

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

МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ. 4. КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ И ДЕФАЗИРОВКА

Ю. А. Кругляк, проф.

Т. В. Крыжановская, ст. преп.

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

В рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники рассматриваются модели упругой дефазировки и спиновой дефазировки, учет некогерентных процессов с использованием зонда Бюттекера, 1D проводник с двумя и более рассеивающими центрами, явление квантовой интерференции, режимы сильной и слабой локализации, скачок потенциала на дефектах, квантовые осцилляции в методе НРФГ без учета дефазировки и с ее учетом в режимах фазовой и импульсной релаксации, эффекты деструктивной и конструктивной интерференции, четырехкомпонентное описание спинового транспорта с учетом дефазировки и в заключение обсуждается квантовая природа классических представлений в физике, явление спиновой когерентности и формализм псевдоспина.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

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

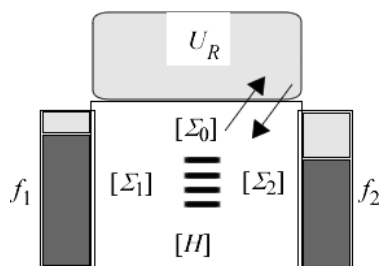


Рис. 1 – Модель квантового транспорта с простой упругой дефазировкой.

Что из себя физически представляет взаимодействие Σ_0 ? С точки зрения электрона, движущегося по проводнику, среда не представляется электрону статической, описываемой статическим гамильтонианом $[H]$, а весьма турбулентной средой со случайно меняющимся потенциалом U_R , который флуктуирует в пикосекундной шкале времени. Даже при достаточно низких температурах с замороженными 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, и другие тонкие эффекты (см., напр., [1 - 11]). Этот эффект усреднения нужно адекватно моделировать, если мы хотим правильно интерпретировать как экспериментальные, так и теоретические данные.

Метод неравновесных функций Грина (НРФГ) был первоначально разработан в квантовой теории поля (неравновесной статистической физике) [12, 13] и к настоящему времени насчитывает огромное число различных версий, в том числе для решения задач квантовой физики и квантовой химии атомов, молекул и твердого тела (см. напр. [14 - 22]). Впоследствии метод НРФГ с успехом применен для учета неупругих процессов квантового транспорта в массивных проводниках. Мы же пока что изложили его применительно к упругим резисторам [1]. Сейчас мы рассмотрим сравнительно простую модель упругой дефазировки.

Что представляет из себя процесс дефазировки? Или другими словами, чем когерентный процесс отличается от некогерентного? Когерентный транспорт это такой процесс движения электрона по проводнику, при котором состояние остальных частиц в канале проводимости не изменяется. Простой отскок электрона от упругого дефекта обратно в канал проводимости есть процесс когерентный. Если же электрон передал часть своей энергии, скажем, атому решетки и

атом начал совершать колебания с большей амплитудой, то такой процесс некогерентный. Это вроде бы означает, что некогерентный процесс также должен быть неупругим, происходящим с обменом энергии. Однако же, это не обязательно так, и классическим примером может служить спиновая дефазировка.

Пусть имеем магнитную примесь с двумя состояниями спина одинаковой энергии (вырождение). И пусть электрон, взаимодействуя с примесью, меняет направление спина на противоположное, без изменения его энергии. Такой процесс – упругий. И тем не менее, это некогерентный процесс, поскольку состояние электрона изменилось.

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

2. УПРУГАЯ ДЕФАЗИРОВКА

Процессы упругой дефазировки в методе НРФГ описываются матрицами собственной энергии:

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

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

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

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

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

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

равны D_0 :

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

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

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

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

Происхождение формул (1) можно понять, если обратиться к исходному при построении метода НРФГ в матричной форме уравнению Шредингера (ур-е (4) в [1])

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

где $[\Sigma_1]$ и $[\Sigma_2]$ – контактные матрицы собственной энергии, а матрица-столбец $\{ S_1 \}$ описывает приток электронов в проводник с левого контакта 1 (рис. 1) [1].

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

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

с соответствующим притоковым членом

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

выписанным выше для модели А. Несколько более длинные выкладки ведут к аналогичному выражению для модели В. В итоге имеем формулу (1б).

Для обоснования формулы (1в) заметим, что эта формула вместе с (1б) должна обеспечивать нулевой ток на «терминале 0», что следует из четвертого уравнения в формализме НРФГ (ур-е (16) в [1]), а именно

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

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

Действительно, в свое время Бюттекер предложил для учета некогерентных процессов вводить фиктивный контакт (зонд Бюттекера), электрохимический потенциал которого подбирается таким образом, чтобы гарантировать на этом контакте нулевой ток [2, 3]. В формализме

НРФГ это ведет к утверждению, что

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

где число f_p подбирается таким, чтобы обеспечить нулевой ток на фиктивном терминале. Это эквивалентно рассуждениям выше, если связь Γ_0 «терминала» с проводником выбрать пропорциональной спектральной функции $[A]$ как это требуется согласно (1в).

Обратим внимание на то обстоятельство, что уравнения (1) предполагают самосогласованную процедуру вычислений, поскольку Σ, Σ^{in} зависят от G^R и G^n , которые в свою очередь, согласно уравнениям (6) и (13) из [1], зависят от Σ и Σ^{in} ; а также на то, что модель А (3) предполагает вычисление полной гриновской функции, что для достаточно больших устройств ведет к появлению в расчетах матриц весьма большого порядка, в то время как модель В (4) не требует столь значительных вычислительных ресурсов, поскольку вычислению подлежат только диагональные элементы гриновских матриц.

Существенное концептуальное различие между моделями А и В состоит в том, что модель А разрушает фазировку, но не затрагивает импульсы, в то время как модель В разрушает также и импульсы [4]. Процесс дефазировки можно представить себе как «извлечение» электрона из проводника в состоянии $[G^n]$ и последующей «инжекции» его обратно в проводник в состоянии $D \times G^n$. Модель А предполагает умножение гриновской матрицы $[G^n]$ на константу, так что электрон «реинжектируется» точно в то же самое состояние, в котором он был «извлечен», без потери импульса, тогда как в модели В отбрасываются недиагональные элементы матрицы D и при «реинжектировании» электрон меняет траекторию движения на некую произвольную по сравнению с той траекторией, с которой он был «извлечен». Вся эта ситуация станет яснее ниже при рассмотрении конкретных примеров.

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

Полноты ради, отметим, что в самом общем случае D есть тензор 4-го ранга, связывающий

друг с другом пары матриц, а именно:

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

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

а упругая дефазировка (1) реализуется через ненулевые D_{ijkl} при $i=k$ и $j=l$.

3. 1D ПРОВОДНИК С ДВУМЯ И БОЛЕЕ РАССЕЙВАЮЩИМИ ЦЕНТРАМИ

Ранее [1] подробно рассматривался 1D проводник с одним рассеивающим центром, характеризуемым вероятностью прохождения T . В [5] было показано, что сопротивление такого проводника R_1 может быть разбито на две части – сопротивление рассеивающего центра и граничное сопротивление (соответственно, уравнения (34) и (35) в [5])

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

Зададимся вопросом, каково будет сопротивление R_2 проводника с двумя одинаковыми рассеивающими центрами, каждый с вероятностью прохождения T . Такой проводник можно рассматривать как последовательное соединение двух проводников, каждый с одним и тем же рассеивающим центром (рис. 2).

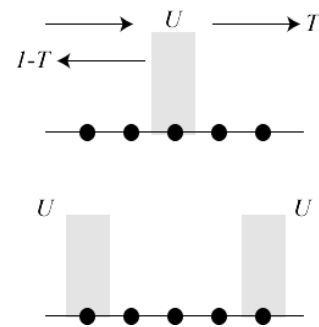


Рис. 2 – Проводник с одним и с двумя одинаковыми рассеивающими центрами.

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

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

так что

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

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

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

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

Для решения задач такого типа воспользуемся моделью однородного 1D проводника в хюккелевском приближении [1]. Вспомним поведение коэффициента прохождения в проводнике с одним рассеивающим центром $U = 2t_0$ (рис. 3) и сравним его с таким же проводником, но с двумя одинаковыми такими же рассеивающими центрами (рис. 4).

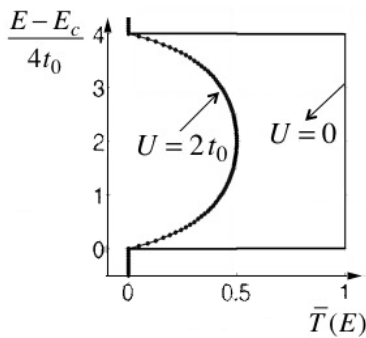


Рис. 3 – Коэффициент прохождения в однородном 1D проводнике с одним точечным рассеивающим центром ($U = 2t_0$) и без него ($U = 0$) [1].

Если электрохимический потенциал в устройстве с проводником с двумя рассеивающими центрами окажется на уровне В (рис. 4), то коэффициент прохождения окажется меньше, чем в проводнике с одним центром; другими словами, сопротивление R_2 окажется больше, чем R_1 . Если же случится так, что химпотенциал ока-

жется на уровне А (рис. 4), то R_2 окажется даже меньше, чем R_1 .

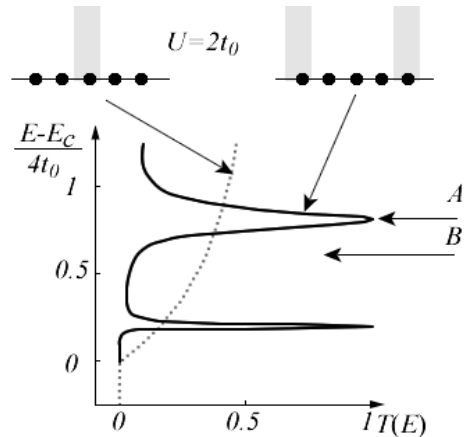


Рис. 4 – Коэффициент прохождения в одномерном 1D проводнике с одним и с двумя одинаковыми рассеивающими центрами с $U = 2t_0$.

Рассмотрим проводник со случайно распределенными рассеивающими центрами. Квантовый расчет методом НРФГ для шести таких центров показывает, что проводимость весьма и весьма низкая (практически омическое поведение), исключая многочисленные всплески проводимости, редко вплоть до значений, близких к единице (рис. 5).

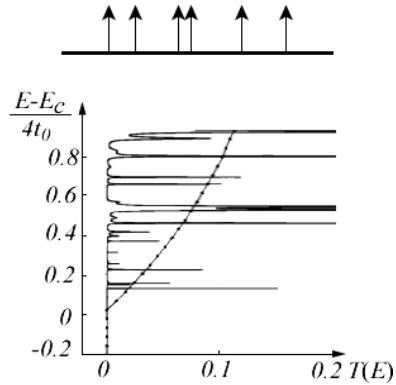


Рис. 5 – Коэффициент прохождения в одномерном 1D проводнике с шестью одинаковыми случайно разбросанными рассеивающими центрами с $U = 2t_0$ [6]. Точками показан результат полуклассического расчета (рис. 3) в пересчете на шесть центров.

На рисунке точками показан также полуклассический результат, полученный вначале для одиночного рассеивающего центра (рис. 3), а затем вклад от него увеличен в шесть раз. Для сопротивления такого проводника имеем

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

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

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

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

Основной вывод состоит в том, что для интерпретации реальных экспериментов при комнатной температуре в формализме НРФГ, как правило, необходимо в той или иной степени учитывать процессы дефазировки, как это описано выше. Пока мы так или иначе не учтем дефазировку, в квантовых моделях электронного транспорта проявятся эффекты интерференции, ведущие к сильной локализации или к резонансному туннелированию. В подтверждение этого рассмотрим изменение потенциала вдоль канала проводника с дефектами методом НРФГ [6].

4. СКАЧОК ПОТЕНЦИАЛА НА ДЕФЕКТАХ

Профиль потенциала одномодового проводника с одним дефектом прозрачности T рассматривался в [1, 5]. Проводимость такого проводника дается формулой (34) из [5]. Тогда сопротивление этого проводника, нормированное на квант сопротивления,

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

Полуклассическое выражение для коэффициента прохождения T дается формулой (113) из [1]. Тогда нормированное сопротивление на дефекте равно

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

Полуклассический профиль потенциала со скачками на граничных сопротивлениях \hbar/q^2 , согласно (36) из [5], и на сопротивлении на дефекте (16) показан на рис. 6 вместе с результатом, полученным методом НРФГ без учета дефазировки.

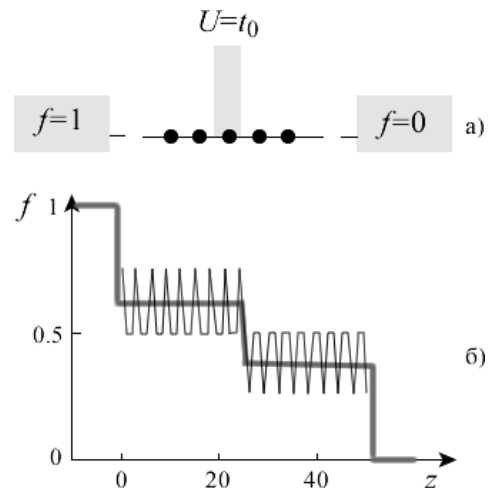


Рис. 6 – (а) Схема одномодового проводника с дефектом $U = t_0$; (б) Квантовые осцилляции в методе НРФГ без дефазировки ($D_0 = 0$) в режиме когерентности при $E = t_0$ на фоне полуклассических скачков потенциала.

Техника вычисления заселенности f в методе НРФГ через функцию Грина и спектральную функцию и далее электрохимического потенциала описана в [5, ф-лы (87) и (88)].

Заселенность в расчете методом НРФГ в результате квантовой интерференции осциллирует настолько сильно, что становится затруднительным увидеть скачок потенциала на дефекте (рис. 6).

Экспериментально профиль потенциала обычно измеряется сканирующим туннельным микроскопом (рис. 14 в [5]) и при комнатной

температуре квантовые осцилляции обычно не видны из-за процессов дефазировки, неизбежно имеющих место в таких условиях. Приведенный выше пример еще раз показывает, что при моделировании и интерпретации реальных транспортных измерений при комнатной температуре необходимо в той или иной степени учитывать дефазировку эффектов квантовой интерференции.

Действительно, если для той же модели проводника (рис. 6а) при расчете методом НРФГ включить дефазировку с учетом только фазовой релаксации (модель А, ур-е (3)), то получим профиль потенциала с ясно выраженным скачком на дефекте в соответствии с полуклассической моделью (рис. 7).

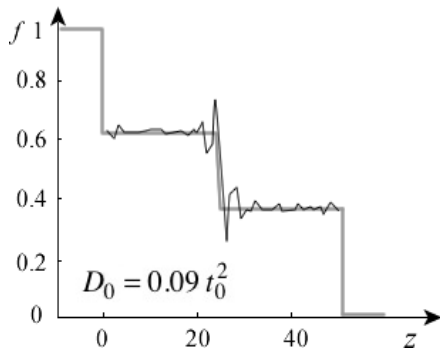


Рис. 7 – Квантовые осцилляции в методе НРФГ при дефазировке с учетом только фазовой релаксации (модель А) при $E = t_0$ не вуалируют скачок потенциала на дефекте.

Любопытно, если учесть также и импульсную релаксацию (модель В, ур-е (4)), то потенциал на всем протяжении проводника падает практически линейно (рис. 8), как это и должно ожидать для равномерно распределенных упругих резисторов по всей длине проводника (приложение 1 в [7]).

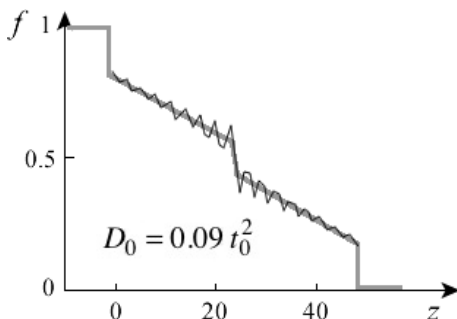


Рис. 8 – Учет в методе НРФГ как фазовой, так и импульсной релаксации (модель В) практически нивелирует скачок потенциала на дефекте, превращая проводник с дефектом в последовательность упругих резисторов.

Сопротивление в пересчете на один узел такого однородного 1D проводника можно получить из (16) путем замены U^2 на D_0

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

где L/a дает число узлов в проводнике.

Еще одним полезным примером может служить уже рассмотренный выше проводник с двумя одинаковыми рассеивающими центрами (рис. 4). Значения электрохимического потенциала на уровнях А и В соответствуют конструктивной ($R_2 < R_1$) и деструктивной ($R_2 > R_1$) квантовой интерференции. Различие между ними ярко проявляется при расчете такого проводника методом НРФГ в режиме когерентного транспорта без дефазировки с $D_0 = 0$ (рис. 9).

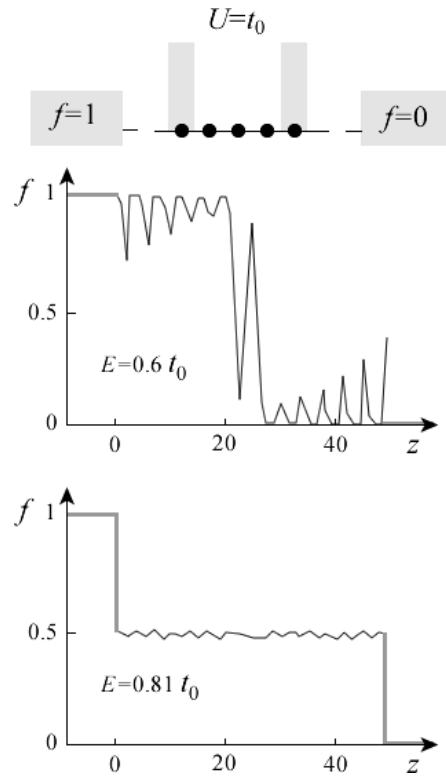


Рис. 9 – Квантовые осцилляции в расчете проводника с двумя одинаковыми рассеивающими центрами с $U = t_0$ методом НРФГ без дефазировки ($D_0 = 0$) в режиме когерентности при $E = 0.6t_0$ свидетельствуют о деструктивной интерференции (режим В с $R_2 > R_1$), а при $E = 0.81t_0$ – о конструктивной интерференции (режим А с $R_2 < R_1$).

На уровне В профиль потенциала выглядит так, как будто мы имеем дело с большим скачком потенциала на дефекте, да еще наложенными на него двумя всплесками (деструктивная интерференция). Небольшое увеличение электрохимического потенциала до $E = 0.81t_0$ (уровень А) кардинально меняет профиль потенциала. Теперь он выглядит так (рис. 9), как можно

было бы ожидать для баллистического проводника со скачками потенциала лишь на границах с контактами (конструктивная интерференция).

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

Стоит лишь в обоих случаях А и В (рис. 9) учесть дефазировку в виде фазовой релаксации с достаточным отличным от нуля значением D_0 , как профиль потенциала сразу становится похожим на полуклассический профиль резистора (рис. 10).

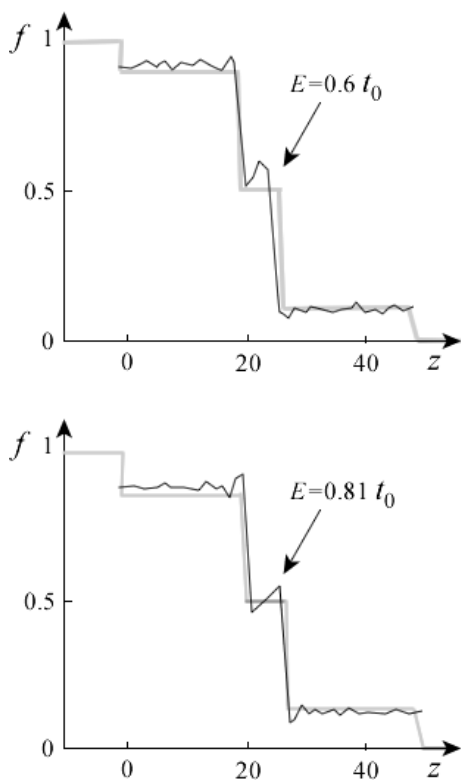


Рис. 10 – Квантовые осцилляции в методе НРФГ при дефазировке с учетом только фазовой релаксации ($D_0 = 0.09t_0^2$) при обоих значениях электрохимического потенциала $0.6t_0$ и $0.81t_0$ на фоне полуклассических скачков потенциала.

В вычислительном отношении обратим внимание на то, что учет дефазировки в методе НРФГ алгоритмически не вызывает затруднений, однако, если в когерентном приближении ($D_0 = 0$) или с учетом лишь импульсной релаксации (модель В, ур-е (4)) достаточно вычислять лишь диагональные элементы гриновской функции, то в случае учета лишь фазовой релаксации необходимо вычислять полную функцию Грина, что существенно увеличивает время вычислений и требует намного больших вычислительных

ресурсов.

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

Для коротких резисторов таких, как на рис. 4, ответ будет скорее всего положительным, а вот для длинных резисторов, как на рис. 5, ответ будет отрицательным. В случае проводника в режиме сильной локализации (рис. 5) трудно представить себе, каким образом усреднение когерентного квантового состояния по многим возможным конфигурациям приведет к полуклассическому результату.

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

5. ТРАНСПОРТ СПИНОВ В ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОМ ФОРМАТЕ

Возвратимся к четырехкомпонентному описанию спинового транспорта [8], но теперь уже с учетом дефазировки. Приводился пример гриновской матрицы для линейного проводника из трех атомов:

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

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

В формализме НРФГ нужно подобрать подходящую матрицу D в уравнении (16):

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

поскольку процесс дефазировки можно визуаль-но представить себе как «извлечение» электрона из проводника в состоянии $[G^n]$ и последующей «инжекции» его обратно в проводник в состоя-нии $D \times G^n$.

Были уже введены две модели для матрицы $[D]$ – модели А и В, описываемые уравнениями, соответственно, (3) и (4). Модель А эквивалент-на умножению матрицы $[D]$ на константу: дру-гими словами, электрон «инжектируется» в то же самое состояние, из которого он был «извле-чен», так что импульс электрона сохраняется. В модели В зануляются недиагональные элементы, что ведет к потере информации об импульсе электрона, что хорошо иллюстрируется рис. 8.

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

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

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

Перепишем гриновскую матрицу

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

как

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

где индексы i, j нумеруют атомы решетки про-водника и учитывается то обстоятельство, что в модели С матрица Σ^{in} в решеточном базисе диа-гональна.

Мы уже знаем, что для любого узла решетки проводника его диагональную матрицу (2 x 2) гриновской матрицы (18) можно записать через числа (N, \bar{S}) , так что уравнение (21) путем не-

сложных преобразований можно записать в виде

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

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

6. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА КЛАССИКИ

Нет ничего удивительного и неожиданного в названии этого раздела. Из разобранных выше примеров мы видели, что для понимания физики и для интерпретации реальных эксперименталь-ных измерений, как правило, достаточно полу-классического рассмотрения. Почти все, что мы обсуждали в этой серии статей, является следст-вием транспортного уравнения Больцмана. Более того, все миллиарды транзисторов в современ-ных ноутбуках, состоящих всего из нескольких сотен атомов, по существу являются классиче-скими устройствами электроники, контролируе-мыми, в основном, электростатикой, а не зако-нами квантовой механики. Недавно выполнен-ные тщательные и всесторонние измерения и расчеты проводимости металлического 2D про-водника с сечением (1 x 4) атомов [9] продемон-стрировали его нормальное омическое поведе-ние. Резонно задаться вопросом удасться ли, опираясь на кажущиеся нам фантастическими успехи нанofизики и нанoeлектроники, создать принципиально иные квантовые устройства, которые выведут нас за пределы нынешней «за-рядовой» парадигмы обработки информации. Коснемся лишь некоторых соображений в этом направлении [10].

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

Рассмотрим, например, эксперимент с ин-жекцией спина в канал проводимости с даль-нейшим измерением потенциала вторым зондом [8]

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

зависящим от косинуса угла между инжекти-

рующим и регистрирующим магнитными контактами (рис. 2 в [8]). Гриневская матрица имела вид (18) с диагональными блоками (2 x 2)

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

элементы которых содержат физически понятные величины электронной и спиновой плотности (N, \bar{S}). Формализм НРФГ приводит [8] далее к уравнению (23) с ($\mu, \bar{\mu}_s$), транслируемыми в (N, \bar{S}) согласно ур-ю (83) в [8].

Этот простой пример позволяет проиллюстрировать связь между квантовым и классическим описанием. Если перекрестные компоненты матрицы (24) пренебрежимо малы, то лишь двух чисел N и S_z достаточно для описания всей физики транспорта. Оставшиеся ненулевыми диагональные компоненты могут быть интерпретированы

$N + S_z$ как число электронов со спином «вверх», $N - S_z$ как число электронов со спином «вниз» и далее выписаны полуклассические уравнения для двух сортов электронов. Фактически такой подход реализован в [7].

Когда работает такая модель? Одна из возможностей предоставляется тогда, когда намагниченности контактов коллинеарны, как в [7], и спин-орбитальное взаимодействие в канале проводимости отсутствует, так что угол θ является целым кратным 180° (рис. 2 в [8]). Другая возможность реализуется тогда, когда спиновая дефазировка настолько значительна, что перекрестными спиновыми компонентами в диагональных блочных матрицах (2 x 2) гриновской матрицы (24) можно пренебречь. Наконец, если можно пренебречь и z -компонентами спина, тогда об учете спина речь вообще не идет.

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

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

и полуклассическое описание скорее всего окажется невозможным. В этом случае нужно иначе выбрать систему координат, или в общем случае иначе выбрать разложение по базисным функциям. Выбрать базис нужно таким образом, чтобы объекты, например, спин, имеющие направления «вверх» и «вниз», были ориентирова-

ны, соответственно, вдоль $+x$ и $-x$; тогда блоки гриновской матрицы будут диагональны

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

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

Псевдоспин. Формализм спиновых матриц Паули [7] замечателен тем, что он не исчерпывается только спином электрона, а распространяется на любые объекты, имеющие двухкомпонентную структуру в комплексной плоскости. Вспомним графен. Атомы углерода в графене топологически не эквивалентны и могут быть либо сорта А, либо сорта В (рис. 23 в [1]). Волновая функция элементарной ячейки графена описывается двухкомпонентным вектором в комплексной плоскости [11]

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

так что соответствующая ей функция Грина (ур-е (10) из [1]) может быть формально переписана следующим образом

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

что не имеет никакого отношения к реальным спинам, а лишь формально математически соответствует (24). Направления псевдоспинов в графене показано на рис. 29б работы [7].

Рассмотрим еще один менее знакомый пример использования концепции псевдоспина, преследуя прежде всего педагогические цели. Вернемся к модели на рис. 6а.

Посмотрим на поведение диагональных элементов гриновской матрицы $[G^n]$ слева и справа от дефекта (рис. 11б). Слева от дефекта «наблюдаются» осцилляции электронной плотности, тогда как после прохождения дефекта плотность постоянна. Заметим, что в такой же модели на рис. 6 – 10 осцилляции имеют место и справа от дефекта. Но там речь шла об осцилляциях заселенности, вычисляемой из G^n/A , а спектральная функция A , пропорциональная плотности состояний D , осциллирует как до, так и после прохождения дефекта, так что к рассматриваемой нами ситуации эти осцилляции справа на рис. 6 – 10 отношения не имеют.

Посмотрите, как можно, используя концеп-

цию псевдо спина, понять поведение диагональных элементов гриновской матрицы на рис. 11б. Ниже показаны псевдоспинорные волновые функции электрона и электронные плотности слева / L и справа / R от дефекта и представление

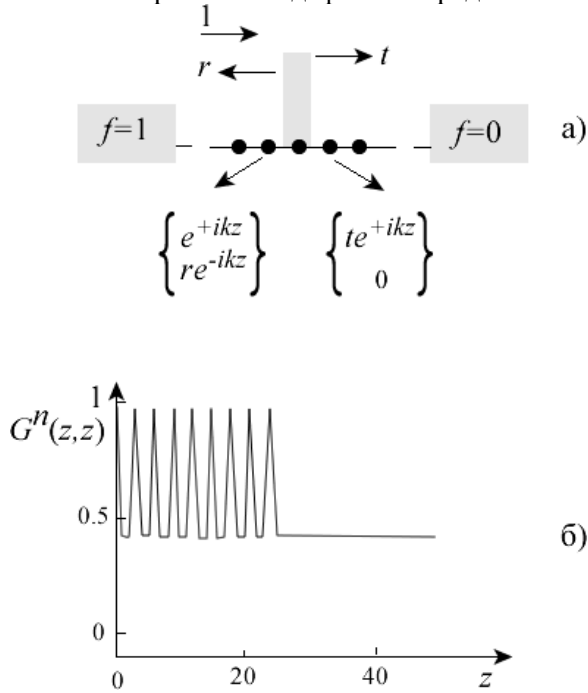


Рис. 11 – (а) Схема одномодового проводника с одним дефектом, характеризуемым коэффициентом прохождения t и коэффициентом отражения r ; стрелками указаны псевдоспинорные волновые функции электрона до и после прохождения дефекта; (б) Поведение диагональных элементов гриновской матрицы слева и справа от дефекта.

последних с использованием концепции псевдоспина:

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

$$\{\psi\}\{\psi\}^+ \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & r^* e^{+2ikz} \\ re^{-i2kz} & r^* \end{bmatrix}_L, \begin{bmatrix} tt^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_R \rightarrow \begin{bmatrix} N+S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N-S_z \end{bmatrix}.$$

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

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

Другими словами, слева от барьера псевдоспин вращается в плоскости $xу$. При построении

графика $G^n(z, z)$ на рис. 11б находилась сумма двух компонент псевдоспина, а затем брался ее квадрат, что эквивалентно равенству

$$Tr \{ \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix} \{\psi\}\{\psi\}^+ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \} = Tr \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \{\psi\}\{\psi\}^+. \quad (26)$$

Фактически мы имеем дело с псевдомагнитом с

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (27)$$

который поляризован на 100 % вдоль оси x . Таким образом, согласно (23) измеряемый потенциал должен быть пропорционален $N + \hat{x} \cdot \vec{S}$, что ведет слева от барьера к осцилляциям по косинусу, а справа – к отсутствию осцилляций

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

что хорошо согласуется с результатами расчета методом НРФГ (рис. 11б).

За пределами нашего рассмотрения остаются многочисленные вопросы и нерешенные проблемы нанопизики и среди них информационные аспекты спинтроники, чему нужно было бы посвятить отдельную публикацию.

Настоящая работа явилась результатом посещения одним из нас (ЮАК) курсов лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» и «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитанных он-лайн в январе – апреле 2012 года проф. С. Датта (Supriyo Datta) в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

БЛАГОДАРНОСТИ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кругляк Ю. А. Нанозлектроника «снизу – вверх»: Метод неравновесных функций Грина, модельные транспортные задачи и квантовая интерференция // Science-Rise. 2015. Т. 9, № 2 (14). С. 41–72.
2. Buttiker M. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys.Rev. Lett.*, 1986, vol. 57, p. 1761.
3. Buttiker M. Symmetry of Electrical Conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 1988, vol. 32, no. 3, pp. 317–334.
4. Golizadeh-Mojarad R., Datta S. Non-equilibrium Green's function based model for dephasing in quantum transport. *Phys. Rev. B.*, 2007, vol. 75, no. 8, pp. 081301/1–4.
5. Кругляк Ю. О., Стрѣха М. В. Эффект Хола і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsys. Tech. 2014. Т. 11, № 1. С. 5–27.

6. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. 473 p.
7. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стриха М. В. Уроки нанoeлектроніки. Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* 2013. Т. 10, № 2. С. 5–35.
8. Кругляк Ю. О., Стриха М. В. Уроки нанoeлектроніки. Транспорт спінів в моделі НРФГ і квантовий спіновий ефект Хола в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* 2014. Т. 11, № 2. С. 5–22.
9. Weber B., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Fuhrer A., Reusch T. C. G., Thompson D. L., Lee W. C. T., Klimeck Gerhard, Hollenberg L. C. L., Simmons M. Y. Ohm's Law Survives to the Atomic Scale. *Science*, 2012, vol. 335, pp. 64–67.
10. Zurek W. H. Decoherence, Einselection and the Quantum Origins of the Classical. *Rev. Mod. Phys.*, 2003, vol. 75, pp. 715–775.
11. Кругляк Ю. А. Графен в транспортной модели Ландауэра – Датты – Лундстрема // *ScienceRise*. 2015. Т. 2, № 2 (7). С. 93–106.
12. Abrikosov A. A., Gor'kov L. P., Dzyaloshinskiy I. E. *Quantum field theoretical methods in statistical physics*. Oxford: Pergamon Press, 1965. 365 p.
13. Зубарев Д. Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике // *УФН*. 1960. Том. LXXI, p. 71.
14. Кругляк Ю. А., Квакуш В. С., Дядюша Г. Г., Хильченко В. И. Методы вычислений в квантовой химии. Киев: Наукова Думка, 1967.
15. Глушков А. В., Кругляк Ю. А. Квазичастичный лагранжев метод в теории атомов и ионов // В кн.: Актуальные проблемы спектроскопии. М.: Изд-во АН СССР, 1985, С. 291.
16. Кругляк Ю. А., Глушков А. В. Метод расчета энергий и длин химических связей в модели квазиэлектронов // *Журн. Физич. Химии*. 1986. Т. 60. С. 1259.
17. Glushkov A. V. New method for calculation of ionization potentials for molecules by Green's functions method. *Journ.Phys.Chem.*, 1992, vol. 66, p. 589.
18. Glushkov A. V., Rusov V. D., Ambrosov S. V., Loboda A. V. Resonance State of Compound Superheavy Nucleus and Eppp in Heavy Nucleus Collisions. *In:New Projects and Lines of Research in Nuclear Physics*. Singapore: World Scientific, 2003, p. 126. (Eds: G. Fazio, F. Hanappe)
19. Glushkov A. V. *Relativistic and correlation effects in spectra of atomic systems*. Odessa: Astroprint, 2006.
20. Glushkov A. V., Lovett L., Khetselius O. Yu., Gurnitskaya E. P., Dubrovskaya Yu. V., Loboda A. V. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant resonances applied to analysis of reaction (m-n) on the nucleus 40Ca. *Int.Journ. Modern Phys. A.*, 2009, vol. 24, p. 611.
21. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Svinarenko A. A., Prepelitsa G. P. Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape. *In: Coherence and Ultrashort Pulse Laser Emission*. Intech, 2010, p. 159. (Ed: Dr. F. J. Duarte)
22. Khetselius O. Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. *Journal of Phys.: C. Series.*, 2012, vol. 397, p. 012012.
4. Golizadeh-Mojarad R., Datta S. Non-equilibrium Green's function based model for dephasing in quantum transport. *Phys. Rev. B.*, 2007, vol. 75, no. 8, pp. 081301/1–4.
5. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V. Hall effect and measurement of electrochemical potentials within «bottom – up» approach. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2014, vol. 11, no. 1, pp. 5–27. (In Ukrainian)
6. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012. 473 p.
7. Kruglyak Yu. O., Kruglyak N. E., Strikha M. V. Lessons of Nanoelectronics. Spintronics in «Bottom – Up» Approach. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2013, vol. 10, no. 2, pp. 5–35. (In Ukrainian)
8. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V. Lessons of nanoelectronics: spin transport and quantum spin Hall effect by «bottom – up» approach. *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, 2014, vol. 11, no. 2, pp. 5–22. (In Ukrainian)
9. Weber B., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Fuhrer A., Reusch T. C. G., Thompson D. L., Lee W. C. T., Klimeck Gerhard, Hollenberg L. C. L., Simmons M. Y. Ohm's Law Survives to the Atomic Scale. *Science*, 2012, vol. 335, pp. 64–67.
10. Zurek W. H. Decoherence, Einselection and the Quantum Origins of the Classical. *Rev. Mod. Phys.*, 2003, vol. 75, pp. 715–775.
11. Kruglyak Yu. A. Graphene in the Landauer - Datta - Lundstrom Transport Model. *ScienceRise*, 2015, vol. 2, no. 2 (7), pp. 93–106. (In Russian)
12. Abrikosov A. A., Gor'kov L. P., Dzyaloshinskiy I. E. *Quantum field theoretical methods in statistical physics*. Oxford: Pergamon Press, 1965. 365 p.
13. Zubarev D. N. Two-time Green's functions in statistical physics. *Uspekhi v fizicheskikh naukakh – Advances in Physical Sciences*, 1960, vol. LXXI, p. 71. (In Russian)
14. Kruglyak Yu. A., Kvakush V. S., Dyadyusha G. G., Khil'chenko V. I. *Metody vychisleniy v kvantovoy khimii* [Methods of calculations in quantum chemistry]. Kiev: Nauk.Dumka, 1967.
15. Glushkov A. V., Kruglyak Yu. A. Quasiparticle Lagrange method in theory of atoms and ions. *In: Aktual'nye problemy spektroskopii* [Actual Problems of Spectroscopy]. Moscow: AS USSR, 1985, p. 291. (In Russian)
16. Kruglyak Yu. A., Glushkov A. V. Method of calculation of the chemical bond energies and lengths in a model of quasi-electrons. *Zhurnal fizicheskoy khimii – Journ. of Phys. Chem.*, 1986, vol. 60, p. 1259. (In Russian)
17. Glushkov A. V. New method for calculation of ionization potentials for molecules by Green's functions method. *Journ.Phys.Chem.*, 1992, vol. 66, p. 589.
18. Glushkov A. V., Rusov V. D., Ambrosov S. V., Loboda A. V. Resonance State of Compound Superheavy Nucleus and Eppp in Heavy Nucleus Collisions. *In:New Projects and Lines of Research in Nuclear Physics*. Singapore: World Scientific, 2003, p. 126. (Eds: G. Fazio, F. Hanappe)
19. Glushkov A. V. *Relativistic and correlation effects in spectra of atomic systems*. Odessa: Astroprint, 2006.
20. Glushkov A. V., Lovett L., Khetselius O. Yu., Gurnitskaya E. P., Dubrovskaya Yu. V., Loboda A. V. Generalized multiconfiguration model of decay of multipole giant resonances applied to analysis of reaction (m-n) on the nucleus 40Ca. *Int.Journ. Modern Phys. A.*, 2009, vol. 24, p. 611.
21. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Svinarenko A. A., Prepelitsa G. P. Energy approach to atoms in a laser field and quantum dynamics with laser pulses of different shape. *In: Coherence and Ultrashort Pulse Laser Emission*. Intech, 2010, p. 159. (Ed.: Dr. F. J. Duarte)
22. Khetselius O. Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. *Journal of Phys.: C. Series.*, 2012, vol. 397, p. 012012.

REFERENCES

1. Kruglyak Yu. A. Nanoelectronics “bottom – up”: Non-equilibrium Green function method, model transport problems and quantum interference. *Science-Rise*, 2015, vol. 9, no. 2 (14), pp. 41–72. (In Russian)
2. Buttiker M. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys.Rev. Lett.*, 1986, vol. 57, p. 1761.
3. Buttiker M. Symmetry of Electrical Conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 1988, vol. 32, no. 3, pp. 317–334.

NON-EQUILLIBRIUM GREEN'S FUNCTIONS METHOD IN MATRIX REPRESENTATION. 4. QUANTUM INTERFERENCE AND DEPHASING

Yu. A. Kruglyak, Prof.
T. V. Kryzhanovskaya, Assis. Prof.

*Odessa State Environmental University,
15, Lvivska St., 65016 Odessa, Ukraine, quantumnet@yandex.ua*

The following topics are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics: a super-brief but hopefully self-containing introduction to the Hamiltonian matrix whose eigenvalues tell us the allowed energy levels in the channel. However, the Hamiltonian describes an isolated channel and we can not talk about the steady-state resistance of an isolated channel without bringing in the contacts and the battery connected across it. Non-equilibrium Green's functions method in matrix presentation was initially formulated and applied to model transport problems for 1D and 2D conductors using a nearest neighbor orthogonal tight-binding model in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics. General method to account for electric contacts in Schrödinger equation to solve electron quantum transport problems is given. There are also discussed the elastic and spin dephasing modeling, account for non-coherent processes using Buttiker probe, 1D conductor with two and more scatterers, quantum interference, strong and weak localization, potential drop across scatterers, quantum oscillations in NEGF method without dephasing and with its account under phase and impulse relaxation regimes, destructive and constructive interference effects, four-component description of spin transport with account for dephasing and ending with discussion of quantum nature of classics including spin coherence and pseudo-spin formalism.

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

МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. 4. КВАНТОВА ІНТЕРФЕРЕНЦІЯ І ДЕФАЗІРОВКА

Ю. О. Кругляк, проф.
Т. В. Крижанівська, ст. викл.

*Одеський державний екологічний університет,
вул. Львівська, 15, 65016, Одеса, Україна, quantumnet@yandex.ua*

В рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядаються моделі пружної дефазіровки і спигової дефазіровки, облік некогерентних процесів з вико-ристанням зонда Бюттекера, 1D провідник з двома і більше розсіюючими центрами, явище квантової інтерференції, режими сильної і слабкої локалізації, стрибок потенціалу на дефектах, квантові осциляції в методі НРФГ без урахування дефазіровки і з її урахуванням в режимах фазової і імпульсної релаксації, ефекти деструктивної і конструктивної інтерференції, чотирьохкомпонентний опис спигового транспорту з урахуванням дефазіровки і на закінчення обговорюється квантова природа класичних уявлень у фізиці, явище спигової когерентності і формалізм псевдоспина.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, квантова інтерференція, дефазіровка, метод НРФГ, когерентність, сильна локалізація, слабка локалізація, фазова релаксація, імпульсна релаксація, деструктивна інтерференція, конструктивна інтерференція, транспорт спинів, спигова когерентність, псевдоспин.

*Дата першого подання: 17. 03. 2017
Дата надходження остаточної версії: 23. 06. 2017
Дата публікації статті: 29. 06. 2017*