

Выделение джоулева тепла при прохождении тока в наноструктурах (Обзор)

© В.Л. Гуревич, М.И. Мурадов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: mag.muradov@mail.ioffe.ru

(Поступил в Редакцию 11 августа 2011 г.)

Обсуждается генерация джоулева тепла при бесстолкновительном прохождении постоянного и переменного тока в полупроводниковых квантовых проволоках, соединяющих два классических резервуара. Поперечный размер квантовой проволоки порядка длины волны де Бройля электронов проводимости.

Рассмотрено пространственное распределение тепла. Тепло выделяется в резервуарах на расстоянии порядка длины свободного пробега электронов. Полное джоулево тепловыделение в резервуарах оказывается одинаковым.

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований за поддержку работы (грант № 95-02-04109-а).

Содержание

1. Введение
2. Кинетическое уравнение для электронов в полупроводниках: трехмерный случай
3. Сохранение энергии
4. Производство энтропии
5. Диссипация механической энергии
6. Роль столкновений при производстве энтропии
 - 6.1. Столкновения электронов с примесями
 - 6.2. Электрон-электронные столкновения
 - 6.3. Электрон-фононные столкновения
 - 6.4. Фонон-фононные столкновения
 - 6.5. Столкновения фононов с дефектами решетки
7. Закон Ома
8. Примеры вычисления производства тепла
 - 8.1. Остаточное сопротивление
 - 8.2. Электрон-фононное рассеяние
 - 8.3. Взаимное электрон-фононное увлечение
9. Явления переноса в квантовой наноструктуре
10. Производство энтропии в наноструктуре
11. Генерация джоулева тепла током в наноструктуре: бесстолкновительный случай
12. Учет столкновений с фононами в нанопроволоке
13. Электрон-дырочная симметрия вырожденных проводников
14. Случай резкого контакта между нанопроволокой и резервуарами
15. Высокочастотная проводимость
16. Заключение

1. Введение

В течение последних десятилетий исследовались теоретически и экспериментально различные явления в квантовых проволоках, т. е. проводниках, у которых

поперечные размеры порядка длины волны де Бройля электронов проводимости. Сюда относятся ступенчатое изменение контактанса, дробовой шум, термоэлектрические свойства, кулоновское увлечение и целый ряд других кинетических явлений. Полное джоулево тепловыделение при прохождении тока через квантовую проволоку определяется из простых энергетических соображений, коль скоро известен контактанс G проводника. Такие соображения, однако, ничего не говорят о пространственном распределении джоулева тепла. Между тем знать соответствующие закономерности необходимо при конструировании устройств, использующих наноструктуры, равно как и больших интегральных схем, с тем, чтобы уменьшить их перегрев. Обычно именно большое тепловыделение и его нелокальность затрудняют работу подобных устройств.

Расчет джоулева тепловыделения — альтернативный способ определения проводимости квантовой проволоки. В настоящем обзоре рассмотрено тепловыделение при баллистическом прохождении тока в квантовых проволоках [1]. Следует подчеркнуть, что речь пойдет именно о необратимом выделении тепла. Кроме него может иметь место также и эффект Пельтье, т. е. выделение тепла на контактах двух проводников при прохождении тока, пропорциональное этому току. Оно положительно вблизи одного из контактов и отрицательно вблизи другого, знак эффекта меняется при изменении направления постоянного тока на противоположное. Этот эффект мы не будем рассматривать.

Сопротивление классического баллистического точечного контакта между двумя металлами рассмотрено в пионерской работе Шарвина [2]. Характерные размеры контакта считались гораздо большими, чем длина волны де Бройля электронов. Кулик, Омелянчук и Шехтер [3] указали, что процессы, приводящие к сопротивлению контакта, и генерация тепла пространственно разделены.

Генерация джоулева тепла при прохождении тока через полупроводниковый точечный контакт в диффузионном режиме обсуждалась Рокни и Левинсоном [4].

Мы сначала обсудим выделение джоулева тепла для статической проводимости квантовых проволок (см. работы Ландауэра, Бюттикера и Имри [5–7]), затем рассмотрим высокочастотную проводимость. Считаем, что нанопроволока имеет поперечный размер порядка длины волны де Бройля электронов λ . Образуя наноструктуру, она соединяет два резервуара — контакты, каждый из которых находится в равновесии. Поданные на них потенциалы различаются, так что между ними протекает ток. Чтобы измерить кондактанс квантовой проволоки, резервуары должны удовлетворять условиям, позволяющим рассматривать их классически.

Подчеркнем, что мы не делаем предположений относительно распределения потенциала вдоль наноструктуры, считая только, что оно является гладким в масштабе электронной волны де Бройля. Существует разница в постановке задач о распределении потенциала в металлических микроконтактах и полупроводниковых нанопроволоках (см. [8–10]). Пространственное распределение электростатического потенциала в металле задается пространственным распределением тока и условием сильного экранирования зарядов. В полупроводниковых наноструктурах концентрация электронов сравнительно невелика и экранирование не столь существенно. Пространственное распределение потенциала в значительной мере задается расположением затворов и потенциалом на них. Обычно ток между наноструктурой и электродами-затворами пренебрежимо мал, и потенциал вдоль поверхности каждого такого электрода постоянен. Он обычно и задает постоянный поперечный размер нанопроволоки a вдоль ее длины L .

Контакты (резервуары), как уже отмечалось, считаются классическими. Оказывается, что тепло генерируется не в квантовой проволоке, а в резервуарах. Вот почему нам потребуется выражение для производства энтропии не только в проволоке, но и в классических проводниках, мы будем им пользоваться на протяжении всего обзора. Такие формулы приведены для разных случаев в разделе 6. Хотя некоторые из них хорошо известны, мы запишем их в таком виде, которым будет удобно пользоваться в следующих разделах.

Мы сумеем разрешить следующий кажущийся парадокс. С одной стороны, скорость генерации джоулева тепла определяется скоростью релаксации рассматриваемой системы. С другой стороны, часто в наноструктурах имеет место так называемый бесстолкновительный перенос, при котором кондактанс G , будучи конечным, не зависит от скорости релаксационных процессов. Иными словами, это означает, что сопротивление, а значит, и полное генерируемое тепло не зависят от скорости релаксации. Мы покажем, как можно примирить эти два обстоятельства.

Будем рассматривать изолированные системы. Конкретно для проводимости на постоянном токе пред-

полагается следующая ситуация. Имеется конденсатор, разряжающийся через интересующий нас проводник. Пусть произведение RC такой системы (где R — сопротивление, а C — емкость) гораздо больше времени эксперимента, которое в свою очередь гораздо больше времен релаксации электронной и фононной систем. Это означает, что проводимость может считаться стационарной. Полная энергия такой системы U сохраняется, а ее полная энтропия S возрастает; через нее и выражается скорость генерации тепла. Наша задача по существу и заключается в вычислении S для различных случаев, которые могут встретиться.

2. Кинетическое уравнение для электронов в полупроводниках: трехмерный случай

Хотя наша цель и состоит в рассмотрении наноструктур, для вычисления производства энтропии нам понадобится кинетическое уравнение для объемного материала, так как практически вся механическая энергия будет диссипировать в резервуарах. В последующих разделах кратко обсудим свойства этого уравнения и приведем его к форме, которая нам понадобится в других частях обзора. Кинетическое уравнение для электронной функции распределения $F_p(\mathbf{r}, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{p}} = \left[\frac{\partial F_p}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\epsilon}_p(\mathbf{r}) = \epsilon_p + e\phi(\mathbf{r})$ — полная энергия электрона, $\phi(\mathbf{r})$ — электростатический потенциал. Правая часть этого уравнения описывает столкновения электронов с примесями (упругие столкновения) и фононами (неупругие столкновения). Последние выражаются через фононную функцию распределения N_q , которая в свою очередь удовлетворяет кинетическому уравнению для фононов

$$\frac{\partial N_q}{\partial t} + \frac{\partial \Omega_q}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial N_q}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \Omega_q}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial N_q}{\partial \mathbf{q}} = \left[\frac{\partial N_q}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (2)$$

Здесь Ω_q — частота фонона (которая в общем случае, например при наличии неоднородной деформации, может слабо зависеть и от пространственных координат). Правая часть уравнения описывает столкновения фононов с примесями (упругие столкновения) и с электронами, а также фонон-фононные столкновения из-за ангармонизма колебаний решетки. Можно включить в $[\partial F_p / \partial t]_{\text{coll}}$ в уравнении (1) также и член, учитывающий электрон-электронные столкновения.

3. Сохранение энергии

Перейдем теперь к обсуждению закона сохранения энергии. Мы используем метод, который нетрудно обобщить применительно к кинетическому уравнению, описывающему явления переноса в наноструктурах

(см. уравнение (55)). Умножим уравнение (1) на $\epsilon_p(\mathbf{r})$, проинтегрируем по $d\xi_p$, где $d\xi_p = d^3p/(2\pi\hbar)^3$ (здесь подразумевается также явно не обозначенное суммирование по спиновым переменным; мы предполагаем, что электронная энергия не зависит от спина), и сложим с уравнением (2), предварительно преобразованным таким же образом, как и (1). Далее воспользуемся следующим свойством интеграла столкновений в кинетическом уравнении

$$\int d\xi_p \left[\frac{\partial F_p}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = 0, \quad (3)$$

означающим сохранение числа электронов при столкновениях. Используя закон сохранения заряда, который также следует из кинетического уравнения,

$$e \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (4)$$

где

$$n(\mathbf{r}) = \int d\xi_p F_p(\mathbf{r}), \quad \mathbf{j} = e \int d\xi_p F_p(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} \quad (5)$$

— концентрация электронов и плотность тока соответственно, можно привести закон сохранения энергии к форме

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div } \mathbf{Q} = \mathbf{j} \mathbf{E}, \quad (6)$$

где $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ — электрическое поле. Здесь мы воспользовались тем, что с учетом электрон-фононных столкновений полная энергия электронной и фононной систем сохраняется. В результате имеем уравнение (6), где плотность энергии и поток энергии даются выражениями

$$U = \int d\xi_p \epsilon_p F_p + \int d\eta_q \hbar \Omega_q N_q, \quad (7)$$

$$\mathbf{Q} = \int d\xi_p \epsilon_p F_p \frac{\partial \epsilon_p}{\partial \mathbf{p}} + \int d\eta_q \hbar \Omega_q N_q \frac{\partial \Omega_q}{\partial \mathbf{q}}. \quad (8)$$

Здесь обозначение $d\eta_q = d^3q/(2\pi)^3$ подразумевает также суммирование по фононным ветвям.

При выводе (6) мы воспользовались следующим преобразованием:

$$\begin{aligned} & \int d\xi_p \tilde{\epsilon}_p \left[\frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{p}} \right] \\ &= \int d\xi_p \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\tilde{\epsilon}_p F_p \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{p}} \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\tilde{\epsilon}_p F_p \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \right) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Первый член в правой части преобразуется в поверхностный интеграл, равный нулю, если поток энергии через поверхность отсутствует. Второй член в правой части можно преобразовать в интеграл по поверхности первой зоны Бриллюэна. Поскольку интегрируемое выражение имеет на противоположных гранях зоны одинаковые по абсолютной величине, но противоположные по знаку значения, весь интеграл оказывается равным нулю. Точно такое же преобразование было проведено в отношении фононов.

4. Производство энтропии

Выражение для генерации энтропии, которое мы получим в этом разделе, использовано далее для выяснения вопроса о пространственном распределении диссипации механической энергии. Это выражение применимо как к объемным материалам, так и к наноструктурам (как уже упоминалось), поскольку хотя ток и протекает в узкой нанопроволоке, диссипация энергии и выделение тепла происходят в соединенных с этой проволокой объемных резервуарах.

Полная энтропия неравновесных электронного и фононного газов имеет вид

$$S = \int d^3r S(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Везде будем считать, что постоянная Больцмана $k_B = 1$, т.е. что температура измеряется в единицах энергии. Здесь $S = S^{(e)} + S^{(p)}$,

$$S^{(e)} = \int d\xi_p s_p^{(e)}, \quad s_p^{(e)} = -F_p \ln F_p - (1 - F_p) \ln(1 - F_p), \quad (11)$$

$$S^{(p)} = \int d\eta_q s_q^{(p)}, \quad s_q^{(p)} = -N_q \ln N_q + (1 + N_q) \ln(1 + N_q). \quad (12)$$

Дифференцируя S по времени и подставляя ∂F_p и $\partial N_q/\partial t$ из соответствующих кинетических уравнений для электронов (1) и фононов (2), получим

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \text{div } \mathbf{s} = \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (13)$$

Здесь скорость производства плотности энтропии дается выражением

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \int d\xi_p \left[\frac{\partial F_p}{\partial t} \right]_{\text{coll}} \ln \frac{1 - F_p}{F_p} \\ &+ \int d\eta_q \left[\frac{\partial N_q}{\partial t} \right]_{\text{coll}} \ln \frac{1 + N_q}{N_q}, \quad (14) \end{aligned}$$

в то время как $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{(e)} + \mathbf{s}^{(p)}$ есть поток энтропии. Используя

$$\frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{r}} \ln \frac{1 - F_p}{F_p} = \frac{\partial s_p^{(e)}}{\partial \mathbf{r}}, \quad \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{p}} \ln \frac{1 - F_p}{F_p} = \frac{\partial s_p^{(e)}}{\partial \mathbf{p}}, \quad (15)$$

имеем

$$\mathbf{s}^{(e)} = \int d\xi_p s_p^{(e)} \frac{\partial \epsilon_p}{\partial \mathbf{p}}, \quad \mathbf{s}^{(p)} = \int d\eta_q s_q^{(p)} \frac{\partial \Omega_q}{\partial \mathbf{q}}. \quad (16)$$

При выводе (13) мы воспользовались преобразованием

$$\begin{aligned} & \int d\xi_p \left[\frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial s_p^{(e)}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial s_p^{(e)}}{\partial \mathbf{p}} \right] \\ &= \int d\xi_p \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(s_p^{(e)} \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{p}} \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(s_p^{(e)} \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] \quad (17) \end{aligned}$$

и учли, что интегралы

$$\int d\xi_p \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(s_p^{(e)} \frac{\partial \tilde{\epsilon}_p}{\partial \mathbf{r}} \right) \quad \text{и} \quad \int d\eta_q \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(s_q^{(p)} \frac{\partial \Omega_q}{\partial \mathbf{r}} \right)$$

равны нулю, так как подынтегральные выражения периодичны в пространстве обратной решетки. Предположив, что потока энтропии через границы образца нет, и проинтегрировав (13), получим

$$\frac{dS}{dt} = \int d^3r \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (18)$$

Подынтегральное выражение имеет физический смысл скорости генерации плотности энтропии.

5. Диссипация механической энергии

Изолированная макроскопическая система обладает механической энергией \mathcal{E} (см. [11], § 19, а также [12], § 79). Это значит, что благодаря внутренним процессам система без изменения ее объема может совершать работу над внешними системами. В общем случае это количество работы зависит от того, каким именно образом изменяется внутреннее состояние рассматриваемой системы. Механическая энергия есть максимальная работа, производимая системой при ее переходе из неравновесного состояния в термодинамическое равновесие.

Максимальная работа \mathcal{E} производится, если переход происходит адиабатически, т.е. при постоянной энтропии \mathcal{S} . Она равна

$$\mathcal{E} = \mathcal{U} - \mathcal{U}_0(\mathcal{S}). \quad (19)$$

где \mathcal{U} — первоначальное значение энергии, а $\mathcal{U}_0(\mathcal{S})$ — энергия системы в термодинамическом равновесии, выраженной как функция ее энтропии \mathcal{S} соотношениями равновесной термодинамики. Беря производную по времени, пишем

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{d\mathcal{U}}{dt} - \frac{d\mathcal{U}_0}{d\mathcal{S}} \frac{d\mathcal{S}}{dt} = \frac{d\mathcal{U}}{dt} - T_0 \frac{d\mathcal{S}}{dt}, \quad (20)$$

где $T_0(\mathcal{S})$ — температура равновесной системы с энтропией \mathcal{S} . Производная от первого члена выпадает благодаря закону сохранения энергии для изолированной системы. Используя (18), получим

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = -T_0 \frac{d\mathcal{S}}{dt} = -T_0 \int d^3r \left[\frac{d\mathcal{S}}{dt} \right]_{\text{coll}}. \quad (21)$$

Это означает, что механическая энергия изолированной системы в отличие от ее полной энергии не сохраняется. При релаксационных процессах, приводящих систему в равновесное состояние, механическая энергия диссипирует и превращается в тепло. Уравнение (21) описывает скорость этой диссипации в рассматриваемой неравновесной системе. Скорость генерации тепла $d\mathcal{Q}/dt$ есть, очевидно,

$$\frac{d\mathcal{Q}}{dt} = -\frac{d\mathcal{E}}{dt} = T_0 \int d^3r \left[\frac{d\mathcal{S}}{dt} \right]_{\text{coll}}. \quad (22)$$

6. Роль столкновений при производстве энтропии

Запишем явные выражения для производства энтропии, обусловленного различными типами столкновений между электронами, фононами и примесями (не предполагая отклонение от равновесия малым). Для объемных материалов приведем их без вывода и ограничимся обсуждением только их важных свойств (для малых отклонений от равновесия некоторые из этих выражений можно найти в [13]). Существенно, что мы рассматриваем контакты, связанные нанопроволокой, как объемные. Далее показано (см. раздел 11), что именно в этих (классических) объемных контактах (резервуарах) тепло и выделяется. Для вычислений необходимо иметь выражение для производства энтропии в классических объемных системах, т.е. в системах с размерами, намного превышающими длину волны де Бройля.

6.1. Столкновения электронов с примесями. Для столкновений электронов с примесями

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \frac{n_i}{2} \int d\xi_p \int d\xi_{p'} w(\mathbf{p}', \mathbf{p}) (F_p - F_{p'}) \ln \frac{(1 - F_{p'}) F_p}{(1 - F_p) F_{p'}}. \quad (23)$$

Здесь n_i — концентрация примесей, $w(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ — вероятность электрон-примесного рассеяния из состояния \mathbf{p} в состояние \mathbf{p}' . Вероятность $w(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ пропорциональна $\delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'})$ из-за закона сохранения энергии. Видно, что выражение (23) неотрицательно. Оно обращается в нуль, если F_p — произвольная функция энергии ϵ_p . Физически это означает, что столкновения электронов с примесями приводят к релаксации электронной функции распределения лишь в пределах поверхности постоянной энергии.

Нужно заметить, что выражение (23) получается в результате так называемого конфигурационного усреднения, т.е. усреднения по положениям примесей. Вопрос о том, когда оно допустимо, выходит за рамки настоящего обзора. Он подробно обсужден в работах [14, 15].

6.2. Электрон-электронные столкновения. В этом случае (ср. с [16])

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \frac{1}{4} \int d\xi_p \int d\xi_{p'} \int d\xi_{p_1} \int d\xi_{p'_1} w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}') \\ &\times \left[(1 - F_{p'}) (1 - F_p) F_{p_1} F_{p'_1} - (1 - F_{p_1}) (1 - F_{p'_1}) F_p F_{p'} \right] \\ &\times \ln \frac{(1 - F_{p'}) (1 - F_p) F_{p_1} F_{p'_1}}{(1 - F_{p_1}) (1 - F_{p'_1}) F_p F_{p'}}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь $w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}, \mathbf{p}')$ — вероятность электрон-электронных столкновений, где \mathbf{p}, \mathbf{p}' относятся к начальным, а $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1$ — к конечным состояниям. Она пропорциональна $\delta(\epsilon_p + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{p'_1})$. Столкновения являются достаточно редкими, так что электронная система может

рассматриваться как Ферми-газ при условии

$$\frac{e^2}{\varepsilon \hbar v} \ll 1, \quad (25)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость полупроводника, v — скорость Ферми.

Изменение энтропии (24) обращается в нуль, если $F_{\mathbf{p}}$ — это функция Ферми $F^{(0)}$, зависящая от произвольного химического потенциала и температуры. Если электронный квазиимпульс \mathbf{p} сохраняется при электрон-электронных столкновениях, $[\partial S/\partial t]_{\text{coll}}$ (24) обращается в нуль также в случае, когда функция $F_{\mathbf{p}}$ принимает вид

$$F^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mathbf{p}\mathbf{V}), \quad (26)$$

где \mathbf{V} — произвольный вектор, имеющий физический смысл дрейфовой скорости.

6.3. Электрон-фононные столкновения. Для вычисления производства энтропии нужно рассматривать электрон-фононные и фонон-электронные столкновения совместно. В результате (см. [17])¹

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \int d\varepsilon_{\mathbf{p}} \int d\varepsilon_{\mathbf{p}'} \int d\eta_{\mathbf{q}} w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \\ &\times \ln \frac{(1 - F_{\mathbf{p}})F_{\mathbf{p}'}(N_{\mathbf{q}} + 1)}{(1 - F_{\mathbf{p}'})F_{\mathbf{p}}} \\ &\times [F_{\mathbf{p}'}(1 - F_{\mathbf{p}})(N_{\mathbf{q}} + 1) - F_{\mathbf{p}}(1 - F_{\mathbf{p}'})N_{\mathbf{q}}]. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ — вероятность электрон-фононного столкновения, пропорциональная $\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'} + \hbar\Omega_{\mathbf{q}})$. При излучении фонона второй аргумент в вероятности относится к начальному состоянию электрона; $N_{\mathbf{q}}$ — функция распределения фононов. Квазиимпульсы электрона и фонона связаны законом сохранения

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{b}, \quad (28)$$

где \mathbf{b} — вектор обратной решетки. Для нормальных процессов $\mathbf{b} = 0$, и мы имеем

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \hbar\mathbf{q} = 0. \quad (29)$$

В общем случае процессов переброса справедливо соотношение (28) с $\mathbf{b} \neq 0$.

Выражение (27) неотрицательно. Оно обращается в нуль, если $F_{\mathbf{p}}$ есть функция Ферми $F^{(0)}$ от $(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)/T$ с произвольным химическим потенциалом μ и температурой T , а $N_{\mathbf{q}}$ — функция Планка $N^{(0)}$ от $\hbar\Omega_{\mathbf{q}}/T$, зависящая от той же температуры T . Если важны только нормальные электрон-фононные столкновения, оно обращается в нуль также для функции распределения электронов вида (26); при условии, что фононная функция распределения есть функция Планка от $(\Omega_{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\mathbf{V})/T$.

¹ Результаты для нормальных металлов получаются из уравнений, приведенных в работе [17] для сверхпроводников, предельным переходом $\Delta \rightarrow 0$ (где Δ — сверхпроводящая щель).

6.4. Фонон-фононные столкновения. Рассмотрим трехфононные процессы, возникающие благодаря кубическому ангармонизму в гамильтониане взаимодействия. Имеем (см. [18])

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \frac{1}{2} \int d\eta_{\mathbf{q}} \int d\eta_{\mathbf{q}'} w(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q}'') \\ &\times [(N_{\mathbf{q}} + 1)(N_{\mathbf{q}'} + 1)N_{\mathbf{q}''} - N_{\mathbf{q}}N_{\mathbf{q}'}(N_{\mathbf{q}''} + 1)] \\ &\times \ln \frac{(N_{\mathbf{q}} + 1)(N_{\mathbf{q}'} + 1)N_{\mathbf{q}''}}{N_{\mathbf{q}}N_{\mathbf{q}'}(N_{\mathbf{q}''} + 1)}, \end{aligned} \quad (30)$$

где $w(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q}'')$ — соответствующая вероятность трехфононного процесса (без учета множителей $N_{\mathbf{q}}$ и $(N_{\mathbf{q}'} + 1)$). Для случая поглощения одного фонона и излучения двух первые два аргумента в этой вероятности соответствуют испущенным фононам; $w(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'')$ пропорциональна $\delta(\Omega_{\mathbf{q}} + \Omega_{\mathbf{q}'} - \Omega_{\mathbf{q}''})$. Здесь

$$\mathbf{q}'' = \mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{b}, \quad (31)$$

где вектор \mathbf{b} равен или нулю (для нормальных процессов) или вектору обратной решетки (для процессов переброса). Если важны процессы переброса, выражение (30) обращается в нуль, когда $N_{\mathbf{q}}$ — функция Планка от произвольной температуры.

6.5. Столкновения фононов с дефектами решетки. Явные выражения для $[\partial S/\partial t]_{\text{coll}}$ не очень отличаются от (23) (см. [18]) и здесь их приводить не будем. Этот вклад обращается в нуль, если $N_{\mathbf{q}}$ — произвольная функция фононной энергии $\hbar\Omega_{\mathbf{q}}$.

7. Закон Ома

В этом разделе обсудим важный случай линейной зависимости между напряжением и током, когда отклонения функций распределения от равновесных функций малы

$$F_{\mathbf{p}} = F^{(0)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) + \Delta F_{\mathbf{p}}, \quad N_{\mathbf{q}} = N^{(0)}(\Omega_{\mathbf{q}}) + \Delta N_{\mathbf{q}}, \quad (32)$$

где $\Delta F_{\mathbf{p}}$ и $\Delta N_{\mathbf{q}}$ удовлетворяют линеаризованным кинетическим уравнениям. $\Delta F_{\mathbf{p}}$ и $\Delta N_{\mathbf{q}}$ должны быть пропорциональны внешнему электрическому полю, это поле мы считаем единственным источником, вызывающим отклонение функций от равновесия. Поскольку столкновительные члены обращаются в нуль для равновесных частей функций распределения, можно выразить производство энтропии через линеаризованные операторы столкновений I , которые действуют на $\Delta F_{\mathbf{p}}$ и $\Delta N_{\mathbf{q}}$. Линейные члены $\Delta F_{\mathbf{p}}$ и $\Delta N_{\mathbf{q}}$ не вносят вклада в производство энтропии. В этом можно убедиться или непосредственной проверкой, или используя следующее физическое соображение. Дело в том, что линейный член в $\Delta F_{\mathbf{p}}$ или $\Delta N_{\mathbf{q}}$ может иметь любой знак, в то время как производство энтропии должно быть неотрицательным.

Разлагая подынтегральное выражение в (23) по ΔF_p и $\Delta F_{p'}$, мы получим [13]

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \frac{n_i}{2} \int d\xi_q \int d\xi_{p'} w(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \frac{(\Delta F_p - \Delta F_{p'})^2}{F_p^{(0)}(1 - F_p^{(0)})}. \quad (33)$$

Чтобы записать главные члены разложения в уравнениях (24), (27), (30) в компактной форме, удобно ввести функции χ_p и ν_q , определенные как

$$\begin{aligned} \Delta F_p &= \chi_p F_p^{(0)}(\epsilon_p) \left[1 - F_p^{(0)}(\epsilon_p) \right], \\ \Delta N_q &= \nu_q N_q^{(0)}(\Omega_q) \left[N_q^{(0)}(\Omega_q) + 1 \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

Для электрон-электронных, электрон-фоонных и фоон-фоонных столкновений получим соответственно

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \frac{1}{4} \int d\xi_p \int d\xi_{p'} \int d\xi_{p_1} \int d\xi_{p_1'} \omega(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1') \\ &\times (1 - F_p^{(0)})(1 - F_{p'}^{(0)}) F_{p_1}^{(0)} F_{p_1'}^{(0)} (\chi_p + \chi_{p'} - \chi_{p_1} - \chi_{p_1'})^2, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \int d\xi_p \int d\xi_{p'} \int d\eta_q F_p^{(0)}(1 - F_{p'}^{(0)}) N_q^{(0)} \\ &\times w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) (\chi_p - \chi_{p'} + \nu_q)^2, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \frac{1}{2} \int d\eta_q \int d\eta_{q'} \int d\eta_{q''} N_q^{(0)}(N_q^{(0)} + 1) \\ &\times w(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; -\mathbf{q}'') (\nu_q + \nu_{q'} - \nu_{q''})^2. \end{aligned} \quad (37)$$

Для получения полного произведения энтропии нужно проинтегрировать эти выражения по всему объему проводника.

Как уже отмечалось, выражение (33) и выражения (35)–(37) квадратичны относительно отклонений функций распределения от равновесных значений. Это означает, что для вычисления диссипации энергии и джоулевых потерь достаточно решить кинетическое уравнение с точностью до первого порядка по электрическому полю \mathbf{E} . Мы считаем это замечание важным, так как в некоторых работах для вычисления производства тепла кинетическое уравнение решается до второго порядка по полю включительно.

Имея в виду дальнейшие приложения, отметим, что эти выражения можно представить и в другом виде. Как пример рассмотрим (36). Можно написать

$$\left[\frac{\partial(F^{(0)} + \Delta F)}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = I \Delta F. \quad (38)$$

Точно таким же образом

$$\left[\frac{\partial(N^{(0)} + \Delta N)}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = I \Delta N, \quad (39)$$

где мы используем одинаковое обозначение I для линейризованных операторов, действующих на ΔF и ΔN . Поскольку

$$\ln \frac{1 - F^{(0)}}{F^{(0)}} = \frac{\epsilon_p - \mu}{T}, \quad \ln \frac{1 + N^{(0)}}{N^{(0)}} = \frac{\hbar \Omega_q}{T},$$

можно убедиться, что благодаря сохранению энергии и числа электронов при электронфоонных столкновениях члены, линейные по ΔF и ΔN , обращаются в нуль, как и должно быть. Квадратичный член можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= - \int d\xi_p \frac{\Delta F_p}{F_p^{(0)}(1 - F_p^{(0)})} I \Delta F_p \\ &- \int d\eta_q \frac{\Delta N_q}{N_q^{(0)}(1 + N_q^{(0)})} I \Delta N_q. \end{aligned} \quad (40)$$

Выражения (35) и (37) также можно преобразовать к аналогичному виду.

Если релаксационные процессы в фоонной системе быстрые, можно пренебречь в (40) вторым членом и остается лишь вклад

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = - \int d\xi_p \frac{\Delta F_p}{F_p^{(0)}(1 - F_p^{(0)})} I \Delta F_p. \quad (41)$$

I — линейный интегральный оператор, действующий на ΔF_p . Он принимает для электрон-фоонных столкновений следующий вид:

$$\begin{aligned} I \Delta F_p &= \int d\xi_{p'} \int d\eta_q \Delta F_{p'} \left\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \left[(1 - F_p^{(0)}) N_q \right. \right. \\ &+ \left. \left. F_p^{(0)}(N_q + 1) \right] + w(\mathbf{p}', \mathbf{p}; \mathbf{q}) \left[(1 - F_{p'}^{(0)}) (N_q + 1) \right. \right. \\ &+ \left. \left. F_{p'}^{(0)} N_q \right] \right\} - \Delta F_p \int d\xi_{p'} \int d\eta_q \left\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right. \\ &\times \left[F_{p'}^{(0)}(N_q^{(0)} + 1) + (1 - F_{p'}^{(0)}) N_q^{(0)} \right] + w(\mathbf{p}', \mathbf{p}; \mathbf{q}) \\ &\times \left[F_p^{(0)} N_q^{(0)} + (1 - F_p^{(0)}) (N_q^{(0)} + 1) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (42)$$

Это алгебраическая сумма двух членов. Один из них интегральный с $\Delta F_{p'}$ под интегралом. Второй имеет обычную форму релаксационного члена (его иногда называют „уходным“ членом кинетического уравнения)

$$\left[\frac{\partial F}{\partial t} \right]_{\text{coll}}^{(\tau)} = - \frac{\Delta F_p}{\tau_p}, \quad (43)$$

где время релаксации τ_p дается выражением

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_p} &= \int d\xi_{p'} \int d\eta_q \left\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right. \\ &\times \left[F_{p'}^{(0)}(N_q^{(0)} + 1) + (1 - F_{p'}^{(0)}) N_q^{(0)} \right] + w(\mathbf{p}', \mathbf{p}; \mathbf{q}) \\ &\times \left[F_p^{(0)} N_q^{(0)} + (1 - F_p^{(0)}) (N_q^{(0)} + 1) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (44)$$

В приближении времени релаксации, когда по какому-либо физическим причинам можно отбросить интегральный член, имеем

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \int d\xi_{\mathbf{p}} \frac{(\Delta F_{\mathbf{p}})^2}{\tau_{\mathbf{p}} F_{\mathbf{p}}^{(0)} (1 - F_{\mathbf{p}}^{(0)})}. \quad (45)$$

Можно использовать это выражение, если $\Delta F_{\mathbf{p}}$ имеет резкий максимум для определенных \mathbf{p} и интеграл в (45) определяется величинами $\Delta F_{\mathbf{p}}$ в малой окрестности максимума (см., например, [19], § 7.3). Такая ситуация рассмотрена нами в разделах 11 и 15.

8. Примеры вычисления производства тепла

Здесь мы кратко обсудим несколько примеров вычисления производства тепла в объемных материалах в омическом режиме. Их можно рассматривать как предварительный шаг для вычисления производства тепла током через наноструктуру для различных типов резервуаров. Хотя мы вычислим (см. раздел 10) генерацию тепла для определенного типа резервуара, рассмотрение, проведенное в настоящем разделе, позволяет обобщить результаты и на другие случаи.

8.1. Остаточное сопротивление. Это простейший пример генерации тепла. Тем не менее этот случай заслуживает обсуждения, так как иногда в литературе можно найти утверждения, что только неупругие столкновения могут приводить к диссипации энергии и производству тепла. Столкновения с примесями сохраняют энергию электрона. Линеаризованное кинетическое уравнение (для произвольной анизотропии электронного спектра и взаимодействия с примесями) есть

$$I \Delta F = - \frac{\partial F^{(0)}(\epsilon_{\mathbf{p}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}} e E v. \quad (46)$$

Интеграл $\int d\xi_{\mathbf{p}} I \Delta F$ равен нулю из-за сохранения числа частиц (см. (3)). Интеграл по $d\xi_{\mathbf{p}}$ в правой части (46) также обращается в нуль, так как v — нечетная функция \mathbf{p} , в то время как все остальные функции четные. Это означает, что уравнение (46) имеет решение. Оператор I определен на классе таких функций, для которых среднее по любой изоэнергетической поверхности обращается в нуль. Функция в правой части уравнения (46) принадлежит к такому классу. Это значит, что можно ввести обратный оператор и записать решение уравнения (46) в следующей символической форме:

$$\Delta F = - \frac{\partial F^{(0)}(\epsilon_{\mathbf{p}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}} e E I^{-1} v. \quad (47)$$

Оператор I^{-1} действует на скорость электрона v . Подставляя уравнение (47) в (23), получим

$$T_0 \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \sigma_{ik} E_i E_k, \quad (48)$$

где

$$\sigma_{ik} = \frac{e^2}{T_0} \int d\xi_{\mathbf{p}} v_i I^{-1} v_k (1 - F_{\mathbf{p}}^{(0)}) F_{\mathbf{p}}^{(0)}. \quad (49)$$

Это выражение не зависит от T_0 , поскольку

$$\int d\epsilon (1 - F_{\mathbf{p}}^{(0)}) F_{\mathbf{p}}^{(0)} = T_0.$$

Одни лишь упругие столкновения привели к диссипации механической энергии. Это имеет ясный физический смысл. Упорядоченное электронное распределение в электрическом токе можно использовать для производства механической работы. Например, протекание тока через кольцо (катушку) втягивает магнитный стержень в кольцо. Эта работа над стержнем совершается электронами, переносящими ток. Результатом столкновений является уменьшение степени упорядочения в электронном распределении, что и означает возрастание энтропии, диссипацию механической энергии и необратимое превращение ее в тепло.

В рассмотренном примере неупругие столкновения были необязательны для диссипации механической энергии. Если электронный вклад в теплоемкость преобладает над решеточным дебаевским вкладом, энергия остается в электронной системе даже при электрон-фононном рассеянии. При обратном соотношении теплоемкостей тепло в конце концов перейдет к решетке, т. е. к системе фононов. Но даже в этом последнем случае, если электрон-примесные столкновения происходят гораздо чаще, чем электрон-фононные, именно первые определяют генерацию энтропии. Конечно, неупругие столкновения необходимы для достижения электронной системой полного равновесия. Тем не менее при наших предположениях они мало влияют на остаточное сопротивление и генерацию тепла.

8.2. Электрон-фононное рассеяние. Другая возможная ситуация — это производство тепла при доминирующей роли электрон-фононных столкновений. Предположим, что релаксационные процессы за счет фонон-фононных столкновений и рассеяния фононов на дефектах настолько быстры по сравнению с электрон-фононными процессами, что с достаточной точностью фононы можно рассматривать как равновесные. Тогда фононы описываются функцией Планка, и $[\partial S / \partial t]_{\text{coll}}$ можно записать в следующей форме:

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \int d\xi_{\mathbf{p}} \int d\xi_{\mathbf{p}'} \int d\eta_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{p}}^{(0)} (1 - F_{\mathbf{p}'}^{(0)}) N_{\mathbf{q}}^{(0)} \times w(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) (\chi_{\mathbf{p}} - \chi_{\mathbf{p}'})^2. \quad (50)$$

Это можно представить себе как результат релаксации квазиимпульса и энергии электронов из-за столкновений с равновесными фононами.

Такой результат можно также записать через обратный линеаризованный оператор столкновений (см. [20]). В этом случае оператор будет смешивать электронные состояния с различными энергиями.

8.3. Взаимное электрон-фононное увлечение. Если доминирующими являются нормальные электрон-фононные столкновения, получим

$$\chi_p = \mathbf{pV}/T, \quad v_q = \hbar \mathbf{qV}/T.$$

Учитывая (29), видим, что производство энтропии, описываемое формулой (36), обращается в нуль. Это означает, что все производство энтропии происходит за счет фононных процессов, хотя электроны и испытывают неупругие столкновения с фононами. Что касается геометрии тепловыделения, этот случай может оказаться противоположным рассмотренному в подразделе 8.1. В случае остаточного сопротивления генерация тепла дублирует пространственное распределение $E^2(\mathbf{r})$ (при условии плавности этого распределения). Наоборот, случай, рассмотренный здесь, может быть нелокальным, так как генерация энтропии определяется фононными столкновениями, а фононы распространяются на расстояния порядка длины свободного пробега. Например, тепловыделение может иметь место вне области падения потенциала.

9. Явления переноса в квантовой наноструктуре

Перейдем к главной цели обзора — рассмотрению наноструктуры, состоящей из нанопроволоки и находящихся в контакте с ней резервуаров. В первую очередь нас будет интересовать баллистический перенос. Движение электронов в продольном направлении такой структуры x инфинитно, и в этом же направлении протекает ток. В перпендикулярном направлении \mathbf{r}_\perp электронное движение квантовано. Для определенности будем рассматривать трехмерный случай. Переход к двумерному случаю можно осуществить простым изменением обозначений.

Рассмотрим так называемый адиабатический случай (см. [21]), когда потенциальный профиль наноструктуры меняется плавно вдоль оси x , изменение происходит на масштабах, гораздо больших λ (где λ — длина волны де Бройля электрона). Как показано в работе [21], отражения волн де Бройля не происходит при переходе из наноструктуры в резервуар, если выполняется следующее условие:

$$\pi^2 \sqrt{2R/a} > 1, \quad (51)$$

где $a(x)$ — ширина нанопроволоки в области ее сопряжения с резервуаром (см. вставку на рис. 1), зависящая от продольной координаты x , а R — радиус кривизны функции $a(x)$ в этой области. Как правило, такое условие на практике гарантированно выполняется. Предполагается, что в свою очередь длина свободного пробега электронов гораздо больше длины нанопроволоки L . Тогда имеется система одномерных электронных зон (их обычно называют каналами), описывающих движение электрона в структуре и в соединенных со структурой

резервуарах, или контактах. Это продольное движение можно рассматривать (квази)классически. Поперечное же движение квантовано. Следуя подходу Глазмана и др. [21], будем считать, что переменные x и \mathbf{r}_\perp разделяются в адиабатическом приближении, т. е. при выполнении неравенства (51). Это значит, что при заданной продольной координате x зависимость потенциала от \mathbf{r}_\perp определяет волновую функцию поперечного движения $\eta_n(\mathbf{r}_\perp; x)$, зависящую от координаты x как от параметра. Здесь n — квантовое число, описывающее поперечное квантование. Электронный спектр зависит от x , и эта зависимость имеет вид

$$\epsilon_n(p; x) = p^2/2m + \epsilon_n(o; x), \quad (52)$$

где m — эффективная масса электрона, а $\epsilon(0, x)$ — положение дна зоны (начала отсчета продольной части энергии одномерной зоны), зависящее от x ; $\epsilon_n(0; x)$ — собственные значения гамильтониана

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + e\phi(\mathbf{r}_\perp; x), \quad (53)$$

зависящего от x как от параметра.

Электронную волновую функцию можно записать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \text{const} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(i \int p(x') dx' / \hbar \right) \eta_n(\mathbf{r}_\perp; x). \quad (54)$$

Сохранение энергии для такой системы можно по аналогии с (6) записать в интегральной форме

$$\frac{d\mathcal{U}}{dt} = J\mathcal{V}, \quad (55)$$

где

$$\mathcal{U} = \sum_n \int dx \int d\xi_p \epsilon_{np} F_{np}, \quad (56)$$

J — полный ток через наноструктуру, описываемый выражением

$$J = e \sum_n \int d\xi_p v_{np} F_{np}. \quad (57)$$

Здесь $d\xi_p = dp/2\pi\hbar$ (суммирование по спиновым переменным, не обозначенное явно, подразумевается), $v_{np} = \partial\epsilon_{np}/\partial p = p/m$ — электронная групповая скорость (не зависящая явно от n), $F_{np}(x)$ — это функция распределения электронов, зависящая от квантового числа n как от параметра, в то время как p (x -компонента квазиимпульса электрона) и x — классические переменные. $F_{np}(x)$ удовлетворяет кинетическому уравнению

$$v \frac{\partial F_{np}(x)}{\partial x} - \frac{\partial F_{np}(x)}{\partial p} \frac{\partial \epsilon_{np}(x)}{\partial x} = \left[\frac{\partial F_{np}}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (58)$$

В случае баллистического переноса правая часть (58) обращается в нуль. В следующих разделах показано, как она меняется при наличии столкновений.

10. Производство энтропии в наноструктуре

Скорость производства энтропии для наноструктуры дается выражением (21). Для системы, взаимодействующей с фононами, производство энтропии описывается формулой

$$\frac{dS}{dt} = \int dx \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}}, \quad (59)$$

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \sum_n \int d\xi_p \ln \frac{1 - F_{np}}{F_{np}} \left[\frac{\partial F}{\partial t} \right]_{\text{coll}} + \int d\eta_q \ln \frac{1 + N_q}{N_q} \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_{\text{coll}}. \quad (60)$$

Интеграл столкновений для электронов имеет вид

$$\left[\frac{\partial F}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \sum_{n'} \int d\xi_{p'} \left\{ w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q}) \left[F'(1 - F)(N_q + 1) - F(1 - F')N_q \right] + w_{n'n}(p', p; \mathbf{q}) \times \left[F'(1 - F)N_q - F(1 - F')(N_q + 1) \right] \right\}, \quad (61)$$

где $F = F_{np}$, $F' = F_{n'p'}$, в то время как

$$w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q}) \propto \delta_{p', p+\hbar\mathbf{q}} \delta(\epsilon_{n'p'} - \epsilon_{np} - \hbar\Omega_{\mathbf{q}}). \quad (62)$$

Величина $w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q})$ пропорциональна вероятности перехода электрона из состояния n' , p' в состояние n , p , сопровождаемого излучением фонона с квазиимпульсом \mathbf{q} . В такой общей форме это соотношение справедливо для любых фононных состояний. Если считать, что электрон в наноструктуре взаимодействует с объемными фононами, теория возмущений дает (ср. с [22,23])

$$w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |c_{\mathbf{q}}|^2 |\langle n | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\perp}) | n' \rangle|^2 \times \delta[\epsilon_n(p) - \epsilon_{n'}(p') + \hbar\Omega_{\mathbf{q}}] \delta_{p', p+\hbar\mathbf{q}}. \quad (63)$$

Здесь $c_{\mathbf{q}}$ — матричный элемент взаимодействия электронов с объемными фононами; \mathbf{q}_{\perp} обозначает q_y, q_z .

Фононный интеграл столкновений имеет вид

$$\left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \sum_{nn'} \int d\xi_p \int d\xi_{p'} w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q}) \times [F'(1 - F)(N_{\mathbf{q}} + 1) - F(1 - F')N_{\mathbf{q}}]. \quad (64)$$

Используя (60), получаем (ср. с (27)) (суммирование по спинам и фононным ветвям подразумевается)

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = \sum_{nn'} \int d\xi_p \int d\xi_{p'} \int d\eta_q w_{nn'}(p, p'; \mathbf{q}) \times \ln \frac{F_{n'p'}(1 - F_{np})(N_{\mathbf{q}} + 1)}{F_{np}(1 - F_{n'p'})N_{\mathbf{q}}} \times [F_{n'p'}(1 - F_{np})(N_{\mathbf{q}} + 1) - F_{np}(1 - F_{n'p'})N_{\mathbf{q}}]. \quad (65)$$

Мы не приводим здесь соответствующих формул для взаимодействия электронов с примесями внутри нанопроволоки. Дело в том, что нас главным образом будут интересовать нанопроволоки, где таких примесей нет. Если такие примеси в проволоке есть и они играют важную роль, их, вообще говоря, нельзя описывать в рамках обычно широко используемой процедуры усреднения по положениям этих примесей, что подразумевается формулой (23). Отметим, однако, что такая процедура усреднения применима вне наноструктуры в области контактов (резервуаров).

Прямым обобщением (24) можно было бы учесть и вклад электрон-электронного взаимодействия в производство энтропии в нанопроволоке. Однако электрон-электронные столкновения в самой нанопроволоке существенно подавлены (см. [24]). В самом деле, можно проверить, что из-за одномерной электронной динамики законы сохранения квазиимпульса и энергии обычно невыполнимы. (Здесь можно сделать следующее замечание: для существенно малых величин относительных скоростей взаимодействующих электронов их столкновения уже не могут описываться с помощью теории возмущений.) Поэтому мы и не приводим здесь соответствующие выражения. Однако вне нанопроволоки (в области контактов) применять формулу (24) можно.

11. Генерация джоулева тепла током в наноструктуре: бесстолкновительный случай

В духе подходов Ландауэра, Бюттикера и Имри [5–7] предположим, что квантовая структура соединена с левым (+) и правым (–) резервуарами. В каждом из них электронный газ находится в равновесии, однако с разными химическими потенциалами, равными соответственно $\mu^{(+)}$ и $\mu^{(-)}$, причем $\mu^{(+)} - \mu^{(-)} = eV$. Считаем, что электронный перенос можно описать в адиабатическом приближении [21]. Поскольку поперечные размеры контактов гораздо больше соответствующих размеров нанопроволоки, число каналов в контактах также гораздо больше, чем в проволоке. В основном эти каналы не являются токопроводящими, так что электроны в них отражаются от проволоки назад в соответствующий контакт. Поэтому мы начнем с рассмотрения токопроводящих каналов, которые „проникают“ в саму наноструктуру. Электростатический потенциал $V(x)$ схематически изображен на рис. 1. Основное падение напряжения происходит в месте сопряжения нанопроволоки с резервуаром на длине, грубо говоря, порядка a .

Предполагая безотражательный перенос, рассмотрим электроны с $p > 0$. Нас интересуют значения $x > L$, при которых в области резервуара происходят релаксация и связанная с этой релаксацией генерация энтропии. Состояния в токопроводящем канале, происходящие из левого резервуара и вступающие в область правого

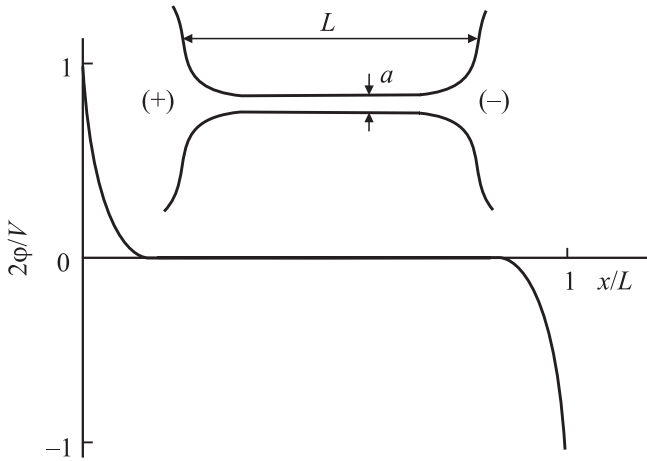


Рис. 1. Распределение электростатического потенциала и профиль наноструктуры в адиабатическом случае (на вставке).

резервуара (контакта) $x > L$, имеют функцию распределения $F^{(0)}(\epsilon_{pm} - \mu^{(+)})$. Физически это означает, что при $x > L$ функция распределения электронов в токопроводящих каналах будет неравновесной по отношению к остальным электронам в этой области (функция распределения которых есть $F^{(0)}(\epsilon_{pm} - \mu^{(-)})$). Таким образом, в области $x > L$ релаксационные процессы должны привести токопроводящие состояния в равновесие. Именно эти процессы мы и собираемся исследовать для вычисления производства тепла и выяснения его пространственного распределения. (Область $x < 0$ рассматривается так же.)

Мы рассматриваем движение электронов внутри проволоки как баллистическое. Это означает, что их рассеяние здесь пренебрежимо мало. Для определенности дальнейших рассуждений предположим, что электроны в контактах релаксируют из-за столкновений с фононами. Что касается самих фононов, будем считать, что из-за ангармонизма и взаимодействия с дефектами кристалла они релаксируют так быстро, что справедливо выражение (41) и фононы можно считать равновесными. Чтобы электроны рассеялись, они должны проникнуть на существенные расстояния в контакты, где электроны можно рассматривать как трехмерный электронный газ, так что для них справедливо обычное блоховское представление. При адиабатическом переносе число узлов волновой функции поперечного квантования $\eta_m(\mathbf{r}_\perp; x)$ для токопроводящего канала не зависит от x и мало. Далеко от нанопроволоки точки отсчета энергий одномерных зон $\epsilon(0, x)$ начинают сближаться. Это значит (если вести рассуждения в терминах функций Блоха), что малое число электронных состояний, являющихся неравновесными, имеет малые поперечные составляющие квазиимпульса по сравнению с продольной частью. Другими словами, эти состояния имеют практически одинаковую величину квазиимпульса \mathbf{p} . Это в свою очередь означает, что неравновесная функция распре-

деления является резкой функцией квазиимпульса \mathbf{p} , и мы имеем дело с ситуацией, которую уже обсуждали ранее (после формулы (45)). Интегральная часть оператора столкновений, описывающая приход в данное состояние, должна быть мала по сравнению с „уходной“ частью, описываемой простым членом релаксационного типа (43). В результате оказывается, что можно ограничиться приближением времени релаксации τ . Как можно убедиться, для вычисления полного производства тепла в области резервуаров в действительности приближение времени релаксации не обязательно. Однако для выяснения пространственного распределения диссипации механической энергии это приближение все же существенно, а вот какой именно механизм вносит в τ преобладающий вклад — для наших рассуждений не важно.

В этом приближении неравновесная часть функции распределения ΔF_{np} удовлетворяет уравнению

$$v_{np} \frac{\partial \Delta F_{np}}{\partial x} + \frac{\Delta F_{np}}{\tau} = 0. \quad (66)$$

Это уравнение должно быть дополнено граничным условием на границе области контакта $x = L$

$$\Delta F_{np}|_{x=L} = \frac{\partial F_{np}}{\partial \mu} \Delta \mu, \quad (67)$$

где $\Delta \mu = \mu^{(+)} - \mu^{(-)} = eV$. Мы предполагаем здесь $eV \ll T$. Решение уравнения (66) с граничным условием (67) есть

$$\Delta F_{np} = \frac{\partial F_{np}^{(0)}}{\partial \mu} \Delta \mu \exp\left(-\frac{x-L}{v\tau_p}\right). \quad (68)$$

Здесь мы пренебрегли различием между скоростью в канале v_{np} и трехмерной скоростью v_p . Подставляя (68) в уравнение (45), предварительно обобщенное на рассматриваемый квантовый случай, получаем пространственное распределение генерации энтропии

$$T \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = 2(eV)^2 \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{1}{\tau_p} \frac{\partial F_{np}^{(0)}}{\partial \mu} \times \exp\left(-\frac{2(x-L)}{v\tau_p}\right). \quad (69)$$

Учитывая соотношения (21) и (59), получаем для производства полной энтропии в резервуаре выражение

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = -\frac{d\mathcal{Q}}{dt} = -\frac{(eV)^2}{\tau_p} 2\mathcal{N} \int_0^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \times \int_L^{\infty} dx \exp\left(-\frac{2(x-L)}{v\tau_p}\right) \frac{\partial F_{np}^{(0)}}{\partial \mu}. \quad (70)$$

Таким образом, в области контакта

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = -\frac{(eV)^2}{2\pi\hbar} \mathcal{N}, \quad (71)$$

где \mathcal{N} — число активных каналов, т.е. каналов, для которых начало отсчета одномерных зон расположено

ниже уровня Ферми. Вычисление вклада области $x < 0$ показывает, что для рассматриваемого случая полное производство энтропии в каждом из контактов (резервуаров) одинаково, несмотря на то что времена релаксации τ_p^\pm могут быть различны. Причем это справедливо независимо от действительной формы профиля потенциала самого канала. Уравнение (70) дает пространственное распределение генерации энтропии. Эта генерация происходит в областях с длиной порядка длины свободного пробега $v\tau_p$, т.е. только в областях, примыкающих к нанопроволоке.

Полную скорость генерации тепла для всей системы можно представить в виде

$$\frac{dQ}{dt} = GV^2. \quad (72)$$

Для G получаем известное выражение (см., например, [25])

$$G = G_0 \mathcal{N}. \quad (73)$$

Здесь

$$G_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar} \quad (74)$$

— кондактанс одного канала, т.е. величина, которую можно было бы назвать квантом кондактанса.

Таким образом, рассмотрение генерации тепла обеспечивает альтернативный метод вычисления кондактанса наноструктур. Еще раз подчеркнем: тот факт, что время релаксации τ_p определялось электрон-фононными столкновениями, не был существенным при выводе уравнения (70). Мы пришли бы к такому же заключению если, например, τ_p определялось бы каким-либо другим механизмом рассеяния в классическом контакте (например, электрон-электронными столкновениями).

Можно получить тот же результат, используя чисто классическое выражение (45) для производства энтропии. Кратко обсудим здесь схему такого вычисления. Для трехмерного случая мы имели

$$\frac{dS}{dt} = \int_L^\infty dx \int d^2\mathbf{r}_\perp \int d\xi_p \frac{(\Delta F_p)^2}{\tau_p F_p^{(0)} (1 - F_p^{(0)})}. \quad (75)$$

Для ΔF можем использовать уравнение (68), где (как уже упоминалось) можно пренебречь зависимостью квазиимпульса \mathbf{p}_\perp от малых поперечных компонент или, другими словами, от номера канала n . Теперь интегрирование по $d^2\mathbf{r}_\perp d^2\mathbf{p}_\perp$ можно заменить суммированием по дискретным значениям \mathbf{p}_\perp . Как отмечалось, число членов в такой сумме должно равняться числу открытых каналов, и мы снова приходим к (71) независимо от действительного механизма рассеяния, ответственного за время релаксации τ . Таким образом, оказывается, что результат зависит от реального профиля потенциала, формирующего наноструктуру, лишь через число активных каналов наноструктуры \mathcal{N} .

12. Учет столкновений с фононами в нанопроволоке

Основная наша задача — обсудить различные случаи тепловыделения при баллистическом переносе электронов в нанопроволоке. Все же представляется полезным коротко рассмотреть, к каким качественно новым явлениям приводит учет столкновений электронов в пределах самой нанопроволоки. В первую очередь он, естественно, должен привести к появлению отрицательной поправки ΔG к чисто баллистическому кондактансу. Соответственно должно возникнуть тепловыделение в нанопроволоке и измениться тепловыделение в резервуарах.

Мы видели, что производство энтропии в двух резервуарах, связанных баллистической проволокой, одно и то же и не зависит ни от формы резервуаров, ни от скоростей релаксации в них (и то, и другое может различаться). Возникает вопрос: сохранится ли подобная ситуация при условии, что электроны испытывают столкновения и в самой нанопроволоке? Будем считать, что условия наблюдения чисто баллистического кондактанса нарушены, и выясним, что нового привносят в задачу такие столкновения в проволоке, которая предполагается пространственно однородной.

Электрон-фононное взаимодействие в проволоке будем предполагать слабым. Конкретно это означает, что изменение $|\Delta G|$ кондактанса за счет взаимодействия электронов с фононами мало по сравнению с бесстолкновительным значением этой величины G . В то же время ΔG — это вполне заметная экспериментальная величина, как показывают оценки, приведенные в работах [22,23], и представленное там исследование ее температурной зависимости. Далее показано, что производство энтропии в проволоке также определяется величиной ΔG .

Одним из важных и интересных результатов является решение поставленного вопроса о том, могут ли в принципе электрон-фононные столкновения нарушить равенство производства энтропии в двух резервуарах (независимо от их формы). В ряде работ обсуждаются возможные причины подобной асимметрии наноструктуры [26]. Казалось бы, поскольку число электронов, движущихся в одном направлении, превалирует над числом электронов, движущихся в обратном направлении, большее количество тепла и должно выделяться в соответствующем резервуаре. Такого рода рассуждения годятся для обратимого тепла Пельтье, но не для джоулева тепла. Оказывается, что равенство производства энтропии сохраняется и при условии, когда слабые электронфононные столкновения имеют место в самой нанопроволоке. Проанализируем роль электрондырочной симметрии, ответственной за это свойство, при условии, что имеется сильное фермиевское вырождение электронного газа. В результате, можно сделать вывод, что сравнительно редкие столкновения в нанопроволоке сами по себе не могут служить причиной для асимметричного выделения тепла в резервуарах.

Функция распределения электронов в нанопроволоке в нулевом приближении по электрон-фононным столкновениям имеет вид

$$F_{np0} = \begin{cases} F^{(0)}(\epsilon_{np} - \mu^{(+)}) & \text{для } p > 0, \\ F^{(0)}(\epsilon_{np} - \mu^{(-)}) & \text{для } p < 0, \end{cases}$$

где $\mu^{(\pm)} = \mu \pm eV/2$. Это решение получено при пренебрежении столкновениями и в предположении, что поле в самой нанопроволоке пренебрежимо мало. Такую функцию и нужно подставить в выражение (65). Фононная функция распределения $N_{\mathbf{q}}$ считается равновесной функцией $N_{\mathbf{q}}^{(0)}$. В следующем приближении при вычислении ΔG нужно учесть электрон-фононные столкновения. А поскольку интеграл столкновений от равновесных функций распределения равен нулю, в него могут вносить вклад только области значений p и p' , где эти две величины имеют противоположные знаки. Тогда для интересующего нас случая

$$eV \ll T \quad (76)$$

получаем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= 2 \left(\frac{eV}{T} \right)^2 \sum_{nm'} \int_0^\infty d\xi_p \int_0^\infty d\xi_{p'} \int d\eta_{\mathbf{q}\perp} \\ &\times w_{nm'}(p, p'; \mathbf{q}) N_{\mathbf{q}}^{(0)} F^{(0)}(\epsilon - \mu) \left[1 - F^{(0)}(\epsilon' - \mu) \right], \\ w_{nm'}(p, p'; \mathbf{q}) &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n' | e^{i\mathbf{q}\perp \cdot \mathbf{r}\perp} | n \rangle|^2 |c_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\Omega_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (77)$$

Это соотношение учитывает только проходящие через структуру электронные моды. Мы не вводим здесь коэффициентов прохождения и отражения, подразумевая, что любая мода с энергией больше некоторой полностью проходит, а с меньшей энергией — полностью отражается.

Вводя обозначение ΔG для той части кондактанса, которая обусловлена столкновениями с фононами в пределах нанопроволоки, получаем

$$\begin{aligned} \Delta G &= -2 \frac{e^2 L}{T} \sum_{nm'} \int d\eta_{\mathbf{q}\perp} |\langle n' | e^{i\mathbf{q}\perp \cdot \mathbf{r}\perp} | n \rangle|^2 C_{n'n}, \\ C_{n'n} &= \int_0^\infty d\xi_p \int_0^\infty d\xi_{p'} N_{\mathbf{q}}^{(0)} \frac{2\pi}{\hbar} |c_{\mathbf{q}}|^2 (\epsilon' - \epsilon - \hbar\Omega_{\mathbf{q}}) \\ &\times \left[1 - F^{(0)}(\epsilon' - \mu) \right] F^{(0)}(\epsilon - \mu). \end{aligned} \quad (78)$$

Генерация плотности энтропии за счет столкновений в пределах нанопроволоки есть

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = - \frac{V^2}{LT} \Delta G, \quad (79)$$

а скорость тепловыделения в пределах нанопроволоки равна

$$\left(\frac{d\mathcal{Q}}{dt} \right)_{\text{nan}} = - \left(\frac{d\mathcal{E}}{dt} \right)_{\text{nan}} = -V^2 \Delta G. \quad (80)$$

В однородной проволоке диссипация механической энергии происходит равномерно по всей длине L проволоки. Изменение кондактанса ΔG , обусловленное электрон-фононными столкновениями, отрицательно. Соответственно вклад в диссипацию механической энергии при заданном приложенном потенциале естественным образом оказывается положительным, в то время как сам кондактанс уменьшается. Это может показаться странным, так как при условии постоянства приложенного потенциала выделяемое тепло должно уменьшаться с уменьшением кондактанса, наша же формула приводит к положительному вкладу в выделяемое тепло. Тем не менее это вполне объяснимо, так как столкновения изменяют функцию распределения электронов и в нанопроволоке, и в резервуарах. Уменьшение тепловыделения в резервуарах оказывается таким [27], что закон сохранения энергии выполняется.

13. Электронно-дырочная симметрия вырожденных проводников

Тот факт, что полное производство энтропии в двух резервуарах одинаково, является следствием особой симметрии, типичной для проводников с сильно вырожденными по Ферми носителями. Обсудим теперь это обстоятельство детально.

Начнем с того, что заменим F_{np} в соответствии с

$$H_{np} = 1 - F_{np}, \quad (81)$$

введя H_{np} как функцию распределения дырок в том же самом канале (т.е. в той же самой одномерной зоне). Такая функция оказывается полезной в случае сильного вырождения. Тогда вместо уравнения (61) имеем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial H_{np}}{\partial t} \right]_{\text{coll}} &= \sum_{n'} \int d\xi_{p'} \int d\eta_{\mathbf{q}} \left\{ w_{nm'}(p, p'; \mathbf{q}) \left[H_{n'p'}(1 - H_{np}) N_{\mathbf{q}} \right. \right. \\ &- \left. \left. H_{np}(1 - H_{n'p'}) (N_{\mathbf{q}} + 1) \right] + w_{n'n}(p', p; \mathbf{q}) \right. \\ &\times \left. \left[H_{n'p'}(1 - H_{np}) (N_{\mathbf{q}} + 1) - H_{np}(1 - H_{n'p'}) N_{\mathbf{q}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (82)$$

Введя переменную $y = -x$, можем написать для малой неравновесной части ΔH

$$v_{np} \frac{\partial \Delta H_{np}}{\partial y} + \frac{\Delta H_{np}}{\tau_{np}} = 0 \quad \text{для } p < 0. \quad (83)$$

Это уравнение имеет такую же форму, как уравнение (66). Однако выражение (83) описывает диссипацию в левом резервуаре. Соответственно величина времени

релаксации τ_{np} может быть существенно другой по сравнению с правым резервуаром при условии, что релаксационные свойства резервуаров различны. Интегрируя решение этого уравнения по y , можно увидеть, что полное тепловыделение в левом резервуаре такое же, как и в правом, независимо от механизма релаксации. Физически это означает, что несущественно, рассматривать ли эту диссипацию как связанную с переходами электронов или дырок. Это и является причиной эквивалентности скорости диссипации механической энергии в двух резервуарах.

Необходимо отметить, что эта симметрия все же является приближенной. Она тем строже, чем лучше выполняется неравенство

$$T/\mu^{(n)} \ll 1. \quad (84)$$

Дело в том, что только энергетическая полоска порядка T вблизи химического потенциала $\mu^{(n)} \equiv \mu - \epsilon_n(0; 0)$ ответственна за явления переноса, включая производство энтропии. Электрон-дырочная симметрия остается справедливой при условии, что изменением плотности электронных состояний в этой тепловой полоске можно пренебречь. Таким образом, диссипация механической энергии в двух резервуарах оказывается одинаковой с относительной точностью $T/\mu^{(n)} \ll 1$.

14. Случай резкого контакта между нанопроволокой и резервуарами

Данный случай (рис. 2) труднее осуществить на опыте, так как противоположное условие плавности контакта (51) оказывается довольно мягким. Тем не менее и он в принципе осуществим (см. работу [28] и ссылки в ней). Кроме того, этот случай представляет заметный теоретический интерес.

На практике любой прибор измеряет либо температуру (если таковая существует), либо напрямую неравновесную функцию распределения (см. далее). В этом разделе мы проведем феноменологическое исследование стационарного случая, когда напряжение V приложено к тонкому мостику, связывающему два полупространства. Применим полуклассические соображения, весьма похожие на использованные Куликом и др. [3]. Эти соображения должны быть справедливы на таких расстояниях,

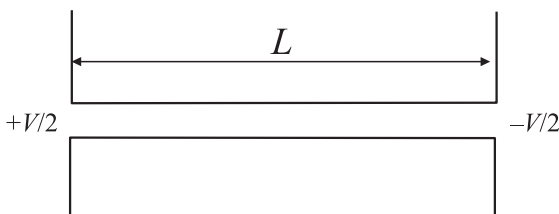


Рис. 2. Наноструктура с резкими контактами.

где перенос частиц контролируется полуклассическими уравнениями. Такой подход позволит рассмотреть эффекты упругих и неупругих столкновений с единой точки зрения и выделить области пространства, где концепция „тепла“ должна рассматриваться различным образом. Последнее особенно важно при обсуждении эксперимента.

При такой геометрии падение потенциала снова сконцентрировано около концов канала на расстояниях порядка его ширины a (см. [29]). Мы рассматриваем симметричный случай, когда эти падения одинаковы на правом и левом концах канала. Будем считать в данном разделе, что

$$eV \gg T. \quad (85)$$

Соответственно мы сможем положить $T = 0$ и считать фермиевское распределение ступенькой. Как отмечалось выше, механическая энергия диссипирует на расстояниях $\sim l$ от канала, где l в условиях преобладания рассеяния электронов дефектами решетки есть упругая длина свободного пробега. Поскольку мы предполагаем $a \ll l$, можно пренебречь изменением потенциала на больших расстояниях $\sim l$. Хотя такое изменение и необходимо для поддержания тока в цепи, тем не менее мы предполагаем, что оно гораздо меньше резких падений потенциала на концах проволоки. Для описания электронных состояний в резервуарах используем блоховское представление для электронных волновых функций, т. е. будем их характеризовать квазиимпульсом p .

Таким образом, наличие „хвостов“ падения потенциала в контактах приводит к связанной с этим ненулевой дрейфовой скорости. Соответственно некоторое увеличение энтропии в действительности происходит и на расстояниях, больших l (что уточняет предположения, сделанные выше). В самом деле, упругие столкновения не приводят к полному равновесию, они приводят только к размыванию функции распределения по изоэнергетической поверхности. Только на следующем этапе формируется электронная температура, что сопровождается дальнейшим увеличением энтропии (см. [18]). Тем не менее, если $\tau_p \ll \tau_{ee}, \tau_{ep}$, где τ_{ee} — электрон-электронное, а τ_{ep} — электрон-фононное время релаксации, можно ожидать, что в основном производство энтропии происходит за счет упругих столкновений.

Что касается изменения функции распределения, то в „баллистической“ области $a < r < l$ неравновесное распределение, вызванное одноканальным проводником в правом берегу-резервуаре (здесь для определенности считаем резервуары двумерными структурами), на расстояниях $r \gg a$ может быть описано как

$$\Delta F \simeq \frac{a}{r} [\theta(\mu - \epsilon + eV/2) - \theta(\mu - \epsilon - eV/2)] \theta(v_x) \quad (86)$$

(считаем $eV > 0$). Здесь мы предположили, что дифракция превращает нашу одноканальную волновую функцию в цилиндрическую волну на расстояниях, гораздо больших ширины канала a . Контакт с каналом учтем,

используя энергетические соображения (т.е. непрерывность потока энергии). Соответственно ради простоты считаем, что коэффициент прохождения электронной волны там, где нанопроволока переходит в полупространство, равен с достаточной точностью единице. (Иначе в (86) появился бы дополнительный множитель $|\mathcal{T}|^2$, где \mathcal{T} — коэффициент прохождения электронной волны.)

Функция распределения такого вида приводит к току

$$J = e\pi r \int v_x \frac{2d^2p}{(2\pi\hbar)^2} \Delta F = \frac{a p_F}{\hbar} G_0 V, \quad G_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}. \quad (87)$$

Для левой границы канала мы имеем дело с аналогичным распределением

$$\Delta F \simeq \frac{a}{r} [\theta(\mu - \epsilon - eV/2) - \theta(\mu + eV/2 - \epsilon)] \theta(-v_x). \quad (88)$$

В действительности именно это распределение переносит механическую энергию в области, где благодаря упругому рассеянию она превращается в „тепло“ при производстве энтропии. Поток энергии в этой области

$$\begin{aligned} I_\epsilon &= \pi r \int v_x \frac{2d^2p}{(2\pi\hbar)^2} (\epsilon - \mu_R) \Delta F \\ &= \int_0^\infty d\epsilon (\epsilon - \mu + eV/2) q_\epsilon = \frac{1}{2} G V^2 = Q/2, \end{aligned}$$

где

$$q_\epsilon = \frac{a p_F}{\pi\hbar^2} [\theta(\mu - \epsilon + eV/2) - \theta(\mu - \epsilon - eV/2)]. \quad (89)$$

Для симметричной структуры такое же положение имеет место и в левом резервуаре. Поток энергии в правое полупространство $I_\epsilon = JV/2$, а полный поток, будучи суммой потоков влево и вправо, равен полному джоулеву теплу $Q = JV$.

Функция ΔF в двумерной области сшивается с ее величиной в канале при $r = a$. Таким образом, эти потоки энергий на расстояниях, больших длины l , от обоих концов канала превращаются в тепловые потоки.

На расстояниях, больших, чем l , но все еще меньших $v\tau_{ee}$, мы имеем дело с уравнением диффузии

$$\nabla^2(\Delta F) = 0. \quad (90)$$

Для предполагаемой цилиндрической симметрии

$$\frac{q_\epsilon}{\pi r} = -v(\epsilon) D(\epsilon) \nabla(\Delta F), \quad (91)$$

где v — плотность состояний, D — коэффициент диффузии; правая часть этого уравнения представляет плотность потока энергии для двумерного случая.

Соответственно для функции распределения электронов имеем

$$\Delta F = \frac{q_\epsilon}{vD\pi} \frac{\ln(r_{\max}/l) - \ln(r/l)}{\ln(r_{\max}/l)}. \quad (92)$$

Здесь r_{\max} — максимальное расстояние, до которого можно продолжить наше асимптотическое выражение

(мы еще вернемся к обсуждению этой величины). Энергетическая зависимость ΔF все еще похожа на имевшую место в канале, при этом, однако, возмущение размылось по поверхности Ферми (не осталось зависимости от скорости v_x) благодаря упругим столкновениям. В этой области весь поток энергии можно отождествить с „потоком тепла“. В то же время мы все еще имеем дело с сильно неравновесным распределением, с которым, вообще говоря, невозможно ассоциировать какую-либо характерную температуру.

В этой области, характеризуемой неравновесным электронным распределением, охватывающим интервал энергий eV около уровня Ферми, измерения могут оказаться нетривиальными. Простейшим прибором тут может служить болометр (приведенный в непосредственный контакт с электронной системой в исследуемой области), который измеряет поток энергии из этой области, приписывая ей некоторую измеряемую эффективную температуру. Более эффективным методом могла бы служить туннельная спектроскопия, применяющая SIN-контакты (сверхпроводник–изолятор–нормальный металл). Благодаря расходящейся плотности состояний в сверхпроводнике в окрестности края щели такой смещенный приложенным напряжением SIN-контакт позволяет восстановить действительную функцию распределения в нормальном металле (см. [30]).

На расстояниях, больших электрон-электронной длины свободного пробега, устанавливается электронная температура. Здесь можно уже пользоваться стандартным уравнением переноса тепла, что приведет к

$$Q_2 = -\kappa_e(T_e) \Delta T_e \pi r. \quad (93)$$

Для $\kappa_e = \text{const}$ мы тут же находим решение, похожее на уже полученное выражение (92). Для $\kappa_e \propto T_e^\alpha$ соответствующую зависимость можно включить в градиентный член, который принимает вид $\nabla(T_e^{1+\alpha})$; таким образом, мы снова получаем пространственное распределение, описываемое логарифмической зависимостью. Такая зависимость, очевидно, должна выйти на насыщение при значениях r , при которых становится важным уход тепла в подложку. Именно это расстояние играет роль r_{\max} в наших рассуждениях, приведенных выше.

Обсудим экспериментальные схемы, позволяющие измерять производство тепла. Во-первых, внутри канала на расстояниях, меньших l , мы имеем дело с чисто механической энергией. Хотя это неравновесное распределение можно зарегистрировать любым пробным прибором (включая гальванометр любого рода), такие измерения не имеют ничего общего с понятием тепла в общепринятом смысле. Зоне $l < r < l_{ee}$, l_{ep} соответствует неравновесное распределение энергии, почти совпадающее с таковым в канале. Хотя это распределение и не может производить работу и тем самым связано с диссипацией механической энергии, такое понятие, как выделение тепла, здесь обычно не употреблялось. Оно

традиционно применяется в области $r > l_{ee}$, где понятие температуры имеет смысл. В этой области „тепло“ (неравновесная температура) действительно может быть измерено термопарой.

В промежуточной области неравновесное электронное распределение можно изучать с помощью более изощренных методов типа примененных Потье и др. для изучения распределения электронов в диффузионном электронном канале [30]. Эта техника применяет контролируемый напряжением SIN-туннельный переход, где ток почти всецело определяется электронами с энергиями около края сверхпроводящей щели в сверхпроводнике.

15. Высокочастотная проводимость

Если к нанопроволоке приложено переменное напряжение

$$V(t) = V_0 \cos \omega t, \quad (94)$$

основные принципы расчета тепловыделения такие же, как и в предыдущих разделах. Высокочастотная проводимость нанопроволок рассматривалась в ряде работ [31–34], включая и недавние работы Козуба и авторов настоящего обзора [29,35]. В соответствии с [29], рассматривается ситуация, когда нанопроволока окружена хорошими проводниками, включая затворы; они подавляют электрические поля вне нанопроволоки. Такая геометрия опыта определяет электродинамику и непосредственно влияет на характер явлений переноса в нанопроволоке и тем самым на тепловыделение.

Чтобы не увеличивать число обозначений, ограничимся случаем, когда только один из токопроводящих каналов (канал 1) внутри нанопроволоки участвует в передаче тока. (В работе [29] исследованы различные случаи многоканального переноса; результаты данного раздела нетрудно обобщить на эти случаи.) Мы считаем, что при переходе от сужения к резервуару перенос остается одноканальным. Для этого случая можно убедиться, что два различных подхода к вычислению джоулевых потерь, а именно вычисление работы внешних источников в наноструктуре и расчет скорости роста энтропии в берегах (резервуарах), приводят к одному и тому же результату. Однако вычисление скорости возрастания плотности энтропии дает и нечто большее — пространственное распределение скорости диссипации механической энергии.

Электроны в резервуарах испытывают столкновения с примесями, фононами и друг с другом. Неравновесная часть $\Delta F_{np}(x)$ должна зависеть от координаты x из-за столкновений. Она удовлетворяет граничным условиям

$$\Delta F_{1p}|_{x=L} = \Delta F_L, \quad \Delta F_{np}|_{x=L} = 0, \quad \text{для } n \neq 1. \quad (95)$$

где ΔF_L — неравновесная часть функции распределения внутри проволоки при $x = L$, вычисленная в [29], p — x -компонента электронного квазиимпульса. Аналогичное

граничное условие должно задаваться для $F_{n,-p}$ при $x = 0$.

Каналы в резервуарах смешиваются благодаря столкновениям. Например, для столкновений с примесями имеем

$$\left[\frac{\partial \Delta F_{np}}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = n_i \sum_{n'} \int d\xi_{p'} w_{n',n}(p', p) (\Delta F_{n'p'} - \Delta F_{np}),$$

$$d\xi_{p'} \equiv \frac{dp'}{2\pi\hbar}. \quad (96)$$

Мы будем считать, что число каналов \mathcal{N} в резервуарах большое, т.е. $\mathcal{N} \gg 1$.

Второй член в уравнении (96) — это релаксационный член, имеющий вид

$$\left[\frac{\partial \Delta F_{1p}}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = -\frac{\Delta F_{1p}}{\tau_p}, \quad (97)$$

где время релаксации τ_p дается формулой

$$\frac{1}{\tau_p} = \sum_{n'} \int d\xi_{p'} w_{n'1}(p', p). \quad (98)$$

Электрон-электронное рассеяние можно рассмотреть аналогичным образом. Снова имеем два члена, для которых сохраним названия „приходный“ и „уходный“. Нам интересен „уходный“ член релаксационного типа для $n = 1$

$$\left[\frac{\partial \Delta F_{1p}}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = -\frac{\Delta F_{1p}}{\tau_{ee}}, \quad (99)$$

где время релаксации определяется выражением

$$\frac{1}{\tau_{ee}} = \sum_{n'n_1n'_1} \int d\xi_{p'} \int d\xi_{p_1} \int d\xi_{p'_1} \times w_{1n'n_1n'_1}(p, p', p_1, p'_1) F_{n'p'}^{(0)} (1 - F_{n_1p_1})^{(0)} (1 - F_{n'_1p'_1}^{(0)}). \quad (100)$$

Таким же образом можно учесть и электрон-фононные столкновения — с тем единственным отличием, что систему электронов и фононов при этом нужно рассматривать совместно.

Часто встречается ситуация, когда объемные фононы почти не затрагиваются явлением переноса электронов в нанопроволоке, так как неравновесные электроны заполняют только малую часть объема системы. Большинство фононов после столкновения с электронами покидает эту часть объема. Если в соответствии с этим считать фононы равновесными, то можно отбросить второй член в уравнении (60), и остается член, аналогичный рассмотренному выше. Это значит, что все три столкновительных механизма можно рассматривать аналогичным образом.

Члены, описываемые выражениями (97) или (99) и аналогичным выражением для электрон-фононных столкновений, обеспечивают главный вклад в производство энтропии. Электронная функция распределения,

составляющая величину порядка ΔF_L для канала 1, в других каналах не обращается в нуль только благодаря столкновениям, и каждая из этих функций пропорциональна $1/\mathcal{N}$. Это значит, что в уравнении (96) для функции ΔF_{1p} доминирует „уходный“ член. Более того, именно он и вносит вклад в производство энтропии

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t}\right]_{\text{coll}} = \sum_n \int d\xi_p \frac{(\Delta F_{np})^2}{\tau F_{np}^{(0)}(1 - F_{np}^{(0)})}. \quad (101)$$

Здесь τ — общее время релаксации для всех типов электронных столкновений. Первый член имеет порядок ΔF_L , в то время как все остальные пропорциональны $1/\mathcal{N}^2$. Поскольку число этих остальных каналов \mathcal{N} , их вклад пропорционален $1/\mathcal{N}$. Ситуация аналогична обсуждавшейся в разделе 7 после формулы (42).

Скорость производства плотности энтропии дается выражением

$$T \frac{dS(x)}{dt} = 2 \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{(\Delta F_{1p})^2}{\tau (-\partial F_1^{(0)}/\partial \epsilon)}. \quad (102)$$

Черта сверху означает усреднение по периоду осцилляций $2\pi/\omega$.

Введем функцию χ следующим образом:

$$\Delta F_{1p} \equiv \chi \left(-\frac{\partial F_1^{(0)}}{\partial \epsilon} \right). \quad (103)$$

Имеем

$$T \frac{dS}{dt} = \int_0^\infty \frac{dp}{\pi\hbar} \frac{1}{(\chi)^2} \frac{1}{\tau} \left(-\frac{\partial F^{(0)}}{\partial \epsilon} \right). \quad (104)$$

χ вне проволоки определяется граничным условием

$$\chi|_{x=L} = \chi_L, \quad (105)$$

где χ_L — известная [29] величина $\chi(x)$ внутри проволоки при $x = L$.

Вне проволоки $\chi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{l^*} \chi + \frac{\partial \chi}{\partial x} = 0, \quad (106)$$

где $\frac{1}{l^*} = \frac{1}{l} - ik$, $l = v\tau$, $k = \frac{\omega}{v}$, v — скорость Ферми, так что плотность тепловыделения как функция координаты $x \geq L$ есть

$$\begin{aligned} \frac{dQ(x)}{dt} &= 2 \int \frac{d\epsilon}{\pi\hbar} \frac{1}{l} \chi_L^2 \left(-\frac{\partial F^{(0)}}{\partial \epsilon} \right) e^{-2(x-L)/l} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} |\chi_L^2| e^{-2(x-L)/l}. \end{aligned} \quad (107)$$

В другом резервуаре зависимость $Q(x)$ определяется таким же образом с учетом, однако, того обстоятельства, что величина l может быть иной. В целом же ситуация не отличается от той, которую мы обсуждали

выше применительно к стационарному случаю, включая равенство полного тепловыделения \mathcal{Q} в резервуарах.

Воспользовавшись явным выражением для $\chi(x)$, полученным в [29],

$$\chi_L = e^{-ikL} \int_0^L dx e^{ikx} \cdot eE(x), \quad (108)$$

можно убедиться, что полное тепловыделение есть

$$T \frac{dS}{dt} = \Re G(\omega) \overline{V^2}, \quad (109)$$

как и должно быть. Поведение $\Re G(\omega)$ детально исследовано в работе [29].

Таким образом, диссипация энергии определяется работой переменного поля и одинакова в двух резервуарах. Она должна быть одинаковой независимо от того, за счет каких столкновений (с примесями, друг с другом или с фононами), диссипирует энергия. Тем не менее пространственное распределение диссипации определяется деталями электронной релаксации в резервуарах. Хотя упругие столкновения и достаточны для диссипации механической энергии, состояние с определенной температурой в резервуарах достигается за счет неупругих столкновений (электрон-электронных и электрон-фононных).

Сделаем одно замечание относительно величин, не усредненных по времени. На расстояниях $r < l$ мы имеем дело с зависящим от времени распределением (механической) электронной энергии. На расстояниях $r > l$ это распределение размывается во времени и в пространстве, и механическая энергия переходит в тепло. Соответственно поток тепла становится стационарным. Можно ожидать, однако, что в непосредственной близости от контакта с резервуаром прибор типа болометра будет детектировать также и осцилляции с частотой 2ω и пространственным масштабом $v/2\omega$.

16. Заключение

Таким образом, мы привели обзор методов расчета джоулева тепловыделения при протекании тока через квантовую наноструктуру в режиме омического переноса заряда. Мы пришли к выводу, что для расчета джоулевых потерь для этого случая (как и во всех случаях омической проводимости) достаточно решать кинетическое уравнение с точностью до первого порядка по падению потенциала V (или по электрическому полю E) вдоль наноструктуры. Выяснено, что генерация энтропии происходит на длине свободного пробега в резервуарах. Даже в случае различных длин свободного пробега в двух резервуарах полное производство джоулева тепла в них одно и то же. Оно могло бы стать различным лишь при интенсивном рассеянии электронов в пределах нанопроволоки. Вычисление производства энтропии обеспечивает альтернативный метод расчета бесстолкновительного контактного наноструктур.

Важным элементом нашей теории явилось то, что по крайней мере одна из степеней свободы в системе может рассматриваться квазиклассически.

В обзоре кратко рассмотрен и более сложный случай омического баллистического сопротивления, сопровождаемого фоннными процессами в самой нанопроволоке. Различные аспекты омической проводимости в подобной ситуации анализировались в работах [22,23,36]. В будущем было бы интересно обсудить возможность наблюдения нелинейных явлений в подобной ситуации. В классическом режиме нелинейные явления в вольт-амперных характеристиках точечных контактов между нормальными металлами наблюдались и обсуждались в пионерских работах Янсона [37]. Здесь же мы имеем в виду квантовую нанопроволоку, когда электроны проводимости испытывают рассеяние внутри наноструктуры на акустических и оптических фононах.

Методы, которые обсуждались выше, при дальнейшем их развитии могут быть применимы и к другим задачам. Примером одной из них может служить генерация тепла при туннелировании электронов.

Список литературы

- [1] В.Л. Гуревич. Письма в ЖЭТФ **63**, 1, 61 (1996); V.L. Gurevich. Phys. Rev. B **55**, 4522 (1997).
- [2] Ю.В. Шарвин. ЖЭТФ **48**, 984 (1965).
- [3] I.O. Kulik, R.I. Shekhter, A.N. Omelyanchouk. Solid. State. Commun. **23**, 301 (1977).
- [4] M. Rokni, Y. Levinson. Phys. Rev. B **52**, 1882 (1995).
- [5] R. Landauer. IBM J. Res. Develop. **1**, 233 (1957); **32**, 306 (1989).
- [6] Y. Imry. In: Directions in Condensed Matter Physics / Eds G. Grinstein, G. Mazenko. World Scientific Singapore (1986). P. 101.
- [7] M. Büttiker. Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [8] И.О. Кулик, Р.И. Шехтер, А.Г. Шкорбагов. ЖЭТФ **81**, 2126 (1981).
- [9] I.F. Itskovich, I.O. Kulik, R.I. Shekhter. Solid State Commun. **50**, 421 (1984).
- [10] И.Б. Левинсон. ЖЭТФ **95**, 2175 (1989).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Гидродинамика. Наука, М. (1986). 736 с.
- [13] Дж. Займан. Электроны и фононы. ИИЛ, М. (1962). 488 с.
- [14] В.Л. Гуревич. ФТП **42**, 8, 931 (2008).
- [15] V.L. Gurevich, V.I. Kozub. J. Phys.: Cond. Matter **23**, 1588 (2011).
- [16] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика. Наука, М. (1979). 528 с.
- [17] A.G. Aronov, Yu.M. Galperin, V.L. Gurevich, V.I. Kozub. Adv. Phys. **30**, 539 (1981).
- [18] В.Л. Гуревич. Кинетика фоннных систем. Наука, М. (1980). 400 с.
- [19] А.А. Абрикосов. Основы теории металлов. Наука, М. (1987)ю 520 с.
- [20] S.V. Gantsevich, V.L. Gurevich, R. Katilius. Phys. Cond. Matter **18**, 165 (1974).
- [21] Л.И. Глазман, Г.В. Лесовик, Д.Е. Хмельницкий, Р.И. Шехтер. Письма в ЖЭТФ **48**, 218 (1988).
- [22] V.L. Gurevich, V.B. Pevzner, K. Hess. Phys. Rev. B **51**, 5219 (1995).
- [23] V.L. Gurevich, V.B. Pevzner, K. Hess. Cond. Matter **6**, 8363 (1994).
- [24] J.P. Leburton. Phys. Rev. B **45**, 11 022 (1995).
- [25] C.W.J. Beenakker, H. van Houten. In: Solid State Physics V. 44 / Eds H. Ehrenreich, D. Turnbull. Academic Press, N.Y. (1991).
- [26] F.F. Quali, L.J. Challis, J. Cooper. Semicond. Sci. Technol. **7**, 608 (1992).
- [27] V.L. Gurevich, M.I. Muradov. J. Phys.: Cond. Matter **18**, 11 217 (2006).
- [28] A. Szafer, A.D. Stone. Phys. Rev. Lett. **62**, 300 (1989).
- [29] V.L. Gurevich, V.I. Kozub, M.I. Muradov. J. Phys. Cond. Matter **22**, 025 304 (2010).
- [30] H. Pothier, S. Gueron, N.O. Birge, D. Esstive, M.H. Devoret. Phys. Rev. Lett. **79**, 3490 (1997).
- [31] T. Christen, M. Büttiker. Phys. Rev. Lett. **77**, 143 (1996).
- [32] Ya.M. Blanter, M. Büttiker. Europhys. Lett. **42**, 535 (1998).
- [33] Ya.M. Blanter, F.W.J. Hekking, M. Büttiker. Phys. Rev. Lett. **81**, 1925 (1998).
- [34] V.A. Sablikov, B.S. Shchamkhalova. Phys. Rev. B **58**, 13 847 (1998).
- [35] V.L. Gurevich, V.I. Kozub, M.I. Muradov. J. Phys.: Cond. Matter **22**, 405 302 (2011).
- [36] V.B. Pevzner, V.L. Gurevich, E.W. Fenton. Phys. Rev. B **51**, 9465 (1995).
- [37] И.К. Янсон. ЖЭТФ **66**, 1035 (1974).