

УДК 537.32, PACS numbers: 73.23.Ad, 73.63.-b, 73.63.Rt, 85.35.-p

МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ. 2. МОДЕЛЬНЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ ЗАДАЧИ

Ю.А. Кругляк, проф.
Т.В. Крыжановская, старш. преп.

Одесский государственный экологический университет,
ул. Львовская, 15, 65016, Одесса, Украина, quantumnet@yandex.ua

В рамках концепции «снизу – вверх» нанозлектроники рассматривается применение метода неравновесных функций Грина к модельным транспортным задачам однородных 1D и 2D проводников в модели сильной связи с ортогональным базисом и с параметрическим учетом взаимодействия соседних атомов.

Ключевые слова: нанозлектроника, нанозлектроника, молекулярная электроника, снизу–вверх, метод НРФГ, одноуровневый резистор, многоуровневый резистор.

1. ВВЕДЕНИЕ

В продолжение первой части [1] настоящего обзора, посвященной теоретическим основам метода неравновесных функций Грина (НРФГ) в матричном представлении, в этой второй части в рамках концепции «снизу – вверх» нанозлектроники [2, 3] рассматривается применение метода НРФГ для анализа и решения модельных транспортных задач переноса электронов на примере однородных 1D и 2D проводников.

В третьей части в качестве модельной системы рассматривается графен как неоднородный 2D проводник в хюккелевском приближении, а также формулируется общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ 1D ПРОВОДНИКА

Для наших целей достаточно одномерной модели неограниченного однородного проводника в приближении сильной связи с учетом взаимодействия лишь соседних атомов (рис. 1) в ортогональной базе. Это приближение известно в квантовой химии с 1931 г. как метод молекулярных орбиталей Хюккеля [4]. Даже такая простая модель корректно описывает не все, но многие свойства протяженных полиенов – $(\text{CH}=\text{CH})_n\text{CH}=\text{CH}_2$ [5 – 7], графена [8, 9], полиацетиленов и кумуленов $\text{C}_n\text{C}=\text{C}_n$ [10 – 12], в последних, правда, каждый атом поставляет по два взаимно ортогональных π -электрона, что требует лишь незначительной модификации модели.

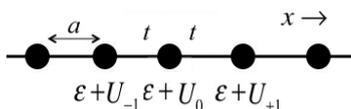


Рис. 1 – К учету изменяющегося вдоль канала проводимости потенциала $U(x)$ в трансляционно-инвариантной цепочке атомов с периодом a , поставляющих каждый по одному электрону, и характеризующейся в приближении Хюккеля двумя параметрами – кулоновским интегралом ϵ и резонансным интегралом t .

Однородный 1D проводник описывается стандартной теорией одномерной модели кристаллов

Кронига – Пенни и подчиняется параболическому дисперсионному соотношению с эффективной массой

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1)$$

Нам нужно переписать дисперсионное соотношение (1) применительно к используемому нами приближению сильной связи с учетом взаимодействия лишь соседних атомов в ортогональной базе.

Другими словами, как выбрать параметры ϵ и t так, чтобы аппроксимировать дисперсионное соотношение (1).

Из уравнения Шредингера

$$E\psi_n = \sum_m H_{nm}\psi_m \quad (2)$$

имеем

$$E = \sum_m H_{nm} \frac{\psi_m}{\psi_n}. \quad (3)$$

Решения уравнения Шредингера (2) есть плоские волны (теорема Блоха)

$$\psi_n = \exp(ikna), \quad (4)$$

так что из (3) следует

$$E(k) = \sum_m H_{nm} \exp(ik(m-n)a). \quad (5)$$

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,

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

так что для любой строки n матрицы $[H]$ согласно уравнению Шредингера (2) имеем

$$E\psi_n = t\psi_{n-1} + \varepsilon\psi_n + t\psi_{n+1} \quad (6)$$

или иначе

$$E = t \frac{\psi_{n-1}}{\psi_n} + \varepsilon + t \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n}, \quad (7)$$

а с учетом (4) и перегруппировки

$$E(k) = \varepsilon + t \exp(+ika) + t \exp(-ika) = \varepsilon + 2t \cos ka. \quad (8)$$

В области малых k

$$\cos ka \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2}. \quad (9)$$

Сравнивая дисперсионное соотношение (8) для однородной цепочки в хюккелевском приближении в области малых k с правильным параболическим дисперсионным приближением (1), находим резонансный и кулоновский интегралы

$$E_c = \varepsilon + 2t, \quad (10)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (11)$$

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. 1).

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 (10) и t (11) 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, подразумеваемая под этим «хорошие» контакты, не создающие на своих концах отраженных потоков (рис. 2).

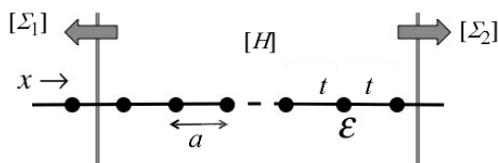


Рис. 2 – Открытым граничным условиям соответствуют «хорошие» контакты, не создающие на своих концах отраженных потоков.

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.3). Контакты не имеют входящих потоков, только выходящие. В n -ой строке (6) уравнения Шредингера (2) слагаемое $t\psi_{n+1}$ уже принадлежит контакту 2, который, согласно уравнению (7), дает вклад в энергию, равный $t\psi_{n+1}/\psi_n$. Эта энергия и есть собственная энергия контакта 2.

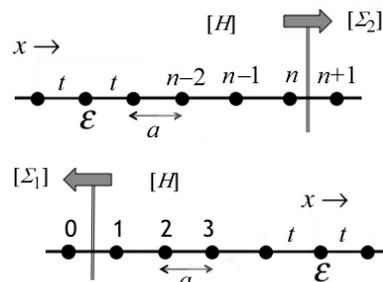


Рис. 3 – К составлению контактных матриц 1D проводника из n атомов.

С учетом

$$\psi_{n+1} = \psi_n e^{ika} \quad (12)$$

вместо (6) имеем

$$E\psi_n = t\psi_{n-1} + (\varepsilon + te^{ika})\psi_n, \quad (13)$$

где добавка к кулоновскому интегралу в n -ой строке (13) есть собственная энергия контакта 2 и помещается она как элемент (n, n) соответствующей контактной матрицы

$$\Sigma_2 = \begin{bmatrix} \ddots & \dots & & \\ & 0 & 0 & 0 \\ \dots & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & te^{ika} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

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

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} te^{ika} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Остальные элементы матриц Σ_1 и Σ_2 нулевые.

2.1 Баллистический 1D проводник

Энергетические матрицы H , Σ_1 и Σ_2 составлены, вычисляем запаздывающую гриновскую функцию G^R (6/[1]), опережающую функцию G^A (7/[1]), матрицы

Γ_1 и Γ_2 (53/[1]) и, наконец, коэффициент прохождения T_{12} (79/[1]) и проводимость $G(E)$ (82/[1]). 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/[1]) это означает, что в рассматриваемом примере коэффициент прохождения должен быть равен единице в области энергий

$$0 < E - E_c < 4t_0,$$

покрываемых дисперсионным соотношением

$$E = \varepsilon + 2t \cos ka = E_c + 2t_0(1 - \cos ka), \quad (16)$$

и нулю за пределами этой области (рис. 4, $U = 0$).

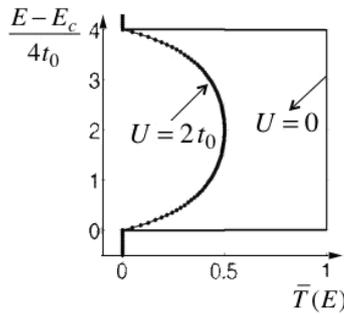


Рис. 4 – Коэффициент прохождения в баллистическом 1D проводнике без рассеяния ($U = 0$) и с одним точечным рассеивающим центром ($U = 2t_0$).

Плотность состояний 1D проводника. Вычислим сначала $D(E)$ 1D проводника из элементарных соображений. Согласно (82/[13]), число состояний 1D проводника длины L со значениями импульса меньшими, чем заданное значение p ,

$$N(p) = \frac{2L}{h/p}. \quad (17)$$

Плотность состояний

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2L}{h} \frac{dp}{dE} = \frac{L}{\pi \hbar v}, \quad (18)$$

где учтено то обстоятельство, что для изотропного закона дисперсии $E(p)$ скорость $v = dE/dp$ (80/[13]).

Получим это же выражение для плотности состояний методом НРФГ. Для изотропного 1D проводника достаточно учесть только один атом в цепи (рис. 5). В этом случае роль длины проводника L играет период решетки a . Для запаздывающей гринвской функции имеем

$$G^R = [E - \varepsilon - 2te^{ika}]^{-1}. \quad (19)$$

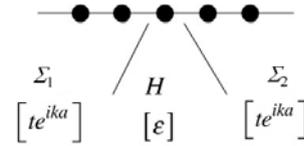


Рис. 5 – К вычислению плотности состояний $D(E) = A/2\pi$ через спектральную функцию A (14/[1]).

Представляя экспоненту через синус и косинус и учитывая (16), получим

$$G^R = i / 2t \sin ka. \quad (20)$$

Имеем также

$$\hbar v = \frac{dE}{dk} = -2at \sin ka, \quad (21)$$

где первое равенство следует из изотропности 1D проводника, а второе – из (16). С учетом (21) для G^R окончательно имеем

$$G^R = \frac{i}{2t \sin ka} = \frac{-i}{\hbar v / a}, \quad (22)$$

функция Грина

$$G^A = \frac{ia}{\hbar v}. \quad (23)$$

Спектральная функция

$$A = i[G^R - G^A] = \frac{2a}{\hbar v}, \quad (24)$$

а плотность состояний

$$D(E) = \frac{A}{2\pi} = \frac{a}{\pi \hbar v} \quad (25)$$

совпадает с выражением (18), полученным ранее из элементарных соображений.

2.2 1D проводник с одним рассеивающим центром

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

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & \varepsilon & t & 0 & \\ \vdots & t & \varepsilon + U & t & \\ & 0 & t & \varepsilon & \\ & & & \dots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (26)$$

При такой постановке задачи коэффициент прохождения может быть вычислен аналитически (рис.6).

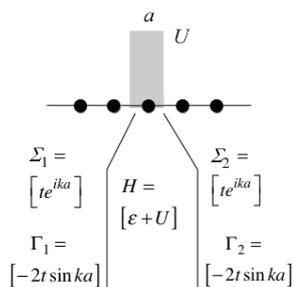


Рис. 6 – К расчету коэффициента прохождения в 1D проводнике с одним рассеивающим центром методом НРФГ.

Контактные матрицы 1x1 заданы, по ним вычислили Γ_1 и Γ_2 по (53/[1]), гриновская функция с учетом (16)

$$G^R(E) = \frac{1}{E - (\varepsilon + U) - 2te^{ika}} = \frac{1}{-U - i2t \sin ka}, \quad (27)$$

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

$$\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2} \quad (28)$$

или с учетом (21) окончательно

$$\bar{T}(E) = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2} = \frac{(\hbar v / a)^2}{U^2 + (\hbar v / a)^2}. \quad (29)$$

Результаты вычислений в отсутствии рассеивающего центра ($U = 0$) и с его учетом $U = 2t_0$ показаны на рис. 4.

Выражение для коэффициента прохождения (29) полезно вывести также из элементарных соображений (рис. 7).

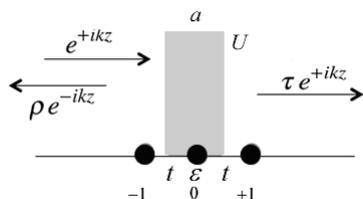


Рис. 7 – К вычислению коэффициента прохождения из условия непрерывности волновой функции.

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 коэффициентом прохождения τ . Из уравнения Шредингера в хюккелевском приближении имеем

$$E\psi_0 = (\varepsilon + U)\psi_0 + t\psi_{-1} + t\psi_{+1}. \quad (30)$$

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

$$1 + \rho = \tau = \psi_0. \quad (31)$$

Подстановка в (114) волновых функций на соседних с дефектом атомах и с учетом (31) дает

$$(E - \varepsilon - U)\tau = t(e^{-ika} + (\tau - 1)e^{ika}) + t\tau e^{ika}, \quad (32)$$

а после простых преобразований и перегруппировок с учетом (16) и (21) для коэффициента прохождения τ получаем

$$\tau = \frac{i\hbar v / a}{-U + i\hbar v / a}, \quad (33)$$

что после умножения на его комплексно сопряженное получаем уже выведенное ранее методом НРФГ выражение для коэффициента прохождения (29).

3. 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 одномерного проводника в приближении сильной связи с учетом взаимодействия лишь соседних атомов (рис. 8) в ортогональном базисе, так называемой хюккелевской модели.

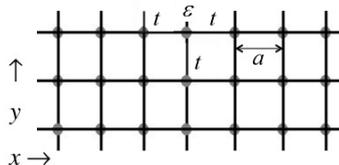


Рис. 8 – Трансляционно-инвариантная решетка атомов с периодом a , поставляющих каждый по одному электрону, и характеризуемая в приближении Хюккеля двумя параметрами – кулоновским интегралом ε и резонансным интегралом t .

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

$$E(k_x, k_y) = E_C + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}. \quad (34)$$

Решение уравнения Шредингера (2) выберем в виде

$$\psi_n = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_n), \quad (35)$$

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. Подстав-

для это решение в уравнение (3), получаем дисперсионное соотношение

$$E(\vec{k}) = \sum_m H_{nm} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_n)), \quad (36)$$

которое для хюккелевской модели решетки дает

$$E(\vec{k}) = \varepsilon + t \exp(+ik_x a) + t \exp(-ik_x a) + t \exp(+ik_y a) + t \exp(-ik_y a) = \varepsilon + 2t \cos(k_x a) + 2t \cos(k_y a). \quad (37)$$

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

$$t = -\hbar^2 / 2ma^2, \quad (38)$$

$$\varepsilon = E_c - 4t \quad (39)$$

или несколько иначе:

$$E_c = \varepsilon + 4t, \quad (40)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (41)$$

Составление хюккелевского гамильтониана H (рис. 9) не вызывает затруднений, обсудить лишь надо построение контактных матриц для 2D проводника.

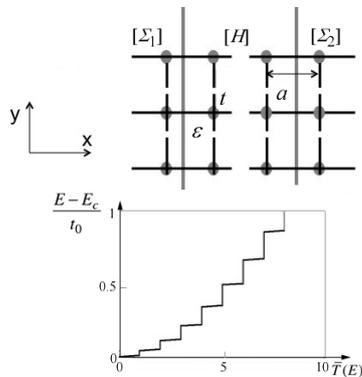


Рис. 9 – Вычленение из двумерной решетки области собственно проводника и контактов для метода НРФГ и результаты расчета коэффициента прохождения методом НРФГ при числе атомов по ширине проводника, равном 25.

Однако, сначала попробуем понять причины появления ступенек в зависимости коэффициента прохождения от энергии. Простое объяснение этого экспериментально наблюдаемого факта может быть следующим [105/[13]]. Для баллистического проводника коэффициент прохождения есть просто число мод $M(E)$, равное половине числа де-Бройлевских длин волн, укладывающихся в поперечном сечении проводника W ,

$$M(E) = \text{Int} \left(\frac{2W}{h/p} \right) = \text{Int} \left(\frac{2W}{h} \sqrt{2mE'} \right), \quad (42)$$

где под значком $\text{Int}(x)$ подразумевается наибольшее целое число, меньшее значения x , а правая часть (42) выписана для параболической дисперсии

$$E' = E - E_c = p^2 / 2m.$$

Экспериментально при низких температурах [14, 15] измеряется число мод $M(E = \mu_0)$, которое будучи по своей физической природе целочисленным свойством [3] показывает скачки при изменении энергии $E = \mu_0$ и поперечного сечения 2D проводника.

Правильное поведение расчетного коэффициента прохождения с ростом энергии (рис. 9), о чем свидетельствует не только само наличие ступенек, но и их равноширинность, подтверждаемая экспериментальными данными [14, 15], свидетельствует о корректном задании энергетических матриц в расчете методом НРФГ. Покажем как же появляются ступеньки (рис. 9) и построим гамильтониан и контактные матрицы для однородной 2D решетки.

Пусть проводник имеет p атомов по ширине проводника и q атомов по длине проводника, т.е. матрица проводника имеет форму (pxq) . Такой 2D проводник условно можно представить себе как p соединенных параллельно 1D проводников, каждый длиной q . Матрица (pxq) есть строчная матрица длины q , элементами которой являются столбцовые матрицы длины p . На рис. 10 показан проводник с одним столбцом формы $(px1)$.

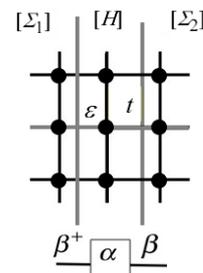


Рис. 10 – Проводник формы $(px1)$.

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

$$\alpha = \begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 \\ t & \varepsilon & t \\ 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix}. \quad (43)$$

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 $p = 3$

$$\beta = \begin{bmatrix} t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t \end{bmatrix}. \quad (44)$$

Гамильтониан H имеет блочную структуру. На его главной диагонали стоят одинаковые матрицы α порядка p , а ближайšie 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 $[\alpha]$

$$[\tilde{\alpha}] = [V]^+ [\alpha] [V], \quad (45)$$

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

$$\tilde{\alpha} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \quad (46)$$

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

$$[\alpha] = [V][\tilde{\alpha}][V]^+. \quad (47)$$

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 соединенных с контактами 1D проводников, каждый длиной q атомов (рис. 11) с энергиями $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_p$, равными собственным значениям матрицы α

$$\varepsilon_n = \varepsilon - 2t_0 \cos k_n a \quad (48)$$

с

$$k_n a = \frac{n\pi}{p+1}. \quad (49)$$

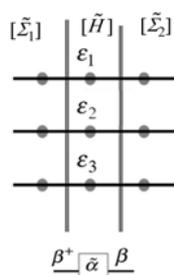


Рис. 11 – 2D проводник в хьюккелевском приближении после диагонализации гамильтониана H .

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. 12.

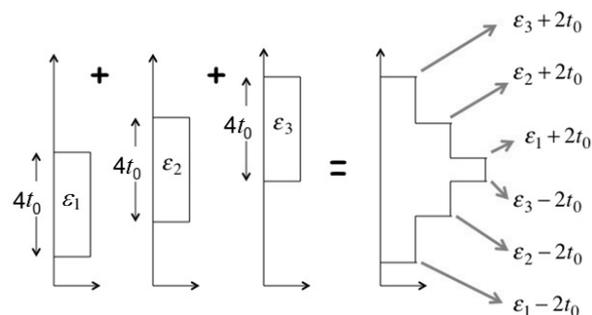


Рис. 12 – К образованию ступенек (рис. 9) в зависимости коэффициента прохождения от энергии.

Складывая коэффициенты прохождения для всех p мод проводника, получаем зависимость коэффициента прохождения от энергии в виде поднимающихся ступенек в нижней части графика (рис. 9) и опускающихся ступенек в верхней части графика.

При моделировании проводников n -типа обычно вычисляют нижнюю часть зоны (рис. 9) и мы видим лишь идущие вверх ступеньки с энергиями $\varepsilon_n - 2t_0$.

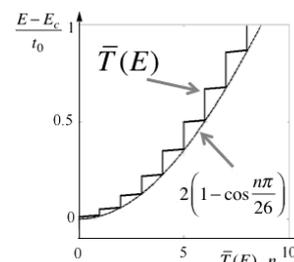


Рис. 13 – Сопоставление численных результатов расчета коэффициента прохождения методом НРФГ с аналитической аппроксимацией по (50) при $p = 25$.

Используя (48), (49) и (40), находим положение ступенек

$$\varepsilon_n - 2t_0 = E_c + 2t_0 \left(1 - \cos \frac{n\pi}{p+1} \right). \quad (50)$$

На рис. 13 результаты расчета коэффициента прохождения методом НРФГ при числе атомов по ширине проводника $p = 25$ (рис. 9) показаны вместе с огибающей ступенек, вычисленной по (50) при той же ширине проводника $p = 25$.

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

$$E_n(k_x) = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_x a, \quad (51)$$

как показано на рис. 14.

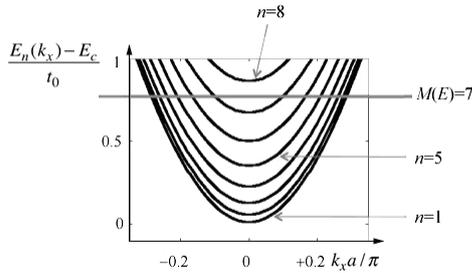


Рис. 14 – Нижние восемь подзон хюккелевской модели 2D проводника.

Дисперсионные соотношения для подзон получаются из общего выражения (37) при требовании, чтобы k_y принимал квантованные значения

$$k_y a = \frac{n\pi}{p+1}, \quad (52)$$

где каждое значение n порождает одну соответствующую подзону (рис. 14).

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.

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

$$[\tilde{X}] = [V]^\dagger [X] [V], \quad (53)$$

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

$$[X] = [V] [\tilde{X}] [V]^\dagger, \quad (54)$$

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

$$E = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_n a, \quad (55)$$

так что контактная матрица в модовом базисе

$$[\tilde{\Sigma}_1] = \begin{bmatrix} te^{ik_1 a} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & te^{ik_2 a} & 0 & \\ 0 & 0 & te^{ik_3 a} & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix}, \quad (56)$$

а после преобразования в решеточный базис (рис. 15)

$$[\Sigma_1] = [V] [\tilde{\Sigma}_1] [V]^\dagger. \quad (57)$$

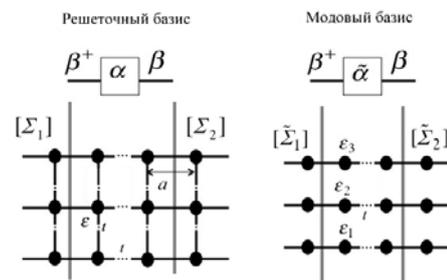


Рис. 15 – К построению контактных матриц в модовом базисе с обратным преобразованием в решеточный базис.

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, к рассмотрению которой с целью расчета графена методом НРФГ в хюккелевском приближении перейдем в третьей части настоящего обзора. Будет изложен также общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера для решения задач квантового транспорта электронов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны Н.Е.Кругляк за помощь в работе по изготовлению рисунков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кругляк Ю.А., Крыжановская Т.В. Метод неравновесных функций Грина в матричном представлении. 1. Теоретические основы // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2014. – В. 18. – С. 175 – 192.
2. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012, 474 p.; www.nanohub.org/courses/FoN2.
3. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Уроки наноэлектроники. 1 – 3 // Фізическое образование в вузах. – 2013. – Т. 19. – №№ 1 – 3.
4. Кругляк Ю.А., Квакуш В.С., Дядюша Г.Г., Хильченко В.И. Методы вычислений в квантовой химии. Расчет π -электронной структуры молекул простыми методами молекулярных орбиталей. – Киев: Наукова думка. – 1967. – 150 с.
5. Kruglyak Yu.A., Ukrainsky I.I. Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method. *Intern. J. Quantum Chem*, 1970, V. 4, no 1, pp. 57 – 72.
6. Украинский И.И., Кругляк Ю.А. Изучение электронной структуры альтернантных радикалов методом расщепленных орбиталей // УФЖ. – 1970. – Т. 15. – № 7. – С. 1068 – 1081.
7. Kventsel G.F., Kruglyak Yu.A. Local Electronic States in Long Polyene Chains. *Theor. Chim.Acta*, 1968, V. 12, pp. 1 – 17.
8. Стріха М.В. Фізика графену: стан і перспективи // Sensor Electronics Microsyst. Techn. – 2010. – Т. 1(7). – № 3. – С. 5 – 13.
9. Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е. Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2012. – В. 13. – С. 207 – 218.
10. Kruglyak Yu.A., Dyadyusha G.G. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration // *Theor. Chim.Acta*. – 1968. – V. 10. – pp. 23 – 32.
11. Kruglyak Yu.A., Dyadyusha G.G. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. II. Results of Calculations and Discussion. *Theor. Chim.Acta*, 1968, V. 12, pp. 18 – 28.
12. Кругляк Ю.А., Дядюша Г.Г. О поворотных барьерах концевых групп в органических кумуленах // Теор. экспер. химия. – 1968. – Т. 4. – № 4. – С. 431 – 437.
13. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноэлектроники: виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsyst. Techn. – 2012. – V. 9, no 4. – pp. 5 – 29.
14. van Wees B.J., van Houten H., Beenakker C.W.J., Williamson J.G., Kouwenhoven L.P., van der Marel D., Foxon C.T. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas. *Phys. Rev. Lett*, 1988, V. 60, no 9, pp. 848 – 850.
15. Wharam D.A., Thornton T.J., Newbury R., Pepper M., Ahmed H., Frost J.E.F., Hasko D.G., Peacock D.C., Ritchie D.A., Jones G.A.C. One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance. *J. Phys. C: Solid State Phys*, 1988, V. 21, no 8, pp. 209 – 214.
16. ing Company, 2012, 474 p.; www.nanohub.org/courses/FoN2.
17. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E. Uroki nanojelektронiki [Lessons of Nanoelectronics]. 1 – 3. *Fізическое образование v vuzah – Physics in Higher Education*, 2013, V. 19, no 1 – 3.
18. Kruglyak Yu.A., Kvakush V.S., Djadjusha G.G., Hil'chenko V.I. *Metody vychislenij v kvantovoj himii. Raschet π -jelektronnoj struktury molekul prostymi metodami molekularnyh orbitalej* [Computational methods in quantum chemistry. Calculation of π -electronic structure of molecules by simple molecular orbital methods]. Kiev, 1967, 150 p.
19. Kruglyak Yu.A., Ukrainsky I.I. Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method. *Intern. J. Quantum Chem*, 1970, V. 4, no 1, pp. 57 – 72.
20. Ukrainskij I.I., Kruglyak Yu.A. Izuchenie jelektronnoj struktury al'ternantnyh radikalov metodom rasshheplennyh orbitalej [Study of electronic structure of alternant radical by splitted orbitals method]. *Ukr. Fiz. Zhurnal – Ukr. Phys. J*, 1970, V. 15, no 7, pp. 1068 – 1081.
21. Kventsel G.F., Kruglyak Yu.A. Local Electronic States in Long Polyene Chains. *Theor. Chim.Acta*, 1968, V. 12, pp. 1 – 17.
22. Striha M.V. Fizika grafenu: stan i perspektivi [Physics of Graphene: Present Status and Perspectives]. *Sensor Electronics Microsyst. Techn.*, 2010, V. 1(7), no 3, pp. 5 – 13.
23. Kruglyak Yu.A., Dyadyusha N.E. Metodicheskie aspekty rascheta zonnnoj struktury grafena s uchedom σ -ostova. Teoreticheskie osnovy [Methodical Aspects in Computation of Graphene Band Structure with an Account of σ -Core. Theoretical Basis]. – *Visnik Odes'kogo derzh. ekologichnogo un-tu – Visn. Odes. derž. ekol. univ.*, 2012, no 13, pp. 207 – 218.
24. Kruglyak Yu.A., Dyadyusha G.G. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration. *Theor. Chim.Acta*, 1968, V. 10, pp. 23 – 32.
25. Kruglyak Yu.A., Dyadyusha G.G. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. II. Results of Calculations and Discussion. *Theor. Chim.Acta*, 1968, V. 12, pp. 18 – 28.
26. Kruglyak Yu.A., Djadjusha G.G. O povorotnyh bar'erah koncevnyh group v organicheskih kumulenah [On rotational barriers of end-groups in organic cumulenes]. *Teor. jeksper. Himija – Teor. eksper. Chem.*, 1968, V. 4, no 4, pp. 431 – 437.
27. Kruglyak Yu.A., Kruglyak N.E., Strikha M.V. Uroky nanojelektронiki: vynykennya strumu, formulyuvannya zakonu Oma irody providnosti v kontseptsiji «znyzu – vhoru» [Lessons of Nanoelectronics: Current generation, Ohm's Law Formulation and Conduction modes in «Bottom – Up» Approach]. *Sensor Electronics Microsyst. Techn.*, 2012, V. 9, no 4, pp. 5 – 29.
28. van Wees B.J., van Houten H., Beenakker C.W.J., Williamson J.G., Kouwenhoven L.P., van der Marel D., Foxon C.T. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas. *Phys. Rev. Lett*, 1988, V. 60, no 9, pp. 848 – 850.
29. Wharam D.A., Thornton T.J., Newbury R., Pepper M., Ahmed H., Frost J.E.F., Hasko D.G., Peacock D.C., Ritchie D.A., Jones G.A.C. One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance. *J. Phys. C: Solid State Phys*, 1988, V. 21, no 8, pp. 209 – 214.

REFERENCES

1. Kruglyak Yu.A., Kryzhanovskaja T.V. Metod neravnovesnyh funkcij Grina v matrichnom predstavlennii. 1. Teoreticheskie osnovy [Non-equilibrium Green's functions method in matrix presentation. 1. Theoretical basics]. – *Visnik Odes'kogo derzh. ekologichnogo un-tu – Visn. Odes. derž. ekol. univ.*, 2014, no 19, pp. 175 – 192.
2. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publish-

NON-EQUILIBRIUM GREEN'S FUNCTIONS METHOD IN MATRIX REPRESENTATION. 2. MODEL TRANSPORT PROBLEMS

Yu.A. Kruglyak, T.V. Kryzhanovskaya

Odessa State Environmental University, 15, Lvivska St., 65016 Odessa, Ukraine

Non-equilibrium Green's functions method is applied to model transport problems for 1D and 2D uniform conductors using the nearest neighbor orthogonal tight-binding approximation in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics.

First of all we discuss the construction of the contact matrices of self-energies. The basic idea is that infinitely long conductor described by the Hamiltonian $[H]$ is replaced by a conductor of the finite length described by the matrix $[H + \Sigma_1 + \Sigma_2]$ with the open boundary conditions at the ends meaning "good" contacts, which do not create the reflected streams at its ends. Further we discuss 1D ballistic conductor, a 1D conductor with a single scattering center, then 2D conductor is modeling and explanation is given to the steplike dependence of the transmission coefficients over the energy, and finally there is given the representation of 2D/3D conductor in the form of parallel 1D conductors, which is not only physically correct but also extremely useful in interpreting experimental data.

In summary the physical adequacy of the Huckel approach is stated in the framework of the method of nonequilibrium Green's functions.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, bottom – up, NEGF method, conductor modeling, 1D conductor, 2D conductor, quantum transport.

МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРИНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. 2. МОДЕЛЬНІ ТРАНСПОРТНІ ЗАДАЧІ

Ю.О. Кругляк, Т.В. Крижанівська

Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, 65016 Одеса, Україна,

В рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки розглядається застосування методу нерівноважних функцій Гріна до модельних транспортних задач однорідних 1D і 2D провідників у моделі сильного зв'язку з ортогональним базисом і з параметричним обліком взаємодії сусідніх атомів.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, знизу–вгору, метод НРФГ, однорівневий резистор, багаторівневий резистор.

Дата первого представления: 08.04.2015

Дата поступления окончательной версии: 06.05.2015

Дата опубликования статьи: 24.09.2015