

## БАЛЛИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НАД ПОТЕНЦИАЛЬНЫМ БАРЬЕРОМ

Ордин С.В.

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия  
stas\_ordin@mail.ru

### 1. Линейная фенология

Макроскопические процессы описываются в рамках линейной фенологии, связывающей термодинамические потоки  $Q_i$  с обобщёнными термодинамическими силами  $F_j$  -градиентами потенциалов  $\Delta\varphi_j$  [1]. Для электрического  $E$ , температурного  $T$  и концентрационного  $N$  поля в канонической форме обобщённые силы имеют следующий вид:

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

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

коэффициентам трения электронных, фоновых, концентрационных солитонов. Макроскопические термоэлектрические процессы описываются с помощью двух коэффициентов: Зеебека и Пельтье:  $\alpha$  и  $\pi$ , которые, как показал Онзагер – симметрично вырождены.

В рамках квантово-механических представлений разработаны модели, которые позволили рассчитать макроскопические кинетические коэффициенты [2]. На масштабах меньше длины свободного пробега эти модели, естественно, в принципе, и теоретически не работают, и не описывают результаты экспериментов [3]. В данной работе были проведены расчёты, учитывающие баллистические эффекты за рамками

приближения времени релаксации, и получена общая связь потоков и потенциалов для прямых эффектов.

### 2. Электропроводность

Для расчёта электропроводности электронов над симметричным прямоугольным потенциальным барьером, длина которого меньше длины свободного пробега электрона, используем закон дисперсии свободных электронов. Используемая прямоугольная форма барьера в дальнейшем, конечно, потребует уточнения, т.к. уже на микро-масштабе необходимо учитывать, что реальные барьеры, как показали расчёты на базе потенциалов атомов, далеки от идеальных. Но прямоугольный барьер был использован во многих ранее проведённых расчётах и, поэтому, качественные отличия баллистического тока от диффузного он позволяет наглядно продемонстрировать. При приложении к барьеру тянущего электроны электрического поля справа, его правый край и дно электронной зоны опускаются на величину, равную разнице потенциалов на барьере (рис. 1а).

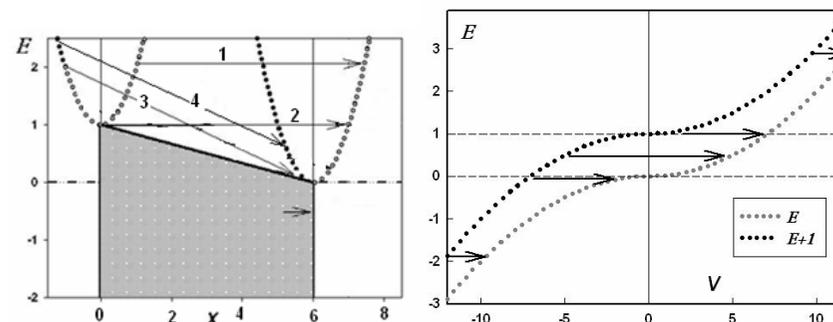


Рис.1. Электронные переходы над барьером под действием электрического поля при рассмотрении в рамках: а - стандартного подхода, б – в рамках модифицированного, учитывающего полярность, закона дисперсии подхода.

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

трёхмерном случаях  $Q_R^{3D}$  поток Ричардсона без учёта высоты барьера  $\varphi$  равен

$$Q_R^{1D} = \int_0^{\infty} e^{-\frac{V_x^2}{b}} V_x dV_x = \frac{b}{2}, \text{ где } b = \frac{2kT}{m}, \text{ а } Q_R^{3D} / Q_R^{1D} = b\pi,$$

а с учётом высоты барьера  $\varphi$  в оба выражения потока Ричардсона входит множитель  $e^{-\frac{\varphi}{kT}}$ . Полученный ричардсоновский ток насыщения  $J_R = e \cdot Q_R$ , естественно, не зависит от приложенного электрического поля  $E$ . Для получения зависимости тока от поля берут разницу токов насыщения Ричардсона с двух обкладок барьера с учётом высоты потенциального барьера. Таким образом, получают линейную зависимость тока при напряжениях  $eU \leq k_B T$ , что соответствует независимой от приложенного напряжения электропроводности:

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

При изначальном учёте в рассмотрении электрического поля нет никаких разумных оснований их не учитывать. Более того, как будет показано ниже, для получения выражений для тока над барьером, работающих как при малых перепадах потенциала на нано- и микро-барьерах, так и при больших, это необходимо.

Воспользуемся методом, аналогичным расчёту поглощения при оптических переходах, но учтём полярность (относительно внешнего электрического поля) кинетической энергии электронов

$$\varepsilon_C^* = \text{Sign}[V_x] \cdot \frac{mV_x^2}{2}. \text{ Тогда законы дисперсии электронов на границах}$$

барьеров трансформируются, как показано на рис.1б, а электронные переходы как для положительных скоростей, так и для отрицательных скоростей отображаются горизонтальными линиями. При этом, как показано на рисунке, из модифицированного закона сохранения энергии:

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

следует, что изменение (приращение) скорости электронов сильно зависит от их начальной скорости  $V_0$ . Их конечную скорость над барьером  $V_x$

получим, решив уравнение для модифицированного закона сохранения энергии:

$$V_x = \text{Sign}[\text{Sign}[V_0]V_0^2 + A] \sqrt{\text{Abs}[\text{Sign}[V_0]V_0^2 + A]}, \text{ где } A = b \cdot eU^*.$$

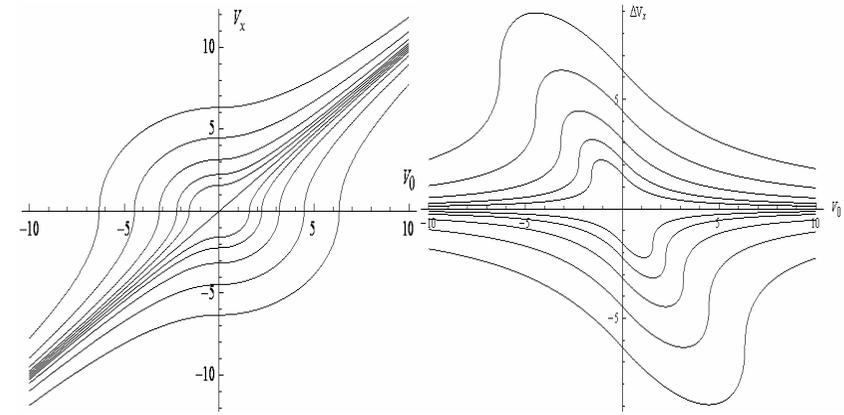


Рис.2. Зависимости конечной скорости электронов  $V_x$  (а) и её приращения  $\Delta V_x$  (б) от их начальной тепловой скорости  $V_0$ . Разность потенциалов меняется в 2 раза.

Так как при нулевой разнице потенциалов интеграл по всем начальным скоростям (на рис.2а – прямая линия) равен нулю, то общее выражение для суммарного тока электронов можно получить, проинтегрировав приращения скорости (рис.2б). С учетом больмановского распределения электронов по энергиям для одномерного случая получим, что поток насыщения ричардсона умножается на  $K^{1D}(eU^*)$  (рис.3).

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

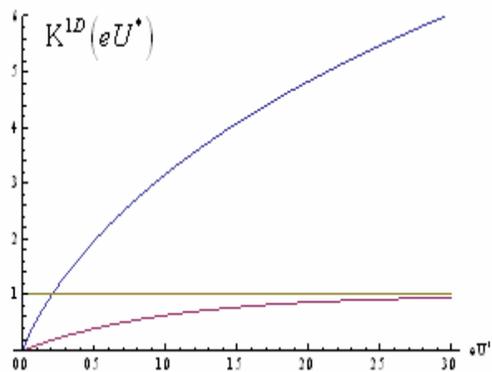


Рис.3. Зависимости разностного ричардсоновского потока (нижняя кривая) и полного потока (верхняя кривая) в приведённых к потоку Ричардсона единицах от приведённой разности потенциалов на барьере.

Как видно из рисунка 3, этот поток существенно нелинейный при малых напряжениях и превышает ричардсоновский.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Zubarev D.N., Nonequilibrium statistical thermodynamics, publishing house "Science", Main edition of the physical and mathematical literature, 1971, 415 p.
2. J.M. Ziman, Principles of the theory of solids, Cambridge, University Press, 1972, 278 pp.
3. S.V. Ordin, W.N. Wang, "Thermoelectric Effects on Micro and Nano Level.", J. Advances in Energy Research, Volume 9, 2011, 30 pp.