

УДК 537.32

DOI: 10.15587/2313-8416.2015.48827

НАНОЭЛЕКТРОНИКА «СНИЗУ – ВВЕРХ»: МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА, МОДЕЛЬНЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ ЗАДАЧИ И КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ

© Ю. А. Кругляк

В рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники рассматривается метод неравновесных функций Грина (НРФГ) в матричной формулировке и применение его к модельным транспортным задачам 1D и 2D проводников в хюккелевском приближении. Сформулирован общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера. Рассматриваются модели упругой дефазировки и спиновой дефазировки, учет некогерентных процессов с использованием зонда Бюттекера

Ключевые слова: нанoeлектроника, квантовый транспорт, квантовая интерференция, дефазировка, НРФГ, когерентность, транспорт спинов

Non-equilibrium Green's functions (NEGF) method in matrix form is presented and applied to model transport problems for 1D and 2D conductors using Huckel approximation in the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics. General method to account for electric contacts in Schrödinger equation is given. Elastic and spin dephasing modeling and account for non-coherent processes are also discussed

Keywords: nanoelectronics, quantum transport, quantum interference, dephasing, NEGF, coherence, spin transport

1. Введение

В продолжение предыдущих публикаций [1–3] в рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники [4, 5] рассмотрим метод неравновесных функций Грина (НРФГ) в матричной формулировке и применим его для анализа и решения модельных транспортных задач переноса электронов на примере однородных и неоднородных 1D и 2D проводников, в том числе и графена. Сформулируем общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера. Затем рассмотрим:

- 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 НРФГ без учета дефазировки и с ее учетом,
- эффекты деструктивной и конструктивной интерференции,
- четырехкомпонентное описание спинового транспорта с учетом дефазировки,
- формализм псевдоспина.

Современный ноутбук содержит более 3 миллиардов полевых транзисторов и резисторов с длиной канала проводимости $\sim 30\text{--}40\text{ нм}$, что соответствует сотне – другой атомов.

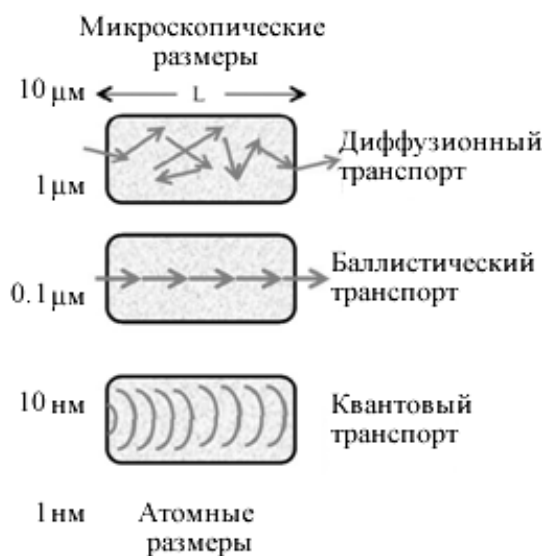


Рис. 1. С уменьшением длины канала проводимости L физическая природа транспорта электронов изменяется качественно – от диффузионного к баллистическому и далее к квантовому

По мере уменьшения длины канала проводимости физическая природа электронного транспорта изменяется качественно (рис. 1). Для достаточно длинных проводников транспорт является диффузионным с траекторией, напоминающей случайные блуждания. Если длина канала проводимости становится меньше средней длины свободного пробега, транспорт электронов переходит в режим баллистического переноса. При еще более коротких длинах канала проводимости начинает проявляться волновая природа электронов в виде таких квантовых эффектов как интерференция и тунелирование.

Исторически все более глубокое понимание физической природы электрической проводимости приходило *сверху – вниз*: от массивных макроскопических проводников до транзисторов молекулярных и даже атомных размеров. Еще лет 20–25 тому назад были обычными рассуждения о том, как понимать концепцию об электрическом сопротивлении, если размер проводника приближается к атомным размерам. Несмотря на исключительные достижения в области экспериментальной мезофизики и нанофизики, и поныне при обсуждении проводимости доминирует концепция *сверху – вниз* вместо более естественной концепции *снизу – вверх*, что делает анализ и обсуждение устройств нанoeлектроники подчас нелепо сложными [6, 7]. Концепцию *снизу – вверх* проиллюстрируем на рис. 2.

Любое устройство нанoeлектроники имеет активный канал проводимости, который описывается гамильтонианом $[H]$, включающем потенциальную энергию U , обязанную всем другим зарядам как внешним (на электродах), так и внутренним (в самом канале). Канал проводимости взаимодействует с истоком и стоком и с любыми другими контактами в конкретном устройстве, которые находятся в локальном равновесии, определяемом соответствующими электрохимическими потенциалами (рис. 2, а). Взаимодействие между каналом и контактами описывается матрицами собственной энергии (self-energy) $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$ [8]. Взаимодействие электрона в канале с его окружением описывается матрицей собственной энергии $[\Sigma_0]$, которая в отличие от матриц $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$, должна быть вычислена самосогласовано. Размерность этих квадратных матриц определяется числом N базисных функций, используемых для квантовомеханического описания канала проводимости и контактов. Конкретный вид матриц определяется используемым методом решения уравнения Шредингера – полуэмпирическим, на основе теории функционала плотности или из первых принципов, а также выбором базисных функций. Как только эти матрицы составлены, дальнейшая процедура вычисления проводимости, тока и других электрофизических свойств является стандартной, чему и посвящен настоящий обзор на примере модельных транспортных задач, представляющих не только научный, но и познавательный и педагогический интерес.

На рис. 2 показаны два предельных случая электронного транспорта – диффузионный (рис. 2, б) и баллистический (рис. 2, в). В баллистическом пределе транспорт электронов контролируется кон-

тактными матрицами $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$, тогда как взаимодействия внутри канала пренебрежимо малы. В противовес этому, в диффузионном пределе транспорт электронов контролируется взаимодействиями внутри канала, описываемыми матрицей $[\Sigma_0]$, а роль контактных матриц $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$ пренебрежимо мала. Не удивительно, что до примерно 1990 года контакты даже не изображались на схемах. Между гамильтоновой матрицей $[H]$ и матрицами $[\Sigma_{0,1,2}]$ есть существенное различие: матрица гамильтониана представляет консервативные динамические силы и является эрмитовой, тогда как матрицы собственной энергии учитывают энтропийные факторы и не являются эрмитовыми.

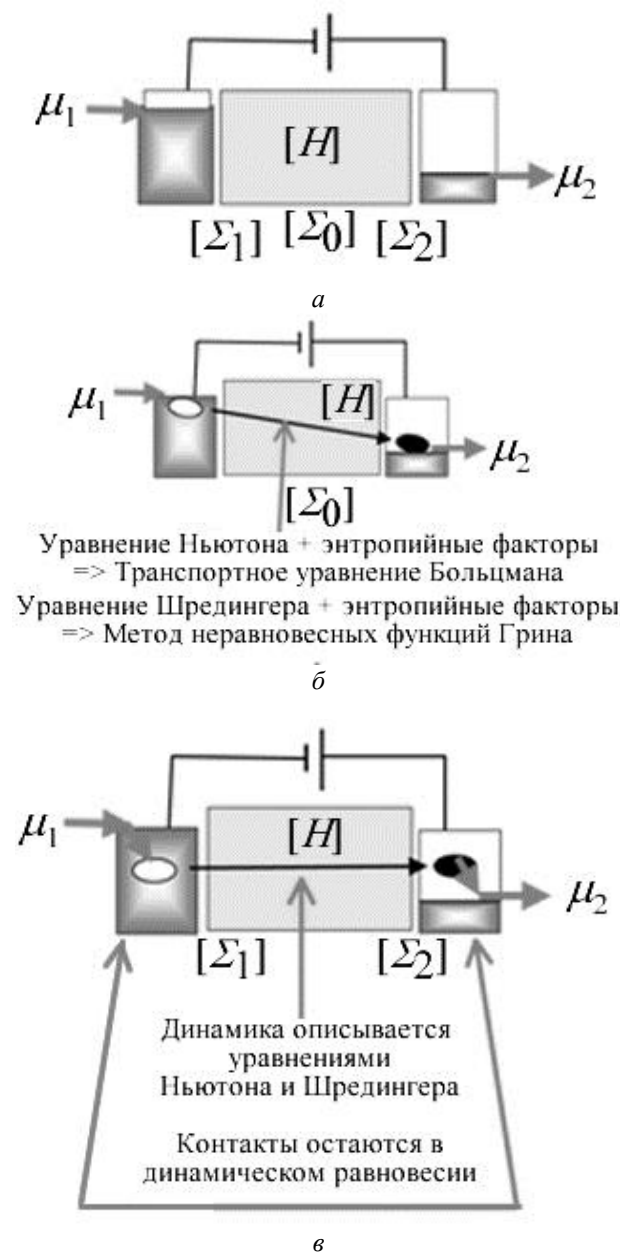


Рис. 2. Схематическое описание: а – активного канала проводимости, взаимодействующего с истоком и стоком, и двух предельных случаев: б – диффузионного транспорта в макроскопических проводниках и в – баллистического транспорта в нанотранзисторах

Уравнение Шредингера само по себе не пригоден для объяснения таких, кажущихся очевидными процессов, как например, самопроизвольный переход электрона из возбужденного состояния в основное и невозможность самопроизвольного обратного процесса. Эта тенденция для систем любой сложности релаксировать однонаправленно в сторону понижения энергии кажется очевидной и не имеет объяснения в рамках квантовой механики. Подобные процессы, как и разнообразные однонаправленные явления в окружающем нас мире, имеют энтропийную природу. При конструировании и анализе работы любого электронного устройства, квантового или классического, уравнения динамики должны быть дополнены энтропийными силами. Так возникла статистическая механика неравновесных процессов, центральное место в которой вот уже 140 лет занимает транспортное уравнение Больцмана [9, 10]. Квантовым аналогом уравнения Больцмана является метод неравновесных функций Грина, основы которого были заложены в работах Мартина и Швингера [11], Каданова и Бейма [12] и Келдыша [13].

Оба подхода – классический Больцмана и квантовый формализм НРФГ объединяет то обстоятельство, что в них одновременно учитываются и динамические и энтропийные процессы. В баллистическом пределе, однако, динамические и энтропийные процессы пространственно разделены (рис. 3, в). Электроны проскакивают от одного контакта к другому под действием только динамических сил. Внутри контактов электроны оказываются не в равновесии, но быстро приходят в равновесное состояние под действием энтропийных сил. Подобную модель развития событий в баллистическом пределе называют моделью упругого резистора Ландауэра, предложенную Рольфом Ландауэром еще в 1957 году [14–16] задолго до ее триумфального экспериментального подтверждения в нанотранзисторах. Сегодня действительно надежно установлено, что баллистические резисторы выдерживают довольно сильные токи благодаря тому, что выделение джоулева тепла пренебрежимо мало. Тепло выделяется на контактах, которые благодаря своей относительной массивности быстро диссипируют его. Пространственное разнесение динамики и термодинамики в баллистических устройствах служит весомым аргументом в пользу концепции «снизу – вверх», которая представляется нам привлекательной не только научно, но и педагогически.

2. Обзор уравнений метода неравновесных функций Грина

Задачу настоящей работы мы видим в том, чтобы дать компактное изложение формализма НРФГ с учетом модели Ландауэра применительно к наноэлектронным устройствам. Если опираться на пионерские работы от Швингера до Келдыша [11–13], основанные на квантовой многочастичной теории возмущений (МЧТВ) и диаграммной технике, то не хватит и нескольких семестров для овладения методом НРФГ. В своем изложении мы бу-

дем следовать работам Датты, Мейра и Вингина [4–7, 17–20], как наиболее адекватным стоящей перед нами задачи.

Начнем с рассмотрения упругого резистора, энтропийные процессы диссипации тепла в котором происходят лишь на контактах, а саму задачу о сопротивлении резистора рассмотрим в одночастичном приближении с добавлением к уравнению Шредингера

$$[H]\{\psi\} = E\{\psi\} \quad (1)$$

еще двух членов, описывающих отток электронов в контакты (outflow),

$$[\Sigma] = [\Sigma_1] + [\Sigma_2] \quad (2)$$

и приток электронов в проводник с контактов (inflow)

$$\{s\} = \{s_1\} + \{s_2\}, \quad (3)$$

а именно:

$$E\{\psi\} = [H]\{\psi\} + [\Sigma]\{\psi\} + \{s\}, \quad (4)$$

где уравнение Шредингера сразу записано в матричном виде, имея в виду, что базисные функции уже выбраны, так что квадратные матрицы взяты в квадратные скобки, а матрицы-столбцы – в фигурные скобки. Теперь решение уравнения Шредингера можно сразу записать через обратную матрицу:

$$\{\psi\} = [EI - H - \Sigma]^{-1} \{s\}, \quad (5)$$

где I – единичная матрица.

Матрица

$$G^R = [EI - H - \Sigma]^{-1} \quad (6)$$

получила название запаздывающей (Retarded) функции Грина, а эрмитово сопряженная ей матрица

$$G^A = [G^R]^+ \quad (7)$$

называется опережающей (Advanced) функцией Грина. Происхождение этих и других терминов, общепринятых в формализме НРФГ, нам для дальнейшего не существенно, подробнее познакомиться с терминологией рекомендуем работы [6, 11–13]. Отметим лишь, что формализм НРФГ в применении к задачам в наноэлектронике сводится к четырем уравнениям, **первое** из которых есть выражение (6) для запаздывающей функции Грина. Теперь уравнение Шредингера (5) перепишем в виде

$$\{\psi\} = [G^R]\{s\}. \quad (8)$$

Произведение столбца $\{\psi\}$ на эрмитово сопряженную ему строку $\{\psi\}^+$ дает

$$\{\psi\}\{\psi\}^+ = [G^R]\{s\}\{s\}^+[G^A], \quad (9)$$

где учтено, что транспонирование произведения матриц меняет порядок сомножителей на обратный.

Неравновесная функция Грина определяется как

$$G^n = 2\pi\{\psi\}\{\psi\}^+, \quad (10)$$

так что число электронов дается выражением

$$N = Tr[G^n] / 2\pi. \quad (11)$$

Аналогично описывается приток электронов

$$\Sigma^{in} = 2\pi\{s\}\{s\}^+, \quad (12)$$

так что теперь уравнение (9) имеет вид

$$G^n = G^R \Sigma^{in} G^A \quad (13)$$

и будет **вторым** уравнением в формализме НРФГ.

Полноты ради отметим, что обозначения по сравнению с [6] упрощены, а именно: Σ вместо Σ^R , G^n вместо $-iG^<$, Σ^{in} вместо $-i\Sigma^<$, однако, первое и второе уравнения (6) и (13) существенно те же, что и уравнения (75) – (77) в основополагающей работе Келдыша [13], полученные диаграммной техникой МЧТВ. Мы полагаем, что вычленение этих двух уравнений, а далее еще двух из МЧТВ, первоначально использованной для их вывода, сделает метод НРФГ более прозрачным и доступным, и он будет читаться студентам физикам и инженерам-электронщикам для решения задач, когда возникает необходимость учесть электрические контакты в уравнении Шредингера.

Приведем оставшиеся два уравнения формализма НРФГ. **Третье** уравнение есть матричная форма плотности состояний $D(E)$, умноженной на 2π , и называется спектральной функцией A :

$$2\pi D(E) = A = G^R \Gamma G^A = G^A \Gamma G^R = i[G^R - G^A], \quad (14)$$

где матрицы G^R и G^A даются уравнениями (6) и (7), а матрица $[\Gamma]$ есть антиэрмитова часть соответствующей контактной матрицы (2):

$$\Gamma = i[\Sigma - \Sigma^+] \quad (15)$$

и описывает взаимодействие электронов в канале с контактами. Вывод формулы (14) для спектральной функции и эквивалентность всех трех ее выражений сделаем ниже.

Все матрицы $[\Sigma]$, $[\Gamma]$ и $[\Sigma^{in}]$ содержат слагаемые, относящиеся к конкретным терминалам (контактам), учитываемым в конкретной задаче. В уравнениях (6), (13) и (14) суммирование по терминалам уже выполнено.

Четвертым уравнением в формализме НРФГ служит уравнение для тока через терминал с номером m

$$\tilde{I}_m = \frac{q}{h} Tr[\Sigma_m^{in} A - \Gamma_m G^n], \quad (16)$$

куда входят только те компоненты матриц, которые относятся к данному терминалу m . Это удельный ток (на единицу энергии), его нужно еще проинтегрировать по всему спектру энергий, чтобы получить полный ток через терминал m .

Далее рассмотрим простые модельные транспортные задачи, затем вернемся к обоснованию и выводу уравнений метода НРФГ и обсудим более сложные транспортные задачи.

3. Одноуровневый резистор: полуклассический подход

Почувствовать физику метода НРФГ можно уже на простейшей транспортной задаче об одноуровневом проводнике, описываемом матрицами 1×1 , т. е. числами с $[H] = \varepsilon$. На этом примере увидим как учитываются контакты в уравнении Шредингера, а затем перейдем к проводнику с произвольным числом каналов, описываемым матрицами $N \times N$. Сначала, однако, рассмотрим одноуровневую задачу в полуклассическом приближении (рис. 3).

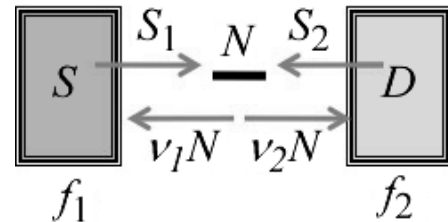


Рис. 3. Модель одноуровневого проводника в полуклассическом приближении

Одноуровневый проводник контактирует с двумя контактами с фермиевскими заселенностями $f_1(\varepsilon)$ и $f_2(\varepsilon)$. Поначалу предположим, что на истоке S фермиевская функция $f_1 = 1$, а на стоке D функция $f_2 = 0$. Это означает, что исток стремится заполнить уровень с энергией ε , а сток стремится только извлечь электроны с этого уровня. Окончательно при вычислении суммарного тока помножим его на $f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)$, имея в виду, что впрыскивание электронов происходит с обоих контактов, и суммарный ток есть разностный эффект.

При $f_1=1$ на истоке и $f_2=0$ на стоке среднее число электронов N удовлетворяет уравнению

$$\frac{dN}{dt} = -(v_1 + v_2)N + S_1 + S_2, \quad (17)$$

где v_1 и v_2 есть скорости, с которыми электроны покидают проводник в направлении контактов, а S_1 и S_2 есть скорости, с которыми электроны впрыскиваются контактами в проводник. В условиях динамического равновесия $dN/dt = 0$, так что заселенность одиночного уровня электронами

$$N = \frac{S_1 + S_2}{v_1 + v_2}. \quad (18)$$

Если мысленно отключить сток, то число электронов будет равно фермиевской функции на истоке, если же отключить исток, то число электронов будет равно фермиевской функции на стоке:

$$\frac{S_1}{v_1} = f_1(\varepsilon) \quad \text{и} \quad \frac{S_2}{v_2} = f_2(\varepsilon). \quad (19)$$

Перегруппируем уравнение (17) в

$$\frac{dN}{dt} = (S_1 - v_1 N) + (S_2 - v_2 N), \quad (20)$$

тогда первое слагаемое есть поток электронов, создаваемый истоком, а второе слагаемое – стоком. В условиях динамического равновесия оба потока одинаковы и противоположно направлены, а сам ток равен

$$I = q(S_1 - v_1 N) = q(v_2 N - S_2), \quad (21)$$

при этом любое из этих двух выражений может быть использовано для вычисления тока. Из (18) и (19) имеем заселенность уровня в условиях динамического равновесия

$$N = \frac{v_1 f_1(\varepsilon) + v_2 f_2(\varepsilon)}{v_1 + v_2}, \quad (22)$$

подставляя которую в выражение для тока (21) и учитывая (19), для тока I через фермиевские функции окончательно имеем

$$I = q \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)). \quad (23)$$

4. Одноуровневый резистор: квантовый подход

Стационарное уравнение Шредингера

$$[H]\{\psi\} = E\{\psi\}$$

следует из зависящего от времени уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{\tilde{\psi}(t)\} = [H]\{\tilde{\psi}(t)\} \quad (24)$$

в результате подстановки

$$\{\tilde{\psi}(t)\} = \{\psi\} e^{-iEt/\hbar}. \quad (25)$$

Для описания динамического равновесия обычно достаточно стационарного уравнения Шредингера, но в некоторых случаях не обойтись без нестационарного уравнения (24), например, как мы увидим далее, при интерпретации некоторых зависимостей от матриц собственных энергий.

Для одноуровневой задачи $[H] = \varepsilon$ эволюция волновой функции описывается уравнением

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi} = \varepsilon \tilde{\psi}, \quad (26)$$

с использованием которого и ему комплексно сопряженного имеем

$$\frac{d}{dt} (\tilde{\psi} \tilde{\psi}^*) = 0; \quad (27)$$

другими словами заселенность изолированного уровня энергии не изменяется со временем.

Нас же интересует не изолированная система, а проводник, соединенный с двумя контактами. Стандартные учебники по квантовой механике, к сожалению, не показывают как описать интересующую нас ситуацию. Модифицируем уравнение Шредингера следующим образом

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\psi} = \left(\varepsilon - i \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \tilde{\psi} \quad (28)$$

с тем, чтобы эволюция электронной плотности

$$\frac{d}{dt} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\hbar} \right) \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* \quad (29)$$

походила на динамическое уравнение полуклассики (17), разве что за исключением скоростей S_1 и S_2 , с которыми электроны впрыскиваются контактами в проводник, но мы к ним вернемся позже. Уравнения (29) и (17) согласуются друг с другом, если положить

$$\gamma_1 = \hbar v_1, \quad (30)$$

$$\gamma_2 = \hbar v_2. \quad (31)$$

Стационарный аналог уравнения (28)

$$E\psi = \left(\varepsilon - i \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \psi \quad (32)$$

получается подстановкой в него решения для одностороннего значения энергии $E = \varepsilon$:

$$\tilde{\psi}(t) = \psi(E) e^{-iEt/\hbar}. \quad (33)$$

Уравнение (32) имеет очевидное решение $\psi = 0$, что указывает на то, что в динамическом равновесии электроны не могут заселять уровень с энергией $E = \varepsilon$. Пока не включен источник S_1 поступления электронов в проводник электроны могут лишь покидать проводник, уходя в контакты (рис. 4).

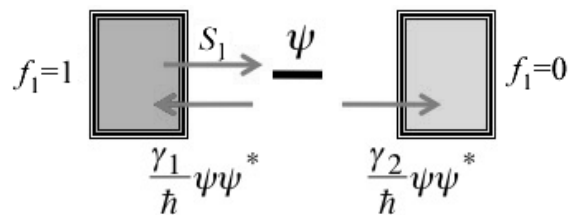


Рис. 4. Опорожнение и поступление электронов в квантовой модели одноуровневого проводника

Введем в стационарное уравнение Шредингера (32) контактный член s_1 в качестве источника электронов:

$$E\psi = \left(\varepsilon - i\frac{\gamma}{2} \right) \psi + s_1, \quad (34)$$

где $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$.

В отличие от полуклассической модели (17) в квантовой модели вводится один источник электронов, а не два, причина чего станет ясной ниже. Уравнение (34) позволяет связать волновую функцию с источником электронов

$$\psi = \frac{s_1}{E - \varepsilon + i(\gamma/2)}. \quad (35)$$

Обратим внимание на то, что волновая функция приобретает свое максимальное значение, когда энергия электрона E становится равной энергии уровня ε . Особенность квантовой модели в том, что волновая функция не существенно исчезает при отклонении E от ε на величину, меньшую γ . Это пример «уширения» или неопределенности энергии, отсутствующих в полуклассике.

Оценим качество источника электронов s_1 следующим образом. Проинтегрируем полное число электронов по всему спектру энергий и приравняем его полуклассическому выражению (22) с учетом того, что $f_1=1$ и $f_2=0$ (рис. 4):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \psi \psi^* = \frac{v_1}{v_1 + v_2} = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad (36)$$

где второе равенство получено с учетом (30) и (31).

Вычислим левую часть уравнения (36), воспользовавшись выражением для волновой функции (35),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \psi \psi^* = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{s_1 s_1^*}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} = \frac{2\pi s_1 s_1^*}{\gamma}, \quad (37)$$

где

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\gamma}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} = 2\pi. \quad (38)$$

Приравняв (36) и (37), получим

$$2\pi s_1 s_1^* = \gamma_1. \quad (39)$$

Другими словами, качество источника электронов пропорционально скорости удаления электронов из проводника, что представляется правдоподобным: если контакт хорошо соединен с проводником, то электроны так же хорошо покидают контакт, как и возвращаются назад из проводника.

Как и в случае классического выражения для тока (21), ток в квантовой модели получим из скорости изменения электронной плотности (29):

$$\frac{d}{dt} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* = (\text{Приток из контакта 1}) - \frac{\gamma_1}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* - \frac{\gamma_2}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* \quad (40)$$

добавив лишь приток из инжектирующего контакта s_1 , не учтенного во временном уравнении Шредингера (28).

Левая и правая части уравнения (40) равны нулю, поскольку речь идет о токе в состоянии динамического равновесия. Как и в классической модели, ток можно вычислить либо как сумму первых двух слагаемых, либо как третье слагаемое в уравнении (40):

$$\frac{I}{q} = (\text{Приток из контакта 1}) - \frac{\gamma_1}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* = \frac{\gamma_2}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^*. \quad (41)$$

Интегрируя по всему спектру энергий, для тока получаем

$$I = q \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\gamma_2}{\hbar} \psi \psi^* \quad (42)$$

и с подстановкой (35) и (39) для тока в квантовой модели окончательно имеем

$$I = \frac{q \gamma_1 \gamma_2}{\hbar 2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{1}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}, \quad (43)$$

что можно сравнить с выражением для тока в полуклассической модели (23), имея в виду, что $f_1 = 1$ и $f_2 = 0$, а $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$:

$$I = \frac{q \gamma_1 \gamma_2}{\hbar \gamma_1 - \gamma_2}. \quad (44)$$

5. Квантовое уширение

Вычисление тока в квантовой модели по (43) предполагает интегрирование по всему спектру энергий, поскольку при квантовом рассмотрении одиночный локализованный уровень размывается в непрерывное распределение по энергии (рис. 5) согласно плотности состояний $D(E)$:

$$D = \frac{\gamma/2\pi}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (45)$$

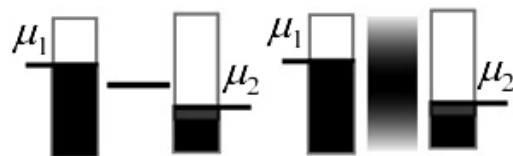


Рис. 5. В отличие от классических представлений (слева) одиночный локализованный уровень энергии в квантовой модели (справа) размывается вследствие принципа неопределенности Гейзенберга

Прямое экспериментальное измерение проводимости одиночной молекулы водорода [21], спектр которой фактически соответствует одноуровневой модели резистора, может служить прямым доказа-

тельством справедливости квантового уширения уровней энергии.

Сравнивая (43) с выражением для тока упругого резистора (32) из работы [1], получаем проводимость одноуровневой модели с учетом квантового уширения

$$G(E) = \frac{q^2}{h} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (46)$$

Предполагая равноценную связь проводника с обоими контактами

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{\gamma}{2} \quad (47)$$

и достаточно низкую температуру для того, чтобы измеряемая проводимость была равной $G(E = \mu_0)$, имеем

$$G \approx G(E = \mu_0) = \frac{q^2}{h} \frac{(\gamma/2)^2}{(\mu_0 - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (48)$$

Таким образом, квантовая модель одноуровневого резистора показывает, что измеряемая проводимость будет максимальной и равной кванту проводимости q^2/h , если электрохимический потенциал μ_0 будет достаточно близок к энергии уровня ε . Экспериментально измеряемый квант проводимости равен $2q^2/h$, где двойка связана с вырождением по спину, поскольку в действительности все уровни энергии идут парами со спинами α и β , так что одноуровневая модель резистора фактически есть двухуровневой с учетом вырождения по спину.

6. К вопросу об интерференции источников поступления электронов в проводник

В отличие от классической модели резистора, в которой одновременно учитывались оба источника поступления электронов с двух контактов в проводник (17), в квантовой модели (34) учитывалась инжекция электронов только с истока ($f_1=1$), а сток подерживался пустым ($f_2=0$).

Это не вопрос удобства рассуждений. Если вместо (34) в уравнении Шредингера одновременно учесть оба инжектирующих контакта

$$E\psi = \left(\varepsilon - i\frac{\gamma}{2} \right) \psi + s_1 + s_2, \quad (49)$$

для волновой функции получим

$$\psi = \frac{s_1 + s_2}{E - \varepsilon + i\frac{\gamma}{2}}, \quad (50)$$

так что в электронной плотности появятся два перекрестных интерференционных слагаемых:

$$\psi\psi^* = \frac{1}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2} (s_1 s_1^* + s_2 s_2^* + s_1 s_2^* + s_2 s_1^*), \quad (51)$$

которые никогда не наблюдались экспериментально, поскольку при инжекции от двух отдельных контактов электроны поступают в проводник с нескоррелированными фазами, меняющимися во времени произвольным образом и в среднем дающими нулевой вклад. Первые же два попарных произведения дают положительные вклады и наблюдаются экспериментально.

Контакты в электронных устройствах обычно не когерентны и это обстоятельство нужно учитывать при их моделировании. В уравнении Шредингера нельзя одновременно учитывать несколько электрических контактов. Учитывать контакты надо по одному, вычислять свойства, зависящие от произведения волновых функций, таких как электронная плотность, ток и другие, а затем суммировать эти вклады от разных контактов.

7. Квантовый транспорт по многоуровневому проводнику

Обобщим одноуровневую модель (34) на многоуровневую (рис. 6) с матрицей гамильтониана $N \times N$, имеющей N собственных значений.

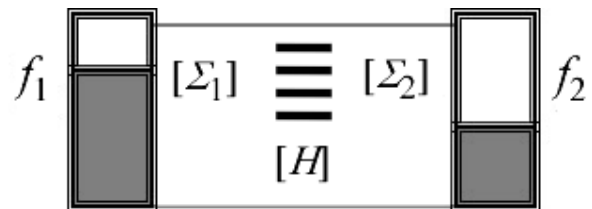


Рис. 6. Транспортная модель для многоуровневого проводника

Уравнение Шредингера с двумя контактами, один из которых инжектирующий, имеет вид:

$$E\{\psi\} = [H + \Sigma_1 + \Sigma_2]\{\psi\} + \{s_1\}, \quad (52)$$

где волновая функция и инжектирующий контакт есть столбцовые матрицы $N \times 1$, а контактные $N \times N$ матрицы Σ_1 и Σ_2 неэрмитовы с антиэрмитовыми компонентами

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= i[\Sigma_1 - \Sigma_1^*], \\ \Gamma_2 &= i[\Sigma_2 - \Sigma_2^*], \end{aligned} \quad (53)$$

выполняющими роль γ_1 и γ_2 в одноуровневой задаче.

Сначала покажем как четыре основных уравнения метода НРФГ (6), (13), (14) и (16) следуют из уравнения Шредингера с учтенными контактами (52).

Из (52) непосредственно имеем

$$\{\psi\} = [G^R] \{s_1\}, \quad (54)$$

где запаздывающая функция Грина G^R дается выражением (6) с

$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2. \quad (55)$$

Неравновесная функция Грина

$$G^n = 2\pi\{\psi\}\{\psi\}^+ = 2\pi[G^R]\{s_1\}\{s_1\}^+[G^A], \quad (56)$$

где опережающая функция Грина G^A есть эрмитово сопряженная запаздывающая функция (7).

Для одноуровневой задачи $2\pi s_1 s_1^* = \gamma_1$ (39), а для многоуровневой – это матрицы

$$2\pi\{s_1\}\{s_1\}^+ = [\Gamma_1], \quad (57)$$

так что

$$G^n = [G^R][\Gamma_1][G^A]. \quad (58)$$

Это неравновесная гриновская функция для одного инжектирующего источника. Для нескольких источников матрицы электронной плотности, вопреки волновым функциям, все складываются, взвешенные соответствующими фермиевскими функциями, для получения (13) с матрицей Σ^{in} , представляющей собой некогерентную сумму всех независимых источников, так что для нашего случая двух источников

$$[\Sigma^{in}] = [\Gamma_1]f_1(E) + [\Gamma_2]f_2(E). \quad (59)$$

Уравнение (13) с (59) дает матрицу электронной плотности G^n через фермиевские функции для двух контактов. Если обе фермиевские функции равны единице, то все состояния заняты электронами, так что матрица электронной плотности становится равной матрице плотности состояний, называемой в методе НРФГ матрицей спектральной функции $[A]$. Полагая в (13) с (59) $f_i=1$ и $f_2=1$, спектральная функция

$$[A] = [G^R][\Gamma][G^A] \quad (60)$$

с $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$.

Получим еще два других выражения для спектральной функции, приведенных в (14). Из (54) с учетом (52) и (55) имеем

$$G^R = [EI - H - \Sigma]^{-1}, \quad (61)$$

так что для обратной матрицы запаздывающей функции Грина имеем

$$[G^R]^{-1} = EI - H - \Sigma. \quad (62)$$

Выполнив эрмитовое сопряжение равенства (62), получим

$$\left[[G^R]^{-1} \right]^+ = \left[[G^R]^+ \right]^{-1} = EI - H - \Sigma^+ \quad (63)$$

или иначе, учитывая (7),

$$[G^A]^{-1} = EI - H - \Sigma^+. \quad (64)$$

Вычитая (62) из (64) и учитывая

$$\Gamma = i[\Sigma - \Sigma^+], \quad (65)$$

следующее из (53), получим

$$[G^R]^{-1} - [G^A]^{-1} = i[\Gamma]. \quad (66)$$

Умножая (66) слева на $[G^R]$, а справа на $[G^A]$, получим еще одно выражение для спектральной функции A (14):

$$i\left[[G^R] - [G^A] \right] = G^R \Gamma G^A. \quad (67)$$

Умножая (66) слева на $[G^A]$, а справа на $[G^R]$, получим третье выражение для спектральной функции A (14)

$$i\left[[G^R] - [G^A] \right] = G^A \Gamma G^R. \quad (68)$$

Осталось получить выражение для тока. Как в случае и классического и квантового рассмотрения одноуровневой модели, выражение для тока получим как изменение во времени числа электронов. Начинаем с временного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\} = [H + \Sigma] \{\psi\} + \{s\} \quad (69)$$

и его эрмитово сопряженного

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\}^+ = \{\psi\}^+ [H + \Sigma^+] + \{s\}^+. \quad (70)$$

Имеем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\} \{\psi\}^+ &= \left(i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\} \right) \{\psi\}^+ + \\ &+ \{\psi\} \left(i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\}^+ \right) = ([H + \Sigma] \{\psi\} + \{s\}) \{\psi\}^+ - \\ &- \{\psi\} (\{\psi\}^+ [H + \Sigma^+] + \{s\}^+) = \\ &= [(H + \Sigma) \psi \psi^+ - \psi \psi^+ (H + \Sigma^+)] + \\ &+ [s s^+ G^A - G^R s s^+], \end{aligned} \quad (71)$$

где использовались уже известное соотношение (54) и его эрмитово сопряженное

$$\{\psi\} = [G^R] \{s\} \quad \text{и} \quad \{\psi\}^+ = \{s\}^+ [G^A]. \quad (72)$$

Поскольку след матрицы $[\psi \psi^+]$ дает число электронов, определив производную этой матрицы по времени, найдем матрицу оператора тока, след которой даст ток. Учтывая (10) и (12), для матрицы оператора тока из (71) имеем

$$I^{op} = \frac{[HG^n - G^n H] + [\Sigma G^n - G^n \Sigma^+] + [\Sigma^{in} G^A - G^R \Sigma^{in}]}{i2\pi\hbar}. \quad (73)$$

Учитывая, что след произведения матриц не зависит от порядка сомножителей, для скорости изменения числа электронов в канале имеем

$$\frac{dN}{dt} = \frac{-i}{h} Tr \left(\left[\sum G^n - G^n \sum^+ \right] + \left[\sum^{in} G^A - G^R \sum^{in} \right] \right), \quad (74)$$

а с учетом еще (14) и (15) окончательно имеем

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{h} Tr \left[\sum^{in} A - \Gamma G^n \right]. \quad (75)$$

Далее нужно учесть следующее. В уравнении (73) обе части равенства равны нулю, поскольку речь идет о токе в системе (рис. 6) в состоянии динамического равновесия. Обе части уравнения (73) разбиваются на слагаемые, относящиеся к контактам 1 и 2. Сумма их равна нулю в согласии с законом Кирхгофа для электрических цепей в состоянии динамического равновесия. Обобщая на произвольный номер контакта m , получаем уже упомянутое уравнение (16) для тока

$$\tilde{I}_m = \frac{q}{h} Tr \left[\sum_m^{in} A - \Gamma_m G^n \right]. \quad (76)$$

Классическая и квантовая модели сравниваются на рис. 7, где множителем D в классической модели учитывается многоуровневость классической задачи.

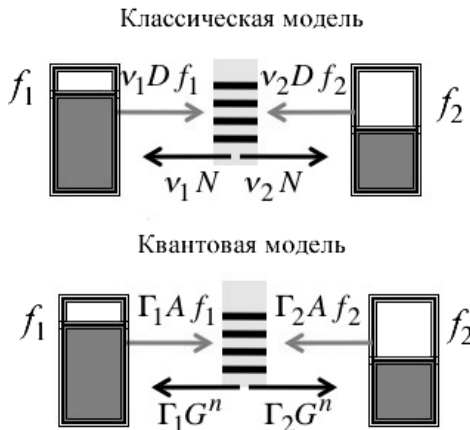


Рис. 7. Пополнение и опорожнение канала проводимости в классической и квантовой моделях транспорта электронов.

8. Функция проводимости для когерентного транспорта

Преобразуем уравнение (76) следующим образом. Учтем (13) и (14), а также

$$\Gamma = \sum_n \Gamma_n, \quad \sum^{in} = \sum_n \sum_n^{in}, \quad \sum_n^{in} = \Gamma_n f_n(E). \quad (77)$$

Тогда имеем

$$\tilde{I}_m = \frac{q}{h} \sum_n \bar{T}_{mm} (f_m(E) - f_n(E)), \quad (78)$$

где коэффициент прохождения (transmission coefficient) между контактами m и n

$$\bar{T}_{mn} \equiv Tr \left[\Gamma_m G^R \Gamma_n G^A \right]. \quad (79)$$

Пользуясь перестановочностью матриц под знаком следа, легко доказывается полезное свойство коэффициента прохождения

$$\sum_n \bar{T}_{mn} = \sum_n \bar{T}_{nm} = Tr \left[\Gamma_m A \right]. \quad (80)$$

Перепишем выражение для тока (78) с использованием (79) применительно к двухтерминальному устройству

$$\tilde{I}(E) = \frac{q}{h} Tr \left[\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A \right] (f_1(E) - f_2(E)) \quad (81)$$

и сравнивая это выражение для тока с аналогичным выражением для тока в упругом резисторе (32) из работы [1]

$$I = \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) (f_1(E) - f_2(E)),$$

получаем квантовый аналог функции проводимости

$$G(E) = \frac{q^2}{h} Tr \left[\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A \right] = \frac{q^2}{h} \bar{T}_{12}. \quad (82)$$

Для интерпретации экспериментальных данных, полученных на многотерминальных устройствах, Бюттекер [22] предложил элегантную формулу, связывающую ток I_m на контакте m с электрохимическими потенциалами на остальных контактах

$$I_m = (1/q) \sum_n G_{m,n} (\mu_m - \mu_n), \quad (83)$$

где $G_{m,n}$ есть проводимость, определяемая коэффициентом прохождения между контактами m и n .

В области линейного отклика воспользуемся нашим обычным разложением разности фермиевских функций в ряд Тейлора (21) работы [1] для получения соответствующей разности электрохимических потенциалов, тогда уравнение (78) окажется фактически уравнением Бюттекера (83) с проводимостью

$$G_{m,n}(E) \equiv \frac{q^2}{h} Tr \left[\Gamma_m G^R \Gamma_n G^A \right],$$

которую нужно еще усреднить для упругого резистора обычным образом

$$G_{m,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G_{m,n}(E).$$

До сих пор рассматривались только физические контакты $[\Sigma_{1,2}]$ в квантовой модели когерентного транспорта, в которой электроны движутся когерентно от истока к стоку по каналу, описываемому статическим гамильтонианом $[H]$ в отсутствие взаимодействия электрона с окружением $[\Sigma_0]$ при его движении по каналу (рис. 2, а). Учет взаимодействия

$[\Sigma_0]$ с формальной точки зрения проблемы не представляет. Все уравнения метода НРФГ остаются прежними, в матрицах же Σ , Γ и Σ^{in} появятся лишь дополнительные члены:

$$\begin{aligned} \Sigma &= \Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_0, \\ \Gamma &= \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_0, \\ [\Sigma^{in}] &= [\Gamma_1]f_1(E) + [\Gamma_2]f_2(E) + [\Sigma_0^{in}]. \end{aligned} \quad (84)$$

Однако, что из себя физически представляет взаимодействие Σ_0 ? С точки зрения электрона, движущегося в твердом теле, среда не представляется электрону статической, описываемой статическим гамильтонианом $[H]$, а весьма турбулентной средой со случайно меняющимся потенциалом U_R , который флуктуирует в пикосекундной шкале времени. Даже при достаточно низких температурах с замороженными фононными модами электрон движется в поле флуктуирующего потенциала, создаваемого всеми другими электронами (приближение самосогласованного поля). Даже в этом случае имеют место фазовые флуктуации (дефазировка), приводящие к флуктуации тока. Типичные измерения тока дают нам его среднее значение в интервале нескольких наносекунд, микросекунд или даже миллисекунд. Этот эффект усреднения нужно адекватно моделировать, если мы хотим правильно интерпретировать экспериментальные данные.

Метод НРФГ был первоначально разработан именно для учета неупругих процессов квантового транспорта в массивных проводниках. Мы же изложили его применительно к упругим резисторам. Вопросы дефазировки и обобщение метода НРФГ на неупругие процессы транспорта рассмотрим ниже. Сейчас же мы рассмотрим модельные задачи квантового транспорта, представляющие не только педагогический, но и научный интерес. Начнем мы с квантового транспорта в 1D проводниках не только в режиме баллистического транспорта, но и с учетом рассеивающих центров. Обосновано ли пренебрегать эффектами интерференции на дефектах и предполагать, что электроны диффундируют как классические частицы? Такой вопрос поставил Андерсон еще в 1958 году [23] и пришел к выводу, что диффузия может быть существенно подавлена или даже ею можно полностью пренебречь в результате квантовой интерференции между рассеивающими центрами. Мы не намерены углубляться в теорию андерсоновской локализации [24], покажем лишь как даже упрощенная модель НРФГ помогает глубже понять физику квантового транспорта.

Для любой транспортной задачи нужно написать гамильтониан $[H]$ и матрицы собственной энергии Σ . Как только это сделано, дальнейшие вычисления методом НРФГ выполняются стандартно.

9. Моделирование 1D проводника

Для наших целей достаточно одномерной модели неограниченного однородного проводника в приближении сильной связи с учетом взаимодей-

ствия лишь соседних атомов (рис. 8) в ортогональной базе. Это приближение известно в квантовой химии с 1931 г. как метод молекулярных орбиталей Хюккеля [25]. Даже такая простая модель корректно описывает не все, но многие свойства протяженных полиенов $-(CH=CH-)_nCH_2$ [26–28], графена [29, 30], полиацетиленов и кумуленов $=(C=C)_nC=C$ [31–33], в последних, правда, каждый атом поставляет по два взаимно ортогональных π -электрона, что требует лишь незначительной модификации модели.

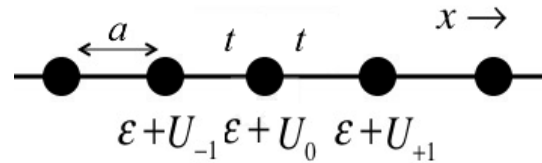


Рис. 8. К учету изменяющегося вдоль канала проводимости потенциала $U(x)$ в трансляционно-инвариантной цепочке атомов с периодом a , поставляющих каждый по одному электрону, и характеризуемой в приближении Хюккеля двумя параметрами – кулоновским интегралом ϵ и резонансным интегралом t

Однородный 1D проводник описывается стандартной теорией одномерной модели кристаллов Кронига-Пенни и подчиняется параболическому дисперсионному соотношению с эффективной массой:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (85)$$

Необходимо переписать дисперсионное соотношение (85) применительно к используемому нами приближению сильной связи с учетом взаимодействия лишь соседних атомов (рис. 8) в ортогональной базе. Другими словами, как выбрать параметры ϵ и t так, чтобы аппроксимировать дисперсионное соотношение (85).

Из уравнения Шредингера

$$E\psi_n = \sum_m H_{nm}\psi_m \quad (86)$$

имеем

$$E = \sum_m H_{nm} \frac{\psi_m}{\psi_n}. \quad (87)$$

Решения уравнения Шредингера (86) есть плоские волны (теорема Блоха)

$$\psi_n = \exp(ikna), \quad (88)$$

так что из (87) следует

$$E(k) = \sum_m H_{nm} \exp(ik(m-n)a). \quad (89)$$

Матрица $[H]$ имеет следующую структуру: по главной диагонали стоят кулоновские интегралы ϵ , на соседних верхней и нижней диагоналях стоят

резонансные интегралы t , остальные элементы равны нулю,

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & & \dots & & \ddots \\ & \varepsilon & t & 0 & \\ \vdots & t & \varepsilon & t & \vdots \\ & 0 & t & \varepsilon & \\ \ddots & & \dots & & \ddots \end{bmatrix},$$

так что для любой строки n матрицы $[H]$ согласно уравнению Шредингера (86) имеем

$$E\psi_n = t\psi_{n-1} + \varepsilon\psi_n + t\psi_{n+1} \quad (90)$$

или иначе

$$E = t \frac{\psi_{n-1}}{\psi_n} + \varepsilon + t \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n}, \quad (91)$$

а с учетом (88) и перегруппировки

$$E(k) = \varepsilon + t \exp(+ika) + t \exp(-ika) = \varepsilon + 2t \cos ka. \quad (92)$$

В области малых k

$$\cos ka \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2}. \quad (93)$$

Сравнивая дисперсионное соотношение (92) для однородной цепочки в хюккелевском приближении в области малых k с правильным параболическим дисперсионным приближением (85), находим резонансный и кулоновский интегралы

$$E_c = \varepsilon + 2t, \quad (94)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (95)$$

Если при моделировании электронного устройства потребуется учесть изменяющийся вдоль канала проводимости потенциал $U(x)$, это делается путем добавления локального значения потенциала U к кулоновскому интегралу (рис. 8).

Теперь, конечно, трансляционная инвариантность нарушается, дисперсионное соотношение будет другим, но новый гамильтониан вполне пригоден для численных расчетов и удовлетворительно описывает физику транспорта для потенциалов $U(x)$, не слишком быстро меняющихся в масштабе межатомных расстояний.

С найденными значениями интегралов ε (94) и t (95) легко выписывается матрица гамильтониана $[H]$. Теперь обсудим контактные матрицы собственных энергий. Основная идея заключается в том, чтобы бесконечно протяженный проводник, описываемый гамильтонианом $[H]$, заменить на проводник конечной длины, описываемый матрицей $[H + \Sigma_1 + \Sigma_2]$, с открытыми граничными условиями на концах, подразумевая под этим «хорошие» контак-

ты, не создающие на своих концах отраженных потоков (рис. 9).

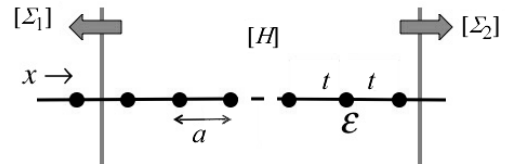


Рис. 9. Открытым граничным условиям соответствуют «хорошие» контакты, не создающие на своих концах отраженных потоков

Проиллюстрируем эту идею на одномерной решетке. Пусть проводник ограниченной длины имеет n атомов, перенумерованных от 1 до n . Тогда левый контакт 1 начинается перед атомом цепи с номером 1, а правый контакт 2 – после атома цепи с номером n (рис. 10).

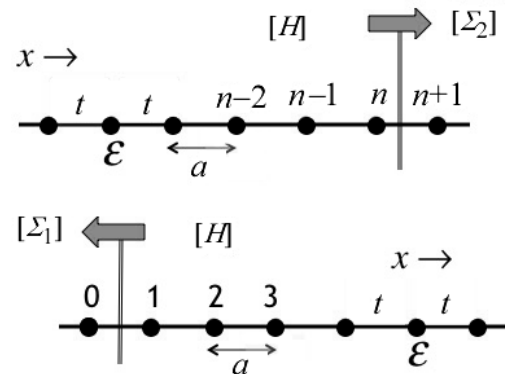


Рис. 10. К составлению контактных матриц 1D проводника из n атомов

Контакты не имеют входящих потоков, только выходящие. В n -ой строке (90) уравнения Шредингера (86) слагаемое $t\psi_{n+1}$ уже принадлежит контакту 2, который, согласно уравнению (91), дает вклад в энергию, равный $t\psi_{n+1}/\psi_n$. Эта энергия и есть собственная энергия контакта 2. С учетом

$$\psi_{n+1} = \psi_n e^{ika} \quad (96)$$

вместо (90) имеем

$$E\psi_n = t\psi_{n-1} + (\varepsilon + te^{ika})\psi_n, \quad (97)$$

где добавка к кулоновскому интегралу в n -ой строке (97) есть собственная энергия контакта 2 и помещается она как элемент (n, n) соответствующей контактной матрицы

$$\Sigma_2 = \begin{bmatrix} \ddots & & \dots & & \ddots \\ & 0 & 0 & 0 & \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \\ & 0 & 0 & te^{ika} & \\ \ddots & & \dots & & \ddots \end{bmatrix}. \quad (98)$$

Такую же собственную энергию имеет контакт 1, а в соответствующей контактной матрице помещается она как элемент $(1, 1)$

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} te^{ika} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix}. \quad (99)$$

Остальные элементы матриц Σ_1 и Σ_2 нулевые.

9. 1. Баллистический 1D проводник

Энергетические матрицы H , Σ_1 и Σ_2 составлены, вычисляем запаздывающую гриновскую функцию G^R (6), опережающую функцию G^A (7), матрицы Γ_1 и Γ_2 (53) и, наконец, коэффициент прохождения T_{12} и проводимость $G(E)$ (82). Вычисление проводимости баллистического 1D проводника является хорошей проверкой того, что контактные матрицы определены правильно. Проводимость должна быть равна кванту проводимости q^2/h , помноженному на число мод $M(E)$ 1D проводника, равное единице (спины не учитываются). Согласно (82) это означает, что в рассматриваемом примере коэффициент прохождения должен быть равен единице в области энергий $0 < E - E_c < 4t_0$, покрываемых дисперсионным соотношением

$$E = \varepsilon + 2t \cos ka = E_c + 2t_0(1 - \cos ka), \quad (100)$$

и нулю за пределами этой области (рис. 11, $U=0$).

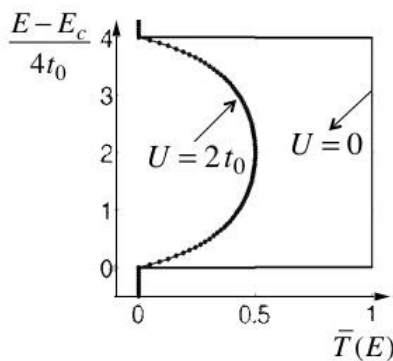


Рис. 11. Коэффициент прохождения в баллистическом 1D проводнике без рассеяния ($U=0$) и с одним точечным рассеивающим центром ($U=2t_0$)

9. 2. Плотность состояний 1D проводника

Вычислим сначала $D(E)$ 1D проводника из элементарных соображений. Согласно (82) работы [1], число состояний 1D проводника длины L со значениями импульса меньшими, чем заданное значение p ,

$$N(p) = \frac{2L}{h/p}. \quad (101)$$

Плотность состояний

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2L}{h} \frac{dp}{dE} = \frac{L}{\pi \hbar v}, \quad (102)$$

где учтено то обстоятельство, что для изотропного закона дисперсии $E(p)$ скорость $v = dE/dp$ [1].

Получим это же выражение для плотности состояний методом НРФГ. Для изотропного 1D проводника достаточно учесть только один атом в цепи (рис. 12).

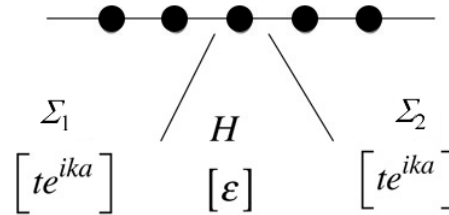


Рис. 12. К вычислению плотности состояний $D(E) = A/2\pi$ через спектральную функцию A (14)

В этом случае роль длины проводника L играет период решетки a . Для запаздывающей гриновской функции имеем

$$G^R = [E - \varepsilon - 2te^{ika}]^{-1}. \quad (103)$$

Представляя экспоненту через синус и косинус и учитывая (100), получим

$$G^R = i / 2t \sin ka. \quad (104)$$

Имеем также

$$\hbar v = \frac{dE}{dk} = -2at \sin ka, \quad (105)$$

где первое равенство следует из изотропности 1D проводника, а второе – из (100). С учетом (105) для G^R окончательно имеем

$$G_R = \frac{i}{2t \sin ka} = \frac{-i}{\hbar v / a}, \quad (106)$$

а опережающая функция Грина

$$G^A = \frac{ia}{\hbar v}. \quad (107)$$

Спектральная функция

$$A = i[G^R - G^A] = \frac{2a}{\hbar v}, \quad (108)$$

а плотность состояний

$$D(E) = \frac{A}{2\pi} = \frac{a}{\pi \hbar v} \quad (109)$$

совпадает с выражением (102), полученным ранее из элементарных соображений.

9. 3. 1D проводник с одним рассеивающим центром

В гамильтониане рассеивающий центр моделируем путем добавления к кулоновскому интегралу одного из атомов цепочки постоянного потенциала U :

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & & \dots & & \\ & \varepsilon & t & 0 & \\ \vdots & t & \varepsilon + U & t & \\ & 0 & t & \varepsilon & \\ & & \dots & & \ddots \end{bmatrix}. \quad (110)$$

При такой постановке задачи коэффициент прохождения может быть вычислен аналитически (рис. 13).

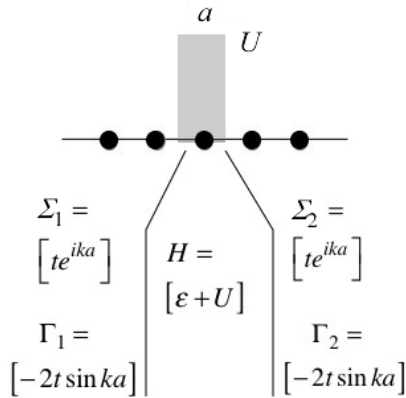


Рис. 13. К расчету коэффициента прохождения в 1D проводнике с одним рассеивающим центром методом НРФГ

Контактные матрицы 1×1 заданы, по ним вычислили Γ_1 и Γ_2 по (53), гриновская функция с учетом (100)

$$G^R(E) = \frac{1}{E - (\varepsilon + U) - 2te^{ika}} = \frac{1}{-U - i2t \sin ka}, \quad (111)$$

от нее комплексным сопряжением берем опережающую функцию G^A и сразу получаем коэффициент прохождения

$$\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2} \quad (112)$$

или с учетом (105) окончательно

$$\bar{T}(E) = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2} = \frac{(\hbar v / a)^2}{U^2 + (\hbar v / a)^2}. \quad (113)$$

Результаты вычислений в отсутствие рассеивающего центра ($U = 0$) и с его учетом $U = 2t_0$ показаны на рис. 11.

Выражение для коэффициента прохождения (113) полезно вывести также из элементарных соображений (рис. 14).

Удобства ради, перенумеруем атомы проводника так, чтобы дефект находился на атоме с номером 0. Падающая на рассеивающий центр волна $\exp(+ikz)$ отражается $\rho \cdot \exp(-ikz)$ с коэффициентом отражения ρ и проходит далее $\tau \cdot \exp(+ikz)$ с коэффи-

циентом прохождения τ . Из уравнения Шредингера в хюккелевском приближении имеем

$$E\psi_0 = (\varepsilon + U)\psi_0 + t\psi_{-1} + t\psi_{+1}. \quad (114)$$

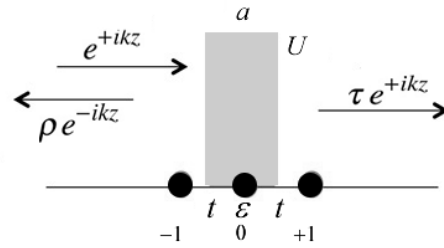


Рис. 14. К вычислению коэффициента прохождения из условия непрерывности волновой функции

Из закона сохранения и условия непрерывности волновой функции на дефекте ($z=0$) имеем

$$1 + \rho = \tau = \psi_0. \quad (115)$$

Подстановка в (114) волновых функций на соседних с дефектом атомах и с учетом (115) дает

$$(E - \varepsilon - U)\tau = t(e^{-ika} + (\tau - 1)e^{ika}) + t\tau e^{ika}, \quad (116)$$

а после простых преобразований и перегруппировок с учетом (100) и (105) для коэффициента прохождения τ получаем

$$\tau = \frac{\hbar v / a}{-U + \hbar v / a}, \quad (117)$$

что после умножения на его комплексно сопряженное получаем уже выведенное ранее методом НРФГ выражение для коэффициента прохождения (113).

10. Моделирование 2D проводника

Среди фундаментальных экспериментов 80-х годов, приведших к рождению мезофизики, были наблюдения проводимости баллистических 2D проводников, оказавшейся целочисленно пропорциональной кванту проводимости $2q^2/h$. Для понимания физики и интерпретации таких экспериментов нужна как можно более простая модель 2D проводника.

Для наших целей, по аналогии с 1D проводниками, достаточно двумерной модели неограниченного однородного проводника в приближении сильной связи с учетом взаимодействия лишь соседних атомов (рис. 15) в ортогональной базе, так называемой хюккелевской модели.

Параметры модели ε и t выберем таким образом, чтобы выполнялось стандартное дисперсионное соотношение с эффективной массой

$$E(k_x, k_y) = E_C + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}. \quad (118)$$

Решение уравнения Шредингера (86) выберем в виде

$$\psi_n = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (119)$$

где волновой вектор определяется его проекциями k_x и k_y в выбранной системе координат, а радиус-вектор указывает положение n -го атома в решетке. Подставляя это решение в уравнение (87), получаем дисперсионное соотношение

$$E(\vec{k}) = \sum_m H_{nm} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_n)), \quad (120)$$

которое для хюккелевской модели решетки дает

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= \varepsilon + t \exp(+ik_x a) + t \exp(-ik_x a) + \\ &+ t \exp(+ik_y a) + t \exp(-ik_y a) = \\ &= \varepsilon + 2t \cos(k_x a) + 2t \cos(k_y a). \end{aligned} \quad (121)$$

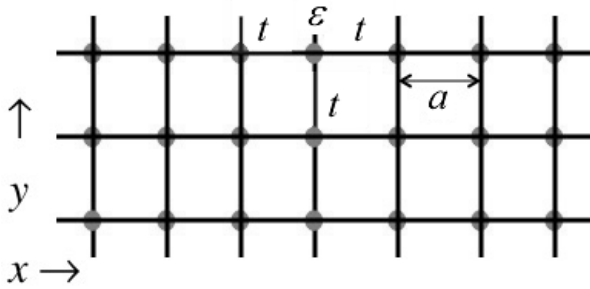


Рис. 15. Трансляционно-инвариантная решетка атомов с периодом a , поставляющих каждый по одному электрону, и характеризуемая в приближении Хюккеля двумя параметрами – кулоновским интегралом ε и резонансным интегралом t

Пользуясь теми же соображениями, что и для одномерной цепочки, для резонансного и кулоновского интегралов как параметров модели получаем

$$t = -\hbar^2 / 2ma^2, \quad (122)$$

$$\varepsilon = E_c - 4t \quad (123)$$

или несколько иначе

$$E_c = \varepsilon + 4t, \quad (124)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (125)$$

Составление хюккелевского гамильтониана H (рис. 16) не вызывает затруднений, обсудить лишь надо построение контактных матриц для 2D проводника.

Однако, сначала попробуем понять причины появления ступенек в зависимости коэффициента прохождения от энергии. Простое объяснение этого экспериментально наблюдаемого факта может быть следующим (ф-ла (105) в [1]). Для баллистического проводника коэффициент прохождения есть просто число мод $M(E)$, равное половине числа де-Бройлевских длин волн, укладывающихся в поперечном сечении проводника W ,

$$M = \text{Int} \left(\frac{2W}{h/p} \right) = \text{Int} \left(\frac{2W}{h} \sqrt{2mE'} \right), \quad (126)$$

где под значком $\text{Int}(x)$ подразумевается наибольшее целое число, меньшее значения x , а правая часть (126) выписана для параболической дисперсии $E' = E - E_c = p^2/2m$. Экспериментально при низких температурах [34, 35] измеряется число мод $M(E = \mu_0)$, которое будучи по своей физической природе целочисленным свойством показывает скачки при изменении энергии $E = \mu_0$ и поперечного сечения 2D проводника.

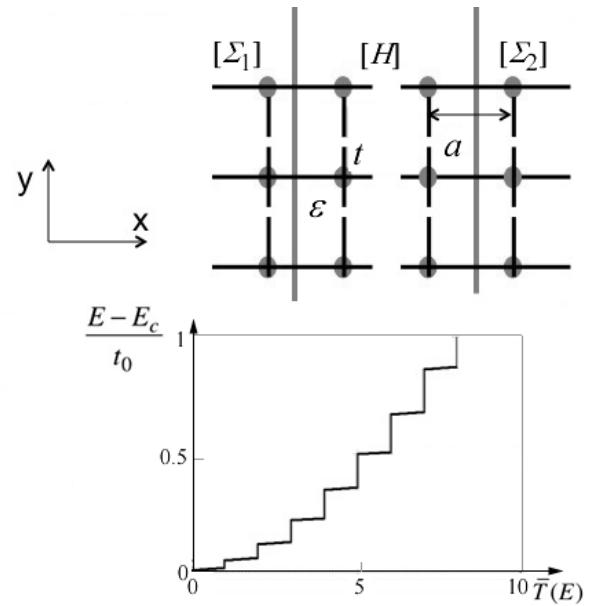


Рис. 16. Вычленение из двумерной решетки области собственно проводника и контактов для метода НРФГ и результаты расчета коэффициента прохождения методом НРФГ при числе атомов по ширине проводника, равном 25

Правильное поведение расчетного коэффициента прохождения с ростом энергии (рис. 16), о чем свидетельствует не только само наличие ступенек, но и их равноширинность, подтверждаемая экспериментальными данными [34, 35], свидетельствует о корректном задании энергетических матриц в расчете методом НРФГ. Покажем как появляются ступеньки (рис. 16) и построим гамильтониан и контактные матрицы для 2D решетки.

Пусть проводник имеет p атомов по ширине проводника и q атомов по длине проводника, т. е. матрица проводника имеет форму $(p \times q)$. Такой 2D проводник условно можно представить себе как p соединенных параллельно 1D проводников, каждый длиной q . Матрица $(p \times q)$ есть строчная матрица длины q , элементами которой являются столбцовые матрицы длины p . На рис. 17 показан проводник с одним столбцом формы $(p \times 1)$.

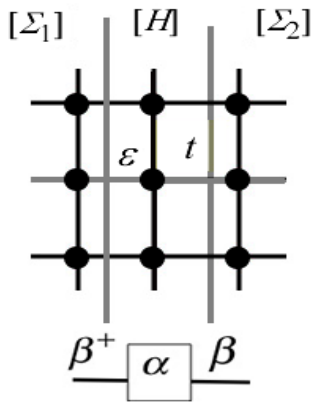


Рис. 17. Проводник формы $(p \times 1)$

Каждый из q столбцов описывается своей хюккелевской матрицей α порядка p . Например, при $p=3$ она имеет вид

$$\alpha = \begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 \\ t & \varepsilon & t \\ 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix}. \quad (127)$$

Столбцы связаны друг с другом резонансными интегралами t следующим образом. Рассмотрим связь между столбцами с соседними номерами n и $n+1$. Эта связь описывается скалярной матрицей $\beta = t \cdot I$ порядка p , где I – единичная матрица. В нашей модели, естественно, $\beta = \beta^+$. Например, при $p=3$

$$\beta = \begin{bmatrix} t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t \end{bmatrix}. \quad (128)$$

Гамильтониан H имеет блочную структуру. На его главной диагонали стоят одинаковые матрицы α порядка p , а ближайшие к ней диагонали сверху и снизу заполнены матрицами β тоже порядка p , остальные элементы нулевые. Если длина проводника составляет, скажем, $q=10$ атомам, а по ширине проводника располагается $p=5$ атомов, то порядок матрицы H равен $p \times q = 50$.

Решение задачи на собственные значения гамильтониана H сводится к диагонализации матрицы $[\alpha]$

$$[\tilde{\alpha}] = [V]^+ [\alpha] [V], \quad (129)$$

где столбцы матрицы $[V]$ есть собственные векторы матрицы $[\alpha]$, так что

$$\tilde{\alpha} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \quad (130)$$

Всегда возможно обратное преобразование из собственного, иначе модового базиса в исходный решеточный базис:

$$[\alpha] = [V][\tilde{\alpha}][V]^+. \quad (131)$$

Матрица β не затрагивается преобразованием базиса, поскольку она уже диагональная. Диагонализация матрицы α формы $(p \times p)$ приводит к занулению резонансных интегралов t , связывающих строки исходной матрицы гамильтониана, т. е. к превращению 2D проводника в p параллельно соединенных с контактами 1D проводников, каждый длиной q атомов (рис. 18) с энергиями $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_p$, равными собственным значениям матрицы α :

$$\varepsilon_n = \varepsilon - 2t_0 \cos k_n a, \quad (132)$$

с

$$k_n a = \frac{n\pi}{p+1}. \quad (133)$$

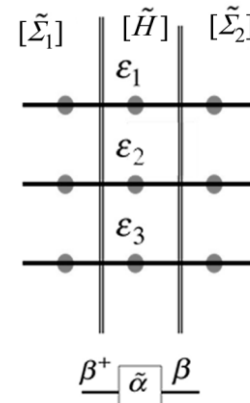


Рис. 18. 2D проводник в хюккелевском приближении после диагонализации гамильтониана H

Для каждого из p параллельных 1D проводников коэффициент прохождения равен единице в области энергий $(t_0 \equiv |t|) \varepsilon_n - 2t_0 < E < \varepsilon_n + 2t_0$, как показано на рис. 19.

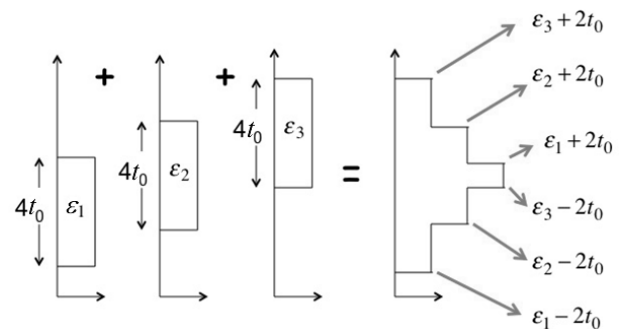


Рис. 19. К образованию ступенек (рис. 16) в зависимости коэффициента прохождения от энергии

Складывая коэффициенты прохождения для всех p мод проводника, получаем зависимость коэффициента прохождения от энергии в виде поднимающихся ступенек в нижней части графика (рис. 16) и опускающихся ступенек в верхней части графика. При моделировании проводников n -типа обычно вы-

числяют нижнюю часть зоны (рис. 16) и мы видим лишь идущие вверх ступеньки с энергиями $\varepsilon_n - 2t_0$. Используя (132), (133) и (124), находим положение ступенек

$$\varepsilon_n - 2t_0 = E_c + 2t_0 \left(1 - \cos \frac{n\pi}{p+1} \right). \quad (134)$$

На рис. 20 результаты расчета коэффициента прохождения методом НРФГ при числе атомов по ширине проводника $p=25$ (рис. 16) показаны вместе с огибающей ступенек, вычисленной по (134) при той же ширине проводника $p=25$.

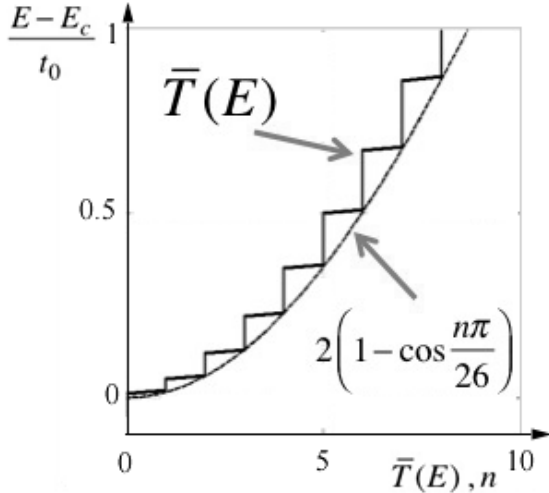


Рис. 20. Сопоставление численных результатов расчета коэффициента прохождения методом НРФГ с аналитической аппроксимацией по (134) при $p=25$

Представление 2D/3D проводника в виде параллельных 1D проводников представляется нам не только физически корректным, но и исключительно полезным подходом при интерпретации экспериментальных данных. Каждый из этих 1D проводников называют модой или подзоной с дисперсионным соотношением

$$E_n(k_x) = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_x a, \quad (135)$$

как показано на рис. 21.

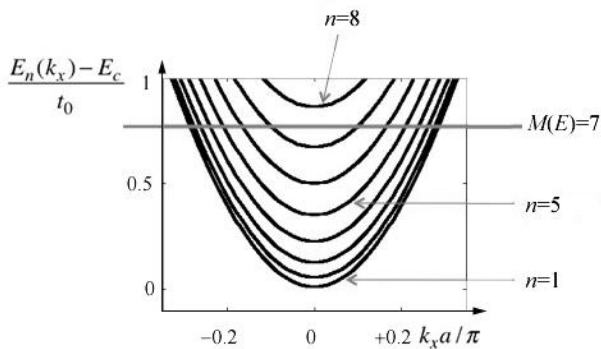


Рис. 21. Нижние восемь подзон хюккелевской модели 2D проводника

Дисперсионные соотношения для подзон получаются из общего выражения (121) при требовании, чтобы k_y принимал квантованные значения

$$k_y a = \frac{n\pi}{p+1}, \quad (136)$$

где каждое значение n порождает одну соответствующую подзону (рис. 21).

Горизонтальная линия, проведенная при определенной энергии E , пересекает число подзон, равное удвоенному значению мод при этой энергии, поскольку каждая мода порождает два пересечения, одно для состояния с положительной скоростью, а другое – с отрицательной.

10. 1. Контактные собственные энергии для 2D проводника

В идеальном случае контакты должны быть такими, чтобы электроны беспрепятственно покидали проводник и не возвращались в результате отражения от границ контактов. Мы рассмотрим простейшую модель таких контактов, которая сводится к тому, что контакт является естественным продолжением самого проводника.

2D проводник ширины p эквивалентен p параллельным 1D проводникам в результате преобразования базиса

$$[\tilde{X}] = [V]^+ [X][V], \quad (137)$$

где матрица X в решеточном базисе преобразуется в матрицу \tilde{X} в модовом базисе или обратно

$$[X] = [V][\tilde{X}][V]^+, \quad (138)$$

как это было продемонстрировано выше для гамильтониана H . В результате для каждого из p независимых 1D проводников легко выписывается своя контактная матрица, а затем они все собираются в полную матрицу Σ .

В хюккелевской модели 2D проводника каждый из p 1D проводников характеризуется собственной энергией контакта $t \exp(ika)$ с соответствующим значением ka для конкретного 1D проводника при заданной энергии E . Для моды с номером n

$$E = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_n a, \quad (139)$$

так что контактная матрица в модовом базисе

$$[\tilde{\Sigma}_1] = \begin{bmatrix} te^{ik_1 a} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & te^{ik_2 a} & 0 & \\ 0 & 0 & te^{ik_3 a} & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix}, \quad (140)$$

а после преобразования в решеточный базис (рис. 22)

$$[\Sigma_1] = [V][\tilde{\Sigma}_1][V]^+. \quad (141)$$

Изложенный выше метод построения контактных матриц подходит для однородных решеток, но не пригоден в общем случае, поскольку далеко не всегда удастся одним и тем же преобразованием базиса диагонализировать одновременно и матрицу α и матрицу β . А в рассмотренном нами случае матрица β вообще скалярная, т. е. уже диагонализирована. Примером подобного рода может служить решетка графена.

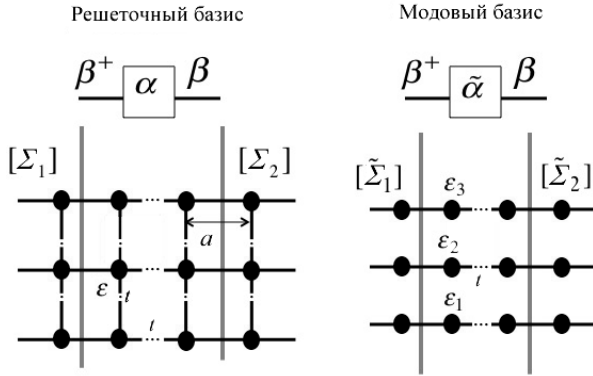


Рис. 22. К построению контактных матриц в модовом базисе с обратным преобразованием в решеточный базис

11. Графен

В рассмотренной однородной решетке (рис. 15) каждый атом находится в одном и том же окружении. В правильной гексагональной решетке графена (рис. 23) есть два сорта атомов.

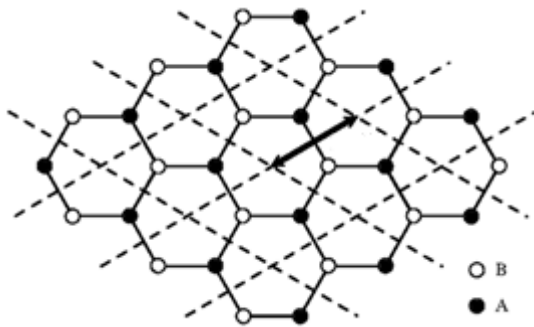


Рис. 23. Элементарная ячейка графена и вектор трансляции решеток Бравэ А и В

Атомы сортов А и В находятся в разном окружении. У атома сорта А слева один атом, а справа два, а у атома сорта В наоборот. Трансляционную инвариантность графеновой решетки обеспечивают два атома, образующие элементарную ячейку в виде правильного ромба. Учитывая наличие двух неэквивалентных атомов в элементарной ячейке, уравнение Шредингера (86) перепишем в виде

$$E\{\psi\}_n = \sum_m [H]_{nm} \{\psi\}_m, \tag{142}$$

где $\{\psi\}_n$ есть вектор-столбец формы (2×1) , компоненты которого соответствуют двум атомам сорта А и В, образующим элементарную ячейку с номером n .

Гамильтониан формы (2×2) устанавливает связь между атомами сорта А и В ячейки с номером n и атомами сорта А и В ячейки с номером m .

Решение запишем в виде

$$\{\psi\}_n = \{\psi\}_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_n), \tag{143}$$

после подстановки которого в (142), имеем

$$E\{\psi\}_0 = [h(\vec{k})]\{\psi\}_0, \tag{144}$$

где гамильтониан с учетом фазового множителя

$$[h(\vec{k})] = \sum_m [H]_{mm} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_n)) \tag{145}$$

также имеет форму (2×2) . Вычислим его, воспользовавшись вырезкой из графена, содержащей ячейку в окружении ее четырех ближайших ячеек (рис. 24).

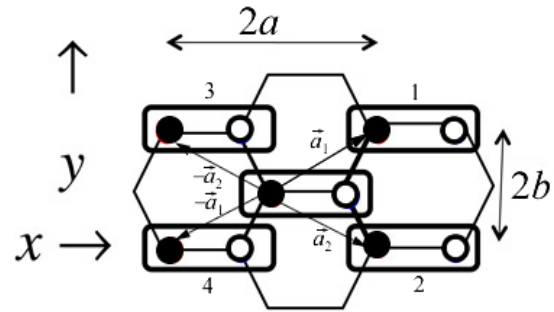


Рис. 24. Элементарная ячейка графена с номером 0 в окружении ближайших четырех ячеек с номерами 1, 2, 3, 4

Потребуется также два вектора

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\hat{x} + b\hat{y}, \\ \vec{a}_2 &= a\hat{x} - b\hat{y}, \end{aligned} \tag{146}$$

связанные с геометрическими параметрами графеновой сетки

$$a = 3a_0 \text{ и } b = \sqrt{3}a_0 / 2, \tag{147}$$

где a_0 – длина связи СС в графене, обычно принимаемая равной 1.42 \AA .

Вклады в гамильтониан (145) от пяти ячеек с учетом векторов (146) (рис. 24)

$$\begin{aligned} & e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \\ & + \begin{bmatrix} \varepsilon & t \\ t & \varepsilon \end{bmatrix} \\ & + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \end{aligned} \tag{148}$$

нужно суммировать вместе с соответствующими фазовыми множителями. У центральной ячейки фазовый множитель отсутствует, поскольку это диагональный вклад в гамильтониан ($n=m=0$). Взаимодействие ячеек с $n=0$ и $m=1$ в хюккелевской модели сводится лишь к одному резонансному интегралу t между атомом В центральной ячейки и атомом А ячейки $m=1$. Аналогично для взаимодействия центральной ячейки с ячейкой $m=2$. Отличаются они только фазовыми множителями: сдвиг первой ячейки по отношению к центральной определяется вектором \vec{a}_1 , а второй ячейки – вектором \vec{a}_2 (рис. 24). Аналогично получаются вклады от ячеек 3 и 4.

Суммирование пяти матриц (148) дает для гамильтониана (145)

$$[h(\vec{k})] = \begin{bmatrix} \varepsilon & h_0^* \\ h_0 & \varepsilon \end{bmatrix}, \quad (149)$$

где

$$h_0 \equiv t + te^{+ik \cdot \vec{a}_1} + te^{+ik \cdot \vec{a}_2} \quad (150)$$

или с учетом (146)

$$h_0 \equiv t(1 + 2\cos(k_y b) \exp(+ik_x a)). \quad (151)$$

Диагонализация (144) с учетом (149) дает дисперсионное соотношение

$$E(\vec{k}) = \varepsilon \pm |h_0(\vec{k})|, \quad (152)$$

привести которое к привычному для графена виду

$$E = \pm v_0 p, \quad (153)$$

где v_0 – фермиевская скорость, составляющая примерно 1/300 от скорости света, можно путем линеаризации h_0 вблизи дираковских точек, в которых

$$h_0(\vec{k}) = 0, \quad (154)$$

так что

$$E(\vec{k}) = \varepsilon. \quad (155)$$

В этих точках равновесный электрохимический потенциал расположен при ε для нейтральных систем, у которых ровно половина уровней энергии заполнена (валентная зона), а другая половина – пустая (зона проводимости). Дираковских точек – три пары (рис. 25).

Выберем пару, соответствующую $k_x = 0$. Тогда гамильтониан (151) обращается в ноль при $k_y b = \pm 2\pi/3$.

Разложение гамильтониана (151) в ряд Тейлора вблизи этой пары точек дает

$$h_0(\vec{k}) \approx \pm ita(k_x \mp i\beta_y), \quad (156)$$

где

$$\beta_y \equiv k_y \mp 2\pi/3b. \quad (157)$$

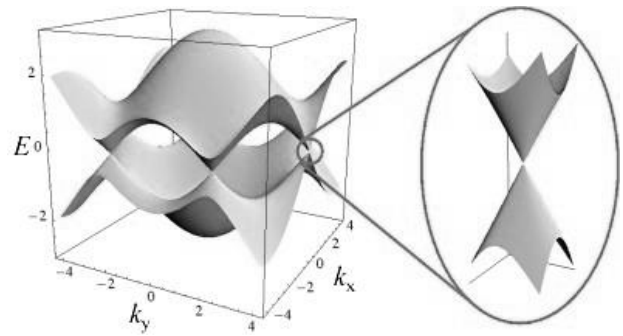


Рис. 25. Зонная структура графена. Увеличенным масштабом показан линейный спектр носителей тока в окрестности точки Дирака $k_x a = 0$ и $k_y b = +2\pi/3$ (рис. 26)

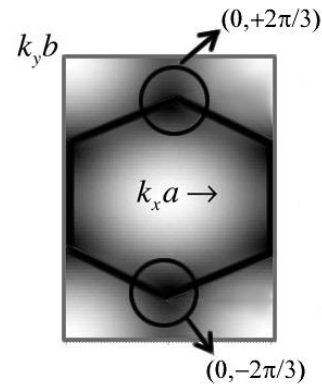


Рис. 26. Сечение зонной структуры графена по дираковским точкам, область вблизи которых зачернена

После не сложных преобразований окончательно получаем дисперсионное соотношение в окрестности дираковских точек

$$E = \varepsilon \pm at\sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (158)$$

что при $\varepsilon=0$ эквивалентно стандартной записи (153). Далее рассмотрим построение контактных матриц для графена.

12. Общий метод построения контактных матриц

Любой 2D проводник с одинаковым по всей длине проводника сечением по его ширине может быть разбит на фрагменты, повторяющие друг друга по всей длине проводника. Например, в случае графена таким фрагментом может быть вырезка, повторяющаяся по всей длине графенового проводника и показанная в одном экземпляре на рис. 27.

Фрагмент описывается матрицей гамильтониана $[H] \equiv \alpha$ порядка n по числу используемых базисных функций. Например, для фрагмента на рис. 27 $n=12$ в хюккелевском приближении. Матрицы фрагментов α связываются между собой матрицами β .

Рассмотрим правую границу проводника с контактом (рис. 28).

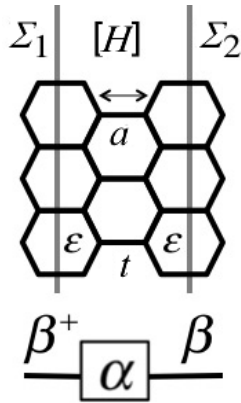


Рис. 27. К построению контактных матриц для графена

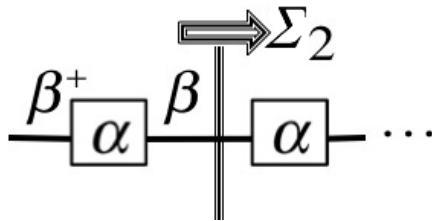


Рис. 28. Правая граница проводника с контактом

Контактная блочная матрица везде нулевая кроме последнего диагонального элемента с номером n

$$\Sigma_2(E) = \begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & 0 \\ \dots & 0 & \beta g_2 \beta^+ \end{bmatrix}. \quad (159)$$

В этом ненулевом блоке g_2 называют граничной (surface) функцией Грина для контакта 2 и вычисляют ее итерационно из уравнения

$$[g_2]^{-1} = (E + iO^+)I - \alpha - \beta^+ g_2 \beta, \quad (160)$$

где O^+ – инфинитезимальное положительное число, выбором которого управляют сходимостью итерационного процесса, а слагаемое iO^+I обеспечивает отрицательность мнимых частей и неэрмитовость матриц g и Σ .

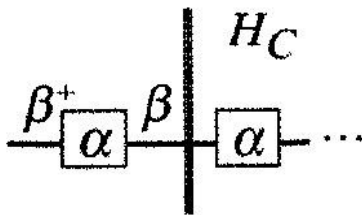


Рис. 29. Правая граница проводника с контактом в общем случае

Рассмотрим вывод уравнения (160) в более общем случае (рис. 29), когда

последний фрагмент проводника связан с неограниченным контактом, описываемым гамильтонианом H_c

$$\begin{bmatrix} \alpha & B \\ B^+ & H_c \end{bmatrix}, \quad (161)$$

где

$$[B] \equiv [\beta \ 0 \ 0 \ \dots]. \quad (162)$$

Результирующая запаздывающая функция Грина вычисляется из равенства

$$\begin{bmatrix} A & -B \\ -B^+ & A_c \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} G^R & \dots \\ \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (163)$$

где

$$A \equiv (E + iO^+)I - \alpha, \quad (164)$$

$$A_c \equiv (E + iO^+)I_c - H_c. \quad (165)$$

Для вычисления G^R из (163) обратимся к очевидному равенству для блочных матриц

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} \times \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}, \quad (166)$$

перемножая которые после несложных преобразований получим

$$p = (A - BD^{-1}C)^{-1}. \quad (167)$$

Воспользовавшись матричным равенством (167), для G^R из (163) имеем

$$G^R = [A - BA_c^{-1}B^+]^{-1}, \quad (168)$$

так что контактная матрица

$$\Sigma = BA_c^{-1}B^+. \quad (169)$$

Поскольку матрица B (162) имеет единственный ненулевой элемент β , имеем

$$\Sigma = \beta g \beta^+, \quad (170)$$

где g представляет собой верхний блок матрицы $[A_c]^{-1}$:

$$\begin{bmatrix} A & -\beta & 0 & 0 & \dots \\ -\beta^+ & A & -\beta & 0 & \dots \\ 0 & -\beta^+ & A & -\beta & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} g & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (171)$$

Искомое уравнение (160) получается, если уравнение (168) применить к матрице $N \times N$ (171), рассматривая первый блок A как проводник, а остальное $(N-1) \times (N-1)$ как контакт. Тогда

$$g_N = [A - \beta g_{N-1} \beta^+]^{-1}, \quad (172)$$

где g_N соответствует g в правой части уравнения (171), если матрица слева имеет размеры $N \times N$. Уравнение (172) решается итеративно, начиная с известного g_1 , далее g_2 и так далее, пока g_N не совпадет с g_{N-1} с наперед заданной точностью, давая решение уравнения (160)

$$g = [A - \beta g \beta^+]^{-1}. \quad (173)$$

Полезно получить уже известное нам значение Σ для однородного 1D проводника, воспользовавшись общим методом построения контактных матриц Σ по уравнению (170). Сначала найдем g по уравнению (173), в котором $A = EI - \alpha$. Для однородного проводника $\alpha = \varepsilon$, $\beta = t$, $I = 1$, так что

$$g^{-1} = E - \varepsilon - t^2 g$$

или иначе

$$t^2 g^2 - (E - \varepsilon)g + 1 = 0,$$

решением которого является

$$g = \frac{(E - \varepsilon) \pm \sqrt{(E - \varepsilon)^2 - 4t^2}}{2t^2} = \frac{1}{t} \left(\cos ka \pm \sqrt{\cos^2 ka - 1} \right) = \frac{e^{\pm ika}}{t}, \quad (174)$$

где мы воспользовались дисперсионным соотношением для однородного 1D проводника (92). Подставляя (174) в (170), получаем уже известное нам выражение для однородного проводника $t \exp(ika)$, где в показателе экспоненты знак «+» выбран по физическим соображениям.

13. Баллистическая проводимость графена

В качестве иллюстративного примера приведем результаты расчета коэффициента прохождения и плотности состояний состояний хюккелевской модели графеновых лент для его двух конфигураций границ (рис. 30) – зигзагообразной (Zigzag Graphene Nano Ribon / ZGNR) и креслоподобной (Armchair Graphene Nano Ribon / AGNR) [36]. Расчеты проводились для лент шириной $W = 53 \text{ нм}$ с резонансным интегралом $t_0 = 2.7 \text{ эВ}$.

Поскольку рассматриваемые идеальные графеновые ленты являются баллистическими проводниками, то коэффициенты прохождения равны числу мод

$$M = \text{Int} \left(\frac{2W}{h/p} \right) = \text{Int} \left(\frac{2W}{h} \frac{E}{v_0} \right), \quad (175)$$

где использовано дисперсионное соотношение для графена (153). Фермиевская скорость v_0 полагалась равной 10^6 м/с , обычно используемой в литературе [37].

Результаты расчета коэффициента прохождения и плотности состояний методом НРФГ представлены на рис. 31.

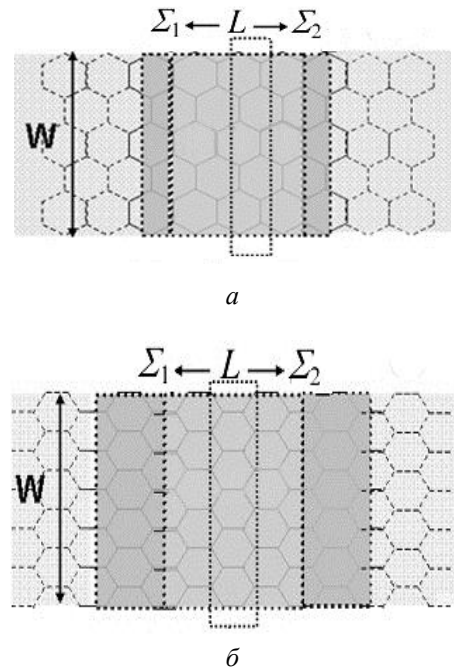


Рис. 30. Выбор повторяющихся фрагментов (показаны прямоугольниками, выступающими за пределы ширины лент W) двух конфигураций границ: a – зигзагообразной; b – креслоподобной

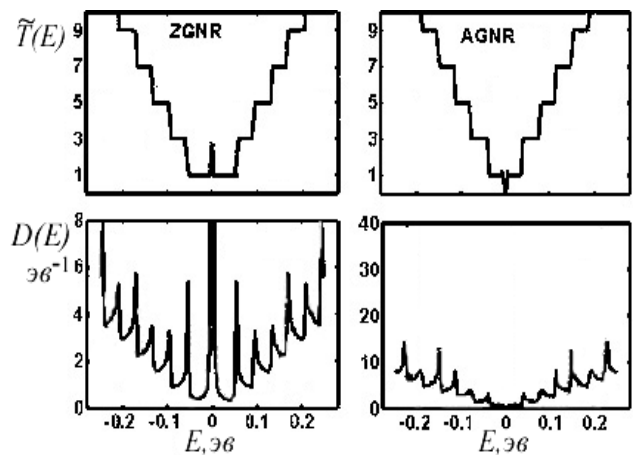


Рис. 31. Коэффициент прохождения и плотность состояний для двух конфигураций границ – зигзагообразной ZGNR (слева) и креслоподобной AGNR (справа)

Обращает на себя внимание высокая плотность состояний при $E = 0$ для зигзагообразной конфигурации графеновой ленты. Это так называемые краевые локальные состояния вблизи уровня Ферми, отсутствующие у креслоподобной конфигурации [38, 39]. В нашу задачу не входит анализ результатов расчета, тем более, что роль конфигурации границ и ширины графеновых лент детально изучены [38–42]. Отметим лишь высокую правдоподобность результатов, получаемых даже в рамках такой простейшей хюккелевской модели графена.

14. Дефазировка

До сих пор рассматривались только физические контакты $[\Sigma_{1,2}]$ в квантовой модели когерентно-

го транспорта, в которой электроны движутся когерентно от истока к стоку по каналу, описываемому статическим гамильтонианом $[H]$ в отсутствие взаимодействия электрона с окружением при его движении по каналу, описываемому собственной энергией $[\Sigma_0]$ (рис. 32).

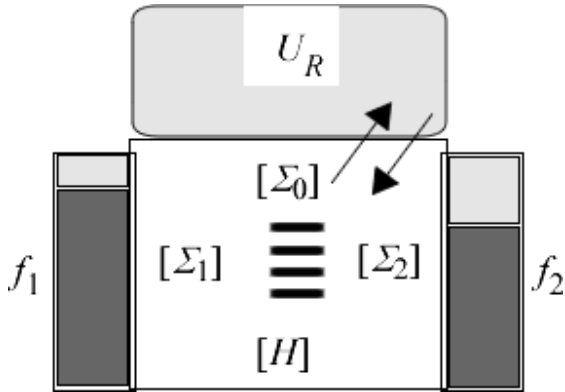


Рис. 32. Модель квантового транспорта с простой упругой дефазировкой

Что из себя физически представляет взаимодействие Σ_0 ? С точки зрения электрона, движущегося по проводнику, среда не представляется электрону статической, описываемой статическим гамильтонианом $[H]$, а весьма турбулентной средой со случайно меняющимся потенциалом U_R , который флуктуирует в пикосекундной шкале времени. Даже при достаточно низких температурах с замороженными фоновыми модами электрон движется в поле флуктуирующего потенциала, создаваемого всеми другими электронами (приближение самосогласованного поля). Даже в этом случае имеют место фазовые флуктуации (дефазировка), приводящие к флуктуации тока. Этот эффект усреднения нужно адекватно моделировать, если мы хотим правильно интерпретировать экспериментальные данные.

Метод НРФГ был первоначально разработан именно для учета неупругих процессов квантового транспорта в массивных проводниках. Мы же пока что изложили его выше применительно к упругим резисторам. Сейчас мы рассмотрим сравнительно простую модель упругой дефазировки.

Что представляет из себя процесс дефазировки? Или другими словами, чем когерентный процесс отличается от некогерентного? Когерентный транспорт это такой процесс движения электрона по проводнику, при котором состояние остальных частиц в канале проводимости не изменяется. Простой отскок электрона от упругого дефекта обратно в канал проводимости есть процесс когерентный. Если же электрон передал часть своей энергии, скажем, атому решетки и атом начал совершать колебания с большей амплитудой, то такой процесс некогерентный. Это вроде бы означает, что некогерентный процесс также должен быть неупругим, происходящим с обменом энергии. Однако же, это не обязательно так, и классическим примером может служить спиновая дефазировка.

Пусть имеем магнитную примесь с двумя состояниями спина одинаковой энергии (вырождение).

И пусть электрон, взаимодействуя с примесью, меняет направление спина на противоположное, без изменения его энергии. Такой процесс – упругий. И тем не менее, это некогерентный процесс, поскольку состояние электрона изменилось.

Что делает такой процесс некогерентным? Не можем ли мы рассматривать электрон и спиновую примесь как единую составную систему, состояние которой не изменилось и поэтому процесс можно считать когерентным? Что в действительности делает такие процессы некогерентными, так это внешние силы, которые инспирируют возвращение примесных спинов в неполяризованное состояние (50 % «вверх» и 50 % «вниз»). Такой процесс «стирания информации» и есть суть спиновой дефазировки. В общем случае под дефазировкой понимается такой процесс, при котором квантовомеханическая интерференция разрушается.

14.1. Упругая дефазировка

Процессы упругой дефазировки в методе НРФГ описываются матрицами собственной энергии

$$[\Sigma_0] = D \times [G^R], \quad (176)$$

$$[\Sigma_0^{in}] = D \times [G^n], \quad (177)$$

$$[\Gamma_0] = D \times [A], \quad (178)$$

где «крест» \times означает поэлементное умножение матриц, а элементы матрицы D описывают корреляцию между случайными значениями потенциала в узлах i и j проводника:

$$D_{ij} = \langle U_{Ri} U_{Rj} \rangle. \quad (179)$$

Две предельные модели корреляционных связей представляют интерес. В первой из них случайный потенциал полностью скоррелирован во всех узлах по всей длине канала проводимости, имеет одно и то же значение для любого узла i , так что все элементы матрицы D одинаковы и равны D_0 :

$$(Модель A) D_{ij} = D_0. \quad (180)$$

Во второй модели корреляция отсутствует между узлами проводника, матрица D скалярная:

$$(Модель B) D_{ij} = D_0 \cdot \delta_{ij}, \quad (181)$$

где δ_{ij} – дельта-функция Кронекера. Реальные процессы описываются обычно промежуточными случаями.

Происхождение формул (176)–(178) можно понять, если обратиться к исходному при построении метода НРФГ в матричной форме уравнению Шредингера

$$E \{ \psi \} = [H + \Sigma_1 + \Sigma_2] \{ \psi \} + \{ s_1 \}, \quad (182)$$

где $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$ – контактные матрицы собственной энергии, а матрица-столбец $\{s_1\}$ описывает приток электронов в проводник с левого контакта 1 (рис. 32).

Случайный потенциал вводится в уравнение Шредингера по аналогии с матрицами собственной энергии

$$E\{\psi\} = [H + \Sigma_1 + \Sigma_2]\{\psi\} + U_R\{\psi\} + \{s_1\} \quad (183)$$

с соответствующим притоковым членом

$$\Sigma_0^{in} A = 2\pi U_R U_R^* \{\psi\} \{\psi\}^+ = D_0 G^n, \quad (184)$$

выписанным для модели А. Несколько более длинные выкладки ведут к аналогичному выражению для модели В. В итоге имеем формулу (177).

Для обоснования формулы (178) заметим, что эта формула вместе с (177) должны обеспечивать нулевой ток на «терминале 0», что следует из четвертого уравнения (16) в формализме НРФГ, а именно:

$$I_0 = \frac{q}{h} Tr[\Sigma_0^{in} A - \Gamma_0 G^n] = D_0 \frac{q}{h} Tr[G^n \Gamma_0 - \Gamma_0 G^n] = 0 \quad (185)$$

и является обязательным условием, поскольку «терминал 0» не является физическим контактом, где электроны могут переходить в проводник или покидать его.

Действительно, в свое время Бюттекер предложил для учета некогерентных процессов вводить фиктивный контакт (зонд Бюттекера), электрохимический потенциал которого подбирается таким образом, чтобы гарантировать на этом контакте нулевой ток [22, 43]. В формализме НРФГ это ведет к утверждению, что

$$\Sigma_0^{in} = \Gamma_0 f_p, \quad (186)$$

где число f_p подбирается таким, чтобы обеспечить нулевой ток на фиктивном терминале. Это эквивалентно рассуждениям выше, если связь Γ_0 «терминала» с проводником выбрать пропорциональным спектральной функции $[A]$ как это требуется согласно (178).

Обратим внимание на то обстоятельство, что уравнения (176) – (178) предполагают самосогласованную процедуру вычислений, поскольку Σ и Σ^{in} зависят от G^R и G^n , которые в свою очередь, согласно уравнениям (6) и (13), зависят от Σ и Σ^{in} ; а также на то, что модель А (180) предполагает вычисление полной гриновской функции, что для достаточно больших устройств ведет к появлению в расчетах матриц весьма большого порядка, в то время как модель В (181) не требует столь значительных вычислительных ресурсов, поскольку вычислению подлежат только диагональные элементы гриновских матриц.

Существенное концептуальное различие между моделями А и В состоит в том, что модель А разрушает фазировку, но не затрагивает импульсы, в то время как модель В разрушает также и импульсы [44]. Процесс дефазировки можно представить себе как «извлечение» электрона из проводника в состоянии $[G^n]$ и последующей «инъекции» его обратно в проводник в состоянии $D \times G^n$. Модель А предполагает умножение

гриновской матрицы $[G^n]$ на константу, так что электрон «реинжектируется» точно в то же самое состояние, в котором он был «извлечен», без потери импульса, тогда как в модели В отбрасываются недиагональные элементы матрицы D и при «реинжектировании» электрон меняет траекторию движения на некую произвольную по сравнению с той траекторией, с которой он был «извлечен». Вся эта ситуация станет яснее ниже при рассмотрении конкретных примеров.

Вместо учета упругой дефазировки через матрицу собственной энергии $[\Sigma_0]$ можно было бы включить случайный потенциал U_R в гамильтониан с дальнейшим усреднением его по возможным случайным реализациям U_R . Оба подхода хотя и не совсем эквивалентны, однако, в ряде случаев приводят к одинаковым результатам, в чем мы также убедимся ниже на конкретных примерах.

Полноты ради, отметим, что в самом общем случае D есть тензор 4-го ранга, связывающий друг с другом пары матриц, а именно:

$$[\Sigma_0]_{ij} = \sum_{k,l} D_{ijkl} [G^R]_{kl}, \quad (187)$$

$$[\Sigma_0^{in}]_{ij} = \sum_{k,l} D_{ijkl} [G^n]_{kl}, \quad (188)$$

а упругая дефазировка (176)–(178) реализуется через ненулевые D_{ijkl} при $i=k$ и $j=l$.

15. 1D проводник с двумя и более рассеивающими центрами

Выше подробно рассматривался 1D проводник с одним рассеивающим центром (п. 9. 3), характеризуемым коэффициентом прохождения T . В [45] было показано, что сопротивление такого проводника R_l может быть разбито на две части – сопротивление рассеивающего центра и граничное сопротивление (соответственно, уравнения (34) и (35) в [45]):

$$R_l = \frac{h}{q^2 M} \left(\frac{1-T}{T} + 1 \right). \quad (189)$$

Зададимся вопросом, каково будет сопротивление R_2 проводника с двумя одинаковыми рассеивающими центрами, каждый с коэффициентом прохождения T . Такой проводник можно рассматривать как последовательное соединение двух проводников, каждый с одним и тем же рассеивающим центром (рис. 33).

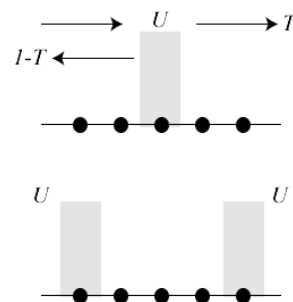


Рис. 33. Проводник с одним и с двумя одинаковыми рассеивающими центрами

Можно ожидать, что в проводнике с двумя центрами вклад от рассеивающих центров удвоится:

$$R_2 = \frac{h}{q^2 M} \left(2 \frac{1-T}{T} + 1 \right) = \frac{h}{q^2 M} \frac{2-T}{T}, \quad (190)$$

так что

$$R_2 = R_1 (2-T). \quad (191)$$

Если коэффициент прохождения рассеивающих центров T близок к единице, то имеет место баллистический предел проводимости с $R_2 \approx R_1$: два одинаковых проводника, каждый с одним и тем же рассеивающим центром и соединенных последовательно, проводят так же, как один из них, поскольку все сопротивление является граничным.

Если $T \ll 1$, имеет место омический предел с $R_2 \approx 2R_1$: два таких проводника, соединенных последовательно, удваивают сопротивление одного проводника, поскольку все сопротивление связано с каналом проводимости.

Но может ли R_2 быть меньше, чем R_1 ? Если бы электроны подчинялись законам классической механики, то, конечно, нет. Увеличение количества препятствий на автомобильном шоссе не может увеличить предельный трафик на этом шоссе. А вот на «квантовом шоссе» такое вполне возможно благодаря квантовой (волновой) интерференции.

Для решения задач такого типа воспользуемся рассмотренной выше моделью однородного 1D проводника в хюккелевском приближении (п. 9. 1). Вспомним поведение коэффициента прохождения в проводнике с одним рассеивающим центром $U=2t_0$ (рис. 11) и сравним его с таким же проводником, но с двумя одинаковыми такими же рассеивающими центрами (рис. 34).

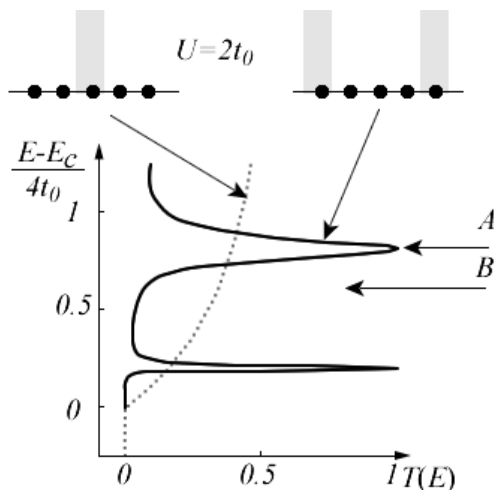


Рис. 34. Коэффициент прохождения в одномерном 1D проводнике с одним и с двумя одинаковыми рассеивающими центрами с $U=2t_0$

Если электрохимический потенциал в устройстве с проводником с двумя рассеивающими центрами окажется на уровне В (рис. 34), то коэффициент прохождения окажется меньше, чем в проводнике с

одним центром; другими словами, сопротивление R_2 окажется больше, чем R_1 . Если же случится так, что химпотенциал окажется на уровне А (рис. 34), то R_2 окажется даже меньше, чем R_1 .

Рассмотрим проводник со случайно распределенными рассеивающими центрами. Квантовый расчет методом НРФГ для шести таких центров показывает, что проводимость весьма и весьма низкая (практически омическое поведение), исключая многочисленные всплески проводимости, редко вплоть до значений, близких к единице (рис. 35).

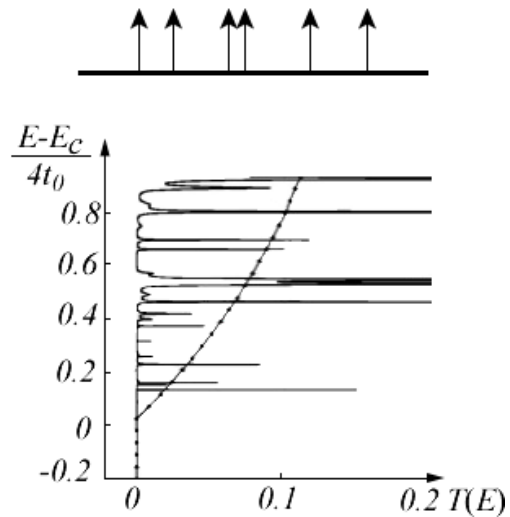


Рис. 35. Коэффициент прохождения в одномерном 1D проводнике с шестью одинаковыми случайно разбросанными рассеивающими центрами с $U=2t_0$ [4]. Точками показан результат полуклассического расчета (рис. 11) в пересчете на шесть центров

На рис. 34 точками показан также полуклассический результат, полученный вначале для одиночного рассеивающего центра (рис. 11), а затем вклад от него увеличен в шесть раз. Для сопротивления такого проводника имеем

$$R_6 = \frac{h}{q^2 M} \left(6 \frac{1-T}{T} + 1 \right) = \frac{h}{q^2 M} \frac{6-5T}{T}, \quad (192)$$

где первое слагаемое в скобках обусловлено шестью рассеивающими центрами, а второе слагаемое – граничным сопротивлением.

Квантовые расчеты показывают аналогичное поведение и в мультимодовых проводниках как только классический коэффициент прохождения $M\lambda/L$ оказывается меньше единицы. О таких проводниках говорят, что они находятся в режиме сильной локализации. Любопытно, что даже если $M\lambda/L$ превосходит единицу, то квант проводимости лишь не намного меньше классического значения; о таких проводниках говорят, что они находятся в режиме слабой локализации.

Подобные эффекты локализации обычно экспериментально наблюдаются только при низких температурах. При комнатной температуре крайне редко можно встретиться с отклонением от закона Ома.

Рассмотрим, например, медную проволоку с поперечным сечением $10\text{ нм} \times 10\text{ нм}$, которое содержит приблизительно 1000 атомов, и стало быть число мод $M \approx 1000$. Пусть средний свободный пробег $\lambda \approx 40\text{ нм}$. Тогда такая проволока длиной не более чем $M\lambda \approx 40\text{ мкм}$ должна обнаруживать неомическое поведение, что не подтверждается экспериментальными наблюдениями. Причина этого кроется в том, что эффекты локализации вызываются квантовой интерференцией и наблюдаются только в том случае, когда имеет место фазовая когерентность по всей длине проводника. Медная проволока длиной $L \approx 40\text{ мкм}$ фазово некогерентна, тем более при комнатной температуре. Концептуально реальный проводник можно рассматривать как последовательность отдельных когерентных проводников, каждый длиной, равной длине фазовой когерентности L_p . Видим мы или не видим эффекты локализации зависит не от $M\lambda/L$, а от $M\lambda/L_p$.

Основной вывод состоит в том, что для интерпретации реальных экспериментов при комнатной температуре в формализме НРФГ, как правило, необходимо в той или иной степени учитывать процессы дефазировки, как это описано выше. Пока мы так или иначе не учтем дефазировку, в квантовых моделях электронного транспорта проявятся эффекты интерференции, ведущие к сильной локализации или к резонансному туннелированию. В подтверждение этого рассмотрим изменение потенциала вдоль канала проводника с дефектами методом НРФГ [4].

16. Скачок потенциала на дефектах

Профиль потенциала одномодового проводника с одним дефектом прозрачности T рассматривался выше, а также в [45]. Проводимость такого проводника дается формулой (34) из [45]. Тогда сопротивление этого проводника, нормированное на квант сопротивления,

$$R_{Norm} = (1-T)/T. \quad (193)$$

Полуклассическое выражение для коэффициента прохождения T дается выше формулой (113). Тогда нормированное сопротивление на дефекте равно

$$R_{Norm} = (Ua/\hbar v)^2. \quad (194)$$

Полуклассический профиль потенциала со скачками на граничных сопротивлениях \hbar/q^2 , согласно (36) из [45], и на сопротивлении на дефекте (194) показан на рис. 36 вместе с результатом, полученным методом НРФГ без учета дефазировки.

Техника вычисления заселенности f в методе НРФГ через функцию Грина и спектральную функцию и далее электрохимического потенциала описана в [45, ф-лы (87) и (88)].

Заселенность в расчете методом НРФГ в результате квантовой интерференции осциллирует

настолько сильно, что становится затруднительным увидеть скачок потенциала на дефекте (рис. 36).

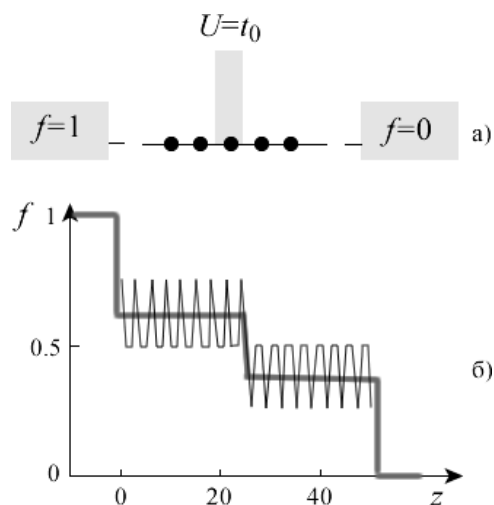


Рис. 36. Схема одномодового проводника и его квантовые осцилляции: а – схема с одним дефектом $U=t_0$; б – Осцилляции в методе НРФГ без дефазировки ($D_0=0$) в режиме когерентности при $E = t_0$ на фоне полуклассических скачков потенциала

Экспериментально профиль потенциала обычно измеряется сканирующим туннельным микроскопом (рис. 14 в [45]) и при комнатной температуре квантовые осцилляции обычно не видны из-за процессов дефазировки, неизбежно имеющих место в таких условиях. Приведенный выше пример еще раз показывает, что при моделировании и интерпретации реальных транспортных измерений при комнатной температуре необходимо в той или иной степени учитывать дефазировку эффектов квантовой интерференции.

Действительно, если для той же модели проводника (рис. 36а) при расчете методом НРФГ включить дефазировку с учетом только фазовой релаксации (модель А, ур-е (180)), то получим профиль потенциала с ясно выраженным скачком на дефекте в соответствии с полуклассической моделью (рис. 37).

Любопытно, если учесть также и импульсную релаксацию (модель В, ур-е (181)), то потенциал на всем протяжении проводника подает практически линейно (рис. 38), как это и должно ожидать для равномерно распределенных упругих резисторов по всей длине проводника [3].

Сопротивление в пересчете на один узел такого однородного 1D проводника можно получить из (194) путем замены U^2 на D_0 :

$$R_{Norm} = D_0 (a/v)^2 (L/a), \quad (195)$$

где L/a дает число узлов в проводнике.

Еще одним полезным примером может служить уже рассмотренный выше проводник с двумя одинаковыми рассеивающими центрами (рис. 34). Значения электрохимического потенциала на уров-

нях А и В соответствуют конструктивной ($R_2 < R_1$) и деструктивной ($R_2 > R_1$) квантовой интерференции. Различие между ними ярко проявляется при расчете такого проводника методом НРФГ в режиме когерентного транспорта без дефазировки с $D_0 = 0$ (рис. 39).

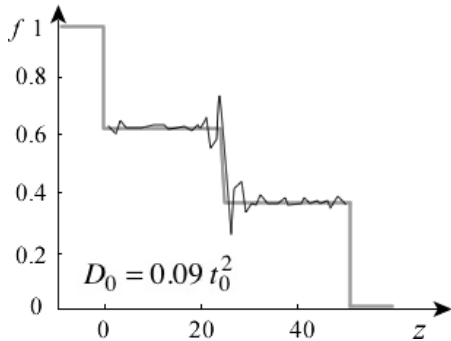


Рис. 37. Квантовые осцилляции в методе НРФГ при дефазировке с учетом только фазовой релаксации (модель А) при $E = t_0$ не вуалируют скачок потенциала на дефекте

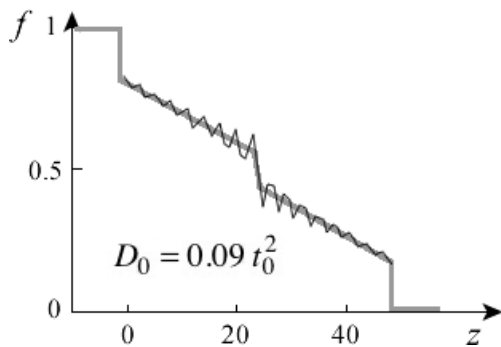


Рис. 38. Учет в методе НРФГ как фазовой, так и импульсной релаксации (модель Б) практически нивелирует скачок потенциала на дефекте, превращая проводник с дефектом в последовательность упругих резисторов

На уровне В профиль потенциала выглядит так, как будто мы имеем дело с большим скачком потенциала на дефекте, да еще наложенными на него двумя всплесками (деструктивная интерференция). Небольшое увеличение электрохимического потенциала до $E = 0.81t_0$ (уровень А) кардинально меняет профиль потенциала. Теперь он выглядит так (рис. 39), как можно было бы ожидать для баллистического проводника со скачками потенциала лишь на границах с контактами (конструктивная интерференция).

На поставленный выше вопрос «может ли R_2 быть меньше, чем R_1 ?» ответ однозначный – «Да, может»: два дефекта могут создать меньшее сопротивление, чем один такой дефект. И этот «странный» результат обязан квантовой интерференции.

Стоит лишь в обоих случаях А и В (рис. 39) учесть дефазировку в виде фазовой релаксации с достаточным отличным от нуля значением D_0 , как профиль потенциала сразу становится похожим на полуклассический профиль резистора (рис. 40).

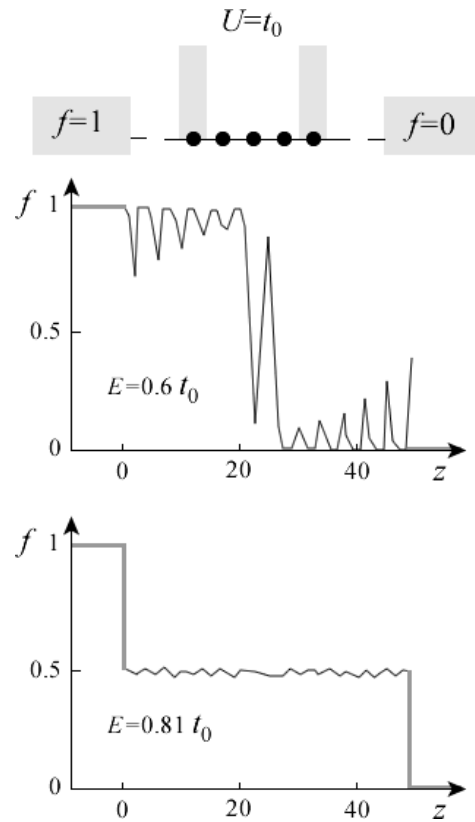


Рис. 39. Квантовые осцилляции в расчете проводника с двумя одинаковыми рассеивающими центрами с $U = t_0$ методом НРФГ без дефазировки ($D_0 = 0$) в режиме когерентности при $E = 0.6t_0$ свидетельствуют о деструктивной интерференции (режим В с $R_2 > R_1$), а при $E = 0.81t_0$ – о конструктивной интерференции (режим А с $R_2 < R_1$)

В вычислительном отношении обратим внимание на то, что учет дефазировки в методе НРФГ алгоритмически не вызывает затруднений, однако, если в когерентном приближении ($D_0 = 0$) или с учетом лишь импульсной релаксации (модель В, ур-е (181)) достаточно вычислять лишь диагональные элементы гриновской функции, то в случае учета лишь фазовой релаксации необходимо вычислять полную функцию Грина, что существенно увеличивает время вычислений и требует намного больших вычислительных ресурсов.

Резонно также поставить вопрос: а что если вместо учета дефазировки через матрицу собственной энергии Σ_0 потенциал U_R включить в гамильтониан H , а затем усреднить его по всем возможным реализациям, приведет ли это к тем же самым результатам?

Для коротких резисторов таких, как на рис. 34, ответ будет скорее всего положительным, а вот для длинных резисторов, как на рис. 35, ответ будет отрицательным. В случае проводника в режиме сильной локализации (рис. 35) трудно представить себе, каким образом усреднение когерентного квантового состояния по многим возможным конфигурациям приведет к полуклассическому результату.

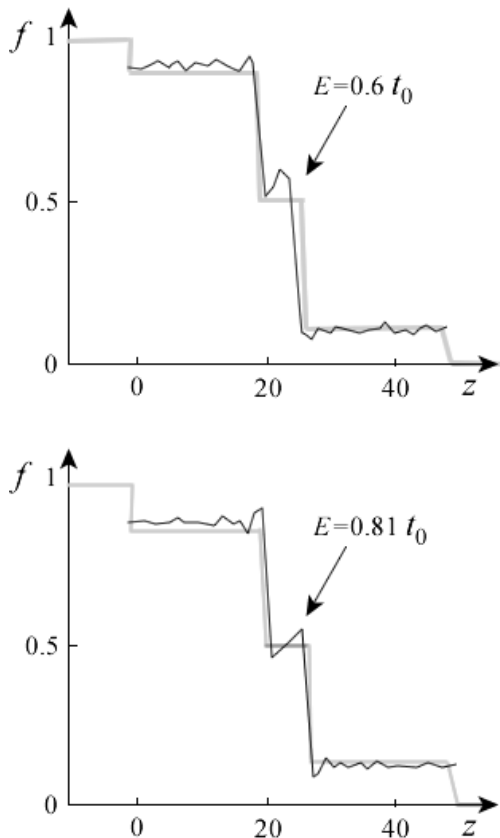


Рис. 40. Квантовые осцилляции в методе НРФГ при дефазировке с учетом только фазовой релаксации ($D_0 = 0.09t_0^2$) при обоих значениях электрохимического потенциала $E = 0.6t_0$ и $E = 0.81t_0$ на фоне полуклассических скачков потенциала

Метод НРФГ с дефазировкой, не вдаваясь в тонкости, не сводится просто к усреднению по многим конфигурациям, а включает в себя также усреднение по фрагментам отдельных конфигураций, в результате чего и достигается полуклассическое описание проводимости, столь хорошо зарекомендовавшее себя при интерпретации реальных измерений при комнатной температуре.

17. Транспорт спинов в четырехкомпонентном формате

Возвратимся к четырехкомпонентному описанию спинового транспорта [46], но теперь уже с учетом дефазировки. Приводился пример гриновской матрицы для линейного проводника из трех атомов:

$$\begin{matrix}
 1up & 1dn & 2up & 2dn & 3up & 3dn \\
 1up & \begin{bmatrix} N_1, \bar{S}_1 \end{bmatrix} & & & & \\
 1dn & & & & & \\
 2up & & \begin{bmatrix} N_2, \bar{S}_2 \end{bmatrix} & & & \\
 2dn & & & & & \\
 3up & & & & \begin{bmatrix} N_3, \bar{S}_3 \end{bmatrix} & \\
 3dn & & & & &
 \end{matrix} \quad (196)$$

в которой диагональные блоки (2×2) содержат четыре действительных числа (N, \bar{S}) , а недиагональные блоки, связывающие соседние и более удаленные друг от друга атомы, опущены; именно недиагональные блоки порождают эффекты квантовой интерференции. В этой связи заметим, что времена спиновой релаксации имеют порядок наносекунд, а времена фазовой релаксации на три порядка и даже более меньше. Раз так, то важно сохранить информацию, хранящуюся в диагональных блоках, даже если не учитываются сведения из недиагональных блоков.

В формализме НРФГ нужно подобрать подходящую матрицу D в уравнении (177):

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

поскольку процесс дефазировки можно визуальнo представить себе как «извлечение» электрона из проводника в состоянии $[G^n]$ и последующей «инъекции» его обратно в проводник в состоянии $D \times G^n$.

Были уже введены две модели для матрицы $[D]$ – модели А и В, описываемые уравнениями, соответственно, (180) и (181). Модель А эквивалентна умножению матрицы $[D]$ на константу: другими словами, электрон «инжектируется» в то же самое состояние, из которого он был «извлечен», так что импульс электрона сохраняется. В модели В зануляются недиагональные элементы, что ведет к потере информации об импульсе электрона, что хорошо иллюстрируется рис. 38.

Определим модель С такую, в которой матрица $[D]$ сохраняет всю информацию о спинах и зануляет импульсную релаксацию, а именно:

$$\begin{matrix}
 \frac{[D]}{D_0} = & 1up & 1dn & 2up & 2dn & 3up & 3dn \\
 & \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 & & & & & &
 \end{matrix} \quad (197)$$

другими словами, модель С напоминает модель В в отношении решетки проводника, а модель А в отношении спиновой информации.

Перепишем гриновскую матрицу

$$G^n = G^R \Sigma^{in} G^A \quad (198)$$

как

$$\begin{aligned}
 [G^n]_{ii} &= \sum [G^R]_{ij} [\Sigma^{in}]_{jj} [G^A]_{ji} = \\
 &= D_0 \sum [G^R]_{ij} [G^n]_{jj} [G^A]_{ji}, \quad (199)
 \end{aligned}$$

где индексы i, j нумеруют атомы решетки проводника и учитывается то обстоятельство, что в модели С матрица Σ^{in} в решеточном базисе диагональна.

Мы уже знаем, что для любого узла решетки проводника его диагональную матрицу (2×2) гриновской матрицы (196) можно записать через числа (N, \vec{S}) , так что уравнение (199) путем несложных преобразований можно записать в виде

$$\begin{Bmatrix} N \\ S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix}_i = \sum_j \begin{bmatrix} \text{Резонансная} \\ \text{матрица} \\ (4 \times 4) \end{bmatrix}_{ij} \begin{Bmatrix} N \\ S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix}_j, \quad (200)$$

где «резонансная» матрица (4×4) может быть интерпретирована как взаимодействие (N, \vec{S}) в узле i с (N, \vec{S}) в узлах j , находящихся от i в одном шаге по решетке. Аналогичное одномерное уравнение напоминает стандартное описание броуновского движения на решетке и ведет к диффузионному уравнению дрейфа.

18. Квантовая природа классики

Нет ничего удивительного и неожиданного в названии этого раздела. Из разобранных выше примеров мы видели, что для понимания физики и для интерпретации реальных экспериментальных измерений, как правило, достаточно полуклассического рассмотрения. Почти все, что мы до сих пор обсуждали, является следствием транспортного уравнения Больцмана. Более того, все миллиарды транзисторов в современных ноутбуках, состоящих всего из нескольких сотен атомов, по существу являются классическими устройствами электроники, контролируемые, в основном, электростатикой, а не законами квантовой механики. Недавно выполненные тщательные и всесторонние измерения и расчеты проводимости металлического 2D проводника с сечением (1×4) атомов [47] продемонстрировали его нормальное омическое поведение. Резонно задаться вопросом удастся ли, опираясь на кажущиеся нам фантастическими успехи нанofизики и наноэлектроники, создать принципиально иные квантовые устройства, которые выведут нас за пределы нынешней «зарядовой» парадигмы обработки информации. Коснемся лишь некоторых соображений в этом направлении [48].

18. 1. Спиновая когерентность

Различие между квантовой физикой и классической лучше всего прослеживается на таком фундаментальном свойстве как спин электрона.

Рассмотрим, например, эксперимент с инъекцией спина в канал проводимости с дальнейшим измерением потенциала вторым зондом [46]

$$\mu_2 = \mu + \frac{\vec{P}_2 \cdot \vec{\mu}_s}{2}, \quad (201)$$

зависящим от косинуса угла между инжектирующим и регистрирующим магнитными контактами (рис. 2 в [46]). Гриновская матрица имела вид (196) с диагональными блоками (2×2)

$$\begin{bmatrix} N + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N - S_z \end{bmatrix}, \quad (202)$$

элементы которых содержат физически понятные величины электронной и спиновой плотности (N, \vec{S}) . Формализм НРФГ приводит [46] далее к уравнению (201) с $(\mu, \vec{\mu}_s)$, транслируемыми в (N, \vec{S}) согласно ур-ю (83) в [46].

Этот простой пример позволяет проиллюстрировать связь между квантовым и классическим описанием. Если перекрестные компоненты матрицы (202) пренебрежимо малы, то лишь двух чисел N и S_z достаточно для описания всей физики транспорта. Оставшиеся ненулевыми диагональные компоненты могут быть интерпретированы $N + S_z$ как число электронов со спином «вверх», $N - S_z$ как число электронов со спином «вниз» и далее выписаны полуклассические уравнения для двух сортов электронов. Фактически такой подход реализован в [3].

Когда работает такая модель? Одна из возможностей предоставляется тогда, когда намагниченности контактов коллинеарны, как в [3], и спин-орбитальное взаимодействие в канале проводимости отсутствует, так что угол θ является целым кратным 180° (рис. 2 в [46]). Другая возможность реализуется тогда, когда спиновая дефазировка настолько значительна, что перекрестными спиновыми компонентами в диагональных блочных матрицах (2×2) гриновской матрицы (202) можно пренебречь. Наконец, если можно пренебречь и z -компонентами спина, тогда об учете спина речь вообще не идет.

Что если коллинеарные магнитные контакты направлены не вдоль оси z , а вдоль оси x ? В этом случае блоки (2×2) гриновской матрицы не диагональны (значок \rightarrow читайте «переписана в виде»):

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

и полуклассическое описание скорее всего окажется невозможным. В этом случае нужно иначе выбрать систему координат, или в общем случае иначе выбрать разложение по базисным функциям. Выбрать базис нужно таким образом, чтобы объекты, например, спин, имеющие направления «вверх» и «вниз», были ориентированы, соответственно, вдоль $+x$ и $-x$; тогда блоки гриновской матрицы будут диагональны:

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

Рекомендация иначе выбрать базис может показаться тривиальной, но это не совсем так, в чем мы сейчас убедимся.

18. 2. Псевдоспин

Формализм спиновых матриц Паули [46] замечателен тем, что он не исчерпывается только спином электрона, а распространяется на любые объекты, имеющих двухкомпонентную структуру в комплексной плоскости. Вспомним графен. Атомы углерода в графене топологически не эквивалентны и могут быть либо сорта А, либо сорта В (рис. 23). Волновая функция элементарной ячейки графена описывается двухкомпонентным вектором в комплексной плоскости [30]

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

так что соответствующая ей функция Грина (10) может быть формально переписана следующим образом:

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

что не имеет никакого отношения к реальным спинам, а лишь формально математически соответствует (202).

Рассмотрим еще один менее знакомый пример использования концепции псевдоспина, преследуя прежде всего педагогические цели. Вернемся к модели на рис. 36, а.

Посмотрим на поведение диагональных элементов гриновской матрицы $[G^n]$ слева и справа от дефекта (рис. 41, б). Слева от дефекта «наблюдаются» осцилляции электронной плотности, тогда как после прохождения дефекта плотность постоянна. Заметим, что в такой же модели на рис. 36–40 осцилляции имеют место и справа от дефекта. Но там речь шла об осцилляциях заселенности, вычисляемой из G^n/A , а спектральная функция A , пропорциональная плотности состояний D , осциллирует как до, так и после прохождения дефекта, так что к рассматриваемой нами ситуации эти осцилляции справа на рис. 36–40 отношения не имеют.

Посмотрите как можно используя концепцию псевдоспина понять поведение диагональных элементов гриновской матрицы на рис. 41б. Ниже показаны псевдоспиновые волновые функции электрона и электронные плотности слева/L и справа/R от дефекта и представление последних с использованием концепции псевдоспина:

$$\begin{aligned} \{\psi\} &\rightarrow \begin{Bmatrix} e^{+ikz} \\ re^{-ikz} \end{Bmatrix}_L, \begin{Bmatrix} re^{+ikz} \\ 0 \end{Bmatrix}_R; \\ \{\psi\} \{\psi\}^+ &\rightarrow \begin{bmatrix} 1 & r^* e^{+i2kz} \\ re^{-i2kz} & rr^* \end{bmatrix}_L, \\ \begin{bmatrix} tt^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_R &\rightarrow \begin{bmatrix} N + S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N - S_z \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Считая коэффициенты t и r действительными величинами, для электронной псевдоплотности и псевдоспиновой плотности слева и справа от барьера, соответственно, получим:

$$\begin{aligned} N &= (1+r^2)/2 & N &= r^2/2 \\ S_x &= +r \cos 2kz & S_x &= 0 \\ S_y &= -r \sin 2kz & S_y &= 0 \\ S_z &= (1-r^2)/2 & S_z &= r^2/2 \end{aligned} \tag{203}$$

Другими словами, слева от барьера псевдоспин вращается в плоскости xy . При построении графика $G^n(z, z)$ на рис. 41б находилась сумма двух компонент псевдоспина, а затем брался ее квадрат, что эквивалентно равенству

$$Tr \{ \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \} \{ \psi \} \{ \psi \}^+ = Tr \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \{ \psi \} \{ \psi \}^+. \tag{204}$$

Фактически мы имеем дело с псевдомагнитом Γ

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \tag{205}$$

который поляризован на 100 % вдоль оси x . Таким образом, согласно (201) измеряемый потенциал должен быть пропорционален $N + \hat{x} \cdot \vec{S}$, что ведет слева от барьера к осцилляциям по косинусу, а справа – к отсутствию осцилляций

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

что хорошо согласуется с результатами расчета методом НРФГ (рис. 41, б).

19. Выводы

Сформулирован метод неравновесных функций Грина (НРФГ) в матричном представлении и продемонстрировано применение его к модельным транспортным задачам 1D и 2D проводников в модели сильной связи с ортогональным базисом и с параметрическим учетом взаимодействия соседних атомов.

Сформулирован общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера для решения задач квантового транспорта электронов.

Рассмотрены модели упругой дефазировки и спиновой дефазировки. Показано как учитывать некогерентные процессы с использованием зонда Бюттекера.

Обсуждены также 1D проводник с двумя и более рассеивающими центрами, явление квантовой интерференции, режимы сильной и слабой локализации, скачок потенциала на дефектах, квантовые осцилляции в методе НРФГ без учета дефазировки и с ее учетом, эффекты деструктивной и конструктивной интерференции, четырехкомпонентное описание

спинового транспорту з урахуванням дефазировки, формалізму псевдоспина.

Благодарности

Я благодарен проф. С.Датта (Supriyo Datta) за можливість прослухати його курси лекцій «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» і «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитаних он-лайн в януарі – апрелі 2012 року і в марті – маї 2015 року в рамках ініціативи Purdue University/nanoHUB-U)2012 [49]; 2015: [50]) і частинно використаних при написанні цього огляду.

Я також благодарен моїй жінці Н. Е. Кругляк за підготовку рисунків до публікації і допомогу в оформленні рукопису.

Литература

1. Кругляк, Ю. О. Уроки наноелектроніки : виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» [Текст] / Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стріха // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології. – 2012. – Т. 9, № 4. – С. 5–29.

2. Кругляк, Ю. А. Наноелектроніка «знизу – вгору»: Виникнення струму, обобщенный закон Ома, упругий резистор, моды проводимости, термоэлектричество [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 7, № 2 (12). – С. 76–100. doi: 10.15587/2313-8416.2015.45700

3. Кругляк, Ю. А. Наноелектроніка «знизу – вгору»: Начало спинтроники и магнетроники [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 8, № 2 (13). – С. 51–68. doi: 10.15587/2313-8416.2015.47792

4. Datta, S. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport [Text] / S. Datta. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. – 492 p. – Available at: <https://nanohub.org/courses/FoN1> doi: 10.1142/8029

5. Datta, S. Nanoelectronic devices : A unified view. The Oxford Handbook on Nanoscience and Nanotechnology: Frontiers and Advances [Text] / S. Datta ; Eds. A. V. Narlikar, Y. Y. Fu. – Oxford University Press. – 2012. – Vol. 1, Chapter 1. – 26 p.

6. Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor [Text] / Datta, S. – Cambridge: Cambridge University Press, 2005. – 404 p. doi: 10.1017/cbo9781139164313

7. Datta, S. Nanodevices and Maxwell's demon [Text] / Datta, S. // Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology. – 2008. – Vol. 2. – P. 59–81. doi: 10.1007/978-0-387-73048-6_7

8. Caroli, C. A direct calculation of the tunneling current : IV. Electron phonon interaction effects [Text] / C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, D. Saint-James // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1972. – Vol. 5, Issue 1. – P. 21–42. doi: 10.1088/0022-3719/5/1/006

9. Kubo, R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems [Text] / R. Kubo // Journal of the Physical Society of Japan. – 1957. – Vol. 12, Issue 6. – P. 570–586. doi: 10.1143/jpsj.12.570

10. Sears, F. W. Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics [Text] / F. W. Sears, G. L. Salinger. – Boston: Addison-Wesley. – 1975. – P. 331–336, 355–361.

11. Martin, P. C. Theory of many-particle systems. I. [Text] / P. C. Martin, J. Schwinger // Physical Review. – 1959. – Vol. 115, Issue 6. – P. 1342–1373. doi: 10.1103/physrev.115.1342

12. Kadanoff, L. P. Quantum Statistical Mechanics [Text] / L. P. Kadanoff, G. Baym. – New York: W. A. Benjamin, 1962. – 203 p.

13. Келдыш, Л. В. Диаграммная техника для неравновесных процессов [Текст] / Л. В. Келдыш // ЖЭТФ. – 1964. – Т. 47. – С. 1515–1527.

14. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction [Text] / R. Landauer // IBM Journal of Research and Development. – 1957. – Vol. 1, Issue 3. – P. 223–231. doi: 10.1147/rd.13.0223

15. Landauer, R. Electrical resistance of disordered onedimensional lattices [Text] / R. Landauer // Philosophical Magazine. – 1970. – Vol. 21, Issue 172. – P. 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472

16. Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction (and comment) [Text] / R. Landauer // Journal of Mathematical Physics. – 1996. – Vol. 37, Issue 10. – P. 5259. doi: 10.1063/1.531590

17. Datta, S. Steady-state quantum kinetic equation [Text] / S. Datta // Physical Review B. – 1989. – Vol. 40, Issue 8. – P. 5830–5833. doi: 10.1103/physrevb.40.5830

18. Datta, S. A simple kinetic equation for steady-state quantum transport [Text] / S. Datta // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1990. – Vol. 2, Issue 40. – P. 8023–8052. doi: 10.1088/0953-8984/2/40/004

19. Meir, Y. Landauer formula for the current through an interacting electron region [Text] / Y. Meir, N. S. Wingreen // Physical Review Letters. – 1992. – Vol. 68, Issue 16. – P. 2512–2515. doi: 10.1103/physrevlett.68.2512

20. Datta, S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems [Text] / S. Datta. – Cambridge: Cambridge University Press, 2001. – 377 p.

21. Smit, R. H. M. Measurement of the conductance of a hydrogen molecule [Text] / R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, N. D. Lang, M. C. van Hemert, J. M. van Ruitenbeek // Nature. – 2002. – Vol. 419, Issue 6910. – P. 906–909. doi: 10.1038/nature01103

22. Buttiker, M. Symmetry of Electrical Conduction [Text] / M. Buttiker // IBM Journal of Research and Development. – 1988. – Vol. 32, Issue 3. – P. 317–334. doi: 10.1147/rd.323.0317

23. Anderson, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices [Text] / P. W. Anderson // Physical Review. – 1958. – Vol. 109, Issue 5. – P. 1492–1505. doi: 10.1103/physrev.109.1492

24. Anderson, P. W. New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality [Text] / P. W. Anderson // Physical Review B. – 1981. – Vol. 23, Issue 10. – P. 4828–4836. doi: 10.1103/physrevb.23.4828

25. Кругляк, Ю. А. Методы вычислений в квантовой химии. Расчет π -электронной структуры молекул простыми методами молекулярных орбиталей [Текст] / Ю. А. Кругляк. – Киев: Наукова думка, 1967. – 161 с.

26. Kruglyak, Y. A. Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method [Text] / Y. A. Kruglyak, I. I. Ukrainsky // International Journal of Quantum Chemistry. – 1970. – Vol. 4, Issue 1. – P. 57–72. doi: 10.1002/qua.560040106

27. Kruglyak, Yu. A. Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes [Text] /

Yu. A. Kruglyak // ScienceRise. – 2015. – Vol. 5, Issue 2 (10). – P. 69–105. doi: 10.15587/2313-8416.2015.42643

28. Kventsel, G. F. Local Electronic States in Long Polyene Chains [Text] / G. F. Kventsel, Y. A. Kruglyak // Theoretica Chimica Acta. – 1968. – Vol. 12, Issue 1. – P. 1–17. doi: 10.1007/bf00527002

29. Стріха, М. В. Фізика графену: стан і перспективи [Текст] / М. В. Стріха // Сенсорна електроніка та мікро-системні технології. – 2010. – Т. 1 (7), № 3. – С. 5–13.

30. Кругляк, Ю. А. Графен в транспортній моделі Ландауэра – Датты – Лундстрёма [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 2, № 2 (7). – С. 93–106. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332

31. Kruglyak, Y. A. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration [Text] / Y. A. Kruglyak, G. G. Dyadyusha // Theoretica Chimica Acta. – 1968. – Vol. 10, Issue 1. – P. 23–32. doi: 10.1007/bf00529040

32. Kruglyak, Y. A. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. II. Results of Calculations and Discussion [Text] / Y. A. Kruglyak, G. G. Dyadyusha // Theoretica Chimica Acta. – 1968. – Vol. 12, Issue 1. – P. 18–28. doi: 10.1007/bf00527003

33. Kruglyak, Yu. A. Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 2. Cumulenes and origin of the forbidden zone [Text] / Yu. A. Kruglyak // ScienceRise. – 2015. – Vol. 6, Issue 2 (11). – P. 122–148. doi: 10.15587/2313-8416.2015.44540

34. van Wees, B. J. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas [Text] / B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon // Physical Review Letters. – 1988. – Vol. 60, Issue 9. – P. 848–850. doi: 10.1103/physrevlett.60.848

35. Wharam, D. A. One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance [Text] / D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost et. al. // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1988. – Vol. 21, Issue 8. – P. L209–L214. doi: 10.1088/0022-3719/21/8/002

36. Mojarad, R. G. Atomistic non-equilibrium Green's function simulations of graphene nano-ribbons in the quantum hall regime [Text] / R. G. Mojarad, A. N. M. Zainuddin, G. Klimeck, S. Datta // Journal of Computational Electronics. – 2008. – Vol. 7, Issue 3. – P. 407–410. doi: 10.1007/s10825-008-0190-x

37. Berger, C. Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene [Text] / C. Berger, S. Zhimin, L. Xuebin, W. Xiaosong, N. Brown, C. Naud et. al. // Science. – 2006. – Vol. 312, Issue 5777. – P. 1191–1196. doi: 10.1126/science.1125925

38. Fujita, M. Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge [Text] / M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, K. Kusakabe // Journal of the Physical Society of Japan. – 1996. – Vol. 65, Issue 7. – P. 1920–1923. doi: 10.1143/jpsj.65.1920

39. Nakada, K. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence [Text] / K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54, Issue 24. – P. 17954–17961. doi: 10.1103/physrevb.54.17954

40. Brey, L. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation [Text] / L. Brey, H. A. Fertig // Physical Review B. – 2006. – Vol. 73, Issue 23. – P. 235411. doi: 10.1103/physrevb.73.235411

41. Wakabayashi, K. Electronic transport properties of graphene nanoribbons [Text] / K. Wakabayashi, Y. Takane,

M. Yamamoto, M. Sigrist // New Journal of Physics. – 2009. – Vol. 11, Issue 9. – P. 095016. doi: 10.1088/1367-2630/11/9/095016

42. Koch, M. Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon [Text] / M. Koch, F. Ample, C. Joachim, L. Grill // Nature Nanotechnology. – 2012. – Vol. 7, Issue 11. – P. 713–717. doi: 10.1038/nnano.2012.169

43. Buttiker, M. Four-terminal phase-coherent conductance [Text] / M. Buttiker // Physical Review Letters. – 1986. – Vol. 57, Issue 14. – P. 1761–1764. doi: 10.1103/physrevlett.57.1761

44. Golizadeh-Mojarad, R. Nonequilibrium Green's function based model for dephasing in quantum transport [Text] / R. Golizadeh-Mojarad, S. Datta // Physical Review B. – 2007. – Vol. 75, Issue 8. – P. 081301(R). doi: 10.1103/physrevb.75.081301

45. Кругляк, Ю. О. Уроки наноелектроніки: Ефект Хола і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу – вгору» [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха // Sensor Electronics Microsystem Technologies. – 2013. – Т. 10, № 4. – С. 5–22.

46. Кругляк, Ю. О. Уроки наноелектроніки: Транспорт спінів в моделі НРФГ і квантовий спіновий ефект Хола в концепції «знизу – вгору» [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха // Sensor Electronics Microsystem Technologies. – 2014. – Т. 11, № 1. – С. 5–27.

47. Weber, B. Ohm's Law Survives to the Atomic Scale [Text] / B. Weber, S. Mahapatra, H. Ryu, S. Lee, A. Fuhrer, T. C. G. Reusch et. al. // Science. – 2012. – Vol. 335, Issue 6064. – P. 64–67. doi: 10.1126/science.1214319

48. Zurek, W. H. Decoherence, Einselection and the Quantum Origins of the Classical [Text] / W. H. Zurek // Reviews of Modern Physics. – 2003. – Vol. 75, Issue 3. – P. 715–775. doi: 10.1103/revmodphys.75.715

49. nanoHUB-U: Fundamentals of Nanoelectronics, Part 2: Quantum Models [Electronic resource]. – Available at: <https://nanohub.org/courses/FoN2>

50. PurdueX. Free online courses from Purdue University [Electronic resource]. – Available at: <https://www.edx.org/school/purdueX>

References

1. Krugljak, Ju. O., N. Krugljak, Ju., Striha, M. V. (2012). Lessons of nanoelectronics: current generation, Ohm's law formulation and conduction modes in «bottom-up» approach. Sensor Electronics and Microsystem Technologies, 9 (4), 5–29.

2. Krugljak, Ju. A. (2015). Nanoelectronics «bottom-up»: current generation, generalized ohm's law, elastic resistors, conductivity modes, thermoelectricity. ScienceRise, 7/2 (12), 76–100. doi: 10.15587/2313-8416.2015.45700

3. Krugljak, Ju. A. (2015). The «bottom-up» nanoelectronics: elements of spintronics and magnetronics. ScienceRise, 8/2 (13), 51–68. doi: 10.15587/2313-8416.2015.47792

4. Datta, S. (2012). Lessons from Nanoelectronics. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 492. Available at: <https://nanohub.org/courses/FoN1> doi: 10.1142/8029

5. Datta, S., Narlikar, A. V., Fu, Y. Y. (2012). Nanoelectronic devices: A unified view. The Oxford Handbook on Nanoscience and Nanotechnology: Frontiers and Advances. Oxford University Press, 1 (1), 26.

6. Datta, S. (2005). Quantum Transport: Atom to Transistor, 404. doi: 10.1017/cbo9781139164313

7. Datta, S. (2008). Nanodevices and Maxwell's Demon. Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, 2, 59–81. doi: 10.1007/978-0-387-73048-6_7

8. Caroli, C., Combescot, R., Nozieres, P., Saint-James, D. (1972). A direct calculation of the tunnelling current: IV. Electron-phonon interaction effects. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5 (1), 21–42. doi: 10.1088/0022-3719/5/1/006
9. Kubo, R. (1957). *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems*. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12 (6), 570–586. doi: 10.1143/jpsj.12.570
10. Sears, F. W., Salinger, G. L. (1975). *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics*. Boston: Addison-Wesley, 331–336, 355–361.
11. Martin, P. C., Schwinger, J. (1959). Theory of Many-Particle Systems. I. *Physical Review*, 115 (6), 1342–1373. doi: 10.1103/physrev.115.1342
12. Kadanoff, L. P., Baym, G. (1962). *Quantum Statistical Mechanics*. New York: W. A. Benjamin, 203.
13. Keldysh, L. V. *Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes [Text] / L. V. Keldysh // JETP. – 1965. – Vol. 20, Issue 4. – P. 1018–1026.*
14. Landauer, R. (1957). Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 1 (3), 223–231. doi: 10.1147/rd.13.0223
15. Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, 21 (172), 863–867. doi: 10.1080/14786437008238472
16. Landauer, R. (1996). Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction (and comment). *Journal of Mathematical Physics*, 37 (10), 5259. doi: 10.1063/1.531590
17. Datta, S. (1989). Steady-state quantum kinetic equation. *Physical Review B*, 40 (8), 5830–5833. doi: 10.1103/physrevb.40.5830
18. Datta, S. (1990). A simple kinetic equation for steady-state quantum transport. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2 (40), 8023–8052. doi: 10.1088/0953-8984/2/40/004
19. Meir, Y., Wingreen, N. S. (1992). Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Physical Review Letters*, 68 (16), 2512–2515. doi: 10.1103/physrevlett.68.2512
20. Datta, S. (2001). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 377.
21. Smit, R. H. M., Noat, Y., Untiedt, C., Lang, N. D., van Hemert, M. C., van Ruitenbeek, J. M. (2002). Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature*, 419 (6910), 906–909. doi: 10.1038/nature01103
22. Buttiker, M. (1988). Symmetry of electrical conduction. *IBM Journal of Research and Development*, 32 (3), 317–334. doi: 10.1147/rd.323.0317
23. Anderson, P. W. (1958). Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, 109 (5), 1492–1505. doi: 10.1103/physrev.109.1492
24. Anderson, P. W. (1981). New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a “wire” and possible extension to higher dimensionality. *Physical Review B*, 23 (10), 4828–4836. doi: 10.1103/physrevb.23.4828
25. Krugljak, Ju. A. (1967). *Metody vychislenij v kvantovoj himii. Raschet π -jelektronnoj struktury molekul prostymi metodami molekuljarnyh orbitalej*. Kyiv: Naukova dumka, 161.
26. Krugljak, Y. A., Ukrainsky, I. I. (1970). Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method. *International Journal of Quantum Chemistry*, 4 (1), 57–72. doi: 10.1002/qua.560040106
27. Krugljak, Yu. A. (2015). Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes. *ScienceRise*, 5/2 (10), 69–105. doi: 10.15587/2313-8416.2015.42643
28. Kventsel, G. F., Krugljak, Y. A. (1968). Local electronic states in long polyene chains. *Theoretica Chimica Acta*, 12 (1), 1–17. doi: 10.1007/bf00527002
29. Striha, M. V. (2010). *Fizyka grafenu : stan i perspektyvy*. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, 1 (7(3)), 5–13.
30. Krugljak, Ju. A. (2015). Graphene in Landauer-Datta-Lundstrom transport model. *ScienceRise*, 2/2 (7), 93–106. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332
31. Krugljak, Y. A., Dyadyusha, G. G. (1968). Torsion barriers of end-groups in cumulenes. *Theoretica Chimica Acta*, 10 (1), 23–32. doi: 10.1007/bf00529040
32. Krugljak, Y. A., Dyadyusha, G. G. (1968). Torsion barriers of end-groups in cumulenes. *Theoretica Chimica Acta*, 12 (1), 18–28. doi: 10.1007/bf00527003
33. Krugljak, Yu. A. (2015) Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 2. Cumulenes and origin of the forbidden zone. *ScienceRise*, 6/2 (11), 122–148. doi: 10.15587/2313-8416.2015.44540
34. Van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., Foxon, C. T. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60 (9), 848–850. doi: 10.1103/physrevlett.60.848
35. Wharam, D. A., Thornton, T. J., Newbury, R., Pepper, M., Ahmed, H., Frost, J. E. F. et al. (1988). One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 21 (8), L209–L214. doi: 10.1088/0022-3719/21/8/002
36. Golizadeh-Mojarad, R., Zainuddin, A. N. M., Klimeck, G., Datta, S. (2008). Atomistic non-equilibrium Green’s function simulations of Graphene nano-ribbons in the quantum hall regime. *Journal of Computational Electronics*, 7 (3), 407–410. doi: 10.1007/s10825-008-0190-x
37. Berger, C., Zhimin, S., Xuebin, L., Xiaosong, W., Brown, N., Naud, C. et al. (2006). Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene. *Science*, 312 (5777), 1191–1196. doi: 10.1126/science.1125925
38. Fujita, M., Wakabayashi, K., Nakada, K., Kusakabe, K. (1996). Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65 (7), 1920–1923. doi: 10.1143/jpsj.65.1920
39. Nakada, K., Fujita, M., Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S. (1996). Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Physical Review B*, 54 (24), 17954–17961. doi: 10.1103/physrevb.54.17954
40. Brey, L., Fertig, H. A. (2006). Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation. *Physical Review B*, 73 (23), 235411. doi: 10.1103/physrevb.73.235411
41. Wakabayashi, K., Takane, Y., Yamamoto, M., Sigríst, M. (2009). Electronic transport properties of graphene nanoribbons. *New Journal of Physics*, 11 (9), 095016. doi: 10.1088/1367-2630/11/9/095016
42. Koch, M., Ample, F., Joachim, C., Grill, L. (2012). Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon. *Nature Nanotechnology*, 7 (11), 713–717. doi: 10.1038/nnano.2012.169
43. Buttiker, M. (1986). Four-Terminal Phase-Coherent Conductance. *Physical Review Letters*, 57 (14), 1761–1764. doi: 10.1103/physrevlett.57.1761
44. Golizadeh-Mojarad, R., Datta, S. (2007). Nonequilibrium Green’s function based models for dephasing in quantum transport. *Physical Review B*, 75 (8), 081301(R). doi: 10.1103/physrevb.75.081301

45. Krugljak, Ju. O., Striha, M. V. (2013). Uroky nanoelektroniky : Efekt Hola i vymirjuvannja elektrohimichnyh potencialiv v koncepcii' «znyzu – vgoru». Sensor Electronics Microsystem Technologies, 10 (4), 5–22.

46. Krugljak, Ju. O., Striha, M. V. (2014). Uroky nanoelektroniky : Transport spiniv v modeli NRFG i kvantovyj spinovyj efekt Hola v koncepcii' «znyzu – vgoru». Sensor Electronics Microsystem Technologies, 11 (1), 5–27.

47. Weber, B., Mahapatra, S., Ryu, H., Lee, S., Fuhrer, A., Reusch, T. C. G. et. al. (2012). Ohm's Law Sur-

vives to the Atomic Scale, 335 (6064), 64–67. doi: 10.1126/science.1214319

48. Zurek, W. H. (2003). Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. Reviews of Modern Physics, 75 (3), 715–775. doi: 10.1103/revmodphys.75.715

49. nanoHUB-U: Fundamentals of Nanoelectronics, Part 2: Quantum Models. Available at: <https://nanohub.org/courses/FoN2>

50. PurdueX. Free online courses from Purdue University. Available at: <https://www.edx.org/school/purdue>

Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.

Дата надходження рукопису 21.08.2015

Кругляк Юрій Олександрович, доктор хімічних наук, професор, кафедра інформаційних технологій, Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, Одеса, Україна, 65016
E-mail: quantumnet@yandex.ua