
ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 73.20.Fz, 75.76.+j, 85.35.-p, 85.35.Ds

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: КВАНТОВА ІНТЕРФЕРЕНЦІЯ І ДЕФАЗУВАННЯ В МЕТОДІ НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*

* Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є.Лашкарьова НАН України

пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, *E-mail: maksym_strikha@hotmail.com*

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: КВАНТОВА ІНТЕРФЕРЕНЦІЯ І ДЕФАЗУВАННЯ В МЕТОДІ НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У черговій із серії оглядово-навчальних статей у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядаються моделі пружного й спінового дефазування, врахування некогерентних процесів з використанням зонду Бюттекера, 1D провідник з двома й більше розсіювальними центрами, явище квантової інтерференції, режими сильної і слабкої локалізації, стрибок потенціалу на дефектах, квантові осциляції в методі нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) без урахування дефазування та з ним, ефекти деструктивної та конструктивної інтерференції, чотирикомпонентний опис спінового транспорту з урахуванням дефазування, формалізм псевдоспіну.

Ключові слова: квантова інтерференція, дефазування, метод НРФГ, когерентність, сильна локалізація, слабка локалізація, фазова релаксація, імпульсна релаксація, деструктивна інтерференція, конструктивна інтерференція, спіновий транспорт, спінова когерентність, псевдоспін

LESSONS OF NANOELECTRONICS: QUANTUM INTERFERENCE AND DEPHASING IN NON-EQUILLIBRIUM GREEN'S FUNCTIONS METHOD

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. Within the following in the series of the review and tutorial articles next topics are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics: elastic and spin dephasing modeling, account for non-coherent processes using Buttiker probe, 1D conductor with two and more scatterers, quantum interference, strong and weak localization, potential drop across scatterers, quantum oscillations in non-equilibrium Green's functions (NEGF) method without dephasing and with it, destructive and constructive interference effects, four-component description of spin transport with account for dephasing, and pseudo-spin formalism.

Keywords: quantum interference, dephasing, NEGF method, coherence, strong localization, weak localization, phase relaxation, impulse relaxation, destructive interference, constructive interference, spin transport, spin coherence, pseudospin

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ И ДЕФАЗИРОВКА В МЕТОДЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Ю. А. Кругляк, М. В. Стріха

Аннотация. В очередной из серии обзорно-учебных статей в рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники рассматриваются модели упругой дефазировки и спиновой дефазировки, учет некогерентных процессов с использованием зонда Бюттекера, 1D проводник с двумя и более рассеивающими центрами, явление квантовой интерференции, режимы сильной и слабой локализации, скачок потенциала на дефектах, квантовые осцилляции в методе неравновесных функций Грина (НРФГ) без учета дефазировки и с ее учетом, эффекты деструктивной и конструктивной интерференции, четырехкомпонентное описание спинового транспорта с учетом дефазировки, формализм псевдоспина.

Ключевые слова: квантовая интерференция, дефазировка, метод НРФГ, когерентность, сильная локализация, слабая локализация, фазовая релаксация, импульсная релаксация, деструктивная интерференция, конструктивная интерференция, транспорт спинов, спиновая когерентность, псевдоспин

Вступ. Цією статтею автори продовжують серію навчально-оглядових статей, які друкуються в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» починаючи з №4 за 2012 рік. Нагадаємо, що раніше у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної нанoeлектроніки ми розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№ 4, 2012), термоелектричні явища (№ 1, 2013), основи спінтроніки (№ 2, 2013) та застосування методу нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3, 4, 2013), класич-

ний та квантовий ефекти Холла (№ 1, 2014), спіновий ефект Холла (№ 2, 2014). У цій статті ми розглянемо моделі пружного й спинового дефазування, врахування некогерентних процесів з використанням зонду Бюттекера, 1D провідник з двома й більше розсіювальними центрами, явище квантової інтерференції, режими сильної і слабкої локалізації, стрибок потенціалу на дефектах, квантові осциляції в методі НРФГ без урахування дефазування та з ним, ефекти деструктивної та конструктивної інтерференції, чотирикомпонентний опис спі-

нового транспорту з урахуванням дефазування, формалізм псевдоспіну.

Наша стаття (як і попередні статті цієї серії) розрахована насамперед на викладачів, аспірантів та студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціальностях фізичного й інженерного профілю, й має на меті популяризацію сучасної концепції викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта, сформульованої в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і значною мірою альтернативної традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих 3D провідниках.

Нагадаємо: в попередніх статтях ми розглядали тільки фізичні контакти $[\Sigma_{1,2}]$ в квантовій моделі когерентного транспорту [1], в якій електрони рухаються когерентно від витоку до стоку (з функціями заповнення $f_{1,2}$) по каналу, описуваному статичним гамільтоніаном $[H]$ за відсутності взаємодії електрона з оточенням при його русі по каналу, описуваному власною енергією $[\Sigma_0]$ (рис. 1).

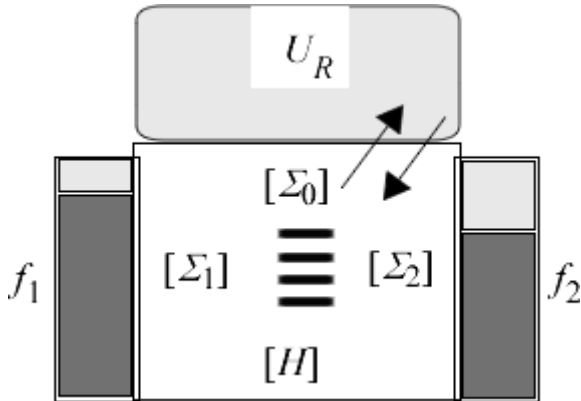


Рис. 1. Модель квантового транспорту з простим пружним дефазуванням.

Що фізично являє собою взаємодія $[\Sigma_0]$? З погляду електрона, що рухається у провіднику, середовище не є незмінним, описуваним статичним гамільтоніаном $[H]$, а навпаки, видаватиметься цьому електрону вельми турбулентним з випадково змінним потенціалом U_R , який флюктує в пікосекундній шкалі часу. Навіть при достатньо низьких температурах із замороженими фононними модами електрон рухається в полі флюктуційного потенціалу,

створюваного всіма іншими електронами (наближення самоузгодженого поля). Навіть у цьому випадку мають місце фазові флюктуації (дефазування), що призводять до флюктуації струму. Цей ефект усереднювання потрібно адекватно моделювати, якщо ми хочемо правильно інтерпретувати експериментальні дані.

Метод нерівноважних функцій Гріна був спочатку розроблений саме для опису непружних процесів квантового транспорту в масивних провідниках. Ми ж поки що сформулювали його щодо пружних резисторів [1]. Далі ми розглянемо порівняно просту модель пружного дефазування.

Що являє собою процес дефазування? Або, іншими словами, чим когерентний процес відрізняється від некогерентного? Когерентний транспорт – це такий процес руху електрона у провіднику, при якому стан решети частинок у каналі провідності не змінюється. Просте відбиття електрона від пружного дефекту назад у канал провідності – це процес когерентний. Якщо ж електрон передав частину своєї енергії, скажімо, атому ґратки і цей атом почав коливатися з більшою амплітудою, то такий процес некогерентний. Сказане начебто означає, що некогерентний процес також повинен бути непружним, таким, що відбувається з обміном енергії. Проте це не обов'язково так, і класичним прикладом може служити дефазування спіну.

Нехай ми маємо магнітну домішку з двома станами з однаковою енергією, але з протилежними проекціями спіну (виродження). І нехай електрон, взаємодіючи з домішкою, міняє напрям спіну на протилежний, без зміни своєї енергії. Такий процес – пружний. І, однак, це – некогерентний процес, оскільки стан електрона змінився.

Що робить такий процес некогерентним? Чи не можемо ми розглядати електрон і спінову домішку як єдину складну систему, стан якої не змінився і тому процес можна вважати когерентним? Насправді такі процеси некогерентними роблять зовнішні сили, які зумовлюють повернення спінів домішки в неполяризований стан (50% «вгору» і 50% «вниз»). Такий процес «стирання інформації» і є суть

дефазування спіну. В загальному випадку під дефазуванням розуміють такий процес, при якому квантовомеханічна інтерференція руйнується.

Пружне дефазування. Процеси пружного дефазування в методі НРФГ описуються матрицями власної енергії

$$[\Sigma_0] = D \times [G^R], \quad (1a)$$

$$[\Sigma_0^{in}] = D \times [G^n], \quad (1б)$$

$$[\Gamma_0] = D \times [A], \quad (1в)$$

де символ “ \times ” означає поелементне множення матриць, а елементи матриці D описують кореляцію між випадковими значеннями потенціалу у вузлах i та j провідника:

$$D_{ij} = \langle U_{Ri} U_{Rj} \rangle. \quad (2)$$

Являють інтерес дві граничні моделі кореляційних зв'язків. У першій з них випадковий потенціал повністю скорельований у всіх вузлах по всій довжині каналу провідності, має одне і те ж значення для будь-якого вузла i , так що всі елементи матриці $[D]$ однакові і рівні D_0 :

$$\text{(Модель А)} \quad D_{ij} = D_0. \quad (3)$$

У другій моделі кореляція між вузлами провідника відсутня, тому матриця D скалярна:

$$\text{(Модель В)} \quad D_{ij} = D_0 \cdot \delta_{ij}, \quad (4)$$

де δ_{ij} – дельта-символ Кронекера. Реальні процеси описуються зазвичай проміжними випадками.

Походження формул (1) можна зрозуміти, якщо звернутися до початкового при побудові методу НРФГ в матричній формі рівняння Шредінгера (рівняння (4) в [1])

$$E\{\psi\} = [H + \Sigma_1 + \Sigma_2]\{\psi\} + \{S_1\}, \quad (5)$$

де $[\Sigma_1]$ і $[\Sigma_2]$ – контактні матриці власної енергії, а матриця-стовпець $\{s_j\}$ описує притік електронів у провідник з лівого контакту 1 (рис. 1) [1].

Випадковий потенціал вводять у рівняння Шредінгера за аналогією з матрицями власної енергії

$$E\{\psi\} = [H + \Sigma_1 + \Sigma_2]\{\psi\} + U_R\{\psi\} + \{S_1\} \quad (6)$$

з відповідним членом, що описує притік,

$$\Sigma_0^{in} A = 2\pi U_R U_R^* \{\psi\} \{\psi\}^+ = D_0 G^n, \quad (7)$$

виписаним вище для моделі А. Трохи довші викладки ведуть до аналогічного виразу для моделі В. У результаті маємо формулу (1б).

Для обґрунтування формули (1в) відзначимо, що ця формула разом з (1б) повинна забезпечувати нульовий струм на «терміналі 0», що впливає з четвертого рівняння у формалізмі НРФГ (рівняння (16) в [1]), а саме:

$$I_0 = \frac{q}{h} \text{Tr}[\Sigma_0^{in} A - \Gamma_0 G^n] = D_0 \frac{q}{h} \text{Tr}[G^n \Gamma_0 - \Gamma_0 G^n] = 0, \quad (8)$$

що є обов'язковою умовою, оскільки «термінал 0» не є фізичним контактом, де електрони реально можуть переходити в провідник або покидати його.

Справді, свого часу Бюттекер запропонував для врахування некогерентних процесів вводити фіктивний контакт (зонд Бюттекера), електрохімічний потенціал якого добирається так, щоб гарантувати на цьому контакті нульовий струм [2, 3]. У формалізмі НРФГ це веде до твердження, що

$$\Sigma_0^{in} = \Gamma_0 f_p, \quad (9)$$

де число f_p добирається таким, щоб забезпечити нульовий струм на фіктивному терміналі. Це еквівалентно міркуванням, наведеним вище, якщо зв'язок Γ_0 “терміналу” з провідником вибрати пропорційним спектральній функції $[A]$, як цього вимагає (1в).

Звернімо увагу на ту обставину, що рівняння (1) припускають самоузгоджену процедуру обчислень, оскільки Σ , Σ^n залежать від G^R та G^n , які, у свою чергу, згідно до рівнянь (6) і (13) з [1], залежать від Σ , Σ^n ; а також на те, що модель А (3) передбачає обчислення повної ґрінівської функції, що для достатньо ве-

ликих пристроїв веде до появи в розрахунках матриць вельми великого порядку, тоді як модель В (4) не вимагає таких значних обчислювальних ресурсів, оскільки обчисленню підлягають тільки діагональні елементи грінівських матриць.

Істотна концептуальна відмінність між моделями А і В полягає в тому, що модель А руйнує фазування, але не зачіпає імпульсів, тоді як модель В змінює так само й імпульси [4]. Процес дефазування можна уявити собі як «витягання» електрона з провідника в стані $[G^n]$ і подальшу «інжекцію» його назад у провідник в стані $D \times G^n$. Модель А припускає множення грінівської матриці $[G^n]$ на константу, так що електрон «реінжектується» в той самий стан, з якого він був «витягнутий», без зміни імпульсу, тоді як у моделі В відкидаються недіагональні елементи матриці D і при «реінжектуванні» електрон змінює траєкторію руху на якусь іншу в порівнянні з тією, з якої він був «витягнутий». Вся ця ситуація стане яснішою нижче при розгляді конкретних прикладів.

Замість врахування пружного дефазування через матрицю власної енергії $[\Sigma_0]$ можна було б включити в гамільтоніан випадковий потенціал U_R з подальшим усереднюванням його за можливими випадковими реалізаціями U_R . Обидва підходи хоча й не зовсім еквівалентні, проте, у ряді випадків приводять до однакових результатів, в чому ми також переконуємося нижче на конкретних прикладах.

Повноти ради, відзначмо, що в найзагальнішому випадку D є тензором 4-го рангу, що пов'язує одну з однією пари матриць, а саме:

$$[\Sigma_0]_{ij} = \sum_{k,l} D_{ijkl} [G^R]_{kl}, \quad (10a)$$

$$[\Sigma_0^{in}]_{ij} = \sum_{k,l} D_{ijkl} [G^n]_{kl}, \quad (10б)$$

а пружне дефазування (1) реалізується через ненульові D_{ijkl} при $i=k$ и $j=l$.

1D провідник з двома і більше розсіювальними центрами. Раніше в [1] ми детально розглянули 1D провідник з одним розсіювальним центром, що характеризується ймо-

вірністю проходження T . В [5] було показано, що опір такого провідника R_1 може бути розбитий на дві частини – опір розсіювального центру і межовий опір (відповідно, рівняння (34) і (35) в [5]):

$$R_1 = \frac{h}{q^2 M} \left(\frac{1-T}{T} + 1 \right), \quad (11)$$

де M – число мод провідності (походження й фізичну суть цього поняття докладно обговорено нами в [7]).

Спробуємо відповісти на питання: який опір R_2 провідника з двома однаковими розсіювальними центрами, кожний з ймовірністю проходження T ? Такий провідник можна розглядати як послідовне з'єднання двох провідників, кожний з одним і тим самим розсіювальним центром (рис. 2).

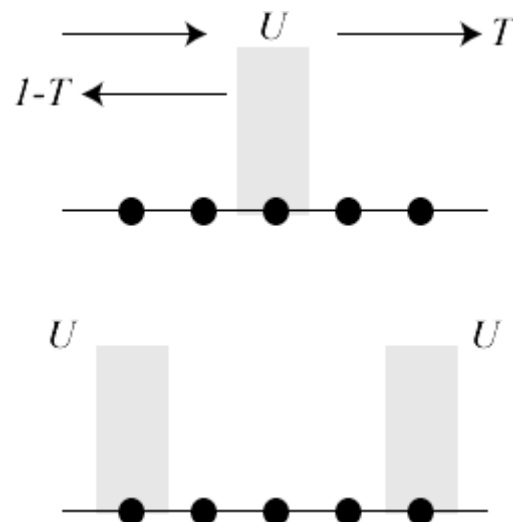


Рис. 2. Провідник з одним і з двома однаковими розсіювальними центрами.

Можна чекати, що в провіднику з двома центрами внесок від них подвоїться:

$$R_2 = \frac{h}{q^2 M} \left(2 \frac{1-T}{T} + 1 \right) = \frac{h}{q^2 M} \frac{2-T}{T}, \quad (12)$$

отже

$$R_2 = R_1 (2 - T). \quad (13)$$

Якщо ймовірність проходження розсіювальних центрів T близька до одиниці, то має місце балістична границя провідності з

$R_2 \approx R_1$. Отже, два однакові провідники, кожний з одним і тим самим розсіювальним центром і сполучені послідовно, проводять себе так само, як один з них, оскільки весь опір є межовим.

Якщо $T \ll 1$, має місце омічна границя з $R_2 \approx 2R_1$: два такі провідники, сполучені послідовно, мають подвійний опір одного провідника, оскільки весь опір був пов'язаний з каналом провідності.

Але чи може R_2 бути меншим ніж R_1 ? Якби електрони підкорялися законам класичної механіки, то, звичайно, ні. Збільшення кількості перешкод на автомобільному шосе не може збільшити граничний трафік на цьому шосе. А ось на квантовому «шосе» таке цілком можливо завдяки квантовій (хвильовий) інтерференції.

Для розв'язання задач такого типу скористаємося моделлю однорідного 1D провідника в гюккелівському наближенні [1]. Пригадаємо поведінку коефіцієнта проходження в провіднику з одним розсіювальним центром $U = 2t_0$ (рис. 3) і порівняємо його з таким самим провідником, але з двома однаковими розсіювальними центрами (рис. 4).

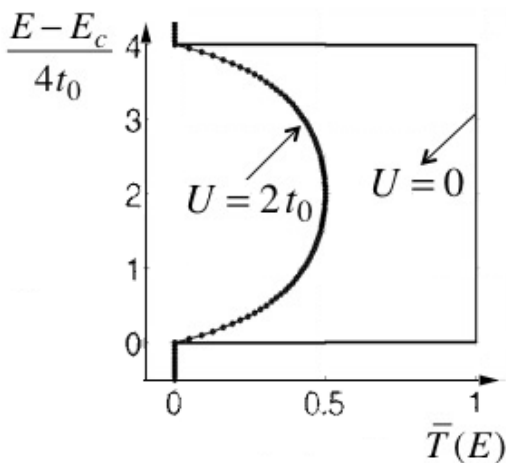


Рис. 3. Коефіцієнт проходження в однорідному 1D провіднику з одним точковим розсіювальним центром ($U = 2t_0$) і без нього ($U = 0$) [1].

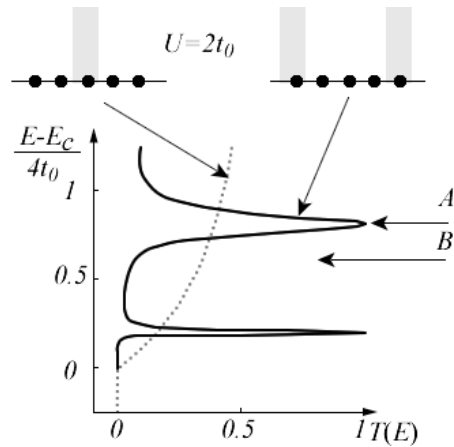


Рис. 4. Коефіцієнт проходження в одномодовому 1D провіднику з одним і з двома однаковими розсіювальними центрами з $U = 2t_0$.

Якщо електрохімічний потенціал в пристрої з провідником з двома розсіювальними центрами виявиться на рівні B (рис. 4), то коефіцієнт проходження буде меншим, ніж у провіднику з одним центром; іншими словами, опір R_2 виявиться більшим за R_1 . Якщо ж станеться так, що хімпотенціал виявиться на рівні A (рис. 4), то R_2 виявиться меншим за R_1 .

Розгляньмо провідник з випадково розподіленими розсіювальними центрами. Квантовий розрахунок методом НРФГ для шести таких центрів [6] показує, що провідність вельми низька (практично омічна поведінка), але при цьому мають місце «сплески» провідності, аж до значень, близьких до одиниці (рис. 5).

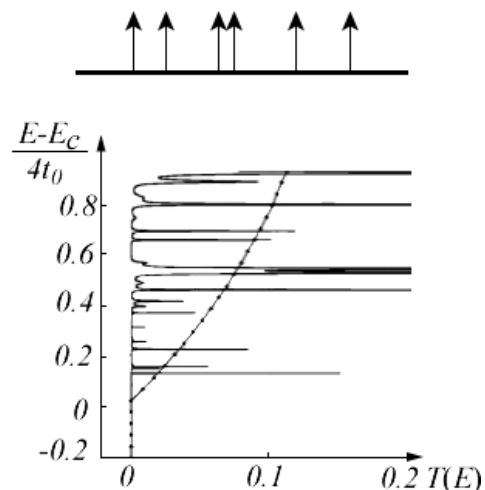


Рис. 5. Коефіцієнт проходження в одномодовому 1D провіднику з шістьма однаковими випадково розташованими розсіювальними центрами з $U = 2t_0$ [6]. Крапками показаний результат напівкласичного розрахунку (рис. 3) в перерахунку на шість центрів.

На рис.5 крапками показаний також напівкласичний результат, який був отриманий спочатку для одиночного розсіювального центру (рис. 3), а потім внесок від нього був збільшений у шість разів. Для опору такого провідника маємо

$$R_6 = \frac{h}{q^2 M} \left(6 \frac{1-T}{T} + 1 \right) = \frac{h}{q^2 M} \frac{6-5T}{T}, \quad (14)$$

де перший доданок у дужках обумовлений шістьма розсіювальними центрами, а другий доданок – межовим опором.

Квантові розрахунки показують аналогічну поведінку і в мультимодових провідниках, що йно класичний коефіцієнт проходження $M\lambda/L$ виявляється меншим від одиниці, де λ – середня довжина вільного пробігу, а L – довжина провідника. Про такі провідники говорять, що вони перебувають у режимі сильної локалізації. Цікаво, що навіть коли $M\lambda/L$ перевищує одиницю, то квант провідності $h/q^2 M$ лише не набагато менший від класичного значення; про такі провідники говорять, що вони перебувають у режимі слабкої локалізації.

Подібні ефекти локалізації зазвичай експериментально спостерігаються тільки при низьких температурах. При кімнатній температурі украй рідко можна зустрітися з відхиленням від закону Ома. Розгляньмо, наприклад, мідний дріт з поперечним перерізом 10 нм x 10 нм, який містить приблизно 1000 атомів, і отже число мод $M \approx 1000$. Нехай середній вільний пробіг $\lambda \approx 40$ нм. Тоді такий дріт завдовжки не більше ніж $M\lambda \approx 40$ мкм повинен виявляти неомічну поведінку, що, однак, не підтверджується експериментальними спостереженнями. Причина цього криється в тому, що ефекти локалізації спричинені квантовою інтерференцією і спостерігаються тільки у тому випадку, коли має місце фазова когерентність по всій довжині провідника. Натомість мідний дріт завдовжки $L \approx 40$ мкм фазово некогерентний, тим більше при кімнатній температурі. Концептуально реальний провідник можна розглядати як послідовність окремих когерентних провідників, кожний завдовжки в довжину фазової когерентності L_{ph} . Отже, те, бачимо ми або не бачимо ефекти локалізації,

залежить не від співвідношення $M\lambda/L$, а від $M\lambda/L_{ph}$.

Основний висновок полягає в тому, що для інтерпретації реальних експериментів при кімнатній температурі у формалізмі НРФГ, як правило, необхідно тією або іншою мірою враховувати процеси дефазування, як це було описано вище. Поки ми так чи інакше не врахуємо дефазування, в квантових моделях електронного транспорту виявляться ефекти інтерференції, що ведуть до сильної локалізації або до резонансного тунелювання. На підтвердження цього розгляньмо зміну потенціалу уздовж каналу провідника з дефектами методом НРФГ [6].

Стрибок потенціалу на дефектах. Профіль потенціалу одномодового провідника з одним дефектом із прозорістю T розглядався в [1, 5]. Провідність такого провідника визначається формулою (34) з [5]. Тоді опір цього провідника, нормований на квант опору, становить

$$R_{Norm} = (1 - T)/T. \quad (15)$$

Напівкласичний вираз для коефіцієнта проходження T дається формулою (113) з [1]. Тоді нормований опір на дефекті дорівнює

$$R_{Norm} = (Ua/\hbar v)^2, \quad (16)$$

де v - швидкість електрона, a - стала ґратки.

Напівкласичний профіль потенціалу зі стрибками на межових опорах h/q^2 , згідно (36) з [5], і на опорі на дефекті (16) зображений на рис. 6 разом із результатом, отриманим методом НРФГ без урахування дефазування.

Техніка обчислення функції заселеності f у методі НРФГ через функцію Гріна і спектральну функцію, і далі потенціалу описана в [5, ф-ли (87) і (88)].

Заселеність у розрахунку методом НРФГ внаслідок квантової інтерференції осцилює настільки сильно, що стає складно побачити стрибок потенціалу на дефекті (рис. 6).

Експериментально профіль потенціалу зазвичай вимірюють скануючим тунельним мікроскопом (рис. 14 в [5]). При кімнатній температурі квантові осциляції як правило не видні через процеси дефазування, що неминуче

мають місце за таких умов. Наведений вище приклад ще раз показує, що при моделюванні та інтерпретації реальних транспортних вимірювань при кімнатній температурі необхідно тією або іншою мірою враховувати дефазування ефектів квантової інтерференції.

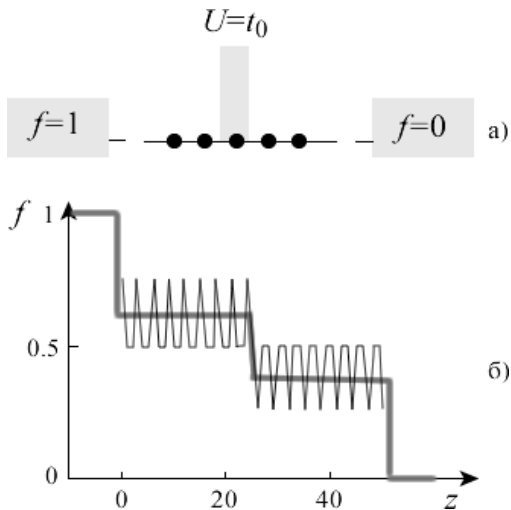


Рис. 6. (а) Схема одномодового провідника з дефектом $U = t_0$; (б) Квантові осциляції в методі НРФГ без дефазування ($D_0 = 0$) в режимі когерентності при $E = t_0$ на тлі напівкласичних стрибків потенціалу.

Справді, якщо для тієї ж моделі провідника (рис. 6а) при розрахунку методом НРФГ включити дефазування з урахуванням тільки фазової релаксації (модель А, рівняння (3)), то отримаємо профіль потенціалу з ясно вираженим стрибком на дефекті відповідно до напівкласичної моделі (рис. 7).

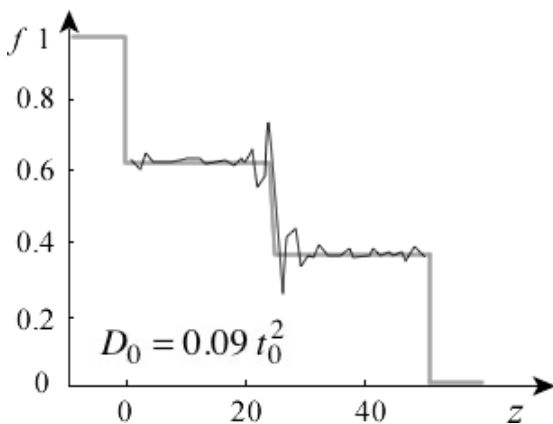


Рис. 7. Квантові осциляції в методі НРФГ при дефазуванні з урахуванням тільки фазової релаксації (модель А) при $E = t_0$ не вуалюють стрибка потенціалу на дефекті.

Цікаво, що при врахуванні також імпульсної релаксації (модель В, рівняння (4)) потенціал на всьому провіднику падає практично лінійно (рис. 8), як цього й слід очікувати для рівномірно розподілених пружних резисторів по всій довжині провідника (див. Додаток 1 у [7]).

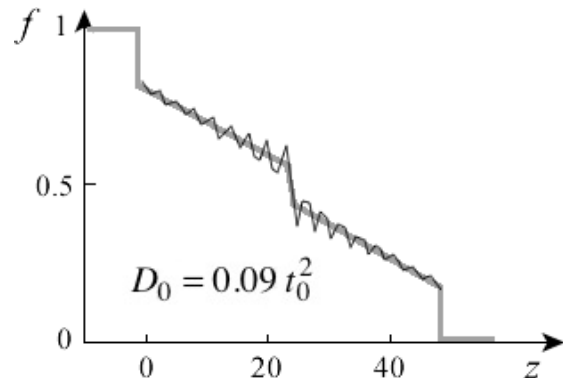


Рис. 8. Врахування в методі НРФГ як фазової, так і імпульсної релаксації (модель В) практично нівелює стрибок потенціалу на дефекті, перетворюючи провідник з дефектом на послідовність пружних резисторів.

Опір у перерахунку на один вузол такого однорідного 1D провідника можна отримати з (16) шляхом заміни U^2 на D_0 :

$$R_{Norm} = D_0 (a/\hbar v)^2 (L/a), \quad (17)$$

де L/a дає число вузлів у провіднику.

Ще одним корисним прикладом може служити вже розглянутий вище провідник з двома однаковими розсіювальними центрами (рис. 4). Значення електрохімічного потенціалу на рівнях А і В відповідають конструктивній ($R_2 < R_1$) і деструктивній ($R_2 > R_1$) квантовій інтерференції. Відмінність між ними яскраво виявляється при розрахунку такого провідника методом НРФГ у режимі когерентного транспорту без дефазування з $D_0 = 0$ (рис. 9).

На рівні В профіль потенціалу виглядає так, як ніби ми маємо справу з великим стрибком потенціалу на дефекті, та ще з накладеними на нього двома сплесками (деструктивна інтерференція). Невелике збільшення електрохімічного потенціалу до $E = 0.81t_0$ (режим А) кардинально змінює профіль потенціалу. Те-

пер він виглядає так, як можна було б очікувати для балістичного провідника, зі стрибками потенціалу лише на межах з контактами (конструктивна інтерференція).

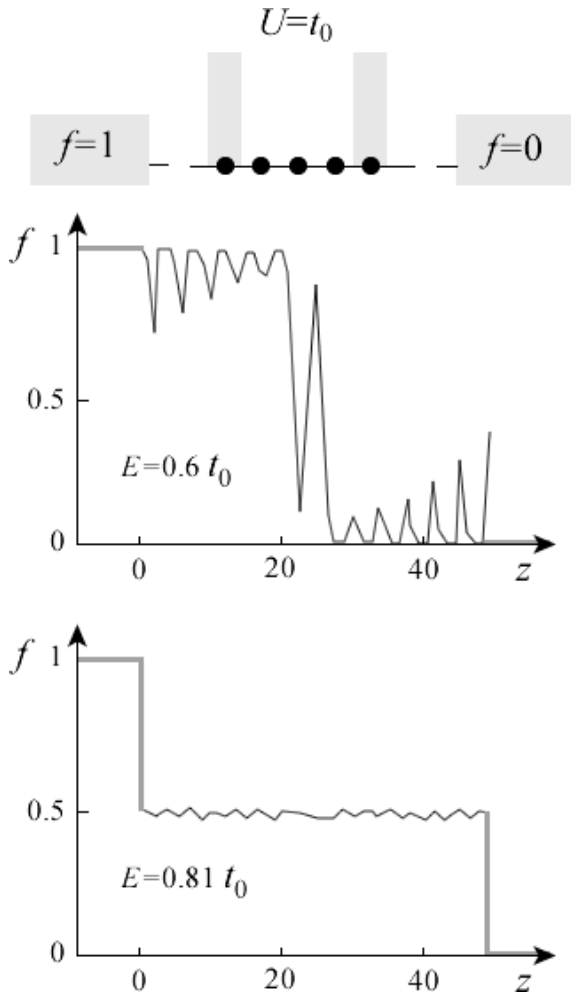


Рис. 9. Квантові осциляції при розрахунку провідника з двома однаковими розсіювальними центрами з $U = t_0$ методом НРФГ без дефазування ($D_0 = 0$) в режимі когерентності при $E = 0.6t_0$ свідчать про деструктивну інтерференцію (режим В з $R_2 > R_1$), а при $E = 0.81t_0$ – про конструктивну інтерференцію (режим А з $R_2 < R_1$).

На поставлене вище питання: чи «може R_2 бути менше ніж R_1 ?» відповідь однозначна – «Так, може». Два дефекти можуть зумовити менший опір, ніж один такий дефект. І цей «дивний результат» спричинений квантовою інтерференцією.

Варто лише в обох випадках А і В (рис. 9) врахувати дефазування у формі фазової релаксації з достатнім відмінним від нуля значенням D_0 , як профіль потенціалу відразу стає

схожим на напівкласичний профіль резистора (рис. 10).

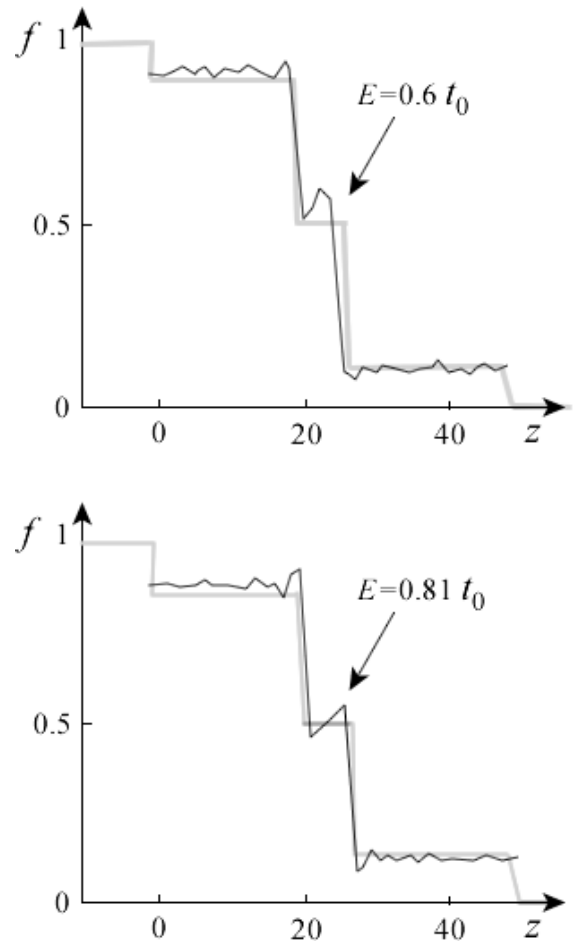


Рис. 10. Квантові осциляції в методі НРФГ при дефазуванні з урахуванням тільки фазової релаксації ($D_0 = 0.09 t_0^2$) при двох значеннях електростатичного потенціалу $0.6t_0$ та $0.81t_0$ на фоні напівкласичних стрибків потенціалу.

В обчислювальному аспекті звернімо увагу на те, що врахування дефазування в методі НРФГ алгоритмічно не викликає утруднень, проте, якщо в когерентному наближенні ($D_0 = 0$) або з урахуванням лише імпульсної релаксації (модель В, рівняння (4)) достатньо обчислювати лише діагональні елементи грінівської функції, то у випадку врахування лише фазової релаксації необхідно обчислювати повну функцію Гріна, що істотно збільшує час обчислень і вимагає набагато більших обчислювальних ресурсів.

Резонно також поставити запитання: коли замість врахування дефазування через матри-

цю власної енергії Σ_0 потенціал U_R включити в гамільтоніан H , а потім усереднити його по всіх можливих реалізаціях, чи приведе це до тих самих результатів?

Для коротких резисторів, таких, як на рис. 4, відповідь буде швидше за все позитивною, а ось для довгих резисторів, як на рис. 5, – негативною. У випадку провідника в режимі сильної локалізації (рис. 5) важко уявити собі, яким чином усереднювання когерентного квантового стану по багатьох можливих конфігураціях призведе до напівкласичного результату.

Метод НРФГ з дефазуванням не зводиться просто до усереднювання по багатьох конфігураціях, а включає також усереднювання по фрагментах окремих конфігурацій, внаслідок чого й досягається напівкласичний опис провідності, що так добре зарекомендував себе при інтерпретації реальних вимірювань при кімнатній температурі.

Спіновий транспорт у чотирьохкомпонентному форматі. Повернімося до чотирьохкомпонентного опису спінового транспорту [8], але тепер уже з урахуванням дефазування. Раніше ми наводили приклад грінівської матриці для лінійного провідника з трьох атомів:

$$\begin{array}{cccccc} & 1up & 1dn & 2up & 2dn & 3up & 3dn \\ 1up & & & & & & \\ 1dn & [N_1, \bar{S}_1] & & & & & \\ 2up & & & & & & \\ 2dn & & [N_2, \bar{S}_2] & & & & \\ 3up & & & & & & \\ 3dn & & & & & [N_3, \bar{S}_3] & \end{array}, \quad (18)$$

в якій діагональні блоки (2 x 2) містять чотири дійсні числа (N, \bar{S}) , що описують електронну й спінову густину, а недіагональні блоки, які зв'язують сусідні й більш віддалені один від одного атоми, були опущені; саме недіагональні блоки породжують ефекти квантової інтерференції. В зв'язку з цим відзначмо, що часи спінової релаксації мають порядок наносекунд, а часи фазової релаксації на понад три порядки менші. Коли це так, то важливо зберегти інформацію, що зберігається в діаго-

нальних блоках, навіть якщо не враховуються відомості з недіагональних блоків.

У формалізмі НРФГ потрібно підібрати відповідну матрицю D в рівнянні (16):

$$[\Sigma^{in}] = D \times [G^n],$$

оскільки, як уже говорилося, процес дефазування можна візуально уявити собі як «витягання» електрона з провідника в стані $[G^n]$ і подальшу «інжекцію» його назад у провідник у стан $D \times G^n$.

Були вже сформульовані дві моделі для матриці $[D]$ – моделі А і В, описувані рівняннями, відповідно, (3) і (4). Модель А еквівалентна множенню матриці $[D]$ на константу: іншими словами, електрон «інjektується» в той самий стан, з якого він був «витягнутий», так що імпульс електрона зберігається. В моделі В натомість зануляються недіагональні елементи, що веде до втрати інформації про імпульс електрона, – це добре ілюструє рис. 8.

Визначимо тепер модель С як таку, в якій матриця $[D]$ зберігає всю інформацію про спіни й зануляє імпульсну релаксацію, а саме:

$$\frac{[D]}{D_0} = \begin{array}{cccccc} 1up & 1dn & 2up & 2dn & 3up & 3dn \\ 1up & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1dn & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2up & 0 & 0 & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} & 0 & 0 \\ 2dn & 0 & 0 & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} & 0 & 0 \\ 3up & 0 & 0 & 0 & 0 & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \\ 3dn & 0 & 0 & 0 & 0 & \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \end{array}. \quad (19)$$

Іншими словами, модель С нагадує модель В щодо ґратки провідника, а модель А – щодо інформації про спін.

Перепишемо грінівську матрицю

$$G^n = G^R \Sigma^{in} G^A \quad (20)$$

як

$$\begin{aligned} [G^n]_{ii} &= \sum [G^R]_{ij} [\Sigma^{in}]_{jj} [G^A]_{ji} = \\ &= D_0 \sum [G^R]_{ij} [G^n]_{jj} [G^A]_{ji}, \end{aligned} \quad (21)$$

де індекси i, j нумерують атоми ґратки провідника і враховано ту обставину, що в моделі С

матриця Σ^{in} в ґратковому базисі діагональна.

Ми вже знаємо, що для будь-якого вузла ґратки провідника його діагональний блок (2 x 2) ґрінівської матриці (18) можна записати через числа (N, \vec{S}) , так що рівняння (21) шляхом нескладних перетворень можна записати у вигляді

$$\begin{Bmatrix} N \\ S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix}_i = \sum_j \begin{bmatrix} \text{Резонансна} \\ \text{матриця} \\ (4 \times 4) \end{bmatrix}_{ij} \begin{Bmatrix} N \\ S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix}_j, \quad (22)$$

де «резонансна матриця» (4 x 4) може бути інтерпретована як взаємодія (N, \vec{S}) у вузлі i з (N, \vec{S}) у вузлах j , сусідніх щодо i в ґратці. Аналогічне одновимірне рівняння нагадує стандартний опис броунівського руху на ґратці й веде до дифузійного рівняння дрейфу.

Квантова природа класики. Немає нічого дивного й несподіваного в назві цього розділу. З розглянутих вище прикладів ми бачили, що для розуміння фізики і для інтерпретації реальних експериментальних вимірювань, як правило, достатньо напівкласичного розгляду. Майже все, що ми обговорювали в цій серії статей, є наслідком транспортного рівняння Больцмана. Більш того, всі мільярди транзисторів в сучасних ноутбуках, що складаються всього з декількох сотень атомів, по суті є класичними пристроями електроніки, контрольованими в основному електростатикою, а не законами квантової механіки. Виконані нещодавно ретельні й усебічні вимірювання й розрахунки провідності металевого 2D провідника з перерізом (1 x 4) атомів [9] продемонстрували його нормальну омічну поведінку. Резонно поставити питання: чи вдасться, спираючись на успіхи нанофізики і наноелектроніки, які здаються нам фантастичними, створити принципово інші квантові пристрої, які виведуть нас за межі нинішньої «зарядової парадигми» обробки інформації. Торкнімося лише деяких міркувань щодо цього [10].

Спінова когерентність. Відмінність між квантовою фізикою і класичною чи не найкраще простежити на прикладі такого фундаментального поняття, як спін електрона.

Розгляньмо, наприклад, експеримент з інжекцією спіну в канал провідності з подальшим вимірюванням потенціалу другим зондом [8]:

$$\mu_2 = \mu + \frac{\vec{P}_2 \cdot \vec{\mu}_s}{2}. \quad (23)$$

Нагадаємо: цей потенціал залежить від косинуса кута між інжектуючим і реєструючим магнітними контактами (рис. 2 в [8]). ґрінівська матриця має вигляд (18) з діагональними блоками (2 x 2)

$$\begin{bmatrix} N + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N - S_z \end{bmatrix}, \quad (24)$$

елементи яких містять фізично зрозумілі величини електронної і спінової густини (N, \vec{S}) . Формалізм НРФГ приводить (див. [8]) далі до рівняння (23) з $(\mu, \vec{\mu}_s)$, які транслюються в (N, \vec{S}) згідно з рівнянням (83) роботи [8].

Цей простий приклад дозволяє проілюструвати зв'язок між квантовим і класичним описом. Якщо перехресні компоненти матриці (24) нехтовно малі, то лише двох чисел N і S_z достатньо для опису всієї фізики транспорту. Ці ненульові діагональні компоненти можуть бути інтерпретовані: $N + S_z$ як число електронів зі спіном «угору», $N - S_z$ як число електронів із спином «вниз». Далі можна записати напівкласичні рівняння для двох сортів електронів. Фактично такий підхід був реалізований в [7].

Коли працює така модель? Одна з можливостей виникає тоді, коли намагніченості контактів колінеарні, як у [7], і спін-орбітальна взаємодія в каналі провідності відсутня, так що кут θ є цілим кратним до 180° (рис. 2 в [8]). Інша можливість реалізується тоді, коли дефазування спіну настільки значне, що перехресними компонентами спінів у діагональних блоках матриць (2 x 2) ґрінівської матриці (24) можна нехтувати. Нарешті, якщо мож-

на нехтувати також і z -компонентами спіну, тоді про врахування спіну взагалі не йдеться.

Якщо колінеарні магнітні контакти направлені не уздовж осі z , а уздовж осі x , то в такому випадку блоки (2 x 2) гринівської матриці не-діагональні (значок \rightarrow означає «переписується у вигляді»):

$$\frac{[G^n]}{2\pi} \rightarrow \begin{bmatrix} N & S_x \\ S_x & N \end{bmatrix},$$

і напівкласичний опис швидше за все виявиться неможливим. В цьому випадку потрібно інакше вибрати систему координат, або в загальному випадку інакше вибрати розкладання по базисних функціях. Вибрати базис потрібно так, щоб об'єкти (наприклад, спін), що мають напрями «вгору» і «вниз», були орієнтовані, відповідно, уздовж $+x$ і $-x$; тоді блоки гринівської матриці будуть діагональні:

$$\frac{[G^n]}{2\pi} \rightarrow \begin{bmatrix} N + S_{up} & 0 \\ 0 & N + S_{dn} \end{bmatrix}.$$

Рекомендація інакше вибрати базис може здатися тривіальною, але це не зовсім так, в чому ми зараз переконаємося.

Псевдоспін. Формалізм матриць спінів Паулі [7] чудовий тим, що він не вичерпується тільки спіном електрона, а розповсюджується на будь-які об'єкти, що мають двокомпонентну структуру в комплексній площині. Пригадаємо графен. Атоми вуглецю в графені топологічно не еквівалентні і, залежно від розташування сусідів, можуть бути або сорту А, або сорту В (рис. 23 в [1]). Хвильова функція елементарної комірки графену описується двокомпонентним вектором в комплексній площині [11]

$$\{\psi\} = \begin{Bmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{Bmatrix}.$$

Отже, функція Гріна, яка їй відповідає (рівняння (10) з [1]) може бути формально переписана таким чином:

$$\frac{[G^n]}{2\pi} = \begin{bmatrix} \psi_A \psi_A^* & \psi_A \psi_B^* \\ \psi_B \psi_A^* & \psi_B \psi_B^* \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} N + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N - S_z \end{bmatrix},$$

що не має ніякого відношення до реальних спінів, а лише формально математично відповідає (24). Напрями псевдоспінів у графені показано на рис. 29б роботи [7].

Розгляньмо ще один менш відомий приклад використання концепції псевдоспіну, переслідуючи перш за все педагогічні цілі. Повернімося до моделі на рис. 6а.

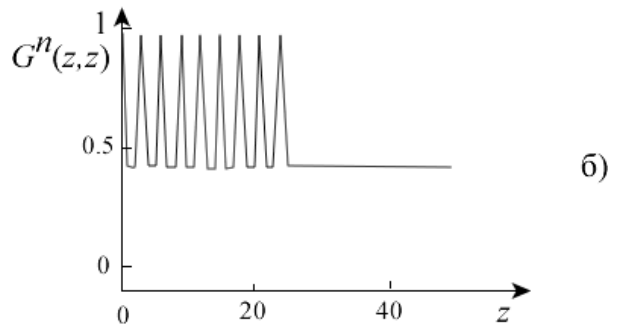
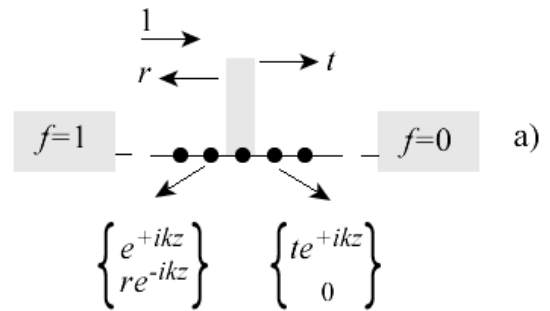


Рис. 11. (а) Схема одномодового провідника з одним дефектом, що характеризується коефіцієнтом проходження t і коефіцієнтом відбиття r ; стрілками вказані псевдоспінорні хвильові функції електрона до і після проходження дефекту. (б) Поведінка діагональних елементів гринівської матриці ліворуч і праворуч від дефекту.

Погляньмо на поведінку діагональних елементів гринівської матриці $[G^n]$ ліворуч і праворуч від дефекту (рис. 11б). Ліворуч від дефекту мають місце осциляції електронної густини, тоді як після проходження дефекту густина стала. Відзначмо, що в такій самій моделі на рисунках 6 – 10 осциляції мають місце і праворуч від дефекту. Але там йшло-

ся про осциляції заселеності, обчислюваної з G^n/A , а спектральна функція A , пропорційна густині станів D , осцилює як до, так і після проходження дефекту, так що до ситуації, яку ми розглядаємо, ці осциляції праворуч на рис. 6 – 10 стосунку не мають.

Використовуючи концепцію псевдоспіну, можна зрозуміти поведінку діагональних елементів гринівської матриці на рис. 11б. Нижче наведені псевдоспінорні хвильові функції електрона і електронна густина ліворуч/L і праворуч/R від дефекту, а також їх представлення з використанням концепції псевдоспіну:

$$\{\psi\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} e^{+ikz} \\ re^{-ikz} \end{array} \right\}_L, \left\{ \begin{array}{l} re^{+ikz} \\ 0 \end{array} \right\}_R;$$

$$\{\psi\}\{\psi\}^+ \rightarrow \left[\begin{array}{cc} 1 & r^* e^{+i2kz} \\ re^{-i2kz} & rr^* \end{array} \right]_L \left[\begin{array}{cc} tt^* & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right]_R \rightarrow \left[\begin{array}{cc} N + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N - S_z \end{array} \right]$$

Вважаючи коефіцієнти t і r дійсними величинами, для електронної псевдогустини і густини псевдоспіну ліворуч і праворуч від бар'єру отримаємо:

$$\begin{aligned} N &= (1 + r^2) / 2 & N &= r^2 / 2 \\ S_x &= +r \cos 2kz & S_x &= 0 \\ S_y &= -r \sin 2kz & S_y &= 0 \\ S_z &= (1 - r^2) / 2 & S_z &= r^2 / 2 \end{aligned} \quad (25)$$

Це означає, що ліворуч від бар'єру псевдоспін обертається в площині xy . При побудові графіка $G^n(z, z)$ на рис. 11б знаходили суму двох компонент псевдоспіну, а потім брали її квадрат, що еквівалентно рівності

$$Tr \left\{ \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right\} \{\psi\}\{\psi\}^+ \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \end{array} \right\} = Tr \left[\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right] \{\psi\}\{\psi\}^+. \quad (26)$$

Фактично ми маємо справу з псевдомагнітом з

$$\Gamma = \left[\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right], \quad (27)$$

який поляризований на 100% уздовж осі x . Таким чином, згідно з (23) вимірюваний потенціал повинен бути пропорційний $N + \hat{x} \cdot \vec{S}$, що

призводить ліворуч від бар'єру до осциляцій по косинусу, а праворуч – до відсутності осциляцій:

$$N + \hat{x} \cdot \vec{S} \rightarrow \frac{1 + r^2}{2} + r \cos 2kz \Big|_L; \quad \frac{r^2}{2} \Big|_R,$$

що добре узгоджується з результатами розрахунку за методом НРФГ (рис. 11б).

За межами нашого розгляду залишаються численні питання й невирішені досі проблеми нанофізики, і серед них інформаційні аспекти спінтроники, яким ми плануємо присвятити окрему публікацію.

На завершення наголосимо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮАК) курсів лекцій «Fundamentals Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts і «Fundamentals Nanoelectronics», Part II: Quantum Models», прочитаних он-лайн у січні – квітні 2012 року проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Один з авторів (МВС) вдячний НАН України й УНТЦ за підтримку, надану в рамках виконання проекту №5716 «Розвіток графенових технологій і дослідження базованих на графені наноструктур для наноелектроніки й оптоелектроніки».

Авторі щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

1. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки. Метод нерівноважних функцій Гріна і модельні транспортні задачі в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2013. –

- V. 10, N 3. – P. 5 – 31, № 4. P. 5 – 22.
2. *Buttiker M.* Four-terminal phase-coherent conductance // *Phys.Rev. Lett.* – 1986. – V. 57. – P. 1761.
 3. *Buttiker M.* Symmetry of Electrical Conduction // *IBM J. Res. Dev.* – 1988. – V. 32, N 3. – P. 317 – 334.
 4. *Golizadeh-Mojarad R., Datta S.* Non-equilibrium Green's function based model for dephasing in quantum transport // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 75, 8. – P. 081301/1 – 4.
 5. *Кругляк Ю.О., Стріха М.В.* Ефект Холла і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 11, N 1. – P. 5 – 27.
 6. *Datta Supriyo.* Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 473.
 7. *Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В.* Уроки наноелектроніки. Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, N 2. – P. 5 – 37.
 8. *Кругляк Ю.О., Стріха М.В.* Уроки наноелектроніки. Спіновий транспорт у моделі НРФГ і квантовий спіновий ефект Хола в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2014. – V. 11, N 2. – P. 5 – 27.
 9. *Weber B., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Fuhrer A., Reusch T.C.G., Thompson D.L., Lee W.C.T., Klimeck Gerhard, Hollenberg L.C.L., Simmons M.Y.* Ohm's Law Survives to the Atomic Scale // *Science.* – 2012. – V. 335. – P. 64 – 67.
 10. *Zurek W.H.* Decoherence, Einselection and the Quantum Origins of the Classical // *Rev. Mod. Phys.* – 2003. – V. 75. – P. 715 – 775.
 11. *Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е.* Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -острова. Теоретические основы // *Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту.* – 2012, В. 13. – С. 207 – 218.

Стаття надійшла до редакції 28.04.14