

PACS numbers: 72.10.Bg, 72.80.Vp, 73.23.Ad, 73.63.-b, 73.63.Rt, 81.05.ue, 85.35.-p

Метод неравновесных функций Грина в матричном представлении: модельные транспортные задачи наноэлектроники в концепции «снизу–вверх»

Ю. А. Кругляк

*Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15,
65016 Одесса, Украина*

В рамках концепции «снизу–вверх» наноэлектроники рассматривается метод неравновесных функций Грина в матричной формулировке и применение его к модельным транспортным задачам $1D$ - и $2D$ -проводников в модели сильной связи с ортогональным базисом и с параметрическим учётом взаимодействия соседних атомов. Сформулирован общий метод учёта электрических контактов в уравнении Шредингера для решения задач квантового транспорта электронов.

В рамках концепції «знизу–вгору» наноелектроніки розглянуто методу нерівноважних Грінових функцій у матричному представленні та застосування її до транспортних задач $1D$ - й $2D$ -провідників у моделі сильної зв'язку з ортогональним базисом і параметричним урахуванням взаємодії сусідніх атомів. Сформульовано загальну методу врахування електричних контактів у Шрединґеровому рівнянні задля розв'язання задач квантового транспорту електронів.

Non-equilibrium Green's functions method within the matrix presentation is considered and applied to model transport problems for $1D$ and $2D$ conductors using a parameterized nearest-neighbour tight-binding model with orthogonal basis within the scope of the 'bottom–up' approach of nanoelectronics. General method to account for electrical contacts within the Schrödinger equation to solve the quantum electronic-transport problems is formulated.

Ключевые слова: нанофизика, наноэлектроника, молекулярная электроника, концепция «снизу–вверх», функции Грина, одноуровневый резистор, многоуровневый резистор, низкоразмерный проводник, когерентный транспорт, квантовый транспорт, графен, коэффициент прохождения.

(Получено 6 марта 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

В продолжение развития концепции «снизу–вверх» [1–3] современной наноэлектроники [4, 5] сформулируем метод неравновесных функций Грина в матричном представлении и применим его для решения и анализа модельных транспортных задач переноса электронов на примере однородных и неоднородных $1D$ - и $2D$ -проводников, в том числе и графена, а также сформулируем общий метод учёта электрических контактов в уравнении Шредингера.

Современный ноутбук содержит почти 4 миллиарда или даже больше резисторов и полевых транзисторов с длиной канала проводимости ~ 30 – 40 нм, что соответствует сотне-другой атомов. 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 ещё более коротких длинах канала проводимости начинает проявляться волновая природа электронов в виде таких квантовых эффектов как интерференция и туннелирование.

Исторически все более глубокое понимание физической природы электрической проводимости приходило «сверху–вниз»: от массивных макроскопических проводников до транзисторов молекулярных и даже атомных размеров. Ещё лет 20–25 тому назад были

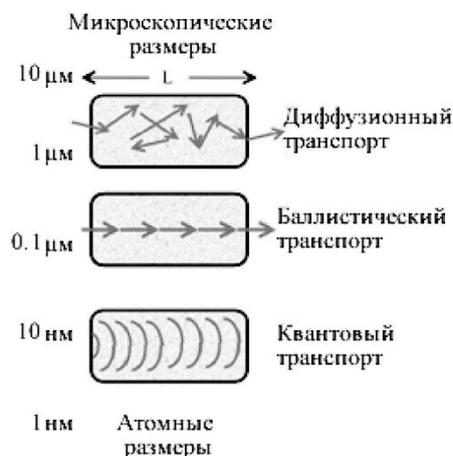


Рис. 1. С уменьшением длины канала проводимости L физическая природа транспорта электронов изменяется качественно — от диффузионного к баллистическому и далее к квантовому.

обычными рассуждения о том, как понимать концепцию об электрическом сопротивлении, если размер проводника приближается к атомным размерам. Несмотря на исключительные достижения в области экспериментальной мезо- и нанofизики, и поныне при обсуждении проводимости доминирует концепция «сверху–вниз» вместо более естественной концепции «снизу–вверх», что делает анализ и обсуждение устройств наноэлектроники подчас нелепо сложными [6, 7].

Мы должны сегодня привнести новые перспективы в университетское и инженерное образование для изучения возможностей и решения конкретных задач современных нанотехнологий. Шестьдесят лет назад электроника столкнулась с аналогичной проблемой в связи с изобретением транзистора и эффективно справилась с ситуацией: было обучено целое поколение физиков и инженеров, на плечи которых легло создание современной электронной промышленности.

Сегодня мы стоим перед необходимостью совершить аналогичную революцию в высшем образовании, как и в исследовательской и инженерной работе. Ещё с момента становления физики твёрдого тела вещества описывались с помощью таких феноменологических свойств как подвижность носителей тока или коэффициентов поглощения в оптике, которые использовались как исходные данные при построении и анализе макроскопических моделей различных электронных и оптических устройств. Эта концепция «сверху–вниз» и поныне широко используется даже применительно к наноструктурированным материалам. Мы полагаем, что такой подход не в полной мере адекватен современным возможностям и перспективам, открывающимся в результате интенсивного развития нанофизики и нанотехнологий. Необходим интегрированный подход, включающий в себя новое мышление и новые модели, порождённые подчас исключительными и даже революционными результатами в различных направлениях нанонаук, и приложение их к таким неравновесным задачам как наноразмерные транзисторы, нано- и мезоустройства преобразования энергии и нанобиосенсоры. Эта новая концепция «снизу–вверх» применительно к новым электронным устройствам и новым материалам, пожалуй, наиболее успешно демонстрируется в Сети вычислительной нанотехнологии (Network of Computational Nanotechnology) Университета Пердью (США). Концепцию «снизу–вверх» проиллюстрируем на рис. 2.

Любое устройство наноэлектроники имеет активный канал проводимости, который описывается гамильтонианом $[H]$, включающим 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 нахо-

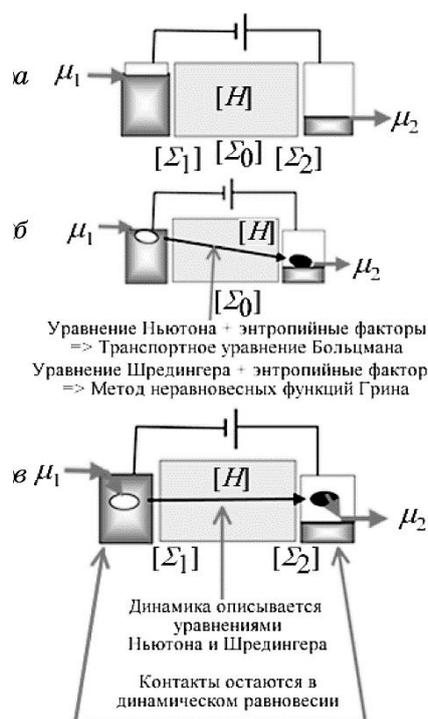


Рис. 2. Схематическое описание (а) активного канала проводимости, взаимодействующего с истоком и стоком, и двух предельных случаев — (б) диффузионного транспорта в макроскопических проводниках и (в) баллистического транспорта в нанотранзисторах.

дятся 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 посвящён настоящий обзор на примере модельных транспортных задач, представляющих не только научный, но и познавательный и педа-

гогический интерес.

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

Уравнение Шредингера само по себе не пригодно для объяснения таких, кажущихся очевидными процессов, как например, самопроизвольный переход электрона из возбуждённого 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 (НРФГ), 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 силы. 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 ещё в 1957 году [14–16] задолго до её триумфального экспериментального подтверждения в нанотранзисторах. Сегодня действительно надёжно установлено, что балли-

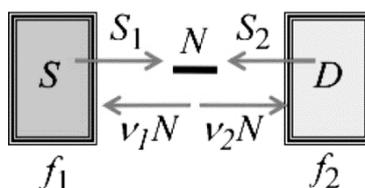


Рис. 3. Модель одноуровневого проводника в полуклассическом приближении.

стические 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. УРАВНЕНИЯ МЕТОДА НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Задачу настоящего обзора мы видим в том, чтобы дать компактное изложение формализма НРФГ с учётом 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 своём изложении мы будем следовать работам Датты, Мейра и Вингрена [4–7, 17–20], как наиболее адекватным стоящей перед нами задачи.

Начнём 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

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

ещё двух членов, описывающих отток электронов в контакты (out-flow)

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

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 сопряжённая 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 несущественно; подробнее познакомиться с терминологией рекомендуем работы [6, 11–13]. Отметим лишь, что формализм НРФГ в применении к задачам в наноэлектронике сводится к четырём 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 сопряжённую ему строку $\{\psi\}^+$ даёт

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

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 даётся выражением

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

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 $-iG^\leftarrow$, Σ^{in} — вместо $-i\Sigma^\leftarrow$, 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. Полагаем, что вычленение этих двух уравнений, а далее ещё двух из МЧТВ, первоначально использованной для их вывода, сделает метод НРФГ более прозрачным и доступным, и он будет читаться студентам физикам и электронщикам для решения задач, когда возникает необходимость учесть электрические контакты в уравнении Шредингера.

Приведём 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 $[\Gamma]$ — 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 трёх её выражений дадим ниже.

Все матрицы $[\Sigma]$, $[\Gamma]$ и $[\Sigma^{in}]$ содержат слагаемые, относящиеся к конкретным терминалам (контактам), учитываемых 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

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

куда входят только те компоненты матриц, которые относятся к

данному терминалу m . Это удельный ток (на единицу энергии), его нужно ещё проинтегрировать по всему спектру энергий, чтобы получить полный ток через терминал m .

Далее рассмотрим простые модельные транспортные задачи, затем вернёмся 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 перейдём к проводнику с произвольным числом каналов, описываемым матрицами $N \times N$. Сначала, однако, рассмотрим одноуровневую задачу в полуклассическом приближении (рис. 3).

Одноуровневый проводник контактирует с двумя контактами с фермиевскими заселённостями $f_1(\varepsilon)$ 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

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

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 заселённость 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:

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

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 источником, 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 заселённость 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 , выраженного 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 собственной энергии.

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 сопряжённого имеем

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

другими словами заселённость изолированного уровня энергии не изменяется со временем.

Нас же интересует не изолированная система, а проводник, соединённый 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 вернёмся позже.

Уравнения (29) и (17) согласуются друг с другом, если положить

$$\gamma_1 = \hbar \nu_1, \quad (30)$$

$$\gamma_2 = \hbar \nu_2. \quad (31)$$

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 одиночного 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

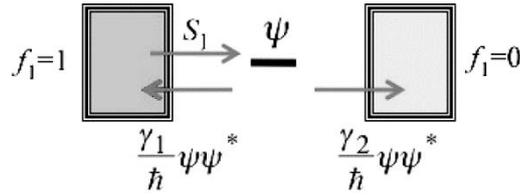


Рис. 4. Опорожнение и поступление электронов в квантовой модели одноуровневого проводника.

уровень с энергией $E = \varepsilon$. Пока не включён источник S_1 поступления электронов в проводник, электроны могут лишь покидать проводник, уходя в контакты (рис. 4).

Введём 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 своё 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 неопределённости 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 учётом 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 учётом (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

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

Приравнивая (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 соединён с проводником, то электроны так же хорошо покидают контакт, как и возвращаются назад из проводника.

Как и классическое выражение 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 , неучтённого во временном уравнении Шредингера (28).

Левая и правая части уравнения (40) равны нулю, поскольку речь идёт 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

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

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

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

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 $D(E)$:

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

Прямое экспериментальное измерение проводимости одиночной молекулы водорода [21], спектр которой фактически соответствует одноуровневой модели резистора, может служить прямым доказательством справедливости квантового уширения уровней энергии.

Сравнивая (43) с выражением (32) для тока в упругом резисторе из работы [1]

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

получаем проводимость одноуровневой модели с учётом квантового уширения:

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

Предполагая равноценную связь проводника с обоими контактами

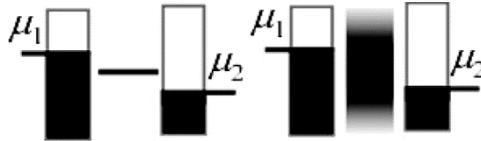


Рис. 5. В отличие от классических представлений (слева) одиночный локализованный уровень энергии в квантовой модели (справа) размывается вследствие принципа неопределённости Гейзенберга.

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma/2 \quad (47)$$

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 является двухуровневой с учётом вырождения по спину.

6. 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 поддерживался 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 перекрёстных интерференционных слагаемых:

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

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.

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

$$\Gamma_1 = i[\Sigma_1 - \Sigma_1^+], \quad \Gamma_2 = i[\Sigma_2 - \Sigma_2^+], \quad (53)$$

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 учтёнными контактами (52).

Из (52) непосредственно имеем

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

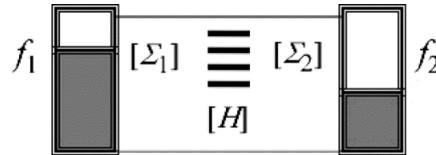


Рис. 6. Транспортная модель для многоуровневого проводника.

где запаздывающая функция Грина G^R даётся 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 сопряжённая 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) даёт 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 $[A]$. Если в (13) с (59) $f_1 = 1$ и $f_2 = 1$, спектральная функция

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

с $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$.

Получим ещё два других выражения для спектральной функции, приведённых в [14]. Из (54) с учётом (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 эрмитово сопряжение равенства (62), получим

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

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 ещё одно выражение для спектральной функции A (14), а именно:

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

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

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

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 сопряжённого

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

Имеем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\} \{\psi\}^+ = \left(i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\} \right) \{\psi\}^+ + \{\psi\} \left(i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi\}^+ \right) =$$

$$\begin{aligned}
 &= ([H + \Sigma]\{\psi\} + \{s\})\{\psi\}^+ - \{\psi\}(\{\psi\}^+[H + \Sigma^+] + \{s\}^+) = \\
 &= [(H + \Sigma)\psi\psi^+ - \psi\psi^+(H + \Sigma^+)] + [ss^+G^A - G^Rss^+],
 \end{aligned} \tag{71}$$

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

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

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

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

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

$$\frac{dN}{dt} = \frac{-i}{\hbar} \text{Tr}([\Sigma G^n - G^n\Sigma^+] + [\Sigma^{in}G^A - G^R\Sigma^{in}]), \tag{74}$$

а с учётом ещё (14) и (15) окончательно имеем:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{\hbar} \text{Tr}[\Sigma^{in}A - \Gamma G^n]. \tag{75}$$

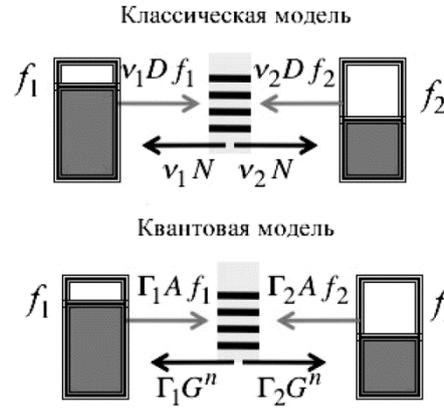


Рис. 7. Пополнение и опорожнение канала проводимости в классической и квантовой моделях транспорта электронов.

Далее нужно учесть следующее. В уравнении (73) обе части равенства равны нулю, поскольку речь идёт 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

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

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

8. ФУНКЦИЯ ПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ КОГЕРЕНТНОГО ТРАНСПОРТА

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

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

Тогда имеем

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

где коэффициент прохождения между контактами m и n

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

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

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

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

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

и сравнивая это выражение для тока с приведённым выше аналогичным выражением для тока в упругом резисторе (32) из работы

[1], получаем квантовый аналог функции проводимости:

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

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 обычным разложением разности фермиевских функций в ряд Тейлора с учётом лишь линейного члена (см. (21) в [1]) для получения соответствующей разности электрохимических потенциалов, тогда уравнение (78) окажется фактически уравнением Бюттекера (83) с проводимостью

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

которую нужно ещё 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). Учёт 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

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

Что из себя физически представляет взаимодействие Σ_0 ? С точки зрения электрона, движущегося в твёрдом 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 замо-

роженными 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 надо адекватно моделировать, если мы хотим правильно интерпретировать экспериментальные данные.

Метод НРФГ был первоначально разработан именно для учёта неупругих процессов квантового транспорта в массивных проводниках. Мы же изложили его выше применительно к упругим резисторам. Вопросы дефазировки и обобщение метода НРФГ на неупругие процессы транспорта рассмотрены в [23].

Сейчас же мы обратимся к модельным задачам квантового транспорта, представляющим не только педагогический, но и научный интерес.

Начнём мы с квантового транспорта в $1D$ -проводниках как в режиме баллистического транспорта, так и с учётом рассеивающих центров. Обосновано ли пренебрегать эффектами интерференции на дефектах и предполагать, что электроны диффундируют как классические частицы? Такой вопрос поставил Андерсон ещё в 1958 году и пришёл 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 упрощённая модель НРФГ помогает глубже понять физику квантового транспорта.

Для любой транспортной задачи нужно написать гамильтониан $[H]$ и матрицы собственной энергии $[\Sigma]$. 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 учётом взаимодействия 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 многие свойства протяжённых полиенов $-(\text{CH}=\text{CH}-)_n\text{CH}=\text{}$ [26–28], графена [29, 30], полиацетиленов и кумуленов $=(\text{C}=\text{C})_n\text{C}=\text{}$ [31–33] (в последних, правда, каждый атом представляет два взаимно ортогональных π -электрона, что требует лишь незначительной модификации модели).

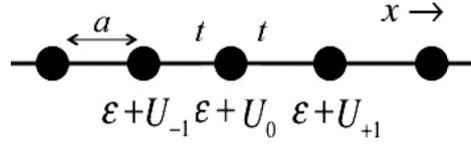


Рис. 8. К учёту изменяющегося вдоль канала проводимости потенциала $U(x)$ в трансляционно инвариантной цепочке атомов с периодом a , поставляющих каждый по одному электрону, и характеризуемой в приближении Хюккеля двумя параметрами — кулоновским интегралом ε и резонансным интегралом t .

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

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

Нам нужно переписать дисперсионное соотношение (85) применительно к используемому нами приближению сильной связи с учётом 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, т.е.

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

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 учётом (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 потребуются учесть изменяющийся вдоль канала проводимости потенциал $U(x)$, это делается путём 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 расчётов 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 выпи-

сывается матрица гамильтониана $[H]$. Теперь обсудим контактные матрицы собственной энергии. Основная идея заключается в том, чтобы бесконечно протяжённый проводник, описываемый гамильтонианом $[H]$, заменить проводником конечной длины, описываемый матрицей $[H + \Sigma_1 + \Sigma_2]$, с открытыми граничными условиями на концах, подразумевая под этим «хорошие» контакты, не создающие на своих концах отражённых потоков (рис. 9).

Проиллюстрируем эту идею на одномерной решётке. 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).

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), даёт вклад в энергию, равный $t\psi_{n+1}/\psi_n$. Эта энергия и есть собственная энергия контакта 2. С учётом

$$\psi_{n+1} = \psi_n e^{ika} \tag{96}$$

вместо (90) имеем

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

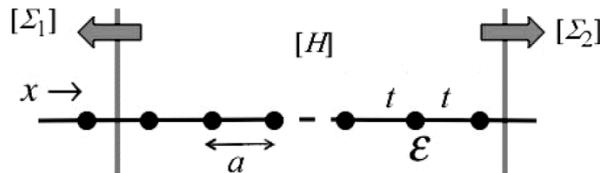


Рис. 9. Открытым граничным условиям соответствуют «хорошие» контакты, не создающие на своих концах отражённых потоков.

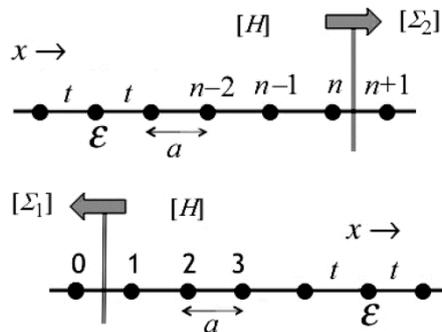


Рис. 10. К составлению контактных матриц 1D-проводника из n атомов.

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

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

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 коэффи-

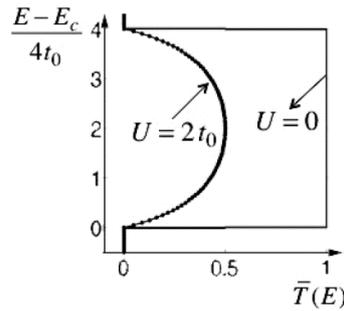


Рис. 11. Коэффициент прохождения в баллистическом 1D-проводнике без рассеяния ($U = 0$) и с одним точечным рассеивающим центром ($U = 2t_0$).

циент 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, $U = 0$).

9.2. Плотность состояний 1D-проводника

Вычислим сначала плотность состояний $D(E)$ 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 $v = dE/dp$ (см. (80) в [1]).

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

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

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

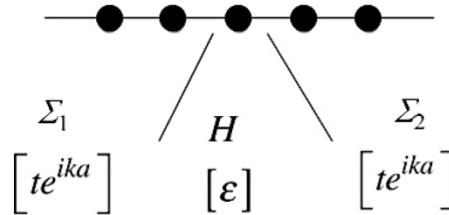


Рис. 12. К вычислению плотности состояний $D(E) = A/2\pi$ через спектральную функцию A (14).

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 учётом (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 путём добавления постоянного потенциала U к кулоновскому интегралу одного из атомов цепочки

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

При такой постановке задачи коэффициент прохождения может

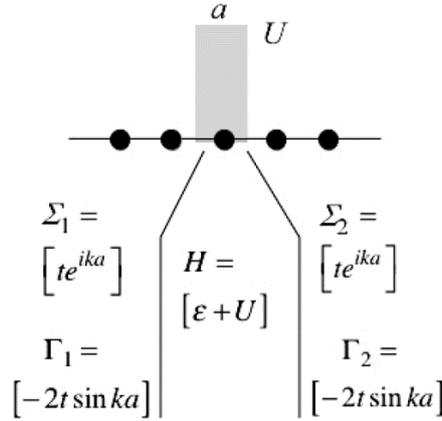


Рис. 13. К расчёту коэффициента прохождения в 1D-проводнике с одним рассеивающим центром методом НРФГ.

быть вычислен аналитически (рис. 13).

Контактные матрицы 1×1 заданы; по ним вычислили Γ_1 и Γ_2 по (53); гриновская функция с учётом (100) —

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

от неё комплексным сопряжением берём 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 учётом (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 отсутствии рассеивающего центра ($U = 0$) и с его учётом $U = 2t_0$ 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 $\exp(-ikz)$ с коэффициентом отражения ρ и проходит далее $\exp(+ikz)$ с коэффициентом прохождения τ . Из уравнения Шредингера в хюккелевском приближении имеем:

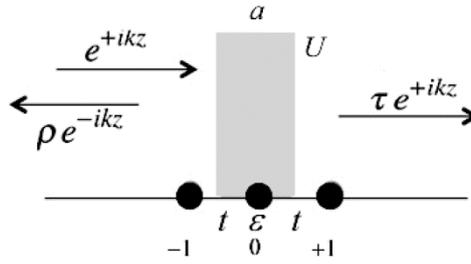


Рис. 14. К вычислению коэффициента прохождения из условия непрерывности волновой функции.

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

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 учётом (115) даёт

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

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

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

откуда после умножения на его комплексно сопряжённое 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 учётом взаимодействия лишь соседних

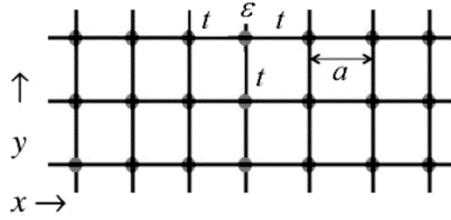


Рис. 15. Трансляционно инвариантная решётка атомов с периодом a , составляющих каждый по одному электрону, и характеризуемая в приближении Хюккеля двумя параметрами — кулоновским интегралом ε и резонансным интегралом t .

атомов (рис. 15) в ортогональной базе (хюккелевская модель).

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

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

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

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

которое для хюккелевской модели решётки даёт

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

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 (см. (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 измеряется число мод $M(E = \mu_0)$, которое будучи по своей физической природе целочисленным свойством пока-

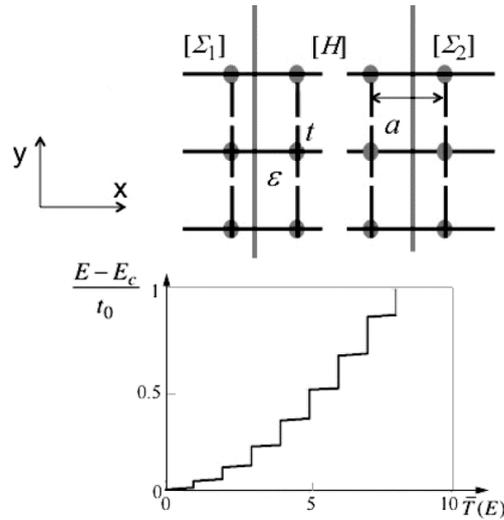


Рис. 16. Вычленение из двумерной решётки области собственно проводника и контактов для метода НРФГ и результаты расчёта коэффициента прохождения методом НРФГ при числе атомов по ширине проводника, равном 25.

зывает скачки при изменении энергии $E = \mu_0$ и поперечного сечения $2D$ -проводника.

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

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 соединённых параллельно $1D$ -проводников, каждый длиной q . Матрица $(p \times q)$ есть строчная матрица длины q , элементами которой являются столбцовые матрицы длины p . На рисунке 17 показан проводник с одним столбцом формы $(p \times 1)$.

Каждый из q столбцов описывается своей хюккелевской матрицей α порядка p . Например, при $p = 3$ матрица α 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 $\beta = tI$ порядка p , где I — единичная матрица. В нашей модели, естественно, $\beta = \beta^+$. Например, при $p = 3$

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

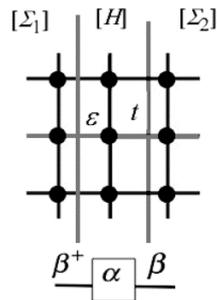


Рис. 17. Проводник формы $(p \times 1)$.

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 решёточный базис:

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

Матрица β не затрагивается преобразованием базиса, поскольку она уже диагональна. 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 соединённых 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

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

Для каждого из p параллельных $1D$ -проводников коэффициент прохождения равен единице в области энергий ($t_0 = |t|$)

$$\varepsilon_n - 2t_0 < E < \varepsilon_n + 2t_0,$$

как показано на рис. 19. Складывая коэффициенты прохождения для всех p мод проводника, получаем зависимость коэффициента прохождения от энергии в виде поднимающихся ступенек в нижней

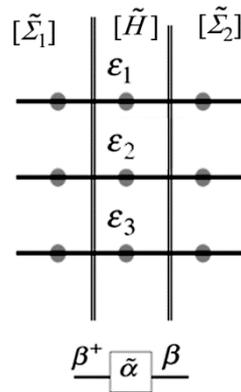


Рис. 18. 2D-проводник в хюккелевском приближении после диагонализации гамильтониана H .

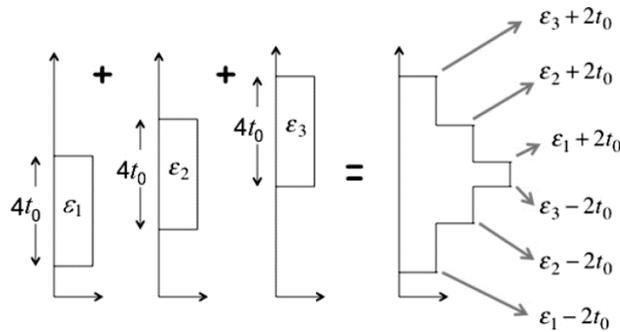


Рис. 19. К образованию ступенек (рис. 16) в зависимости коэффициента прохождения от энергии.

части графика (рис. 16) и опускающихся ступенек в верхней части графика.

При моделировании проводников n -типа обычно вычисляют 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 рисунке 20 результаты расчёта 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 $p = 25$.

Представление 2D/3D-проводника в виде параллельных 1D-

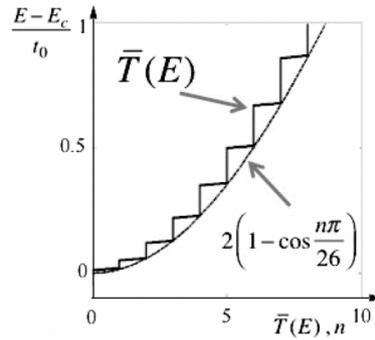


Рис. 20. Сопоставление численных результатов расчёта коэффициента прохождения методом НРФГ с аналитической аппроксимацией по (134) при $p = 25$.

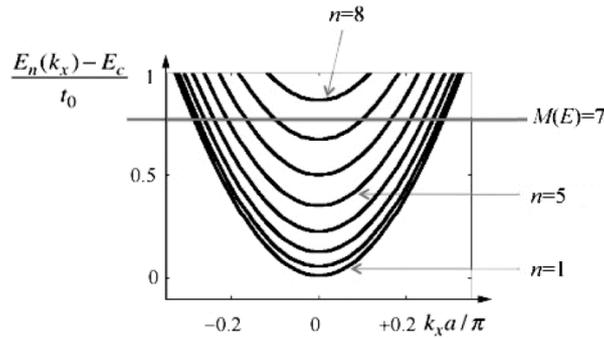


Рис. 21. Нижние восемь подзон хюккелевской модели $2D$ -проводника.

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.

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, проведённая при определённой 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 решёточном 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 решёточный базис (рис. 22)

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

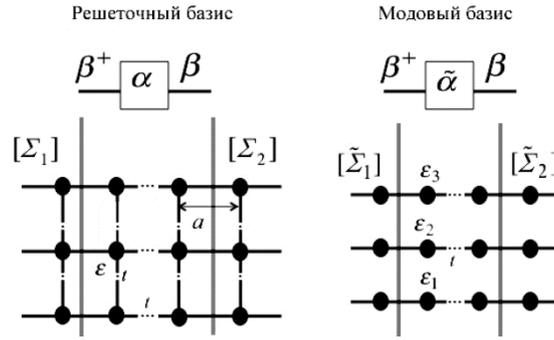


Рис. 22. К построению контактных матриц в модовом базисе с обратным преобразованием в решёточный базис.

Изложенный выше метод построения контактных матриц подходит для однородных решёток, но не пригоден в общем случае, поскольку далеко не всегда удаётся 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 решётка графена.

11. ГРАФЕН

В рассмотренной однородной решётке (рис. 15) каждый атом находится в одном и том же окружении. В правильной гексагональной решётке графена (рис. 23) есть два сорта атомов. 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 решётки обеспечивают два атома, образующие элементарную ячейку в виде правильного ромба.

Учитывая наличие двух неэквивалентных атомов в элементарной

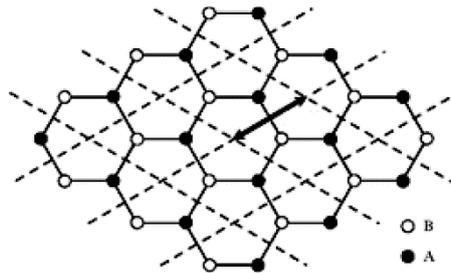


Рис. 23. Элементарная ячейка графена и вектор трансляции решёток Браве А и В.

ячейке, уравнение Шредингера (86) перепишем в виде

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

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

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

после подстановки которого в (142), имеем

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

где гамильтониан с учётом фазового множителя

$$[h(\mathbf{k})] = \sum_m [H]_{nm} \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)) \quad (145)$$

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

Потребуется также два вектора

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x} + b\hat{y}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{x} - b\hat{y}, \quad (146)$$

связанные с геометрическими параметрами графеновой сетки:

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

где a_0 — длина связи СС в графене, обычно принимаемая равной 1,42 Å.

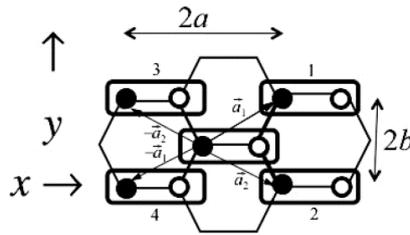


Рис. 24. Элементарная ячейка графена с номером 0 в окружении ближайших четырёх ячеек с номерами 1, 2, 3, 4.

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

$$\begin{aligned}
 & e^{-ik \cdot \mathbf{a}_2} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+ik \cdot \mathbf{a}_1} \\
 & & + & & + \\
 & & & \begin{bmatrix} \varepsilon & t \\ t & \varepsilon \end{bmatrix} & & (148) \\
 & & + & & + \\
 & e^{-ik \cdot \mathbf{a}_1} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+ik \cdot \mathbf{a}_2}
 \end{aligned}$$

— 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 \mathbf{a}_1 , а второй ячейки — вектором \mathbf{a}_2 (рис. 24). Аналогично получаются вклады от ячеек 3 и 4.

Суммирование пяти матриц (148) даёт для гамильтониана (145):

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

где

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

или с учётом (146)

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

Диагонализация (144) с учётом (149) даёт дисперсионное соотношение

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

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 путём линеаризации h_0 вблизи дираковских точек, в которых

$$h_0(\mathbf{k}) = 0, \tag{154}$$

так что

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon. \tag{155}$$

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 нуль при $k_y b = \pm 2\pi/3$.

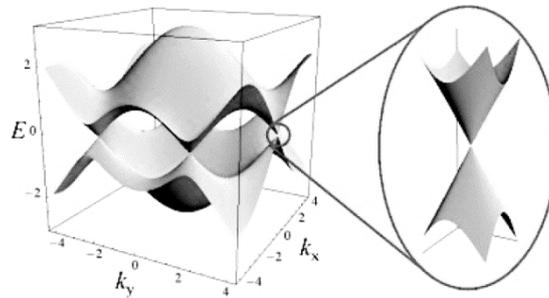


Рис. 25. Зонная структура графена. Увеличенным масштабом показан линейный спектр носителей тока в окрестности точки Дирака $k_x a = 0$ и $k_y b = +2\pi/3$ (рис. 26).

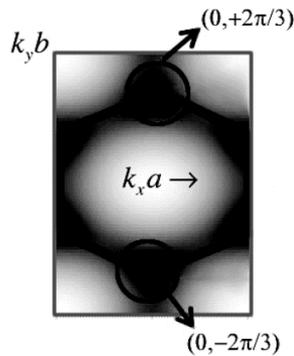


Рис. 26. Сечение зонной структуры графена по дираковским точкам, область вблизи которых зачернена.

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

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

где

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

После несложных 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).

Контактная блочная матрица везде нулевая кроме последнего

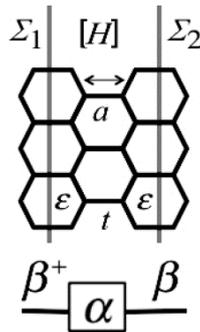


Рис. 27. К построению контактных матриц для графена.

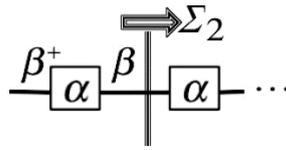


Рис. 28. Правая граница проводника с контактом.

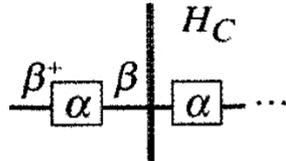


Рис. 29. Правая граница проводника с контактом в общем случае.

диагонального элемента с номером n

$$\Sigma_2(E) = \begin{matrix} & n-2 & n-1 & n \\ \begin{matrix} \dots \\ \dots & 0 & 0 \\ \dots & 0 & \beta g_2 \beta^+ \end{matrix} \end{matrix}. \quad (159)$$

В этом ненулевом блоке g_2 называют граничной (surface) функцией Грина для контакта 2 и вычисляют её 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 .

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

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

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

$$A \equiv (E + i0^+)I - \alpha, \quad (164)$$

$$A_c \equiv (E + i0^+)I_c - H_c. \quad (165)$$

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 $[A_c]^{-1}$, а именно:

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

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 совпадёт с g_{N-1} с наперёд 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 найдём 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 приведём результаты расчёта коэффициента прохождения и плотности состояний хюккелевской модели графеновых лент для его двух конфигураций границ (рис. 30) — зигзагообразной (Zigzag Graphene Nano Ribbon—ZGNR) и креслоподобной (Armchair Graphene Nano Ribbon—AGNR) [36]. Расчёты проводились для лент шириной $W = 53$ нм с резонансным интегралом $t_0 = 2,7$ эВ.

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

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

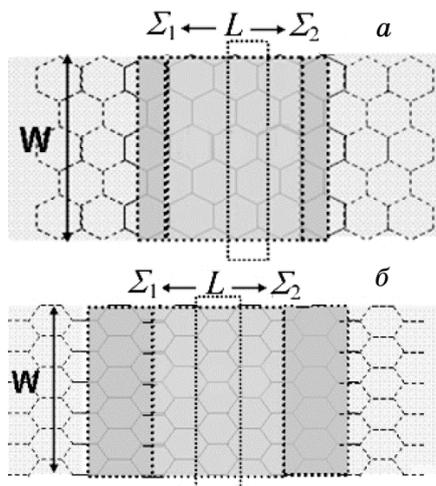


Рис. 30. Выбор повторяющихся фрагментов (показаны прямоугольниками, выступающими за пределы ширины лент W) двух конфигураций границ — зигзагообразной (а) и креслоподобной (б).

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

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

Обращает на себя внимание высокая плотность состояний при $E=0$ для зигзагообразной конфигурации графеновой ленты. Это так называемые краевые локальные состояния вблизи уровня Ферми,

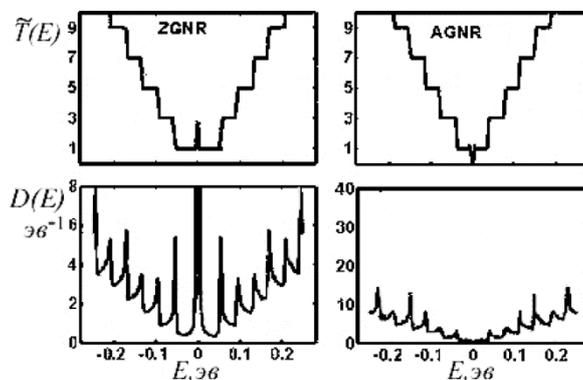


Рис. 31. Коэффициент прохождения и плотность состояний для двух конфигураций границ — зигзагообразной ZGNR (слева) и креслоподобной AGNR (справа).

отсутствующие у креслоподобной конфигурации [38, 39]. В нашу задачу не входит анализ результатов расчёта, тем более что роль конфигурации границ и ширины графеновых лент детально изучены [38–42]. Отметим лишь высокую правдоподобность результатов, получаемых даже в рамках простейшей хюккелевской модели графена.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стрѣха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **9**, No. 4: 5 (2012).
2. Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стрѣха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **10**, No. 1: 5 (2013).
3. Ю. О. Кругляк, Н. Ю. Кругляк, М. В. Стрѣха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **10**, No. 2: 5 (2013).
4. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012).
5. S. Datta, *The Oxford Handbook on Nanoscience and Nanotechnology: Frontiers and Advances* (Eds. A. V. Narlikar and Y. Y. Fu) (Oxford: Oxford University Press: 2012), vol. **1**.
6. S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge: Cambridge University Press: 2005).
7. S. Datta, *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, Nanoscale Phenomena: Basic Science to Device Applications* (Eds. Z. K. Tang and P. Sheng) (Berlin: Springer: 2008), vol. **2**.
8. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **5**: 21 (1972).
9. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**: 570 (1957).
10. F. W. Sears and G. L. Salinger, *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics* (Boston: Addison-Wesley: 1975).
11. P. C. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev.*, **115**, No. 6: 1342 (1959).
12. L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (New York: W. A. Benjamin: 1962).
13. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ*, **47**: 1515 (1964).
14. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.*, **1**, No. 3: 223 (1957).
15. R. Landauer, *Philos. Mag.*, **21**: 863 (1970).
16. R. Landauer, *J. Math. Phys.*, **37**, No. 10: 5259 (1996).
17. S. Datta, *Phys. Rev. B*, **40**: 5830 (1989).
18. S. Datta, *J. Phys. Cond. Matt.*, **2**: 8023 (1990).
19. Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.*, **68**: 2512 (1992).
20. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press: 2001).
21. R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, N. D. Lang, M. C. van Hemert, and J. M. van Ruitenbeek, *Nature*, **419**, No. 3: 906 (2002).
22. M. Buttiker, *IBM J. Res. Dev.*, **32**, No. 3: 317 (1988).
23. Ю. О. Кругляк, М. В. Стрѣха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **11**, No. 3: 5 (2014).
24. P. W. Anderson, *Phys. Rev. B*, **23**, No 10: 4828 (1981).

25. Ю. А. Кругляк, В. С. Квакуш, Г. Г. Дядюша, В. И. Хильченко, *Методы вычислений в квантовой химии. Расчет π -электронной структуры молекул простыми методами молекулярных орбиталей* (Киев: Наукова думка: 1967).
26. Yu. A. Kruglyak and I. I. Ukrainsky, *Intern. J. Quantum Chem.*, **4**, No. 1: 57 (1970).
27. И. И. Украинский, Ю. А. Кругляк, *Укр. физ. ж.*, **15**, № 7: 1068 (1970).
28. G. F. Kventsel and Yu. A. Kruglyak, *Theor. chim. Acta.*, **12**: 1 (1968).
29. М. В. Стриха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **7**, No. 3: 5 (2010).
30. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Вісник Одеського держ. еколог. ун-ту*, № 13: 207 (2012).
31. Yu. A. Kruglyak and G. G. Dyadyusha, *Theor. chim. Acta*, **10**: 23 (1968).
32. Yu. A. Kruglyak and G. G. Dyadyusha, *Theor. chim. Acta*, **12**: 18 (1968).
33. Ю. А. Кругляк, Г. Г. Дядюша, *Теор. експер. химия*, **4**, № 4: 431 (1968).
34. D. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, No. 9: 848 (1988).
35. D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, G. A. C. Jones, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**, No. 8: L209 (1988).
36. R. G. Mojarad, A. N. M. Zainuddin, G. Klimeck, and S. Datta, *J. Comput. Electron.*, **7**: 407 (2008).
37. C. Berger, Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer, *Science*, **312**: 1191 (2006).
38. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Japan*, **65**, No. 7: 1920 (1996).
39. K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B*, **54**, No. 24: 17954 (1996).
40. L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B*, **73**, No. 23: 235411 (2006).
41. K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New J. Phys.*, **11**: 095016 (2009).
42. M. Koch, F. Ample, C. Joachim, and L. Grill, *Nature Nanotechnology*, **7**: 713 (2012).

REFERENCES

1. Yu. O. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **9**, No. 4: 5 (2012) (in Ukrainian).
2. Yu. O. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **10**, No. 1: 5 (2013) (in Ukrainian).
3. Yu. O. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **10**, No. 2: 5 (2013) (in Ukrainian).
4. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012).
5. S. Datta, *The Oxford Handbook on Nanoscience and Nanotechnology: Frontiers and Advances* (Eds. A. V. Narlikar and Y. Y. Fu) (Oxford: Oxford University Press: 2012), vol. 1.
6. S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge: Cambridge

- University Press: 2005).
7. S. Datta, *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, Nanoscale Phenomena: Basic Science to Device Applications* (Eds. Z. K. Tang and P. Sheng) (Berlin: Springer: 2008), vol. 2.
 8. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **5**: 21 (1972).
 9. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**: 570 (1957).
 10. F. W. Sears and G. L. Salinger, *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics* (Boston: Addison-Wesley: 1975).
 11. P. C. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev.*, **115**, No. 6: 1342 (1959).
 12. L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (New York: W. A. Benjamin: 1962).
 13. L. V. Keldysh, *ZhETF*, **47**: 1515 (1964).
 14. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.*, **1**, No. 3: 223 (1957).
 15. R. Landauer, *Philos. Mag.*, **21**: 863 (1970).
 16. R. Landauer, *J. Math. Phys.*, **37**, No. 10: 5259 (1996).
 17. S. Datta, *Phys. Rev. B*, **40**: 5830 (1989).
 18. S. Datta, *S. J. Phys., Cond. Matt.*, **2**: 8023 (1990).
 19. Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.*, **68**: 2512 (1992).
 20. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press: 2001).
 21. R. H. M. Smit, Y. Noat, C. Untiedt, N. D. Lang, M. C. van Hemert, and J. M. van Ruitenbeek, *Nature*, **419**, No. 3: 906 (2002).
 22. M. Buttiker, *IBM J. Res. Dev.*, **32**, No. 3: 317 (1988).
 23. Yu. O. Kruglyak and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **11**, No. 3: 5 (2014) (in Ukrainian).
 24. P. W. Anderson, *Phys. Rev. B*, **23**, No. 10: 4828 (1981).
 25. Yu. A. Kruglyak, V. S. Kvakush, G. G. Dyadyusha, and V. I. Khilchenko, *Computational Methods in Quantum Chemistry. Calculation of π -electronic Structure of Molecules by Simple Molecular Orbital Methods* (Kiev: Naukova Dumka: 1967).
 26. Yu. A. Kruglyak and I. I. Ukrainsky, *Intern. J. Quantum Chem.*, **4**, No. 1: 57 (1970).
 27. I. I. Ukrainsky and Yu. A. Kruglyak, *Ukr. Fiz. Zh.*, **15**, No. 7: 1068 (1970) (in Russian).
 28. G. F. Kventsel and Yu. A. Kruglyak, *Theor. chim. Acta.*, **12**: 1 (1968).
 29. M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **7**, No. 3: 5 (2010) (in Ukrainian).
 30. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Visnyk Odessa State Environ. Univ.*, No. 13: 207 (2012) (in Russian).
 31. Yu. A. Kruglyak and G. G. Dyadyusha, *Theor. chim. Acta.*, **10**: 23 (1968).
 32. Yu. A. Kruglyak and G. G. Dyadyusha, *Theor. chim. Acta.*, **12**: 18 (1968).
 33. Yu. A. Kruglyak and G. G. Dyadyusha, *Teor. Eksper. Khim.*, **4**, No. 4: 431 (1968).
 34. D. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, No. 9: 848 (1988).
 35. D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**, No. 8: L209 (1988).

36. R. G. Mojarad, A. N. M. Zainuddin, G. Klimeck, and S. Datta, *J. Comput. Electron.*, **7**: 407 (2008).
37. C. Berger, Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer, *Science*, **312**: 1191 (2006).
38. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Japan*, **65**, No. 7: 1920 (1996).
39. K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B*, **54**, No. 24: 17954 (1996).
40. L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B*, **73**, No. 23: 235411 (2006).
41. K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, *New J. Phys.*, **11**: 095016 (2009).
42. M. Koch, F. Ample, C. Joachim, and L. Grill, *Nature Nanotechnology*, **7**: 713 (2012).