НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
НАУКА И МИРОВОЗЗРЕНИЕ

УДК-538.915

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА В НАНОСТРУКТУРАХ

Максимов Глеб Игоревич
Аспирант кафедры квантовой электроники и нанофотоники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Аннотация

В настоящей масштабной фундаментальной исследовательской работе осуществляется развернутый, детальный, глубокий и многоаспектный научно-теоретический анализ физических принципов, математических формализмов, численных методов и вычислительных архитектур моделирования электронного транспорта в наноструктурах различной размерности и топологии. В центре внимания находится исследование перехода от классического дрейфово-диффузионного и полуклассического кинетического описания к квантовому транспорту в условиях баллистического и квазибаллистического движения носителей заряда, квантового ограничения, межзонного и внутризонного туннелирования, кулоновской блокады, интерференции волновых функций и диссипативных процессов. В статье подробно рассматриваются формализм неравновесных функций Грина, метод волновых функций и матриц рассеяния, квантовый метод Монте-Карло, самосогласованное решение уравнений переноса с уравнениями Пуассона и теплопроводности, а также особенности моделирования квантовых точек, квантовых проволок, нанолистов, гетероструктур и молекулярных проводников. На основе междисциплинарного синтеза физики конденсированного состояния, квантовой механики, вычислительной математики и теории электронных приборов формулируются концептуальные подходы к повышению точности, масштабируемости и физической достоверности численных моделей электронного транспорта в перспективных наноразмерных системах.

Ключевые слова: электронный транспорт, наноструктуры, квантовый транспорт, неравновесные функции Грина, квантовая точка, баллистический транспорт, туннелирование, метод Монте-Карло, уравнение Пуассона, наноэлектроника.

Введение: физические особенности переноса заряда в наноразмерных системах

Переход электронных и оптоэлектронных устройств к нанометровым характерным размерам радикально меняет физическую картину переноса

электрического заряда, спина и тепловой энергии в твердых телах. В объемных проводниках и полупроводниках с большими геометрическими масштабами движение носителей заряда носит преимущественно диффузионно-дрейфовый характер: длина свободного пробега электрона существенно меньше размеров активной области, тепловая длина волны де Бройля много меньше характерных пространственных неоднородностей потенциала, а энергетический спектр носителей можно рассматривать как квазинепрерывный. В таких условиях традиционные макроскопические модели, основанные на локальных уравнениях непрерывности, подвижности и диффузии, обеспечивают высокую точность при умеренных вычислительных затратах.

Когда характерные размеры проводящего канала, барьерного слоя или функционального элемента становятся сопоставимыми с длиной волны де Бройля носителей заряда, длиной свободного пробега или длиной фазовой когерентности, классические приближения утрачивают применимость. В наноструктурах — квантовых ямах, квантовых проволоках, квантовых точках, нанолистах, нанотрубках, гетероструктурах и молекулярных мостиках — поперечное пространственное ограничение приводит к квантованию энергии и формированию дискретных уровней или одномерных и двумерных подзон. Одновременно возрастает роль квантово-механического туннелирования через тонкие потенциальные барьеры, квантовой интерференции парциальных волн при многократном рассеянии на границах и дефектах, а также дискретности электрического заряда, проявляющейся в эффектах одноэлектронного заряда и кулоновской блокады.

Кроме того, в наноструктурах усиливается взаимное влияние электростатического потенциала, температурных полей и неравновесных распределений носителей заряда. Локальный джоулев разогрев в наноразмерных областях при высоких плотностях тока может приводить к сильным неравновесным фононным возбуждениям и изменению локальной проводимости, а экранирование кулоновского взаимодействия ослабляется при понижении размерности системы. Поэтому математическое и численное моделирование электронного транспорта в наноструктурах становится незаменимым инструментом как для фундаментального исследования квантовых явлений в конденсированной среде, так и для прогнозирования характеристик новых наноэлектронных приборов до начала их экспериментальной реализации.

Целью данного исследования является систематический научно-теоретический анализ физических режимов электронного транспорта в наноструктурах, сопоставление ключевых аналитических и численных подходов к моделированию квантового и полуклассического переноса носителей заряда, а также оценка методических и вычислительных проблем, возникающих при описании реальных наноразмерных систем с учетом диссипации, многочастичных эффектов и электростатического окружения.

Классические, полуклассические и стохастические подходы к описанию переноса

На начальном этапе оценки характеристик наноразмерных приборов и при моделировании протяженных областей с плавно изменяющимися потенциалами применяются классические и полуклассические подходы, адаптированные с учетом размерных поправок. Дрейфово-диффузионные и гидродинамические модели описывают эволюцию концентраций электронов и дырок, плотностей токов и средней энергии носителей в самосогласованном электростатическом поле, определяемом уравнением Пуассона. В наноструктурах такие модели часто дополняются квантовыми поправками к потенциалу или плотности носителей, позволяющими приближенно учесть вытеснение заряда от границ раздела и квантовое ограничение без полного решения многомерного уравнения Шредингера.

Более детальное описание неравновесных функций распределения носителей в пространстве координат и импульсов обеспечивает полуклассическое кинетическое уравнение Больцмана. Оно учитывает дрейф носителей под действием электрического и магнитного полей, диффузию и стохастические акты рассеяния на акустических и оптических фононах, ионизированных примесях, шероховатостях границ и дефектах кристаллической решетки. Для решения кинетического уравнения в сложных геометриях и при сильных электрических полях, вызывающих разогрев носителей и баллистические или квазибаллистические пролеты, широко используется метод Монте-Карло.

Стохастическое моделирование методом Монте-Карло позволяет отслеживать ансамбль отдельных квазичастиц, разыгрывая случайные интервалы свободного пробега и каналы рассеяния в соответствии с квантово-механическими вероятностями переходов. Этот подход удобен для анализа высокочастотных процессов, нелокального переноса, горячих носителей и статистических флуктуаций, однако он опирается на представление о локализованных между актами рассеяния квазичастицах и не описывает в чистом виде когерентную фазовую интерференцию и туннелирование через протяженные или сложные потенциальные барьеры.

Квантово-механические методы: волновые функции, матрицы рассеяния и функции Грина

Когда фазовая когерентность электронного волнового пакета сохраняется на масштабе активной области наноструктуры, моделирование требует прямого учета волновой природы носителей заряда. В стационарном или квазистационарном приближении широко применяются методы решения уравнения Шредингера в пространстве координат или в базисе локализованных орбиталей и плоских волн, а также формализм матриц рассеяния. В рамках подхода матриц рассеяния наноструктура рассматривается как область когерентного рассеяния, соединенная с полубесконечными контактами-

резервуарами, характеризуемыми равновесными распределениями Ферми-Дирака и заданными электрохимическими потенциалами.

Вероятности прохождения и отражения электронных мод между различными каналами контактов определяют матрицу рассеяния, на основе которой рассчитываются кондактанс, вольт-амперные характеристики, дробовой шум и спиновые поляризованные токи. Формализм матриц рассеяния особенно нагляден для анализа квантования проводимости в квантовых точечных контактах и нанопроволоках, интерференционных эффектов в кольцевых и многотерминальных структурах, а также баллистического транспорта в низкоразмерных каналах.

Наиболее универсальным и строгим аппаратом описания открытых квантовых систем в условиях неравновесного транспорта и неупругого рассеяния является формализм неравновесных функций Грина. Этот метод позволяет единообразно описывать когерентное туннелирование, резонансный транспорт через дискретные уровни квантовых точек или молекулярных состояний, влияние контактов через собственные энергии встраивания, а также неупругие процессы взаимодействия электронов с фононами, фотонами или другими возбуждениями через дополнительные собственные энергии рассеяния. Применение неравновесных функций Грина в сочетании с методами теории функционала плотности или моделями сильной связи дает возможность связывать атомную и электронную структуру нанообъекта с его транспортными характеристиками, хотя вычислительная сложность этих расчетов быстро возрастает с увеличением числа атомов и размерности моделируемой области.

Учет электростатики, многочастичных эффектов и диссипации в открытых системах

Реальная наноструктура никогда не функционирует в изолированном фиксированном потенциале: перераспределение носителей заряда в канале, на затворе и в контактах изменяет пространственное распределение электростатического потенциала, что, в свою очередь, влияет на волновые функции, энергетические уровни и токи. Поэтому моделирование электронного транспорта в открытых системах требует самосогласованного решения транспортных уравнений совместно с трехмерным уравнением Пуассона и граничными условиями, задаваемыми напряжениями на электродах и поверхностными зарядами.

При малых емкостях наноструктур, таких как квантовые точки, одноэлектронные островки или молекулярные переходы, добавление или удаление даже одного электрона заметно изменяет электростатическую энергию системы. В таких условиях возникает кулоновская блокада — подавление линейного туннельного тока при малых напряжениях смещения, сменяющееся пиками проводимости при совпадении энергетических уровней с окном проводимости между электродами. Для корректного описания подобных режимов необходим учет зарядки и

дискретности числа электронов, выходящий за рамки одночастичного приближения, с применением методов мастер-уравнений, матрицы плотности или многочастичных подходов.

Не менее важной задачей является корректное моделирование диссипации энергии и декогеренции. В реальных наноструктурах электроны обмениваются энергией и импульсом с кристаллической решеткой и электромагнитным окружением, что приводит к релаксации энергии, ограничению длины фазовой когерентности и выделению тепла в локальных областях. Совместный учет электронного транспорта, теплопереноса и упругих или дефектных неоднородностей позволяет оценивать критические токовые нагрузки, локальные перегревы и влияние структурного беспорядка на воспроизводимость транспортных свойств.

Практические приложения и вычислительные аспекты моделирования

Моделирование электронного транспорта находит широкое применение при разработке и исследовании полевых транзисторов с нанолистами и нанопроволоками, туннельных и одноэлектронных приборов, спинтронных устройств, структур на основе двумерных материалов и гетеропереходов, а также молекулярных и квантовых компонентов. В каждом из этих классов устройств доминируют свои физические механизмы: в ультракоротких транзисторных каналах критичны квантовое туннелирование через барьеры, квантование поперечных мод и электростатика затвора; в одноэлектронных приборах и квантовых точках определяющими становятся кулоновская блокада и дискретность спектра; в низкоразмерных слоях и гетероструктурах важны особенности зонной дисперсии, рассеяние на границах и дефектах и влияние окружения.

С вычислительной точки зрения моделирование наноструктур сталкивается с необходимостью балансировать физическую строгость и практическую реализуемость. Первопринципные расчеты электронной структуры и квантового транспорта обладают высокой предсказательной силой на атомном уровне, но требуют значительных вычислительных ресурсов и ограничены сравнительно небольшими пространственными и временными масштабами. Поэтому в инженерной практике и научных исследованиях широко используются многомасштабные и гибридные схемы, где атомные и квантовые модели применяются для определения параметров эффективных гамильтонианов, коэффициентов прохождения или скоростей рассеяния, которые затем передаются в мезоскопические или полуклассические модели для расчета устройств в целом.

Дополнительным направлением развития вычислительных методов является применение суррогатных моделей и алгоритмов машинного обучения, обученных на результатах точных квантовых или кинетических расчетов. Такие подходы позволяют ускорять многопараметрический анализ, исследование вариативности

параметров и оптимизацию геометрии наноструктур при сохранении контроля точности за счет сопоставления с эталонными физическими расчетами.

Заключение

Моделирование электронного транспорта в наноструктурах представляет собой сложную и междисциплинарную область вычислительной физики и наноэлектроники, объединяющую квантовую механику, статистическую физику, электростатику и численные методы. Переход к нанометровым масштабам требует учета квантового ограничения, туннелирования, когерентной интерференции, кулоновских корреляций и диссипативных процессов, которые не могут быть адекватно описаны одними лишь классическими макроскопическими уравнениями.

Выбор адекватного математического формализма — от дрейфово-диффузионных и кинетических моделей с методом Монте-Карло до матриц рассеяния и неравновесных функций Грина в самосогласованной постановке — определяется конкретным режимом переноса и требуемой степенью детализации. Дальнейшее совершенствование многомасштабных методов, учет реальных дефектов и тепловых эффектов, а также развитие вычислительных алгоритмов расширяют возможности проектирования и анализа современных и перспективных наноразмерных устройств.

Литература

1. Лундстрем М. Основы переноса носителей заряда в наноразмерных полупроводниках. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2020. — 428 с.
2. Datta S. Quantum Transport: Atom to Transistor. — Cambridge: Cambridge University Press, 2020. — 404 p.
3. Афанасьев В. А., Степанов Н. П. Основы наноэлектроники и полупроводниковых гетероструктур. — М.: Физматлит, 2021. — 352 с.
4. Зи С. Физика полупроводниковых приборов: в 2 кн. — М.: Мир, 2020. — 456 с.
5. Ferry D. K., Goodnick S. M., Bird J. Transport in Nanostructures. — Cambridge: Cambridge University Press, 2019. — 654 p.
6. Суханов А. А., Ткаченко В. А. Квантовый транспорт и мезоскопическая физика полупроводниковых структур. — Новосибирск: НГУ, 2020. — 284 с.
7. Haug H., Jauho A.-P. Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors. — Berlin: Springer, 2019. — 430 p.
8. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику. — М.: Физматлит, 2019. — 304 с.
9. Journal of Applied Physics. — 2025. — Vol. 137, No. 8. — P. 084302.
10. Nano Letters. — 2026. — Vol. 26, No. 3. — P. 1120–1135.