\Sigma$  – 22-елемент матриці  $\mathbf{T}_{\Sigma(2)}(k) = \mathbf{T}_{(2)}(k) \mathbf{T}_{(1)}(k)$ .

Тобто коефіцієнт проходження подвійного бар'єру дорівнює

$$t(k) = \frac{1}{\frac{\kappa^2}{4k^2} e^{2ika} + \left(1 - \frac{\kappa}{2ik}\right)^2}.$$

Відповідно, вираз для опору подвійного бар'єру набуває вигляду

$$R_{\Sigma(2)} = \frac{h}{2q^2} \left[ \left| \frac{\kappa^2}{4k^2} e^{2ika} + \left(1 - \frac{\kappa}{2ik}\right)^2 \right|^2 - 1 \right] = \frac{h}{2q^2} \left[ \left| \frac{\kappa^2}{4k^2} (e^{2ika} - 1) + i \frac{\kappa}{k} + 1 \right|^2 - 1 \right].$$

Цей вираз істотно залежить від добутків  $ka$  хвильового числа  $k$  носія на відстань між бар'єрами  $a$ .

Якщо  $ka = \pi n$ ,  $n = 0; 1; 2; \dots$ , то  $R_{\Sigma(2)} = \frac{h}{2q^2} \frac{\kappa^2}{k^2}$ , що в чотири рази більше за опір поодинокого бар'єру. При  $ka = \pi(n + 1/2)$ ,  $n = 0; 1; 2; \dots$  бачимо, що  $R_{\Sigma(2)} = \frac{h}{8q^2} \frac{\kappa^4}{k^4}$  та відношення  $\frac{R_{\Sigma(2)}}{R_{(1)}} = \frac{\kappa^2}{k^2}$ , тобто може бути як великим так і малим числом.<sup>2</sup>

З останніх виразів можна було б зробити висновок про хибність отриманого раніше твердження про те, що ландауерівський опір складеного бар'єру, утвореного послідовним з'єднанням декількох бар'єрів, є сумою опорів складових бар'єрів. Проте такий висновок був би поспішним.

Відмітимо, що електрони та дірки, що переносять заряд у нанопровіднику, мають енергії в діапазоні  $(\mu - qV, \mu)$ , де  $\mu$  – хімічний потенціал електродів, а  $V$  – різниця потенціалів між ними. Відповідно, хвильові числа  $k$  носіїв змінюються в діапазоні з шириною  $\sim \sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}} \frac{qV}{\mu}$ . Якщо відстань між розглянутими бар'єрами є достатньо великою, щоб у вказаному діапазоні хвильових чисел зміна добутку  $ka$  переважала  $\pi$ , то струми, утворені частинками з різними хвильовими числами, додаватимуться і повна провідність нанопровідника може бути замінена її середнім значенням по діапазону залучених в процес перенесення заряду між електродами хвильових чисел. Іншими словами, для великої відстані між бар'єрами та достатньо широкого діапазону змін хвильових чисел  $k$ , коли  $\sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}} \frac{qV}{\mu} a \gg \pi$ , при обчисленні повного струму крізь нанопровідник замість виразу для провідності

$$\sigma_{\Sigma(2)} = \frac{2q^2}{h} \frac{1}{\left| \frac{\kappa^2}{4k^2} (e^{2ika} - 1) + i \frac{\kappa}{k} + 1 \right|^2}$$

можна використати усереднений вираз

$$\langle \sigma_{\Sigma(2)} \rangle = \frac{2q^2}{h} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left| \frac{\kappa^2}{4k^2} (e^{2i\theta} - 1) + i \frac{\kappa}{k} + 1 \right|^{-2} d\theta.$$

Відмічаючи, що для  $|r| < 1$

<sup>2</sup> Такі відмінності зумовлені хвильовими властивостями носіїв. нагадаємо, наприклад, що повний переріз розсіювання квантових частинок на твердій сфері радіуса  $R$  дорівнює  $4\pi a^2$ , в той час як у класичному випадку він складає  $\pi a^2$ .

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{|re^{i\theta} + 1|^2} d\theta = \frac{1}{1-|r|^2}$$

бачимо, що

$$\langle \sigma_{\Sigma(2)} \rangle = \frac{2q^2}{h} \frac{1}{1 + \frac{\kappa^2}{2k^2}}.$$

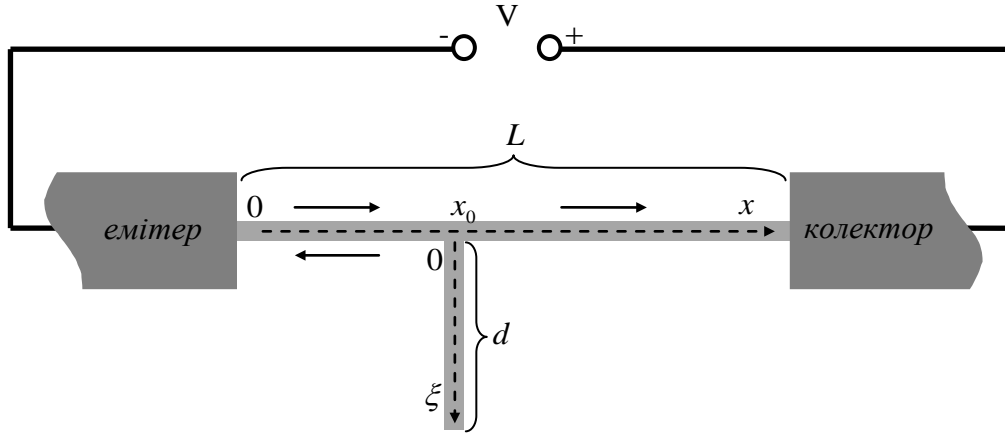
Звідси випливає, що за вказаних умов опір подвійного бар'єру дорівнює

$$R_{\Sigma(2)} = \frac{h}{4q^2} \frac{\kappa^2}{k^2},$$

що в точності збігається з отриманим раніше результатом.

## Квантовий інтерференційний польовий транзистор

Опір каналу (бази) в нанотранзисторі можна змінити, приєднавши до нього в деякій точці  $x_0$  (як зображено на рисунку) тонкий нанопровідник скінченої довжини так, щоб носії могли протікати між емітером та колектором крізь канал, долаючи по дорозі контакт в точці  $x_0$ . Приєднаний провідник називатимемо «затвором».



Контакт с «затвором» у точці  $x_0$  створює для носіїв, що рухаються крізь канал, розсіювальну перешкоду, яку вони з деякою ймовірністю можуть подолати. Для того щоб визначити ландауерівський опір контакту с затвором розглянемо хвильові функції  $\psi(x, E)$ ,  $0 \leq x \leq L$  та  $\varphi(\xi, E)$ ,  $0 \leq \xi \leq d$  власних станів електрона (або дірки) з енергією  $E$  в каналі та затворі відповідно. Ці функції задовольняють рівняння Шредінгера

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x, E) + E_0\psi(x, E) &= E\psi(x, E), \quad 0 \leq x \leq L; \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(\xi, E) + U(\xi)\varphi(\xi, E) &= E\varphi(\xi, E), \quad 0 \leq \xi \leq d. \end{aligned}$$

Тут  $U(\xi)$  – потенціальна енергія носіїв в затворі. Для простоти вважатимемо, що (ефективні) маси носіїв в каналі та затворі збігаються й, окрім того, потенціальна енергія для носіїв в каналі замінюється сталою  $E_0 < 0$ . При проникному контакті каналу з затвором на хвильові функції  $\psi(x, E)$ ,  $\varphi(\xi, E)$  в точці з'єднання ( $x = x_0$  для  $\psi$  та  $\xi = 0$  для  $\varphi$ ) накладаються обмеження, які можна змодельовати у вигляді граничних умов:

$$\begin{cases} \psi(x_0 - 0, E) = \psi(x_0 + 0, E) = \varphi(0, E) \\ \psi'(x_0 - 0, E) - \psi'(x_0 + 0, E) - \varphi'(0, E) = \kappa\psi(x_0 - 0, E) \end{cases} \quad (15)$$

де  $\kappa$  – параметр, який, як і у випадку  $\delta$ -подібного бар'єра, має розмірність зворотної довжини та залежить від фізичної природи контакту затвора з каналом.

Для визначеності вважатимемо, що хвильова функція  $\varphi(\xi, E)$  задовольняє також і другій граничній умові:

$$\varphi'(d, E) = 0.$$

За умови, що функція  $\varphi(\xi, E)$  є відомою, другу граничну умову в (15) з урахуванням першої можна переписати у вигляді:

$$\psi'(x_0 - 0, E) - \psi'(x_0 + 0, E) = \left[ \kappa + \frac{\varphi'(0, E)}{\psi(x_0 - 0, E)} \right] \psi(x_0 - 0, E) = \left[ \kappa + \frac{\varphi'(0, E)}{\varphi(0, E)} \right] \psi(x_0 - 0, E).$$

Бачимо, що для носіїв, які поширюються уздовж каналу, контакт із затвором можна змоделювати у вигляді  $\delta$ -подібного бар'єру з параметром  $\tilde{\kappa}(E)$ , залежним від енергії носія:

$$\tilde{\kappa}(E) = \kappa + \frac{\varphi'(0, E)}{\varphi(0, E)}.$$

Як було встановлено вище, ймовірність проходження крізь подібний бар'єр

$$|t(E)|^2 = \frac{4k^2}{4k^2 + \tilde{\kappa}^2(E)}, \quad k^2 = \frac{2m(E + |E_0|)}{\hbar^2},$$

а відповідний ландауерівський опір

$$R_B = \frac{h}{2q^2} \frac{\tilde{\kappa}^2(E)}{4k^2}.$$

Для дослідження впливу затвора на опір каналу спершу розглянемо випадок, коли потенціал  $U(\xi)$  у рівнянні Шредінгера для функції  $\varphi(\xi, E)$  зводиться до сталої  $\varepsilon_0$  ( $\varepsilon_0 < 0$  и  $\varepsilon_0 < E$ ). Покладаючи

$$k_1^2 = \frac{2m(E + |\varepsilon_0|)}{\hbar^2}$$

бачимо, що

$$\varphi(\xi, E) = A \cos[k_1(d - \xi)]$$

є розв'язком цього рівняння, що задовольняє умову  $\varphi'(d, E) = 0$ . Тому

$$\frac{\varphi'(0, E)}{\varphi(0, E)} = k_1 \operatorname{tg} k_1 d$$

й, відтак,

$$\tilde{\kappa}^2 = (\kappa + k_1 \operatorname{tg} k_1 d)^2.$$

Враховуючи, що значення  $\operatorname{tg} \alpha$  при зміні аргументу  $\alpha$  від 0 до  $\pi$  пробігає всі числа від  $-\infty$  до  $+\infty$ , бачимо, що в залежності від довжини затвора й енергії носіїв опір каналу з приєднаним до нього затвором може змінюватися від  $\frac{h}{2q^2}$  до  $+\infty$ .

Однак, регулювання опору каналу нанотранзистора, вбудованого в готову мікросхему, шляхом зміни довжини приєданого до нього затвора та зміни енергії носіїв заряду в каналі виглядає достатньо складною задачею. Значно простіше добитись того ж результату можна за допомогою зовнішнього електричного поля визначеної напруженості  $F$ , напрямленого паралельно затвору. Щоб зрозуміти, як

таке поле впливає на опір бар'єру, створюваного затвором, насамперед відмітимо, що таке поле помітно не впливатиме на переніс електронів (дірок) крізь канал, бо для нанопровідника малого діаметру  $\Delta \ll d$  додаткові потенціальні енергії, що носії набувають у вказаному зовнішньому полі, будуть розрізнятися на величини не більш ніж  $F\Delta \xrightarrow{\Delta \rightarrow 0} 0$ . При цьому, таке поле в цілому не впливатиме й на струм крізь транзистор, бо при його увімкненні майже однаковим чином зсуватимуться рівні енергії як в контактах, так і в каналі. На стани електронів в затворі поле помітно впливатиме лише якщо величина

$$qF d \frac{2m}{\hbar^2 k^2}$$

(тобто відношення зміни потенціальної енергії електронів в каналі до їх кінетичної енергії) не є нехтовно малою.

Оскільки опір бар'єру, створюваного затвором, залежить безпосередньо від логарифмічної похідної  $\frac{\varphi'(\xi, E)}{\varphi(\xi, E)}$  в точці  $\xi = 0$ , покладаючи

$$\frac{\varphi'(\xi, E)}{\varphi(\xi, E)} = k_1 \operatorname{tg} \delta(\xi, E), \quad k_1 = E + |\varepsilon_0|,$$

перейдемо до рівняння для  $\delta(\xi, E)$ . Диференціюючи по  $\xi$  обидві частини останньої рівності, отримуємо (із урахуванням рівняння для  $\varphi(\xi, E)$ ), що

$$k_1 \delta'(\xi, E) \cdot \frac{1}{\cos^2 \delta(\xi, E)} = \frac{\varphi''(\xi, E)}{\varphi(\xi, E)} - \left( \frac{\varphi'(\xi, E)}{\varphi(\xi, E)} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [U(\xi) - \varepsilon_0] - k_1^2 - k_1^2 \operatorname{tg}^2 \delta(\xi, E).$$

Використовуючи безрозмірну змінну  $\eta = k_1 \xi$  перепишемо рівняння для  $\delta(\eta, E)$  у вигляді

$$\delta'(\eta, E) \cdot \frac{1}{\cos^2 \delta(\eta, E)} = \frac{2m}{\hbar^2 k_1^2} [U(\eta/k_1) - \varepsilon_0] - \operatorname{tg}^2 \delta(\eta, E) - 1$$

або

$$\delta'(\eta, E) = -1 + \frac{2m}{\hbar^2} [U(\eta/k_1) - \varepsilon_0] \cos^2 \delta(\eta, E). \quad (16)$$

При увімкненні електричного поля з напруженістю  $F$  паралельно затвору, отримуємо

$$U(\eta/k_1) - \varepsilon_0 = -q F \frac{\eta}{k_1}.$$

В силу граничної умови в точці  $d$  бачимо, що

$$\operatorname{tg} \delta(d, E) = \frac{\varphi'(d, E)}{\varphi(d, E)} = 0.$$

Тому, можна вважати, що

$$\delta(k_1 d, E) = 0.$$

Звідси та з (16) випливає, що шукана фаза  $\delta(\eta, E)$  задовольняє нелінійне інтегральне рівняння

$$\delta(\eta, E) = -\eta + k_1 d - \frac{2m}{\hbar^2 k_1^2} qF \int_{\eta}^{k_1 d} \frac{1}{k_1} \eta' \cos^2 \delta(\eta', E) d\eta'.$$

Якщо параметр  $\frac{2m}{\hbar^2 k_1^2} qF$  є достатньо малим, то, як випливає з останнього виразу,

$$\delta(0, E) = k_1 d - \frac{m}{2\hbar^2} \frac{qF}{k_1} \left[ d^2 + \frac{1}{k_1^2} \sin^2 k_1 d \right].$$

Таким чином, при ввімкненні електричного поля  $F$  паралельно затвору, опір бар'єру, створюваного затвором, приєднаним у деякій точці каналу, визначається виразом

$$R_B = \frac{h}{2q^2} \frac{[\kappa + k_1 \operatorname{tg}(k_1 d - \varphi(k_1 d))]^2}{4k^2}, \quad \varphi(k_1 d) = \frac{m d^2}{2\hbar^2} \frac{qF}{k_1} \left[ 1 + \frac{\sin^2 k_1 d}{k_1^2 d^2} \right].$$

Чутливість опору каналу до впливу поперечного зовнішнього поля можна підсилити, якщо підключити до нього не один, а декілька паралельних затворів. Розглянемо, наприклад, складений затвор з  $N$  однакових паралельних еквідистантних  $\delta$ -бар'єрів з тими ж, що і вище параметрами  $d, \kappa$ . Вважатиме, що ці бар'єри приєднано до каналу в точках  $x_0, x_0 + a, \dots, x_0 + (N-1)a$ . Як було вказано раніше, коефіцієнт проходження  $t(k)$  крізь такий складений бар'єр задається виразом

$$t(k) = \frac{1}{d_{22}^{\Sigma(N)}(k)},$$

де  $d_{22}^{\Sigma(N)}(k)$  – 22-елемент добутку матриць

$$\mathbf{T}_{\Sigma(N)}(k) = \prod_{s=N}^1 \mathbf{T}(x_s, \kappa_s, k) = \prod_{s=N}^1 \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-2ik[x_0+(s-1)a]} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{2ik[x_0+(s-1)a]} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix}.$$

Оскільки

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-2ik[x_0+(s-1)a]} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{2ik[x_0+(s-1)a]} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{ik[x_0+(s-1)a]} & 0 \\ 0 & e^{-ik[x_0+(s-1)a]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} \\ -\frac{\kappa}{2ik} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik[x_0+(s-1)a]} & 0 \\ 0 & e^{ik[x_0+(s-1)a]} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

бачимо, що



$$\mathbf{T}_{\Sigma(N)}(k) = \begin{pmatrix} e^{ik[x_0+(N-1)a]} & 0 \\ 0 & e^{-ik[x_0+(N-1)a]} \end{pmatrix} \mathbf{G}(k)^N \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix},$$

де  $\mathbf{G}(k)^N$  означає  $N$ -тий степінь матриці

$$\mathbf{G}(k) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\kappa}{2ik} & \frac{\kappa}{2ik} \\ -\frac{\kappa}{2ik} & 1 - \frac{\kappa}{2ik} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[1 + \frac{\kappa}{2ik}\right] e^{-ika} & \frac{\kappa}{2ik} e^{-ika} \\ -\frac{\kappa}{2ik} e^{ika} & \left[1 - \frac{\kappa}{2ik}\right] e^{ika} \end{pmatrix}.$$

Щоб знайти  $N$ -тий степінь матриці  $\mathbf{G}(k)$  помітимо, що її власні значення, тобто корні її характеристичного рівняння

$$\chi(k; \lambda) = \det[\mathbf{G}(k) - \lambda \cdot \mathbf{I}] = \lambda^2 - 2 \left[ \cos ka - \frac{\kappa}{2k} \sin ka \right] \lambda + 1 = 0,$$

даються виразами

$$\lambda_{\pm}(k) = \cos ka - \frac{\kappa}{2k} \sin ka \pm i \sqrt{1 - \left( \cos ka - \frac{\kappa}{2k} \sin ka \right)^2}, \quad \lambda_-(k) = \lambda_+(k)^{-1}.$$

Оскільки кожна квадратна матриця «задовольняє» своє характеристичне рівняння (теорема Келі-Гамільтона), бачимо, що

$$(\mathbf{G}(k) - \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{G}(k) - \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I}) = (\mathbf{G}(k) - \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{G}(k) - \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}) = \mathbf{0}.$$

Звідси

$$\mathbf{G}(k) \cdot (\mathbf{G}(k) - \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I}) = \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}, \quad \mathbf{G}(k) \cdot (\mathbf{G}(k) - \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}) = \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I},$$

що з урахуванням тотожності

$$\frac{1}{\lambda_+(k) - \lambda_-(k)} (\mathbf{G}(k) - \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}) + \frac{1}{\lambda_-(k) - \lambda_+(k)} (\mathbf{G}(k) - \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I}) \equiv \mathbf{I}$$

дає

$$\mathbf{G}(k)^N = \frac{\lambda_+(k)^N}{\lambda_+(k) - \lambda_-(k)} (\mathbf{G}(k) - \lambda_-(k) \cdot \mathbf{I}) + \frac{\lambda_-(k)^N}{\lambda_-(k) - \lambda_+(k)} (\mathbf{G}(k) - \lambda_+(k) \cdot \mathbf{I}).$$

Тому 22-елемент матриці  $\mathbf{T}_{\Sigma(N)}(k)$  в нашому випадку дається виразом

$$d_{22}^{\Sigma(N)}(k) = \left\{ \frac{\lambda_+(k)^N - \lambda_-(k)^N}{\lambda_+(k) - \lambda_-(k)} \left[ 1 - \frac{\kappa}{2ik} \right] e^{ika} - \frac{\lambda_+(k)^{N-1} - \lambda_-(k)^{N-1}}{\lambda_-(k) - \lambda_+(k)} \right\} e^{-i(N-1)ka}.$$

Позначимо для стислості  $\cos ka - \frac{\kappa}{2k} \sin ka$  як  $\cos \theta$  і, відповідно,  $\lambda_+(k) + \lambda_-(k)$  та

$\lambda_{\pm}(k)$  як  $2 \cos \theta$  та  $e^{\pm i\theta}$ . Тоді

$$d_{22}^{\Sigma(N)}(k) = \left\{ \cos N\theta + i \frac{\sin N\theta}{\sin \theta} \left( \sin ka + \frac{\kappa}{2k} \cos ka \right) \right\} e^{-i(N-1)ka}$$

і, отже

$$|t(k)|^2 = |d_{22}^{\Sigma(N)}(k)|^{-2} = \left[ 1 + \frac{\kappa^2}{4k^2} \cdot \frac{\sin^2 N\theta}{\sin^2 \theta} \right]^{-1}.$$

Бачимо, що ландауерівський опір каналу із описаним вище  $N$ -кратним «затвором»

$$R_B^{(N)} = \frac{\kappa^2}{4k^2} \cdot \frac{\sin^2 N\theta}{\sin^2 \theta} \quad (17a)$$

відрізняється множителем  $\frac{\sin^2 N\theta}{\sin^2 \theta}$  від каналу з однократним «затвором». Зауважимо,

що у випадках, коли  $\left| \cos ka - \frac{\kappa}{2k} \sin ka \right| > 1$  цей множник трансформується у

$$R_B^{(N)} = \frac{\kappa^2}{4k^2} \cdot \frac{\text{sh}^2 N\theta}{\text{sh}^2 \theta}. \quad (17b)$$

Чутливістю такої системи затворів можна керувати за допомогою зовнішнього електричного поля  $F$  через описану вище залежність від нього параметру  $\kappa$ , а через останній і параметру  $\theta$ . При цьому, якщо  $\kappa(F_1) = \kappa(F_2) = 0$  для напруженостей полів  $F_1 < F_2$ , тоді при змінах  $F$  в інтервалі  $(F_1, F_2)$  опір затвору  $R_B^{(N)}$  принаймні  $N-1$  раз пройде через нуль, тобто для зміни опору  $R_B^{(N)}$   $N$ -кратного «затвору» від нульового до найбільшого значення потрібна в  $N$  разів менша зміна величина поля  $F$ , ніж у випадку єдиного затвору з тими самими параметрами.

## Хімічний потенціал та теплоємність провідника

Нагадаємо, що хімічний потенціал ідеального фермі-газу визначається з рівняння

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) D(E) dE, \quad (17)$$

де  $n$  – число електронів в одиниці об'єму,  $D(E)$  – густина електронних станів в матеріалі, що визначається рівнянням  $dN(E) = D(E)dE$ ;

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad 0 \leq f(E) \leq 1,$$

– середнє число заповнення одноелектронних станів з енергією  $E$  при заданій температурі. При цьому, стани, що відрізняються лише значеннями проекції спіну на виділений напрям, вважаються різними.

Знаючи матеріал електроду, структуру та хімічний склад його кристалічної ґратки, число валентних електронів атомів, можна обчислити густину електронів  $n$ . Звісно,  $n$  дещо змінюється з температурою внаслідок температурного розширення ґратки, проте, в першому наближенні, цим можна знехтувати.

Найбільш простий, хоча й не самий ефективний, спосіб обчислення значення хімічного потенціалу  $\mu$  – підібрати його значення, добиваючись перетворення інтегралу (17) у тотожність.

Для зручності, далі в цьому параграфі будемо вважати, що  $N(E)$  – не повне число можливих станів в системі, що розглядається, а число станів, що припадають на одиницю її об'єму (або, що теж саме,  $V=1$ ). Будемо шукати залежність  $\mu(n, T)$  у випадку достатньо низьких температур.

При  $T = 0$  всі стани з енергією  $E < E_F$  заповнені й  $N(E_F)|_{T=0} = nV$  (де  $V$  – об'єм ґратки), а всі стани з  $E > E_F$  – вільні (рис. У1). В цьому випадкові хімічний потенціал збігається з енергією Фермі:  $\mu = E_F$ .

Для визначення  $\mu$  при відносно низьких  $T \neq 0$  скористаємось так званим методом Зомерфельда. Для цього перепишемо (17) у вигляді

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) D(E) dE = f(E) N(E)|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) N(E) dE, \quad (18)$$

де враховано, що

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

Подвійна підстановка в (18) обертається в нуль, так що  $f(E) \sim e^{-\beta E}$  при  $E \rightarrow +\infty$ , а  $N(E)$  зростає не швидше, ніж  $E^\nu$ , де  $\nu$  – деяке число (зазвичай  $\leq 1/2$ ), і, стало бути,

$$f(E) N(E)|_{E \rightarrow +\infty} \sim e^{-\beta E} E^\nu \rightarrow 0;$$

при  $E \rightarrow -\infty$ , очевидно,  $f(E) \rightarrow 1$ , але при цьому  $N(E) \rightarrow 0$ , так як у термодинамічних нормальних конденсованих системах відсутні стани зі скільки завгодно великими за модулем від'ємними енергіями, так що число рівнів з енергією меншою за деяку енергію  $E_{\min}$  ( $E_{\min} < 0$ ,  $|E_{\min}| \gg 0$ ) дорівнює нулю.

Таким чином,

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) N(E) dE. \quad (19)$$

Розглянемо випадок достатньо низьких температур, коли  $\beta$  у  $f(E)$  може вважатись великим числом і функція  $f(E)$  набуває вигляду «сходинок» (рис. у2).

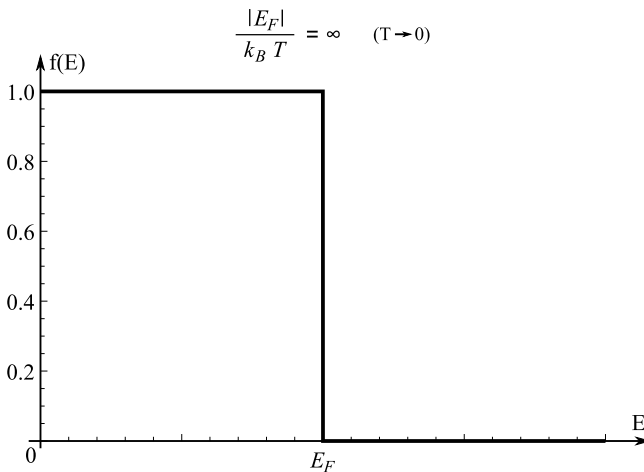


Рис. У1.

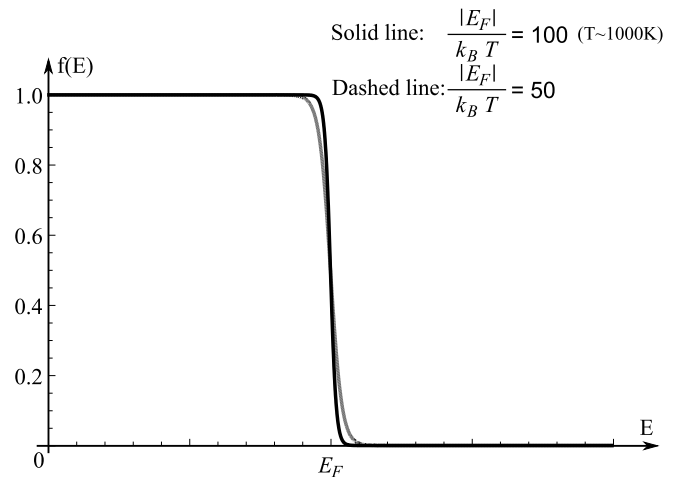


Рис. У2.

Похідна  $-\frac{\partial f(E)}{\partial E}$ , відповідно, близька до нуля в тих областях, де  $f(E) \approx \text{const}$  й приймає великі значення в околі  $E_F$  (рис. У3), тобто при низьких температурах вона вельми схожа з  $\delta$ -функцією Дірака (до того ж, площа під нею також дорівнює одиниці, що легко перевірити).

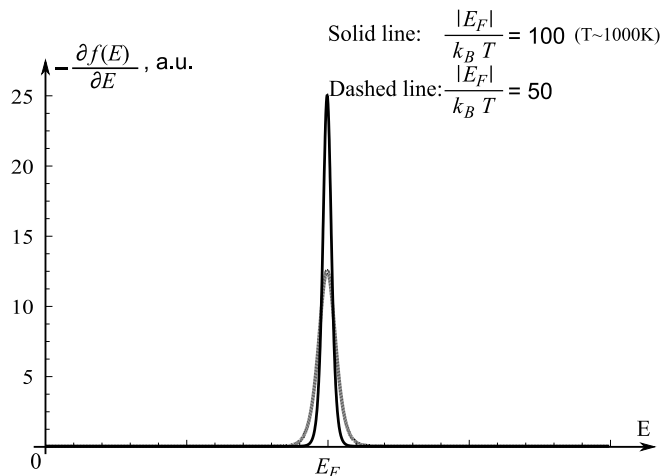


Рис. У3.

Відповідно, основний внесок в інтеграл (19) вносить малий окіл точки  $E = \mu$ , що дозволяє в цьому випадкові замінити функцію  $N(E)$  в інтегралі її розкладом по малому параметру  $(E - \mu)$ :

$$N(E) = N(\mu) + \frac{N'(\mu)}{1!}(E - \mu) + \frac{N''(\mu)}{2!}(E - \mu)^2 + \dots$$

Тоді (33) набуває вигляду (згадаємо, що  $N'(E) = g(E)$ )

$$n = N(\mu) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE}_{-(f(+\infty)-f(-\infty))=1} + g(\mu) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) (E - \mu) dE}_0 + \frac{1}{2} g'(\mu) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) (E - \mu)^2 dE}_{\frac{\pi^2}{3}(k_B T)^2}$$

Остаточно, отримуємо

$$n = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu).$$

За температур, коли  $\frac{E_F}{k_B T} \gg 1$ ,  $\mu \rightarrow E_F$ . Тоді, враховуючи перші члени розкладу

$N(\mu)$  в ряд Тейлора за  $(\mu - E_F)$ , маємо

$$n \approx N(E_F) + \underbrace{N'(E_F)}_{D(E_F)} (\mu - E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(E_F).$$

З урахуванням того, що  $n = N(E_F)$ , бачимо, що

$$D(E_F) (\mu - E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(E_F) = 0, \quad (20)$$

звідки

$$\mu = E_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{D'(E_F)}{D(E_F)} (k_B T)^2.$$

Для фермі-газу вільних частинок, який в деяких випадках може бути успішно використаний для моделювання електронної підсистеми металів,  $D(E) \sim \sqrt{E}$ . Тому

$$\frac{D'(E_F)}{D(E_F)} = \left( \ln D(E) \right)' \Big|_{E=E_F} = \frac{1}{2E_F}$$

тобто

$$\mu = E_F - \frac{\pi^2}{12} \frac{(k_B T)^2}{E_F} = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right].$$

Варто відзначити, що  $\frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2$  – дуже мале число, бо для всіх існуючих

металів та інших речовин (при розумних значеннях тиску)  $E_F \gg k_B T_{\text{кипіння}}$ . Так, найбільша температура кипіння серед чистих речовин спостерігається у ренія:

$$T_{\text{кип.}}(75 \text{ Re}) = 5869 \text{ K},$$

що складає 0.45 еВ. В той же час, рівні Фермі металів у рідкій/кристалічній фазах знаходяться в межах 3 – 10 еВ. Тобто навіть у найбільш екстремальних випадках

$$\frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 < 0.04, \text{ а при кімнатних температурах } \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 < 10^{-4}.$$

Аналогічним методом можна проаналізувати вираз для густини енергії електронного газу

$$u = \int_{-\infty}^{+\infty} E f(E) D(E) dE .$$

В результаті відповідних перетворень отримуємо співвідношення

$$u \approx u_0 + E_F \left[ \underbrace{N'(E_F)}_{D(E_F)} (\mu - E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(E_F) \right] + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(E_F) ,$$

де  $u_0$  – густина енергії при  $T = 0$ . В силу (20) вираз у квадратних дужках в правій частині отриманого співвідношення дорівнює нулю. Тому

$$u \approx u_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(E_F) . \quad (21)$$

Диференціюючи густину енергії за температурою, отримуємо вираз для теплоємності ідеального фермі-газу

$$c_V \approx \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(E_F) T$$

Зокрема, для електронної підсистеми металу, змодельованої ідеальним фермі-газом вільних частинок, маємо

$$c_V \approx \frac{3}{2} k_B \cdot \frac{\pi^2 k_B T}{3 E_F} .$$

## Провідність та дифузія

Повернемося до отриманого вище виразу для густини електронних станів у провіднику

$$n \approx N(E_F) + D(E_F)(\mu - E_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D'(E_F). \quad (22)$$

Якщо кристал є деформованим, то густина носіїв заряду  $n$  та хімічний потенціал  $\mu$  будуть змінюватись від точки до точки:

$$\delta n = D(E_F) \delta \mu,$$

$$\vec{\nabla} n = D(E_F) \vec{\nabla} \mu.$$

При цьому будуть змінюватись й інші фізичні параметри, пов'язані з  $n$ .

Розглянемо провідник, розміщений у зовнішньому електричному полі  $\mathbf{F}$ , в якому також наявні локальні розтягнення та стиснення внаслідок впливу деяких зовнішніх сил (наприклад, ультразвукової хвилі або зовнішнього тиску). Тоді в провіднику буде діяти два механізми, що призводять до появи струму:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_F(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_d(\mathbf{r}), \quad (23)$$

де

$\mathbf{j}_F(\mathbf{r}) = \sigma \mathbf{F}(\mathbf{r})$  – струм, що виникає під дією зовнішнього поля ( $\sigma$  – провідність).

$\mathbf{j}_d(\mathbf{r}) = -qD\vec{\nabla}n$  – струм, зумовлений дифузією електронів ( $D$  – коефіцієнт дифузії).

Будемо вважати, що відповідні поля та деформації достатньо малі (порівняно з атомними полями) та змінюються плавно (тобто є практично сталими на атомних масштабах). Тоді провідник можна умовно розбити макроскопічні області, в кожній з яких встановлюються свої локальні параметри ( $n, \mu, \dots$ ).

Потенціальна енергія частинки, розташованої в деякій точці  $\mathbf{r}$  провідника

$$U = E_0 + q\Phi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{F} = -\vec{\nabla}\Phi(\mathbf{r}).$$

Відповідно, концентрація електронів  $n(\mathbf{r})$  в околі цієї точки відрізняється від концентрації в інших точках провідника:

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_r(E) D(E) dE, \quad \text{де } f_r(E) = \frac{1}{e^{\beta(E - q\Phi(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r}))} + 1},$$

тобто тепер розподіл Фермі залежить від положення елемента об'єму провідника, що розглядається, й враховує вплив зовнішнього поля.

$$\vec{\nabla} n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_r'(E) D(E) dE \left[ q\mathbf{F}(\mathbf{r}) - \vec{\nabla}\mu(\mathbf{r}) \right] \approx -D(E_F) \left[ \vec{\nabla}\mu(\mathbf{r}) - q\mathbf{F}(\mathbf{r}) \right].$$

Враховуючи, що градієнт потенціалу є пов'язаним з електричним полем, з (23) отримуємо вираз для струму, що виникає в провіднику під вказаним вище зовнішнім впливом

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma \mathbf{F}(\mathbf{r}) + q \mathcal{D} \left[ \vec{\nabla} \mu(\mathbf{r}) - q \mathbf{F}(\mathbf{r}) \right] D(E_F). \quad (24)$$

Струм всередині провідника не завжди може протікати необмежено довго – наприклад, у незамкненому провіднику, до кінців якого прикладено різницю потенціалів, струм протікатиме тільки впродовж невеликого проміжку часу одразу після створення різниці потенціалів. Отже,  $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$  дорівнює нулю в такому провідникові, а на однорідних ділянках і  $\vec{\nabla} \mu(\mathbf{r}) = 0$ , тобто

$$\left[ \sigma - q^2 \mathcal{D} D(E_F) \right] \mathbf{F}(\mathbf{r}) = 0,$$

Звідки робимо висновок, що справедливим є так зване співвідношення Ейнштейна

$$\sigma = q^2 \mathcal{D} D(E_F). \quad (25)$$

З урахуванням (25) вираз (24) набуває вигляду:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma}{q} \vec{\nabla} \mu(\mathbf{r}),$$

тобто «силою», що підтримує струм в провіднику, є градієнт хімічного потенціалу (його також називають електрохімічним потенціалом).



## Теплові явища

При переході електрону з одночастинкового стану з енергією  $E$  в емітері до стану з тією ж енергією в колекторі внутрішня енергія  $U_1$  емітера зменшується на  $E$ . Вільна енергія  $F_1$  емітера у відповідності з означенням хімічного потенціалу змінюється при цьому на величину “ $-\mu_1(T)$ ”, а ентропія – на величину

$$\delta S_1 = \frac{1}{T} [\delta U_1 - \delta F_1] = \frac{1}{T} [-E + \mu_1(T)].$$

Відповідна зміна ентропії колектора при цьому дорівнює

$$\delta S_2 = \frac{1}{T} [\delta U_2 - \delta F_2] = \frac{1}{T} [E - \mu_2(T)],$$

а повна зміна ентропії транзистора складає

$$\delta S = \delta S_1 + \delta S_2 = \frac{1}{T} [\mu_1 - \mu_2] = -\frac{1}{T} qV.$$

Враховуючи, що ентропія  $S$  нанотранзистора й ентропія  $\tilde{S}$  інших частин фізичної системи, з транзистором включно, в сумі можуть лише зростати, тобто  $\delta S + \delta \tilde{S} \geq 0$ , то описаний елементарний перехід у транзисторі повинен супроводжуватись виділенням тепла  $T\delta\tilde{S} \geq -T\delta S = qV$  в оточуючий простір.

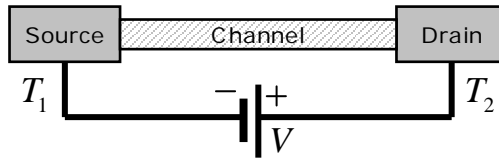
За тих самих умов обернений перехід електрону з енергією  $E$  з колектора до емітера супроводжується зміною ентропії транзистору на величину  $+\frac{1}{T}qV$  й, відповідно, поглинанням з оточуючого простору якнайменш кількості  $qV$  тепла.

За розглянутих умов число переходів в одиницю часу з емітера до колектора крізь канал (базу) перевищує відповідне число зворотних переходів із колектора до емітера на величину, рівну відношенню  $I/q$ , де  $I$  – струм крізь базу. Тому з урахуванням формули Ландауера потужність  $W$  виділення тепла нанотранзистором з тонкою базою при протіканні крізь нього струму  $I$  задовольняє нерівність:

$$W \geq \frac{I}{q} \cdot qV = \frac{V^2}{R} = \frac{2q^2}{h} V^2 = \frac{h}{2q^2} I^2$$

– аналог закону Джоуля-Ленца.

До сих пір, аналізуючи електронний струм крізь нанотранзистор, ми неявно вважали, що температури всіх його складових збігаються. Далі відкинемо це припущення, покладаючи, що емітер S і колектор D транзистору в умовах експерименту перебувають за різних, проте незмінних температур  $T_1$  й  $T_2$ ,  $T_1 \neq T_2$ , відповідно, й, якщо знадобиться, обмежимося умовою  $|T_2 - T_1| \ll T_1$ .



У міркуваннях, що привели нас раніше до виразу для струму крізь канал (базу) транзистора, який виникає за наявності сталої різниці потенціалів  $V$  між емітером і колектором, ми ніяк не торкалися розподілу температур в самому пристрої, хоча явно враховували температурну залежність фермієвської функції розподілу  $f(T, E)$  – ймовірність заповнення в електроді станів з енергією  $E$  при температурі  $T$ .

Щоб отримати за вказаних умов вираз для електричного струму  $I$ , що протікає крізь канал транзистора, згадаємо отриманий раніше відповідний вираз й врахуємо в ньому, що фермієвські функції розподілу для різних електродів тепер відрізняються не лише значеннями хімічних потенціалів, але й температурою. При цьому врахуємо, що кожна зона одноелектронних станів бази  $E_n(\mathbf{k}) = E_n(k)$  дає парціальний внесок до густини електронних станів бази  $D(E)$ , рівний

$$D_n(E) = \frac{2L}{\pi} \left| \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_n(E)}^{-1}, \quad E_n(k_n(E)) = E.$$

Враховуючи, що

$$v_n(E) = \frac{1}{\hbar} D_n(E) = \left[ \frac{dE_n(k)}{dk} \right]_{k=k_n(E)}$$

– швидкість електрону  $n$ -ї зони, який має енергію  $E$ , можна записати

$$D_n(E) = \frac{2}{\pi\hbar} \frac{L}{|v_n(E)|}$$

й, що час життя  $\tau_n(E)$  для електронів  $n$ -ї зони при довжині бази  $L$  меншій за довжину вільного пробігу носіїв в матеріалі, дається виразом

$$\tau_n(E) = \frac{L}{|v_n(E)|},$$

приходимо до висновку, що для електронів  $n$ -ї зони

$$\frac{D_n(E)}{\tau_n(E)} = \frac{2}{\pi\hbar}.$$

Розглядаючи повний струм, що протікає крізь базу як паралельне з'єднання струмів, створюваних електронами з різними зонними енергіями  $E_n(k)$  та вводячи функцію

$$\chi_n(E) = \begin{cases} 1, & \text{якщо енергія } E \text{ лежить у межах } n\text{-ої зони} \\ 0, & \text{якщо енергія } E \text{ не лежить у межах } n\text{-ої зони} \end{cases}$$

отримуємо, що

$$I = \frac{q}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_n \frac{D_n(E)}{T_n(E)} \chi_n(E) [f(T_1, E - \mu(T_1)) - f(T_2, E + qV - \mu(T_2))] =$$

$$= \frac{q}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left[ \sum_n \chi_n(E) \right] [f(T_1, E - \mu(T_1)) - f(T_2, E + qV - \mu(T_2))],$$

за умови, що рівні енергії  $\mu(T_1)$  й  $qV + \mu(T_2)$  перетинають  $\nu$  зон бази та знаходяться в глибині перетнутих зон на відстанях значно більших за  $k_B T$  від їх країв. Якщо  $E_{n,\min}$  та  $E_{n,M}$ , відповідно, нижній і верхній краї  $n$ -ї зони бази,  $E_{n,\min} < \mu < E_{n,M}$  й  $\min\{\mu - E_{n,\min}, E_{n,M} - \mu\} \gg k_B T$ , тоді

$$\int_{E_{n,\min}}^{E_{n,M}} \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE = k_B T \int_{\beta(E_{n,\min}-\mu)}^{\beta(E_{n,M}-\mu)} \frac{1}{e^x + 1} dx = k_B T \ln \frac{e^{\beta(\mu-E_{n,\min})} + 1}{e^{\beta(\mu-E_{n,M})} + 1} \approx k_B T \beta(\mu - E_{n,\min}) = \mu - E_{n,\min}.$$

З останнього співвідношення та виразу для сили струму  $I$  випливає, що за наведених припущень

$$I = \frac{q}{\pi \hbar} [\mu(T_1) + qV - \mu(T_2)].$$

Враховуючи, що  $\mu(T) = E_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(E_F)$ , маємо

$$I = \frac{2\nu q^2}{h} \left[ V - \frac{\pi^2 k_B^2}{6q} D'(E_F) [T_2^2 - T_1^2] \right] \approx \frac{2\nu q^2}{h} \left[ V - \frac{\pi^2}{3q} D'(E_F) k_B^2 T_1 (T_2 - T) \right].$$

За відносно невеликої різниці температур вираз для  $I$  можна записати у вигляді

$$I = \frac{1}{R_{Land}} [\Delta V + S_e \Delta T], \quad (26)$$

де  $R_{Land} = \frac{h}{2\nu q^2}$  – ландауерівська провідність бази,  $S_e = -\frac{\pi^2}{3q} D'(E_F) k_B^2 T$  – коефіцієнт Зеєбека.

Помічаючи, що  $C_V = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2 T$  – електронна теплоємність бази, маємо

$$S_e = \frac{\gamma}{q} C_V,$$

де  $\gamma = -\frac{D'(E_F)}{D(E_F)}$  – коефіцієнт порядку  $E_F^{-1}$ .

Зокрема, якщо хімічні потенціали електродів перетинають єдину параболічну зону,  $E(k) \sim k^2$ , тоді  $D(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E}}$  й стало бути  $\gamma = \frac{1}{2E_F}$ .

Формула (26) показує, що, поряд з різницею потенціалів  $\Delta V$ , електрорушійною силою (ЕРС), що викликає протікання струму між емітером та колектором, є й різниця температур між електродами. Цю додаткову ЕРС називають термо-ЕРС.

Якщо коефіцієнт Зеебека є від'ємним, тоді додатковий струм буде напрямленим від менш нагрітого електроду до більш нагрітого.

Якщо струм крізь базу відсутній,  $I = 0$ , проте, в той самий час, емітер і колектор підтримуються при різних температурах, то між ними встановиться різниця потенціалів

$$\Delta V = -S_e \Delta T .$$

## Гігантський магнітоопір

Успіхи комп'ютерної ери в значній мірі зобов'язані неперервному вдосконаленню конструкцій електронних мікросхем, технологій їх виготовлення та самій ідеї про те, що інформація може оброблятися, передаватися та видаватися у формі електричного заряду. Як вже згадувалось, протягом останньої половини сторіччя обчислювальна потужність комп'ютерів подвоювалася кожні півтора-два роки, проте в найближчі роки можливості традиційних кремнієвих технологій для подальшого вдосконалення комп'ютерних пристроїв будуть вичерпані з потенційно серйозними наслідками для наукового прогресу.

Ще в 1989 році Supriyo Datta та Biswajit Das запропонували альтернативну ідею пристроїв, які для обробки інформації використовуватимуть спін електронів замість їх заряду. Реалізація цієї ідеї дозволила б вийти за рамки принципових обмежень кремнієвої електроніки.

Поштовхом до практичного використання безпосередньо спіну в контексті електроніки послугувало відкриття гігантського магнітоопору. Коли електричний струм витікає з феромагнетика (наприклад, з феромагнітного металічного контакту) в немагнітний провідник, струм в немагнітній речовині виявляється поляризованим в тому сенсі, що спіни носіїв струму зорієнтовані переважно в одному напрямку. Якщо цей спіновий струм інжектуюється далі з немагнітного провідника в інший феромагнітний контакт, він зазнаватиме опору, залежного від відносної орієнтації магнітних полів контактів. Така поведінка опору є основою функціонування спінового затвору – пристрою, що розпізнає орієнтацію намагніченості контактів та дозволяє істотно збільшити густину запису в магнітних носіях інформації.

Насправді, спіновий затвор являє собою дещо більше за пасивний сенсор, що перетворює записану методом намагнічування інформацію в електричний сигнал, який далі може оброблятися методами традиційної електроніки. В додачу до цього, запропонований S. Datta та B. Das пристрій може діяти як перемикач, аналогічний звичайним кремнієвим транзисторам. Відомий, як спіновий польовий транзистор, цей пристрій базується на тому факті, що в деяких напівпровідникових матеріалах з сильною спін-орбітальною взаємодією (взаємодією між орбітальним кутовим моментом електронних станів та спіном електронів в цих станах), зовнішнє електричне поле може повертати напрям спінів інжектованих електронів.

Хоча поки що нікому не вдалося до кінця реалізувати ідею спінового польового транзистора внаслідок низки складних супутніх технічних проблем, сама ідея використання спіну як самостійного засобу передачі й обробки інформації породила нову область знань – спінтроніку.

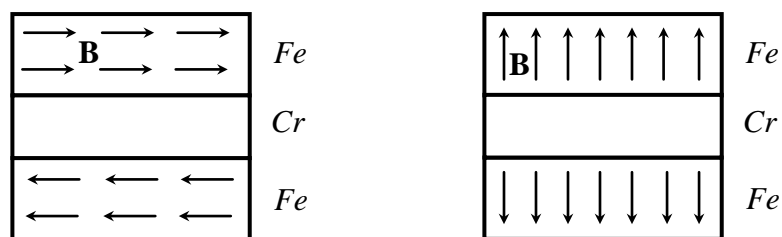
Магнітоопір, що є ключовим поняттям спітроніки, являє собою явище зміни електричного опору речовини в залежності від величини прикладеного зовнішнього магнітного поля. Чисельно він характеризується співвідношенням вигляду

$$\delta_H = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(H)},$$

де  $\rho(0)$  – питомий опір у відсутності поля,  $\rho(H)$  – питомий опір у магнітному полі  $H$ . У звичайних масивних магнітних матеріалах магнітоопір  $\delta_H$  є зовсім малим. При кімнатних температурах у феромагнітному залізі та нікелі (при паралельній орієнтації поля й струму)  $\delta_H$  складає відповідно 0.0007 та 0.015 в полі  $H = 10$  кЕ.

Експериментальні факти, що свідчать про можливість підсилення магнітоопору в анізотропних середовищах відомі порівняно давно. Однак до кінця 80-х років ХХ сторіччя не вдалося довести  $\delta_H$  до 0.1. В 1988 році А. Ферту та П. Грюнбергу при дослідженні опору структур, складених з послідовно розташованих шарів феромагнітних та неферомагнітних матеріалів, незалежно вдалось досягти значного збільшення  $\delta_H$ .

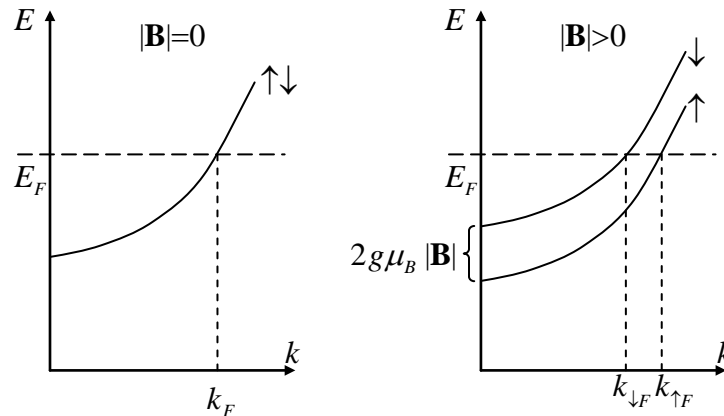
Зокрема, в роботі А.Ферта, в якій було заявлено про відкриття ефекту, експериментально досліджувалась надгратка (001)Fe/(001)Cr, створена шляхом почергового осадження пари заліза та хрому у високому вакуумі й при кімнатній температурі на зріз (001) об'ємноцентрованої ґратки GaAs. При товщині шарів заліза у 3 нм та хрому у 0.9-3 нм при гелієвій температурі 4.2К й напруженості зовнішнього поля  $H = 20$  кЕ магнітоопір такої антиферомагнітної структури досягав 0.9. Цей ефект отримав назву *гігантського магнітоопору* щоб підкреслити його відносно велику величину порівняно зі спостережуваними до цього значеннями  $\delta_H$ .



Грубе пояснення явища гігантського магнітоопору зводиться до наступних простих міркувань.

У немагнітних провідниках електрони провідності можна розділити на дві рівні частини відповідно до орієнтації їх спінів відносно виділеного напрямку. При цьому сумарна густина електричного струму  $\mathbf{j}$  в них також є сумою густин струмів  $\mathbf{j}_\uparrow$  та  $\mathbf{j}_\downarrow$  носіїв зі спінами, орієнтованими уздовж та проти виділеного напрямку (умовно, «вгору» та «вниз»). В таких речовинах, як мідь чи золото, енергетичні зони для  $\uparrow$  та  $\downarrow$ -електронів можна вважати співпадаючими. Однак, у зовнішньому магнітному полі  $\mathbf{B}$ , напрямленому в певному напрямку  $\uparrow$  («вгору»), рівні  $\uparrow$ -

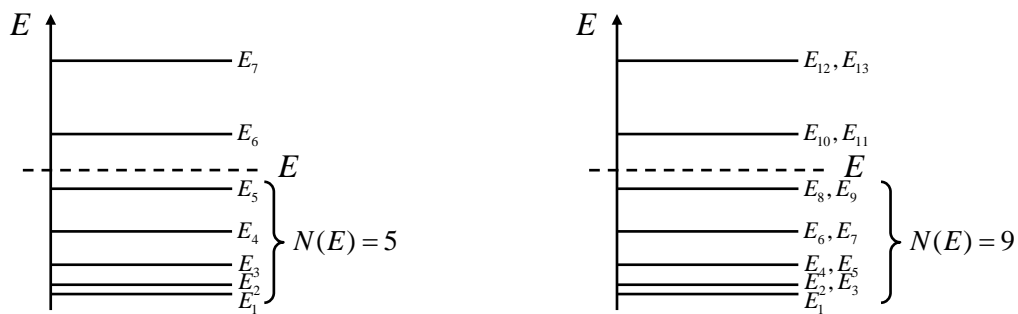
електронів знижуються на величину  $g \mu_B |\mathbf{B}|$ , де  $\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24}$  Дж/Тл – магнетон Бора ( $q = 1.6 \times 10^{-19}$  Кл,  $m_e = 9.1 \times 10^{-31}$  кг), а  $g \approx 2$  –  $g$ -фактор електрону. Рівні  $\downarrow$ -електронів, навпаки, підвищуються на таку ж саму величину.



В результаті, як видно з рисунку, нижче рівня Фермі  $E_F$  опиняється більше число станів  $\uparrow$ -зони, ніж станів  $\downarrow$ -зони. Тому, в полі  $\mathbf{B}$ , напрямленому «вгору», більшу долю носіїв складатимуть  $\uparrow$ -електрони. Також видно, що для густин станів  $\uparrow$ - та  $\downarrow$ -електронів поблизу рівня Фермі справедлива рівність  $D_{\uparrow}(E_F) > D_{\downarrow}(E_F)$ .

Отримаємо вираз для густини станів у провіднику за наявності магнітного поля, вважаючи, що зонні енергії  $E_n(\mathbf{k})$  залежать лише від модуля хвильового вектору  $\mathbf{k}$ ,  $E_n(\mathbf{k}) = E_n(k)$ .

Нехай  $N(E)$  – функція розподілу електронних станів провідника, тобто число рівнів з енергіями меншими або рівними  $E$ , що припадають на одиницю його об'єму.



Тоді з означення густини електронних станів випливає (при майже неперервному розподілі рівнів, тобто при достатньо великих лінійних розмірах елементів транзистора), що  $D(E) = N'(E)$ .

Нагадаємо, що хвильовий вектор у тривимірному кубічному кристалі, що має форму куба з ребром  $L$ , при циклічних крайових умовах на його границі може приймати лише значення

$$\mathbf{k} = \left( \frac{2\pi}{L} n_x, \frac{2\pi}{L} n_y, \frac{2\pi}{L} n_z \right), \quad k^2 = |\mathbf{k}|^2 = \frac{4\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2),$$

де  $n_x, n_y, n_z \in \mathbf{Z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Враховуючи однозначну залежність зонної енергії від хвильового числа електронного стану, маємо вираз

$$N(E) = \frac{1}{L^3} \sum_{n, \mathbf{k}} \theta(E - E_n(\mathbf{k})),$$

де  $\theta(x) = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ 1, & x \leq 0 \end{cases}$  – функція Хевісайда. Оскільки при  $\frac{2\pi}{L} \rightarrow 0$  справедливе співвідношення

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \approx \int_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k},$$

бачимо, що

$$D(E) = \frac{1}{L^3} \frac{d}{dE} \sum_{n, \mathbf{k}} \theta(E - E_n(\mathbf{k})) = \frac{1}{L^3} \sum_{n, \mathbf{k}} \delta(E - E_n(\mathbf{k})) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_n \int_{\mathbf{k}} \delta(E - E_n(\mathbf{k})) d\mathbf{k}.$$

Звідси, вважаючи, що рівень Фермі провідника перетинає лише одну зону з енергією  $E(\mathbf{k})$ , залежною лише від модуля хвильового вектору  $\mathbf{k}$ ,  $E(\mathbf{k}) = E(k)$ , для густини станів такого провідника в околі рівня Фермі за наявності магнітного поля отримуємо

$$D(E) = D_{\uparrow}(E) + D_{\downarrow}(E),$$

де  $D_{\uparrow\downarrow}(E)$  - густини станів електронів зі спінами, що напрямлені відповідно вздовж « $\uparrow$ » і проти « $\downarrow$ » поля,

$$\begin{aligned} D_{\uparrow\downarrow}(E) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \delta(E \pm g\mu_B |\mathbf{B}| - E(k)) d\mathbf{k} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \delta(E \pm g\mu_B |\mathbf{B}| - E(k)) k^2 dk \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left| \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right|^{-1} k^2 \Big|_{k=k(E \pm g\mu_B |\mathbf{B}|)} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k^2 (E \pm g\mu_B |\mathbf{B}|)}{\hbar v(E \pm g\mu_B |\mathbf{B}|)}, \end{aligned}$$

де

$$v(E) = \frac{1}{\hbar} \cdot \left| \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right|_{k=k(E)}$$

– модуль швидкості зонного електрону з енергією  $E$ ,  $k(E)$  - функція обернена до  $E(k)$ . Зокрема, на рівні Фермі

$$\begin{aligned} D_{\uparrow}(E_F) &= \frac{1}{2\pi^2 \hbar} \frac{1}{v(E_F + \mu_B H)} k^2(E_F + \mu_B H) \\ D_{\downarrow}(E_F) &= \frac{1}{2\pi^2 \hbar} \frac{1}{v(E_F - \mu_B H)} k^2(E_F - \mu_B H) \end{aligned}$$

У феромагнітних матеріалах на кшталт заліза, кобальту й нікелю електрони знаходяться в сильному самоузгодженому полі  $\mathbf{M}$  (приймемо за його напрям  $\uparrow$ ), створюваного впорядкованими магнітними моментами електронів незаповнених d-



оболонки атомів. Тому й у відсутності зовнішнього магнітного поля густини електронних станів в околі рівня Фермі для спінів, зорієнтованих уздовж  $\mathbf{M}$  ( $\uparrow$ ) та у протилежному напрямку ( $\downarrow$ ), виявляються відмінними й задовольняють умову  $D_{\uparrow}(E_F) > D_{\downarrow}(E_F)$ . При цьому внесок в електропровідність феромагнітних матеріалів електронів зі спінами напрямленими протилежно до  $\mathbf{M}$  виявляється меншим за внесок кількісно переважаючих  $\uparrow$ -носіїв. Останнє твердження нескладно обґрунтувати в рамках спрощеної ізотропної моделі, в якій зонні енергії електронів  $E_{\alpha}(k)$  залежать лише від модуля  $k = |\mathbf{k}|$  їх квазіімпульсу  $\mathbf{k}$ . В цьому випадкові парціальний внесок  $D_{\alpha}(E)$  у повну густину електронних станів від зони  $E_{\alpha}(k)$  (за умови, що рівень  $E$  перетинає цю зону), складає

$$D_{\alpha}(E) = \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{k_{\alpha}^2(E)}{2\pi^2 \hbar v_{\alpha}(E)}. \quad (27)$$

З іншого боку, парціальний внесок  $\sigma_{\alpha}$  в електропровідність електронів зони  $E_{\alpha}(k)$ , що перетинає рівень Фермі, в силу співвідношення Ейнштейна пов'язана з коефіцієнтом дифузії електронів  $\mathcal{D}_{\alpha}$  у станах з зони  $E_{\alpha}(k)$  співвідношенням

$$\sigma_{\alpha} = q^2 \mathcal{D}_{\alpha} D_{\alpha}(E_F).$$

При цьому, згідно з електронною теорією металів

$$\mathcal{D}_{\alpha} = \frac{1}{3} l_{\alpha}(E_F) v_{\alpha}(k_{\alpha}(E_F)),$$

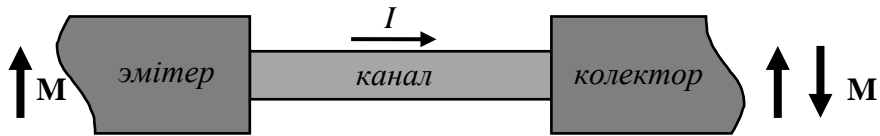
де  $l_{\alpha}(E_F)$  – середня довжина вільного пробігу електронів з зони  $E_{\alpha}$  на рівні Фермі,  $v_{\alpha}(k_{\alpha}(E_F))$  – абсолютне значення швидкості цих електронів на рівні Фермі. Бачимо, що

$$\sigma_{\alpha} = q^2 \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{k_{\alpha}^2(E)}{6\pi^2 \hbar} l_{\alpha}(E_F). \quad (28)$$

Використовуючи останній вираз, порівняємо провідності  $\sigma_{\uparrow}$  та  $\sigma_{\downarrow}$  основних та неосновних носіїв у магнітних матеріалах при низьких температурах, за яких зіткненнями електронів з фононами можна знехтувати. За таких температур кінцеве значення довжини вільного пробігу носіїв зумовлено в основному зіткненнями з дефектами ґратки та її границями. Звертаючись до формули (28) бачимо, що в ній для  $\sigma_{\uparrow}$  квазіімпульси  $k_{\uparrow}(E_F)$  більші, ніж  $k_{\downarrow}(E_F)$  у формулі для  $\sigma_{\downarrow}$  (бо рівні зони  $E_{\uparrow}(k)$  при одних і тих самих значеннях  $k$  лежать нижче, ніж рівні зони  $E_{\downarrow}(k)$ ). При цьому, як показують експеримент та достатньо непростий теоретичний аналіз, у феромагнітних матеріалах довжина вільного пробігу  $l_{\uparrow}(E_F)$  може майже в 10 разів перевищувати  $l_{\downarrow}(E_F)$ . Тому  $\sigma_{\uparrow} > \sigma_{\downarrow}$ .

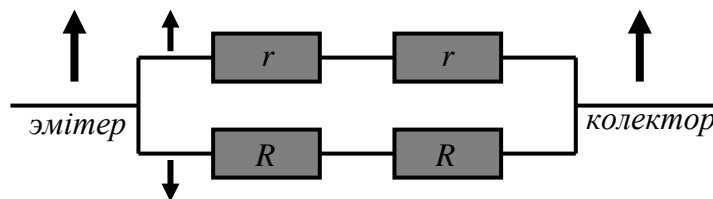
Відмінність у  $\sigma_{\uparrow}$  та  $\sigma_{\downarrow}$  лежить в основі пристрою, названого спіновим клапаном. Схематично його можна представити як резистор з феромагнітними

контактами та немагнітним каналом (стрілками вказано напрями намагніченості контактів).



Опір такого пристрою виявляється різним при паралельній та антипаралельній намагніченостях емітера та колектора. При цьому опір  $R_p$  при паралельній намагніченості виявляється меншим за опір  $R_{AP}$  при антипаралельній намагніченості контактів. Для пояснення цієї відмінності будемо умовно вважати, що пристрій являє собою два (паралельно з'єднаних) провідних канали, спіни носіїв в одному з яких зорієнтовані паралельно намагніченості емітера  $\mathbf{M}$ , а в іншому – антипаралельно  $\mathbf{M}$ . Для спрощення не будемо враховувати опір каналу (бази).

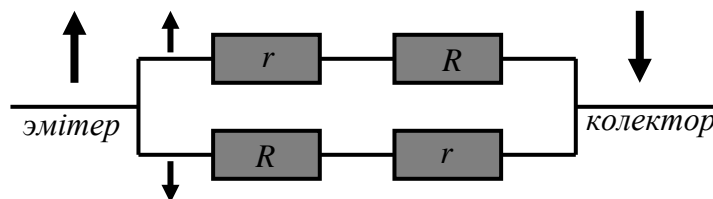
Нехай  $r$  – опір емітера для  $\uparrow$ -каналу з паралельно поляризованими спінами носіїв, а  $R$  – відповідний опір для  $\downarrow$ -каналу. Будемо вважати, що такі ж опори для  $\uparrow$ - та  $\downarrow$ -каналів має колектор. За цих припущень, електрична схема пристрою при паралельній намагніченості контактів матиме вигляд



Опір в цьому випадку дорівнює

$$R_p = \left( \frac{1}{2r} + \frac{1}{2R} \right)^{-1} = \frac{2rR}{r+R}.$$

При антипаралельній намагніченості контактів відповідна схема має вигляд



а її опір

$$R_{AP} = \left( \frac{1}{R+r} + \frac{1}{r+R} \right)^{-1} = \frac{r+R}{2}.$$

Очевидно, що

$$R_{AP} - R_p = \frac{1}{2(R+r)} [(r+R)^2 - 4rR] = \frac{(R-r)^2}{2(R+r)} > 0$$

й магнітоопір спінового клапану дорівнює

$$\delta_M = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} = \frac{(R-r)^2}{4rR} = \frac{\left(\frac{R-r}{R+r}\right)^2}{\frac{4rR}{(R+r)^2}} = \frac{\left(\frac{R-r}{R+r}\right)^2}{1 + \frac{4rR - (R+r)^2}{(R+r)^2}} = \frac{\left(\frac{R-r}{R+r}\right)^2}{1 - \left(\frac{R-r}{R+r}\right)^2} = \frac{p^2}{1-p^2},$$

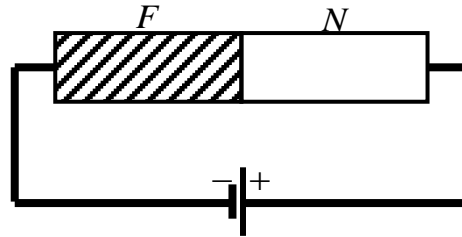
де  $p = \frac{R-r}{R+r}$  – поляризуємість пристрою.

Клапан називають відкритим, якщо контакти транзистора намагнічені паралельно та закритим в протилежному випадкові. При  $p \rightarrow 1$ , тобто  $R \rightarrow \infty$ , клапан відкритий при паралельній намагніченості контактів і його опір складає  $2r$  та повністю закритий при антипаралельній намагніченості.

## Інжекція спінів

З урахуванням можливості двох різних напрямків спіну електронів у намагніченому провіднику, струм можна розглядати як паралельне з'єднання двох взаємо проникних струмів з густинами  $j_{\uparrow}$  та  $j_{\downarrow}$  для електронів зі спінами паралельними та антипаралельними намагніченості провідника.

Розглянемо контакт відносно довгих квазіодновимірних феромагнітного (F) та неферомагнітного («нормального», N) провідників. Будемо вважати, що в нерівноважному стані, підтримуваному зовнішнім джерелом, хімічні потенціали  $\mu_{\uparrow}$  та  $\mu_{\downarrow}$  носіїв з протилежними орієнтаціями спінів і відповідні густини струмів  $j_{\uparrow}$  і  $j_{\downarrow}$  можуть змінюватись від точки до точки й, взагалі кажучи, з часом.



Наряду з густиною зарядового струму

$$j_{ch} = q [j_{\uparrow} + j_{\downarrow}] = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} [\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow}(x) + \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}(x)]$$

введемо й густину спінового струму, покладаючи

$$j_s = q [j_{\uparrow} - j_{\downarrow}] = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} [\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow}(x) - \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}(x)],$$

де  $x$  – координата вздовж провідників, початок якої вибираємо в точці їх контакту.

В немагнітних металах і напівпровідниках провідність не залежить від орієнтації спіну:  $\sigma_{\uparrow} = \sigma_{\downarrow} = \frac{1}{2} \sigma_N$  і тому

$$j_s = q [j_{\uparrow} - j_{\downarrow}] = \frac{\sigma_N}{2q} \frac{\partial}{\partial x} [\mu_{\uparrow}(x) - \mu_{\downarrow}(x)].$$

Рівняння неперервності для заряду та для спіну мають вигляд, відповідно,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j_{ch}}{\partial x}, \quad \frac{\partial M_z}{\partial t} = -\frac{\partial j_s}{\partial x} + T_s,$$

де  $M_z$  –  $z$ -компонента вектору намагніченості,  $z$  – вісь квантування,  $T_s$  описує спінову релаксацію:

$$T_s = q \left[ \frac{n_{\uparrow} - \bar{n}_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} - \frac{n_{\downarrow} - \bar{n}_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \right],$$

$\bar{n}_{\uparrow}$ ,  $\bar{n}_{\downarrow} \Rightarrow n_{\sigma}$  – концентрації носіїв зі спіном  $\sigma$ ,  $\tau_{\sigma\sigma'}$  – ймовірність перевертання спіну зі стану  $\sigma$  в стан  $\sigma'$ . Відмітимо, що згідно із принципом детальної рівноваги

$$\frac{D_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{D_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}},$$

де  $D_{\sigma}$  – густина електронних станів для носіїв зі спіновим станом  $\sigma$ . Тобто в рівновазі число переходів в одиницю часу зі стану носіїв зі спіном  $\uparrow$  у стан зі спіном  $\downarrow$  дорівнює числу відповідних переходів зі стану  $\downarrow$  у стан  $\uparrow$ . Зауважимо, що у феромагнетиках  $D_{\uparrow} \neq D_{\downarrow}$  і, як наслідок  $\tau_{\uparrow\downarrow} \neq \tau_{\downarrow\uparrow}$ .

В стаціонарному стані  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$  та  $\frac{\partial M_z}{\partial t} = 0$ . Підставляючи вирази для густини току заряду та спіну через електрохімічні потенціали в рівняння неперервності, отримуємо рівняння

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}) = 0, \quad (29)$$

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}) + \frac{q}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (n_{\uparrow} - \bar{n}_{\downarrow}) - \frac{q}{\tau_{\downarrow\uparrow}} (n_{\downarrow} - \bar{n}_{\uparrow}) = 0. \quad (31)$$

Щоб звести цю систему до рівнянь для визначення хімічних потенціалів  $\mu_{\sigma}$ , врахуємо співвідношення Ейнштейна  $\sigma_{\sigma} = q^2 \mathcal{D}_{\sigma} D_{\sigma}(E_F)$  для носіїв зі спінами  $\uparrow, \downarrow$ , де  $\mathcal{D}_{\sigma}$  – відповідні коефіцієнти дифузії, рівність

$$\frac{D_{\uparrow}(E_F)}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{D_{\downarrow}(E_F)}{\tau_{\downarrow\uparrow}},$$

і використаємо співвідношення

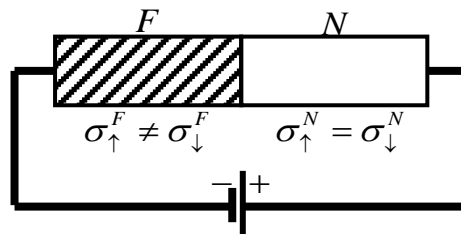
$$n_{\sigma} - \bar{n}_{\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{e^{\beta(E-\mu_{\sigma})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(E-\bar{\mu}_{\sigma})} + 1} \right] D_{\sigma}(E) dE \approx [\mu_{\sigma} - \bar{\mu}_{\sigma}] D_{\sigma}(E_F),$$

беручи до уваги, що у стані рівноваги  $\bar{\mu}_{\uparrow} = \bar{\mu}_{\downarrow}$ . Скориставшись цими рівностями та співвідношеннями, після простих перетворень у випадку квазіодновимірних провідників приходимо до системи *Валета-Ферта*

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dx^2} (\sigma_{\uparrow} \mu_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow} \mu_{\downarrow}) = 0 \\ \frac{d^2}{dx^2} [\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}] = \frac{1}{\lambda^2} [\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}] \end{cases}, \quad (32)$$

де  $\lambda$  – так звана довжина спінової дифузії,

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{D_{\uparrow} \tau_{\uparrow\downarrow}} + \frac{1}{D_{\downarrow} \tau_{\downarrow\uparrow}} \right].$$



Загальний розв'язок першого рівняння системи (32), очевидно, має вигляд

$$\sigma_{\uparrow}\mu_{\uparrow}(x) + \sigma_{\downarrow}\mu_{\downarrow}(x) = A + Bx,$$

а другого –

$$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} = Ce^{\frac{x}{\lambda}} + De^{-\frac{x}{\lambda}}.$$

Тому загальний розв'язок системи рівнянь (32) має вигляд

$$\mu_{\uparrow}^F(x) = A_F + B_F x + \frac{C_F}{\sigma_{\uparrow}^F} e^{\frac{x}{\lambda_F}} + \frac{D_F}{\sigma_{\uparrow}^F} e^{-\frac{x}{\lambda_F}};$$

$$\mu_{\downarrow}^F(x) = A_F + B_F x - \frac{C_F}{\sigma_{\downarrow}^F} e^{\frac{x}{\lambda_F}} - \frac{D_F}{\sigma_{\downarrow}^F} e^{-\frac{x}{\lambda_F}};$$

$$\mu_{\uparrow}^N(x) = A_N + B_N x + \frac{C_N}{\sigma_{\uparrow}^N} e^{\frac{x}{\lambda_N}} + \frac{D_N}{\sigma_{\uparrow}^N} e^{-\frac{x}{\lambda_N}};$$

$$\mu_{\downarrow}^N(x) = A_N + B_N x - \frac{C_N}{\sigma_{\downarrow}^N} e^{\frac{x}{\lambda_N}} - \frac{D_N}{\sigma_{\downarrow}^N} e^{-\frac{x}{\lambda_N}},$$

де  $\mu_{\sigma}^{F(N)}$ ,  $\lambda_{F(N)}$  і  $\sigma_{\sigma}^{F(N)}$  – електрохімічний потенціал, дифузійна довжина та провідність  $F$ -шару ( $N$ -шару).

Відповідно, густина струму дорівнює

$$j_{\sigma}^{F(N)} = \frac{\sigma_{\sigma}^{F(N)}}{q} \frac{\partial}{\partial x} \mu_{\sigma}^{F(N)}.$$

У ферромагнітному шарі провідність є залежною від орієнтації спіну носіїв:

$$\sigma^F = \sigma_{\uparrow}^F + \sigma_{\downarrow}^F, \text{ у немагнітному аналогічна залежність відсутня: } \sigma_{\uparrow}^N = \sigma_{\downarrow}^N = \frac{1}{2}\sigma_N.$$

Коефіцієнти  $A_F, B_F, C_F, D_F$  та  $A_N, B_N, C_N, D_N$  визначаються з граничних умов.

Не зменшуючи загальності можна вважати, що

$$\begin{aligned} \mu_{\uparrow}^F(x) - \mu_{\downarrow}^F(x) &\rightarrow 0 \\ &x \rightarrow -\infty \\ \mu_{\uparrow}^N(x) - \mu_{\downarrow}^N(x) &\rightarrow 0 \\ &x \rightarrow \infty \end{aligned}.$$

В силу цих умов

$$D_F = 0 \text{ и } C_N = 0.$$

Густина зарядового струму, що протікає крізь систему, є сталою:

$$j_{\uparrow}^N + j_{\downarrow}^N = j_{\uparrow}^F + j_{\downarrow}^F = j_{ch},$$

що дає

$$B_F = \frac{q j_{ch}}{\sigma_{\uparrow}^F + \sigma_{\downarrow}^F} = \frac{q j_{ch}}{\sigma^F}, \quad B_N = \frac{q j_{ch}}{\sigma^N}.$$

На  $F/N$ -інтерфейсі граничні умови, що виражають неперервність електрохімічних потенціалів та збереження струмів, мають вигляд

$$\begin{aligned} \mu_{\sigma}^F(x=0) &= \mu_{\sigma}^N(x=0) \\ j_{\sigma}^F(x=0) &= j_{\sigma}^N(x=0) \end{aligned}.$$

Покладаючи  $A = 0$  та використовуючи ці граничні умови, отримуємо, що

$$\begin{aligned}\mu_{\uparrow}^F(x) &= \frac{q j_{ch}}{\sigma^F} x - \frac{q j_{ch}}{2\sigma_{\uparrow}^F} \frac{p(1-p^2)\sigma_F\lambda_N}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}} e^{\frac{x}{\lambda_F}}; \\ \mu_{\downarrow}^F(x) &= \frac{q j_{ch}}{\sigma^F} x + \frac{q j_{ch}}{2\sigma_{\downarrow}^F} \frac{p(1-p^2)\sigma_F\lambda_N}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}} e^{\frac{x}{\lambda_F}}; \\ \mu_{\uparrow}^N(x) &= \frac{q j_{ch}}{\sigma^N} \left[ x + \frac{p\lambda_N}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}} \left( p - e^{-\frac{x}{\lambda_N}} \right) \right]; \\ \mu_{\downarrow}^N(x) &= \frac{q j_{ch}}{\sigma^N} \left[ x + \frac{p\lambda_N}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}} \left( p + e^{-\frac{x}{\lambda_N}} \right) \right],\end{aligned}$$

де  $p = \frac{\sigma_{\uparrow}^F - \sigma_{\downarrow}^F}{\sigma_{\uparrow}^F + \sigma_{\downarrow}^F}$  – спінова поляризація  $F$ -шару.

Згідно з отриманими виразами у  $N$ -шарі спіновий струм

$$j_s = \frac{\sigma_N}{2q} \frac{d}{dx} [\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}] = \frac{p}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}} j_{ch} e^{\frac{x}{\lambda_N}}$$

тече від інтерфейсу вглиб  $N$ -шару. Довжина розпаду  $j_c$  характеризується довжиною спінової дифузії. В  $F$ -шарі спін-поляризований струм подавляється на відстанях  $\sim\lambda_F$  від інтерфейсу через зворотній потік спін-поляризованих електронів, викликаний накопиченням спінів на інтерфейсі.

Спінова поляризація струму на інтерфейсі

$$\alpha = \frac{j_{\uparrow}^N - j_{\downarrow}^N}{j_{\uparrow}^N + j_{\downarrow}^N} = \frac{j_{\uparrow}^F - j_{\downarrow}^F}{j_{\uparrow}^F + j_{\downarrow}^F} = \frac{p}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}}.$$

Хоча  $\mu_{\uparrow}$  та  $\mu_{\downarrow}$  неперервні на інтерфейсі, їх похідні при цьому можуть мати розрив. Стрибок напруги  $\Delta\mu$  на інтерфейсі створює зумовлений спінами опір

$$R_S = \frac{\Delta\mu}{q j_{ch}};$$

$$R_S = \frac{p^2\lambda_N\sigma_N^{-1}}{1+(1-p^2)\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}}.$$

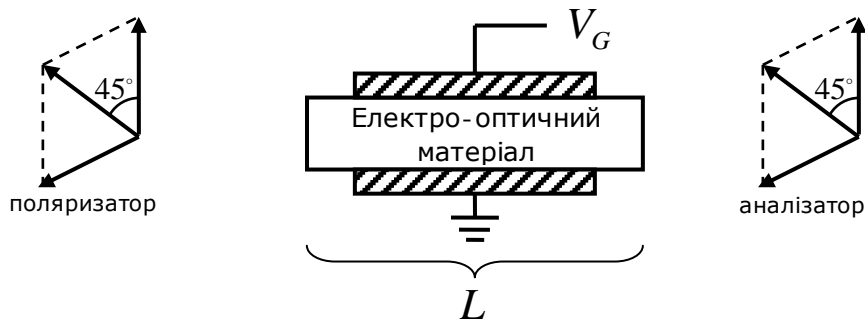
Наведені вирази показують, що спінова поляризація та пов'язаний зі спінами опір на інтерфейсі  $R_S$  включають однаковий фактор  $\frac{\sigma_F\lambda_N}{\sigma_N\lambda_F}$ . У багатьох випадках

дифузійна довжина в  $F$ -шарі є значно меншою, ніж у  $N$ -шарі:  $\lambda_F \ll \lambda_N$ , що є обмежувачим фактором для отримання більшої спінової поляризації. Проблема погіршується, коли для інжектування у напівпровідник спіново-поляризованого струму використовується феромагнітний метал. В цьому випадкові умова  $\sigma_N \ll \sigma_F$  катастрофічно зменшує поляризацію. Один з можливих шляхів подолання нестиковки провідності полягає у використанні феромагнітних напівпровідників у якості джерел спінових носіїв.



## Електро-спіновий модулятор

Розглянемо запропонований спіновий аналог квантового польового інтерференційного транзистору, в якому спіновий струм керується зовнішнім електричним полем (S. Datta, B. Das (1989)). Дія цього пристрою подібна до електро-оптичного модулятора світла, в основі якого лежить так званий ефект Поккельса. Цей ефект спостерігається лише в кристалах, що не мають центру симетрії, наприклад у арсеніді галію або ніобаті літію. Таким кристалом притаманна зміна показників заломлення в зовнішньому постійному електричному полі, що лінійно залежить від напруженості поля, на відмінну від ефекту Керра, для якого така залежність є квадратичною. В електро-оптичному модуляторі



світловий потік, що поширюється уздовж вісі « $x$ », є лінійно поляризованим під кутом  $45^\circ$  до вісі « $z$ » (у площині  $y$ - $z$ ). Відповідну монохроматичну світлову хвилю можна представити в вигляді лінійної комбінації  $z$ - та  $y$ -поляризованих хвиль

$$E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(kx - \omega t)} = \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] E_0 e^{i(kx - \omega t)} \equiv [\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z] E_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad (33)$$

де  $\mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  – орти осей  $y$  та  $z$ .

Припустимо, що електро-оптичний матеріал є одноосним кристалом, оптична вісь якого також співпадає з віссю  $x$ . При включенні керуючого постійного електричного поля  $[\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z] E_c$  внаслідок ефекту Поккельса кристал стає двоосним, і при проходженні вздовж нього  $z$ - та  $y$ - поляризоване світло буде мати різні показники заломлення,  $n + \Delta n$  та  $n - \Delta n$ , відповідно, де  $\Delta n = \alpha \cdot E_c$ ,  $\alpha$  – стала, що залежить від властивостей кристалу. Тому  $z$ - та  $y$ - компоненти у комбінації (33) зазнають різних фазових зсувів,  $k(n + \Delta n) \cdot L$  та  $k(n - \Delta n) \cdot L$ , відповідно, де  $L$  довжина електро-оптичного кристалу. Тому, для електричного вектора світлової хвилі, що виходить з пластинки, маємо

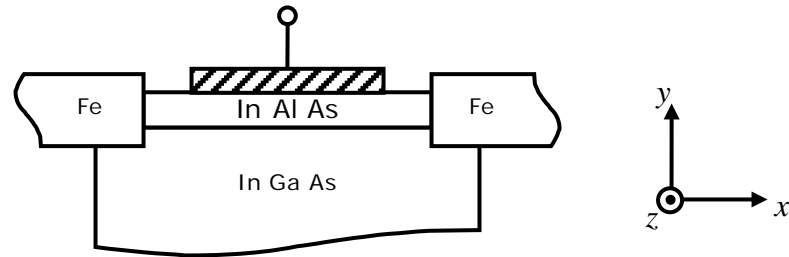
$$\mathbf{E}(x, t) = \begin{pmatrix} e^{ik\Delta n L} \\ e^{-ik\Delta n L} \end{pmatrix} E_0 e^{iknL} e^{i[k(x-L) - \omega t]}.$$

Аналізатор на виході пропускає лише компоненту хвилі уздовж  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Тому інтенсивність хвилі, що проходить крізь аналізатор, визначається виразом

$$I_\varepsilon = \frac{1}{2} c \left| (1; 1) \begin{pmatrix} e^{ik_z L} \\ e^{ik_y L} \end{pmatrix} \right|^2 |E_0|^2 = 2 |E_0|^2 \cos^2 \theta, \quad \theta = \alpha E_c k \cdot L.$$

Таким чином, інтенсивність світла, що проходить крізь пристрій, модулюється зовнішнім полем  $E_c$ , яке керує фазовим зсувом  $\theta \sim E_c$ .

Аналогічний пристрій для електронних хвиль має вигляд



Роль поляризатора та аналізатора в даному випадку відіграють залізні контакти. На рівні Фермі в намагнічених контактах у напрямі вісі  $x$  (каналу) густина станів  $D_\uparrow(E_F)$  є більшою, ніж  $D_\downarrow(E_F)$ , тому струм, що витікає, є спін-поляризованим. Опір правого контакту в приконтактній області для " $\rightarrow$ "-носіїв є меншим, ніж для " $\leftarrow$ "-носіїв. Спінний стан електронів, поляризованих " $\rightarrow$ " у додатному напрямку вісі  $x$  може бути зображеним у вигляді

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (34)$$

( $x$ -pol.)
( $z$ -pol.)
( $-z$ -pol.)

Теоретично й експериментально було встановлено, що у 2-вимірному електронному газі вузькозонних напівпровідників існує розщеплення по енергіях між носіями з « $\uparrow$ »-спінами та « $\downarrow$ »-спінами навіть за відсутності зовнішнього магнітного поля. Основним механізмом, що призводить до такого розщеплення є так звана спін-орбітальна взаємодія – суто релятивістський ефект, що виникає при русі зарядженої квантової частинки зі спіном і характерною швидкістю  $v$  в електричному полі з потенціалом  $V(\mathbf{r})$ . В гамільтоніані такої частинки при урахуванні релятивістських поправок порядку  $\frac{v^2}{c^2}$  з'являється, зокрема, доданок

$$\frac{\hbar q}{2m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} [\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}]),$$

де  $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$  – оператор спінового моменту частинки,  $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \mathbf{e}_x + \sigma_y \mathbf{e}_y + \sigma_z \mathbf{e}_z$ ,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

– матриці Паулі. Цей доданок зветься оператором спін-орбітальної взаємодії. У випадку, коли спін-орбітальна взаємодія виникає внаслідок прикладеного перпендикулярно до гетероструктури електричного поля (на рисунку – вздовж осі  $y$ ), відповідний оператор, так звана добавка Рашби, зводиться до виразу

$$H_R = \eta(\sigma_z k_x - \sigma_x k_z),$$

де  $\eta$  – коефіцієнт, пропорційний напруженості керуючого електричного поля.

Легко перевірити, що для « $\uparrow$ » та « $\downarrow$ »-спінів за однакових енергій хвильові числа виявляються відмінними. Наприклад, для хвиль, що розповсюджуються уздовж вісі  $x$ ,

$$H_R = \eta \sigma_x k_x.$$

В цьому випадку

$$E_{\uparrow} = \frac{\hbar^2 k_{x,1}^2}{2m^*} - \eta k_{x,1} \quad \text{и} \quad E_{\downarrow} = \frac{\hbar^2 k_{x,2}^2}{2m^*} + \eta k_{x,2}$$

і рівність  $E_{\uparrow} = E_{\downarrow}$  дає

$$k_{x,1} - k_{x,2} = \frac{2m^* \eta}{\hbar^2}.$$

Тому фазовий зсув в даному випадкові визначається сталою спін-орбітальної взаємодії та не залежить від енергії

$$\Delta\theta = (k_{x,1} - k_{x,2})L = \frac{2m^* \eta}{\hbar^2} L,$$

де  $L$  – довжина ділянки гейту, перпендикулярно до якої спрямовано електричне поле. Для  $InGaAs/InAlAs$  зсув  $\Delta\theta \sim \pi$  досягається при  $L$  помітно менших довжини вільного пробігу  $\geq 1$  мкм. При переході через вказану гетероструктуру в електричному полі електрони, що виходять з лівого електроду в спіновому стані " $\rightarrow$ ", внаслідок спін-орбітальної взаємодії перейдуть в правий електрод в стані

$$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{1}{2}i\Delta\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{2}i\Delta\theta} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{\Delta\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \frac{\Delta\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Якщо електроди утворюють спіновий клапан, який майже не пропускає електрони в спіновому стані " $\leftarrow$ ", тоді спіновий струм буде змінюватися в залежності від  $\Delta\theta$  за законом  $I_{\max} \cos^2 \frac{\Delta\theta}{2}$ , де  $I_{\max}$  – максимальне значення струму через розглянуту гетероструктуру.

## Література

1. *Suprio Datta*. Lesson from Nanoelectronics. A New Perspective on Transport, Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series, Vol. 1, Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series, Vol. 2, World Scientific Publishing, 2013, 2012, 492 pp.
2. *Marc Baldo*. Introduction to Nanoelectronics. MIT OpenCourseWare Publications, May 2011.
3. *Mark Lundstrom, Changwook Jeong*. Near Equilibrium transport. Fundamentals and Applications, Lessons from Nanoscience: A Lecture Notes Series, Vol. 2, World Scientific Publishing, 2013, 252 pp.
4. Spin Current. Editors: Sadamichi Makawa, Sergio O. Valenzuela, Eiji Saito and Takashi Kimura, Oxford Science Publications, Series on Semiconductor Science and Technology, 17, 2012, pp. 442
5. *Ю.А. Кругляк*. Нанoeлектроника «снизу-вверх», Одесса: ТЭС, 2015 – 536 стр.; ISBN 978-617-7337-15-6

A resource for nanoscience and nanotechnology: <http://nanohub.org>