

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

Ю.А.Кругляк, проф.

Т.В.Крыжановская, старш. преп.

Одесский государственный экологический университет

## МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ. 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

*В рамках концепции «снизу – вверх» нанозлектроники рассматривается метод неравновесных функций Грина в матричной формулировке применительно к задачам квантового транспорта электронов.*

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

**Введение.** В продолжение предыдущих публикаций [1 – 3] в рамках концепции «снизу – вверх» нанозлектроники [4, 5] рассмотрим метод неравновесных функций Грина в матричной формулировке.

Современный ноутбук содержит три миллиарда или даже больше транзисторов с длиной канала проводимости  $\sim 35 - 40$  нм или сейчас даже меньше, что соответствует сотне – другой атомов. По мере уменьшения длины канала проводимости физическая природа электронного транспорта изменяется качественно (рис. 1).



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

Для достаточно длинных проводников транспорт является диффузионным с траекторией, напоминающей случайные блуждания. Если длина канала проводимости становится меньше средней длины свободного пробега, транспорт электронов переходит в режим баллистического переноса. При еще более коротких длинах канала проводимости начинает проявляться волновая природа электронов в виде таких квантовых эффектов как интерференция и туннелирование.

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

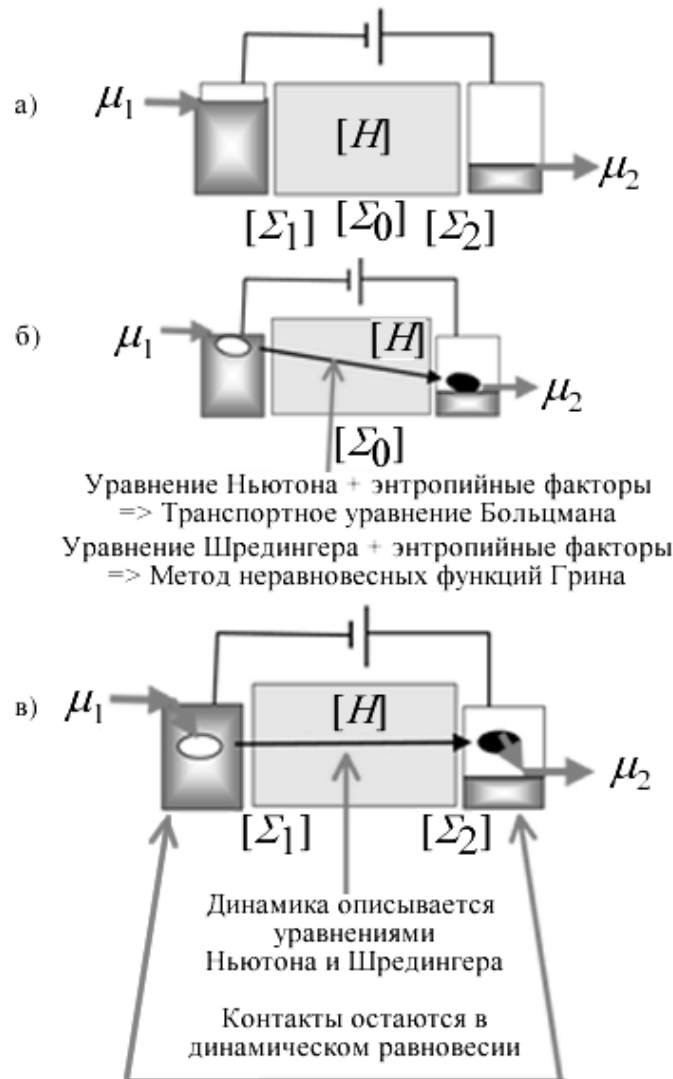


Рис. 2 – Схематическое описание (а) активного канала проводимости, взаимодействующего с истоком и стоком, и двух предельных случаев – (б) диффузионного транспорта в макроскопических проводниках и (в) баллистического транспорта в нанотранзисторах.

Любое устройство нанoeлектроники имеет активный канал проводимости, который описывается гамильтонианом  $[H]$ , включающем потенциальную энергию  $U$ , обязанную всем другим зарядам как внешним (на электродах), так и внутренним (в самом канале). Канал проводимости взаимодействует с истоком и стоком и с

любыми другими контактами в конкретном устройстве, которые находятся в локальном равновесии, определяемом соответствующими электрохимическими потенциалами (рис. 2а). 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 посвящена настоящая работа на примере модельных транспортных задач, представляющих не только научный, но и познавательный и педагогический интерес.

На рис. 2 показаны два предельных случая электронного транспорта – диффузионный (рис. 2б) и баллистический (рис. 2в). 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 возбужденного состояния в основное и невозможность самопроизвольного обратного процесса. Эта тенденция для систем любой сложности релаксировать однонаправлено 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. 3в). Электроны проскакивают от одного контакта к другому под действием только динамических сил. Внутри контактов электроны оказываются не в равновесии, но быстро приходят в равновесное состояние под действием энтропийных сил. Подобную модель развития событий в баллистическом пределе называют моделью упругого резистора Ландауэра, предложенную Рольфом Ландауэром еще в 1957 году [14 – 16] задолго до ее триумфального экспериментального подтверждения в нанотранзисторах. Сегодня

действительно надежно установлено, что баллистические резисторы выдерживают довольно сильные токи благодаря тому, что выделение джоулева тепла пренебрежимо мало. Тепло выделяется на контактах, которые благодаря своей относительной массивности быстро диссипируют его. Пространственное разнесение динамики и термодинамики в баллистических устройствах служит весомым аргументом в пользу концепции «снизу – вверх», которая представляется нам привлекательной не только научно, но и педагогически.

**Уравнения метода неравновесных функций Грина.** Задачу настоящей работы мы видим в том, чтобы дать компактное изложение формализма НРФГ с учетом модели Ландауэра применительно к наноэлектронным устройствам. Если опираться на пионерские работы от Швингера до Келдыша [11 – 13], основанные на квантовой многочастичной теории возмущений (МЧТВ) и диаграммной технике, то не хватит и нескольких семестров для овладения методом НРФГ. В своем изложении мы будем следовать работам Датты, Мейра и Вингина [4 – 7, 17 – 20], как наиболее адекватным стоящей перед нами задачи.

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

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

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

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

и приток электронов в проводник с контактов (inflow)

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

а именно:

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

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

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

где  $I$  – единичная матрица.

Матрица

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

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

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

называется опережающей (Advanced) функцией Грина. Происхождение этих и других терминов, общепринятых в формализме НРФГ, нам для дальнейшего не существенно, подробнее познакомиться с терминологией рекомендуем работы [6, 11 – 13]. Отметим лишь, что формализм НРФГ в применении к задачам в наноэлектронике сводится к

четырем уравнениям, **первое** из которых есть выражение (6) для запаздывающей функции Грина. Теперь уравнение Шредингера (5) перепишем в виде

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

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

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

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

Неравновесная функция Грина определяется как

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

так что число электронов дается выражением

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

Аналогично описывается приток электронов

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

так что теперь уравнение (9) имеет вид

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

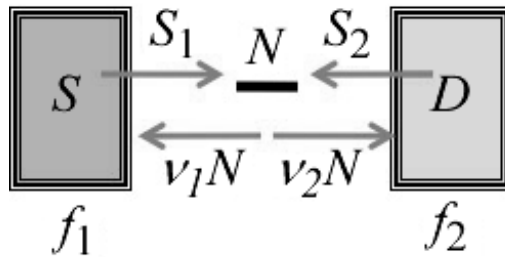


Рис. 3. – Модель одноуровневого проводника в полуклассическом приближении.

Одноуровневый проводник контактирует с двумя контактами с фермиевскими заселенностями  $f_1(\varepsilon)$  и  $f_2(\varepsilon)$ . Поначалу предположим, что на истоке S фермиевская функция  $f_1 = 1$ , а на стоке D функция  $f_2 = 0$ . Это означает, что исток стремится заполнить уровень с энергией  $\varepsilon$ , 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 заселенность одиночного уровня электронами

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

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

$$\frac{S_1}{\nu_1} = f_1(\varepsilon) \quad \text{и} \quad \frac{S_2}{\nu_2} = f_2(\varepsilon). \quad (19)$$

Перегруппируем уравнение (17) в

$$\frac{dN}{dt} = (S_1 - \nu_1 N) + (S_2 - \nu_2 N), \quad (20)$$

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

$$I = q(S_1 - \nu_1 N) = q(\nu_2 N - S_2), \quad (21)$$

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

$$N = \frac{\nu_1 f_1(\varepsilon) + \nu_2 f_2(\varepsilon)}{\nu_1 + \nu_2}, \quad (22)$$

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

$$I = q \frac{\nu_1 \nu_2}{\nu_1 + \nu_2} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)). \quad (23)$$

**Одноуровневый резистор: квантовый подход.** Стационарное уравнение Шредингера

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

следует из зависящего от времени уравнения Шредингера

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

в результате подстановки

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

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

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

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

с использованием которого и ему комплексно сопряженного имеем

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

другими словами заселенность изолированного уровня энергии не изменяется со временем.

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

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

с тем, чтобы эволюция электронной плотности

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

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

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

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

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

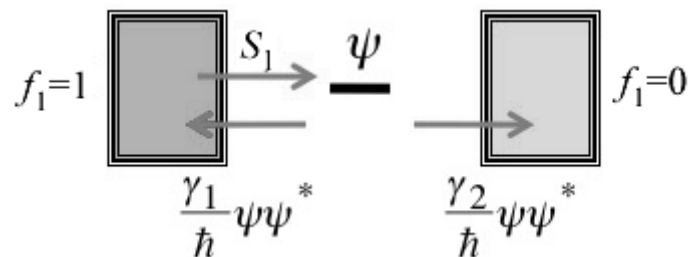


Рис. 4 – Опорожнение и поступление электронов в квантовой модели одноуровневого проводника.



Введем в стационарное уравнение Шредингера (32) контактный член  $s_I$  в качестве источника электронов

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

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

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

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

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

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

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

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

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

где

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

Приравнявая (36) и (37), получим

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

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

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

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

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

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

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

Интегрируя по всему спектру энергий, для тока получаем

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

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

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

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

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

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

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

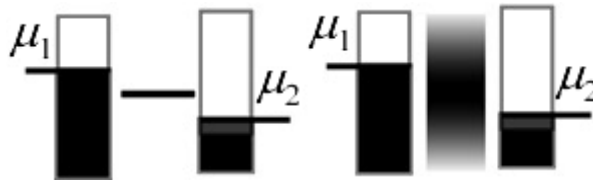


Рис. 5 – В отличие от классических представлений (слева) одиночный локализованный уровень энергии в квантовой модели (справа) размывается вследствие принципа неопределенности Гейзенберга.

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

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

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

Предполагая равноценную связь проводника с обоими контактами

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

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

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

Таким образом, квантовая модель одноуровневого резистора показывает, что измеряемая проводимость будет максимальной и равной кванту проводимости  $q^2/h$ , если электрохимический потенциал  $\mu_0$  будет достаточно близок к энергии уровня  $\varepsilon$ . 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  $\alpha$  и  $\beta$ , так что одноуровневая модель резистора фактически есть двухуровневой с учетом вырождения по спину.

**К вопросу об интерференции источников поступления электронов в проводник.** В отличие от классической модели резистора, в которой одновременно учитывались оба источника поступления электронов с двух контактов в проводник (17), в квантовой модели (34) учитывалась инжекция электронов только с истока ( $f_1 = 1$ ), а сток 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 перекрестных 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 попарные 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.

**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,

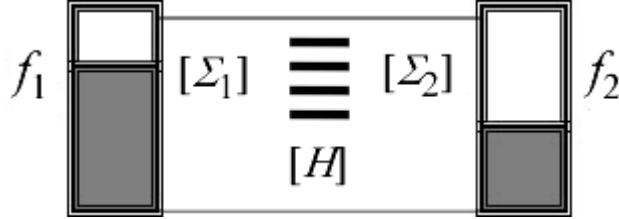


Рис. 6 – Транспортная модель для многоуровневого проводника.

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  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  неэрмитовы с антиэрмитовыми компонентами

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

выполняющими роль  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  в одноуровневой задаче.

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

Из (52) непосредственно имеем

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

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

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

Неравновесная функция Грина

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

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

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

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

так что

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

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

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

Уравнение (13) с (59) дает матрицу электронной плотности  $G^n$  через фермиевские функции для двух контактов. Если обе фермиевские функции равны единице, то все состояния заняты электронами, так что матрица электронной плотности становится равной матрице плотности состояний, называемой в методе НРФГ матрицей спектральной функции  $[A]$ . Полагая в (13) с (59)  $f_1 = 1$  и  $f_2 = 1$ , спектральная функция

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

с  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$ .

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

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

так что для обратной матрицы запаздывающей функции Грина имеем

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

Выполнив эрмитовое сопряжение равенства (62), получим

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

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 еще одно выражение для спектральной функции  $A$  (14)

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

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 сопряженного

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

Имеем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Далее нужно учесть следующее. В уравнении (73) обе части равенства равны нулю, поскольку речь идет о токе в системе (рис. 6) в состоянии динамического равновесия. Обе части уравнения (73) разбиваются на слагаемые, относящиеся к

контактам 1 и 2. Сумма их равна нулю в согласии с законом Кирхгофа для электрических цепей в состоянии динамического равновесия. Обобщая на произвольный номер контакта  $m$ , получаем уже упомянутое уравнение (16) для тока

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

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

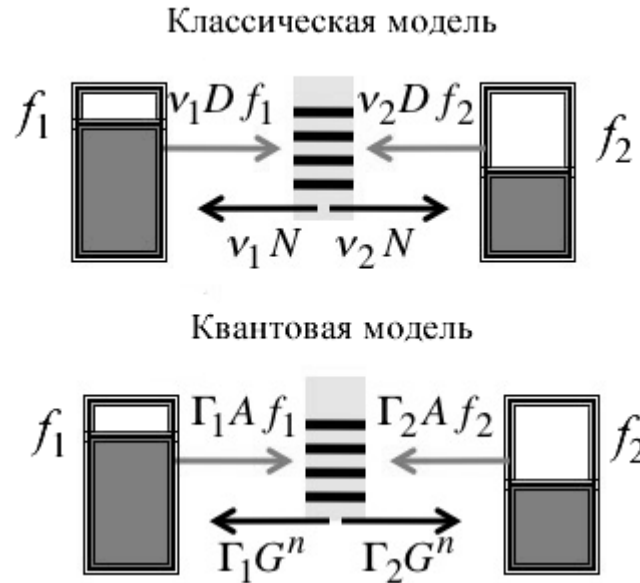


Рис. 7 – Пополнение и опорожнение канала проводимости в классической и квантовой моделях транспорта электронов.

**Функция проводимости для когерентного транспорта.** Преобразуем уравнение (76) следующим образом. Учтем (13) и (14), а также

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

Тогда имеем

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

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

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

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

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

и сравнивая это выражение для тока с аналогичным выражением для тока в упругом резисторе (32) из работы [1], 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 нашим обычным разложением разности фермиевских функций в ряд Тейлора (21) работы [1] для получения соответствующей разности электрохимических потенциалов, тогда уравнение (78) окажется фактически уравнением Бюттекера (83) с проводимостью

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

которую нужно еще усреднить для упругого резистора обычным образом

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

До сих пор рассматривались только физические контакты  $[\Sigma_{1,2}]$  в квантовой модели когерентного транспорта, в которой электроны движутся когерентно от истока к стоку по каналу, описываемому статическим гамильтонианом  $[H]$  в отсутствие взаимодействия электрона с окружением  $[\Sigma_0]$  при его движении по каналу (рис. 2а). Учет взаимодействия  $[\Sigma_0]$  с формальной точки зрения проблемы не представляет. Все уравнения метода НРФГ остаются прежними, в матрицах же  $\Sigma$ ,  $\Gamma$  и  $\Sigma^{in}$  появятся лишь дополнительные члены

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

Однако, что из себя физически представляет взаимодействие  $\Sigma_0$ ? С точки зрения электрона, движущегося в твердом теле, среда не представляется электрону статической, описываемой статическим гамильтонианом  $[H]$ , а весьма турбулентной средой со случайно меняющимся потенциалом  $U_R$ , который флуктуирует в пикосекундной шкале времени. Даже при достаточно низких температурах с замороженными фонными модами электрон движется в поле флуктуирующего потенциала, создаваемого всеми другими электронами (приближение



самосогласованного поля). Даже в этом случае имеют место фазовые флуктуации (дефазировка), приводящие к флуктуации тока. Типичные измерения тока дают нам его среднее значение в интервале нескольких наносекунд, микросекунд или даже миллисекунд. Этот эффект усреднения нужно адекватно моделировать, если мы хотим правильно интерпретировать экспериментальные данные.

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

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

Применение метода НРФГ для анализа и решения модельных транспортных задач переноса электронов на примере однородных и неоднородных 1D и 2D проводников, в том числе и графена, рассмотрим в следующих сообщениях, где также будет сформулирован общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера.

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](http://www.nanohub.org/u)].

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

### Список литературы

1. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стрѣха М.В. Уроки наноелектроніки: виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. – 2012. – V. 9, N 4. – P. 5 – 29.
2. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стрѣха М.В. Уроки наноелектроніки: термоелектричні явища в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. – 2013. – V. 10, N 1. – P. 6 – 21.
3. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стрѣха М.В. Уроки наноелектроніки: Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. – 2013. – V. 10, N 2. – P. 5 – 25.
4. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 474; [www.nanohub.org/courses/FoN1](http://www.nanohub.org/courses/FoN1), [www.nanohub.org/courses/FoN2](http://www.nanohub.org/courses/FoN2).
5. Datta Supriyo. *Nanoelectronic devices: A unified view* // *The Oxford Handbook on Nanoscience and Nanotechnology: Frontiers and Advances*, Eds. A.V. Narlikar and Y.Y.Fu. – Oxford University Press. – 2012. – V. 1, Chapter 1. – pp. 26.

6. *Datta Supriyo*. Quantum Transport: Atom to Transistor. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2005. – pp. 404.
7. *Datta Supriyo*. Nanodevices and Maxwell's demon // Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, Vol. 2, Nanoscale Phenomena: Basic Science to Device Applications, Eds. Z.K. Tang and P. Sheng, Delrin: Springer. – 2008. – pp. 18
8. *Caroli C., Combescot R., Nozieres P., Saint-James D.* A direct calculation of the tunneling current: IV. Electron phonon interaction effects // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1972. – V. 5. – P. 21.
9. *Kubo R.* Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // J. Phys. Soc. Japan. – 1957. – V. 12. – P. 570 – 586.
10. *Sears F.W., Salinger G.L.* Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. – Boston: Addison-Wesley. – 1975. – pp. 331 – 336, 355 – 361.
11. *Martin P.C., Schwinger J.* Theory of many-particle systems. I // Phys. Rev. – 1959. – V. 115, N 6. – P. 1342 – 1373.
12. *Kadanoff L.P., Baym G.* Quantum Statistical Mechanics. – New York: W.A. Benjamin. – 1962.
13. *Келдыш Л.В.* Диаграммная техника для неравновесных процессов // ЖЭТФ. – 1964. – Т. – 47. – С. 1515 – 1527; *Keldysh L.V.* Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes // Sov. Phys. JETP. – 1965. – V. 20. – P. 1018.
14. *Landauer Rolf.* Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // IBM J. Res. Dev. – 1957. – V. 1, N 3. – P. 223 – 231.
15. *Landauer Rolf.* Electrical resistance of disordered onedimensional lattices // Philos. Mag. – 1970. – V. 21. – P. 863 – 867.
16. *Landauer Rolf.* Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // J. Math. Phys. – 1996. – V. 37, N 10. – P. 5259.
17. *Datta S.* Steady-state quantum kinetic equation // Phys. Rev., 1989. – V. B40. – P. 5830.
18. *Datta S.* A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // J. Phys., Cond. Matt. – 1990. – V. 2. – P. 8023 – 8052.
19. *Meir Y., Wingreen N.S.* Landauer formula for the current through an interacting electron region // Phys. Rev. Lett. – 1992. – V. 68. – P. 2512 – 2515.
20. *Datta Supriyo.* Electronic Transport in Mesoscopic Systems.- Cambridge: Cambridge University Press. – 2001. – pp. 377.
21. *Smit R.H.M., Noat Y., Untiedt C., Lang N.D., van Hemert M.C., van Ruitenbeek J.M.* Measurement of the conductance of a hydrogen molecule // Nature. – 2002. – V. 419, N 3. – P. 906 – 909.
22. *Buttiker M.* Symmetry of Electrical Conduction // IBM J. Res. Dev. – 1988. – V. 32, N 3. – P. 317 – 334.
23. *Anderson P.W.* Absence of Diffusion in Certain Random Lattices // Phys. Rev. – 1958. – V. 109, N 5. – P. 1492 – 1505.
24. *Anderson P.W.* New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality // Phys. Rev. B. – 1981. – V. 23, N 10. – P. 4828 – 4836.

**Метод нерівноважних функцій Гріна у матричному зображенні. 1. Теоретичні основи  
Кругляк Ю.О., Крижанівська Т.В.**

*В рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки формулюється метод нерівноважних функцій Гріна в матричному зображенні для задач квантового транспорту електронів.*

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

**Non-Equilibrium Green's Functions Method in Matrix Presentation. 1. Theoretical Basics  
Kruglyak Yu.A., Kryzhanovskaya T.V.**

*Non-equilibrium Green's functions method in matrix presentation is given with application to transport of electrons in quantum regime.*

**Keywords:** *nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, bottom – up, NEGF method, one-level resistor, multiple-level resistor.*