

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

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

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНИКИ: МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. I. ТЕОРІЯ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, E-mail: quantumnet@yandex.ua

* Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України

пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНИКИ: МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. I. ТЕОРІЯ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. В рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки формулюється метод нерівноважних функцій Гріна в матричному зображенні з подальшим застосуванням його до транспортних задач.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, «знизу–вгору», метод НРФГ, однорівневий резистор, багаторівневий резистор, когерентний транспорт, квантовий транспорт, коефіцієнт проходження

LESSONS OF NANOELECTRONICS: NON-EQUILLIBRIUM GREEN'S FUNCTIONS METHOD IN MATRIX REPRESENTATION. I. THEORY

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. Non-equilibrium Green's functions method in matrix form is presented with further application to modeling of transport problems in the frame of the «bottom–up» approach of nanoelectronics.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, “bottom–up”, NEGF, one-level resistor, multiple-level resistor, coherent transport, quantum transport, transmission coefficient

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ. I. ТЕОРИЯ

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники рассматривается метод неравновесных функций Грина в матричном представлении с целью дальнейшего применения его к модельным транспортным задачам.

Ключевые слова: нанoфизика, нанoeлектроника, молекулярная электроника, «снизу–вверх», метод НРФГ, одноуровневый резистор, многоуровневый резистор, когерентный транспорт, квантовый транспорт, коэффициент прохождения.

Вступ. Продовжуючи попередні публікації [1 – 3], ми в рамках концепції «знизу – вгору» нанoeлектроніки, викладеної в лекційних курсах [4, 5], розглянемо метод нерівноважних функцій Гріна в матричному формулюванні з подальшим його застосуванням у другій частині цієї статті для аналізу і розв’язання модельних транспортних задач перенесення електронів на прикладі однорідних і неоднорідних 1D і 2D провідників, у тому числі й графену. У другій частині також буде викладено загальний метод врахування електричних контактів у рівнянні Шредінгера.

Сучасний ноутбук містить понад три мільярди транзисторів з довжиною каналу провідності $\sim 30 - 50$ нм, що відповідає сотні – другій атомів. У міру зменшення довжини каналу провідності фізична природа електронного транспорту змінюється якісно (рис. 1). Для достатньо довгих провідників транспорт дифузійний з траєкторією, що нагадує випадкові блукання. Якщо довжина каналу провідності стає меншою від середньої довжини вільного пробігу, транспорт електронів переходить у режим балістичного перенесення заряду. При ще коротших довжинах каналу провідності починає виявлятися хвильова природа електронів, мають місце такі квантові ефекти, як інтерференція і тунелювання.

Історично дедалі глибше розуміння фізичної природи електричної провідності відбувалося *згори – вниз*: від масивних макроскопічних провідників до транзисторів молекулярних і навіть атомних розмірів. Ще років 20 – 25 тому широко обговорювали питання, як розуміти

концепцію електричного опору, якщо розмір провідника наближається до атомних розмірів. Попри величезні досягнення експериментальної мезофізики і нанoфізики, і понині при обговоренні провідності домінує концепція згори – вниз (замість природної концепції *знизу – вгору*), що робить аналіз і обговорення пристроїв нанoeлектроніки часом безглуздо складним (див. напр. [6, 7]).

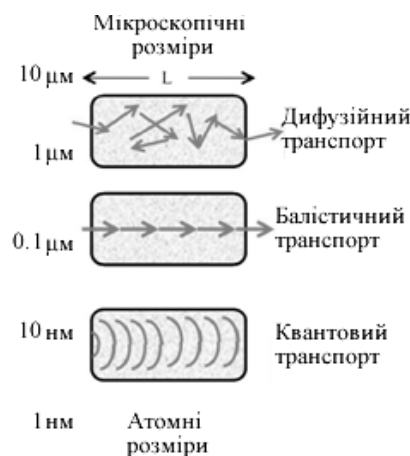


Рис. 1. Зі зменшенням довжини каналу провідності L фізична природа транспорту електронів змінюється якісно - від дифузійного до балістичного і далі до квантового

Концепцію *знизу – вгору* проілюструємо на рис. 2.

Будь-який пристрій нанoeлектроніки має активний канал провідності, який описується гамільтоніаном $[H]$, який включає потенціальну енергію U , зумовлену наявністю всіх інших зарядів - як зовнішніх (на електродах), так і внутрішніх (у самому каналі).

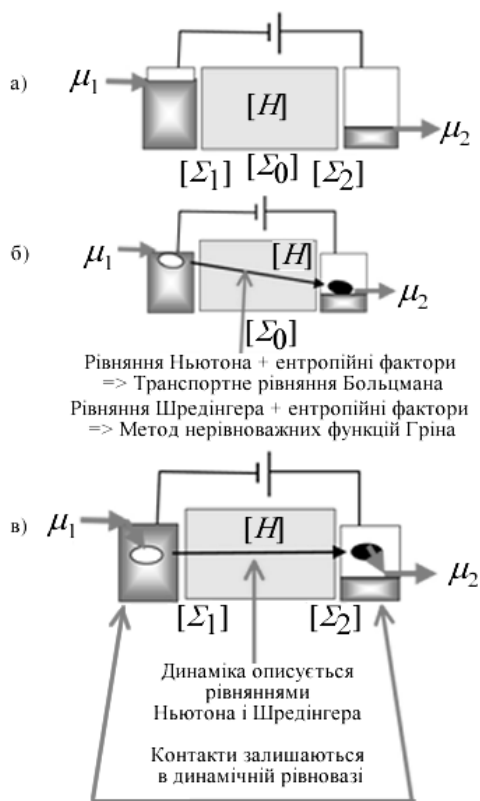


Рис. 2. Схематичний опис (а) активного каналу провідності, що взаємодіє з витоків і стоків, і двох граничних випадків: (б) дифузійного транспорту в макроскопічних провідниках і (в) балістичного транспорту в нанотранзисторах

Канал провідності взаємодіє з витоків і стоків і з усіма іншими контактами в конкретному пристрої, які перебувають у локальній рівновазі, визначуваній відповідними електрохімічними потенціалами (рис. 2а). Взаємодія між каналом і контактами описується матрицями власної енергії (self-energy) $[\Sigma_1]$ і $[\Sigma_2]$ [8]. Взаємодія електрона в каналі з його оточенням описується матрицею власної енергії $[\Sigma_0]$, яка, на відміну від матриць $[\Sigma_1]$ і $[\Sigma_2]$, повинна бути обчислена самоузгоджено. Розмірність цих квадратних матриць визначається числом N базисних функцій, що використовуються для квантомеханічного опису каналу провідності і контактів. Конкретний вигляд матриць визначається використанням методом розв'язання рівняння Шредінгера, – напівемпіричним, на основі теорії функціонала густини або з перших принципів, а також вибором базисних функцій. Як тільки ці матриці складені, подаль-

ша процедура обчислення провідності, струму та інших електрофізичних властивостей є стандартною, чому й присвячена ця робота на прикладі модельних транспортних задач, що являють не тільки науковий, але й пізнавальний та педагогічний інтерес.

На рис. 2 зображені два граничні випадки електронного транспорту – дифузійний (рис. 2б) і балістичний (рис. 2в). В балістичному випадку транспорт електронів контролюється контактними матрицями $[\Sigma_1]$ і $[\Sigma_2]$, тоді як взаємодіями усередині каналу можна знехтувати. На противагу цьому, в дифузійному випадку транспорт електронів контролюється взаємодіями усередині каналу, описуваними матрицею $[\Sigma_0]$, а роль контактних матриць $[\Sigma_1]$ і $[\Sigma_2]$ зникло мала. Не дивно, що до приблизно 1990 року контакти навіть не зображали на схемах. Між гамільтоновою матрицею $[H]$ і матрицями $[\Sigma_{0,1,2}]$ є істотна відмінність: матриця гамільтоніану враховує консервативні динамічні сили і є ермітовою, тоді як матриці власної енергії враховують ентропійні чинники і не є ермітовими.

Рівняння Шредінгера саме по собі не придатне для пояснення таких нібито очевидних процесів, як, наприклад, спонтанний перехід електрона зі збудженого стану в основний і неможливість спонтанного оберненого процесу. Ця тенденція для систем будь-якої складності релаксувати лише в бік зниження енергії здається очевидною і не має пояснення в рамках квантової механіки. Ці та інші різноманітні однонаправлені явища в навколишньому світі мають ентропійну природу. При конструюванні й аналізі роботи будь-якого електронного квантового або класичного пристрою рівняння динаміки слід доповнити ентропійними силами. Так виникла статистична механіка нерівноважних процесів, центральне місце в якій ось уже 140 років посідає транспортне рівняння Больцмана [9, 10]. Квантовим аналогом рівняння Больцмана є метод нерівноважних функцій Гріна (НРФГ), основи якого були закладені в роботах Мартіна і Швінгера [11], Каданова і Бейма [12], Келдиша [13].

Обидва підходи – класичний Больцмана і квантовий формалізм НРФГ - об'єднує та обставина, що в них одночасно враховують як ди-

намічні, так і ентропійні сили. В балістичному випадку, проте, динамічні та ентропійні процеси просторово розділені (рис. 2в). Електрони пролітають від одного контакту до другого під дією тільки динамічних сил. Усередині контактів ці електрони опиняються не в рівновазі, але швидко приходять у рівноважний стан під дією ентропійних сил. Таку модель розвитку подій в балістичному наближенні називають моделлю пружного резистора Ландауера, бо її запропонував Рольф Ландауер ще в 1957 році [14 – 16] задовго до її триумфального експериментального підтвердження в нанотранзисторах. Сьогодні вже надійно встановлено, що балістичні резистори витримують досить сильні струми завдяки тому, що виділення джоулевого тепла в них нехтовно мале. Тепло виділяється на контактах, які завдяки своїй відносній масивності швидко дисипують його. Таке просторове розмежування динаміки і термодинаміки в балістичних пристроях служить вагомим аргументом на користь концепції «знизу – вгору», яка видається нам привабливою не тільки науково, але й педагогічно.

Рівняння методу нерівноважних функцій Гріна. Завдання цієї роботи ми вбачаємо в тому, щоб дати компактний виклад формалізму НРФГ з урахуванням моделі Ландауера у застосуванні до наноелектронних пристроїв. Якщо спиратися на піонерські роботи від Швінгера до Келдиша [11 – 13], засновані на квантовій багаточастинковій теорії збурень (БЧТЗ) і діаграмній техніці, то для оволодіння методом НРФГ не вистачить і декількох семестрів. В своєму викладі ми спиратимемося на роботи Датти, Мейра і Вінґріна [4 – 7, 17 – 20], які дозволяють суттєво спростити поставлене нами завдання.

Почнімо з розгляду пружного резистора, ентропійні процеси дисипації тепла в якому відбуваються лише на контактах, а саму задачу про опір резистора розгляньмо в одночастковому наближенні з додаванням до рівняння Шредінгера

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

ще двох членів, що описують витікання електронів в контакти (outflow)

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

і притік електронів у провідник з контактів (inflow)

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

В результаті цього ми одержуємо запис рівняння Шредінгера в матричному вигляді:

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

Ми вважаємо, що базисні функції вже були вибрані, тож у записі (4) квадратні матриці взяті в квадратні дужки, а матриці-стовпці – у фігурні дужки. Тепер розв'язок рівняння Шредінгера можна відразу записати через обернену матрицю

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

де I – одинична матриця. Матриця

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

отримала назву запізненої (Retarded) функції Гріна, а ермітово спряжена з нею матриця

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

називається випереджаючою (Advanced) функцією Гріна. Походження цих та інших термінів, загальноприйнятих у формалізмі НРФГ, для нас у подальшому не важливе, для докладнішого знайомства з термінологією ми рекомендуємо роботи [6, 11 – 13]. Відзначмо лишень, що формалізм НРФГ у застосуванні до задач наноелектроніки зводиться до чотирьох рівнянь, першим з яких є вираз (6) для запізненої функції Гріна. Тепер рівняння Шредінгера (5) перепишемо у вигляді

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

Добуток стовпця $\{\psi\}$ на ермітово спряжений до нього рядок $\{\psi\}^+$ дає

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

де враховано, що транспонування добутку матриць міняє порядок співмножників на зворотний.

Нерівноважна функція Гріна визначається як

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

Число електронів визначається виразом, що включає слід відповідної матриці:

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

Аналогічно описується притік електронів:

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

Отже, тепер рівняння (9) набуває вигляду

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

і буде **другим** рівнянням у формалізмі НРФГ.

Заради повноти викладу відзначмо, що наші позначення у порівнянні з [6] спрощені, а саме: Σ замість Σ^R , G^n замість $-iG^<$. Проте, наші перше і друге рівняння (6) і (13) істотно ті ж самі, що й рівняння (75) – (77) в основоположній роботі Келдиша [13], отримані діаграмною технікою БЧТЗ. Ми вважаємо, що вичленування цих двох рівнянь зробить метод НРФГ прозорішим і доступнішим у застосуванні, коли виникне необхідність врахувати електричні контакти в рівнянні Шредінгера.

Наведемо решту два рівняння формалізму НРФГ. **Третє** рівняння є матричною формою густини станів $D(E)$, помноженою на 2π , і називається спектральною функцією A

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

де матриці G^R і G^A визначаються рівняннями (6) і (7), а матриця $[\Gamma]$ є антиермітова частина відповідної контактної матриці (2):

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

Ця матриця описує взаємодію електронів у каналі з контактами. Виведення формули (14) для спектральної функції і доведення еквівалентності всіх трьох виразів для неї здійснимо нижче.

Всі матриці $[\Sigma]$, $[\Gamma]$ і $[\Sigma^n]$ містять доданки, що відносяться до конкретних терміналів

(контактів), що їх враховує конкретна задача. В рівняннях (6), (13) і (14) підсумовування по терміналах вже було виконано.

Четвертим рівнянням у формалізмі НРФГ є рівняння для струму через термінал з номером m

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

куди входять тільки ті компоненти матриць, які відносяться до певного терміналу m . Це питомий струм (на інтервал енергії), його потрібно ще проінтегрувати по всьому спектру енергій, щоб отримати повний струм через термінал m .

Далі ми розглянемо прості модельні транспортні задачі, а потім повернемося до обґрунтування і виведення рівнянь методу НРФГ й обговоримо складніші транспортні задачі.

Однорівневий резистор: напівкласичний підхід. Відчути фізику методу НРФГ можна вже на найпростішій транспортній задачі про однорівневий провідник, описуваний матрицями 1×1 , тобто числами з $[H] = \epsilon$. На цьому прикладі побачимо, як враховуються контакти в рівнянні Шредінгера, а потім перейдемо до провідника з довільним числом каналів, описуваного матрицями $N \times N$. Спочатку, проте, розглянемо однорівневу задачу в напівкласичному наближенні (рис. 3).

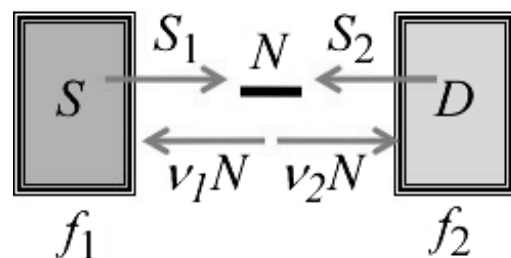


Рис. 3. Модель однорівневого провідника в напівкласичному наближенні

Однорівневий провідник контактує з двома контактами з фермівськими заселеностями $f_1(\epsilon)$ і $f_2(\epsilon)$. Спершу припустімо, що на витoku S фермівська функція $f_1 = 1$, а на стоці D функція

$f_2 = 0$. Це означає, що витік прагне заповнити рівень з енергією ε , а стік прагне витягнути електрони з цього рівня. Остаточно при обчисленні сумарного струму множитимемо його на

$$f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon),$$

маючи на увазі, що упорскування електронів відбувається з обох контактів, і сумарний струм є різницевий ефект.

При $f_1 = 1$ на витоку і $f_2 = 0$ на стоці середнє число електронів N задовольняє рівнянню

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

де v_1 і v_2 - швидкості, з якими електрони покидають провідник у напрямі контактів, а S_1 і S_2 - швидкості, з якими електрони упорскуються контактами в провідник. В умовах динамічної рівноваги $dN/dt = 0$, тому заселення одиночного рівня електронами дорівнює

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

Якщо подумки відімкнути стік, то число електронів буде рівне фермівській функції на витоку, якщо ж відімкнути витік, то число електронів дорівнюватиме фермівській функції на стоці:

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

Перегрупуємо рівняння (17) як

$$\frac{dN}{dt} = (S_1 - v_1N) + (S_2 - v_2N). \quad (20)$$

Тут перший доданок є потік електронів, створований витоком, а другий – стоком. В умовах динамічної рівноваги обидва потоки однакові і протилежно направлені, а сам струм дорівнює

$$I = q(S_1 - v_1N) = q(v_2N - S_2). \quad (21)$$

Будь-який з цих двох виразів може бути використаний для обчислення струму. З (18) і (19) маємо заселеність рівня в умовах динамічної рівноваги

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

Підставляючи її у вираз для струму (21) і враховуючи (19), для струму I через фермівські функції остаточно запишемо:

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

Однорівневий резистор: квантовий підхід. Стационарне рівняння Шредінгера

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

можна формально отримати із залежного від часу рівняння Шредінгера

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

в результаті підстановки

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

Для опису динамічної рівноваги зазвичай достатньо стаціонарного рівняння Шредінгера, але в деяких випадках не обійтися без не-стаціонарного рівняння (24), наприклад, як ми побачимо далі, при інтерпретації певної залежності від матриць власних енергій.

Для однорівневої задачі $[H] = \varepsilon$ еволюція хвильової функції описується рівнянням

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

З використанням (26) і комплексно спряженого до нього рівняння маємо

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

Іншими словами, заселеність ізольованого рівня енергії не змінюється з часом.

Нас же цікавить не ізольована система, а провідник, сполучений з двома контактами. Стандартні підручники з квантової механіки, на жаль, не показують, як описати таку ситуацію.

Модифікуємо рівняння Шредінгера подальшим чином:

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

з тим, щоб еволюція електронної густини

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

була схожа на динамічне рівняння напівкласики (17), хіба що за винятком швидкостей S_1 і S_2 , з якими електрони упорскуються контактами в провідник, – але ми до них повернемося пізніше. Рівняння (29) і (17) узгоджуються одне з одним, якщо покласти

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

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

Стаціонарний аналог рівняння (28)

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

одержуємо підстановкою в нього розв'язку для одиничного значення енергії $E = \varepsilon$

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

Рівняння (32) має очевидний розв'язок $\psi = 0$, він вказує на те, що в динамічній рівновазі електрони не можуть заселяти рівень з енергією $E = \varepsilon$. Поки не буде ввімкнено джерело S_1 надходження електронів у провідник, вони можуть лише покидати провідник, йдучи в контакти (рис. 4).

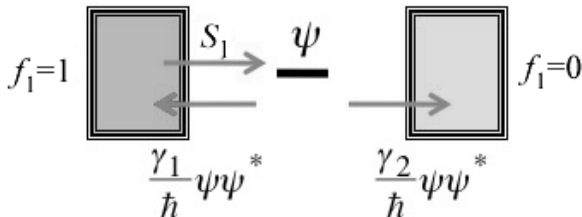


Рис. 4. Витікання і надходження електронів у квантовій моделі однорівневого провідника

Введемо в стаціонарне рівняння Шредінгера (32) контактний доданок s_1 , як джерело елек-

тронів

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

де $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$.

На відміну від напівкласичної моделі (17), в квантовій моделі вводиться одне джерело електронів, а не два, причина чого стане зрозуміла нижче. Рівняння (34) дозволяє пов'язати хвильову функцію з джерелом електронів:

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

Звернімо увагу на те, що хвильова функція набуває свого максимального значення, коли енергія електрона E дорівнює енергії рівня ε . Особливість квантової моделі в тому, що хвильова функція залишається достатньо великою при відхиленні E від ε на величину, меншу від γ . Це приклад «розширення» функції, що є виявом невизначеності за енергією, відсутньої в напівкласиці.

Оцінимо якість джерела електронів s_1 таким чином. Проінтегруємо повне число електронів по всьому спектру енергій і прирівняємо його до напівкласичного виразу (22) з урахуванням того, що $f_1 = 1$ і $f_2 = 0$ (рис. 4):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \psi \psi^* = \frac{\nu_1}{\nu_1 + \nu_2} = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad (36)$$

де друга рівність була отримана з урахуванням (30) і (31).

Обчислимо ліву частину рівняння (36), скориставшись виразом для хвильової функції (35):

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

де

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

Прирівнюючи (36) і (37), отримаємо

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

Іншими словами, якість джерела електронів пропорційна швидкості видалення електронів з провідника, що видається правдоподібним: якщо контакт добре сполучений з провідником, то електрони так само добре покидають контакт, як і повертаються назад з провідника.

Як і у випадку класичного виразу для струму (21), струм у квантовій моделі отримаємо зі швидкості зміни електронної густини (29)

$$\frac{d}{dt} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* = (\text{Притік з контакту 1}) - \frac{\gamma_1}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* - \frac{\gamma_2}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^*, \quad (40)$$

додавши лише притік з інжекційного контакту s_1 , який не враховано в нестационарному рівнянні Шредінгера (28).

Ліва і права частини рівняння (40) рівні нулеві, оскільки йдеться про струм у стані динамічної рівноваги. Як і в класичній моделі, струм можна обчислити або як суму перших двох складових, або як третій доданок у рівнянні (40)

$$\frac{I}{q} = (\text{Притік з контакту 1}) - \frac{\gamma_1}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* = \frac{\gamma_2}{\hbar} \tilde{\psi} \tilde{\psi}^*. \quad (41)$$

Інтегруючи по всьому спектру енергій, для струму одержуємо:

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

З підстановкою (35) і (39) для струму в квантовій моделі остаточно маємо:

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

що можна порівняти з виразом для струму в напівкласичній моделі (23), маючи на увазі, що $f_1 = 1$ і $f_2 = 0$, а $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$:

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

Квантове розширення. Обчислення струму в квантовій моделі за виразом (43) передбачає інтегрування за всім спектром енергій,

оскільки при квантовому розгляді одиночний локалізований рівень розмивається за енергією (рис. 5) і описується густиною станів $D(E)$:

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

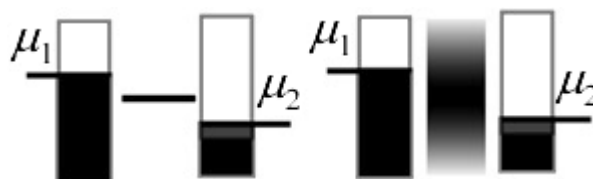


Рис. 5. На відміну від квазікласичного розгляду (ліворуч) одиночний локалізований рівень енергії в квантовій моделі (праворуч) розмивається унаслідок дії принципу невизначеності Гейзенберга

Пряме експериментальне вимірювання провідності одиночної молекули водню [21], спектр якої фактично відповідає однорівневій моделі резистора, може служити прямим доказом наявності квантового розширення рівнів енергії.

Порівнюючи (43) з виразом для струму пружного резистора (32) з роботи [1], одержуємо провідність однорівневої моделі з урахуванням квантового розширення

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

Припускаючи рівноцінний зв'язок провідника з обома контактами

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

і достатньо низьку температуру для того, щоб вимірювана провідність була рівною провідності для енергії хімпотенціалу $G(E = \mu_0)$, маємо:

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

Таким чином, квантова модель однорівневого резистора показує, що вимірювана провідність буде максимальною і рівною кванту провідності q^2/h , якщо електрохімічний потен-

ціал μ_0 буде достатньо близький до енергії рівня ε . Експериментально вимірюваний квант провідності рівний $2q^2/h$, де двійка пов'язана із виродженням за спіном, оскільки насправді всі рівні енергії заповнені парами електронів зі спінами вгору і вниз, так що однорівнева модель резистора фактично є дворівневою з урахуванням виродження за спіном.

До питання про інтерференцію джерел надходження електронів у провідник. На відміну від класичної моделі резистора, в якій одночасно враховувалися обидва джерела надходження електронів з двох контактів у провідник (17), у квантовій моделі (34) враховувалася інжекція електронів тільки з витоку ($f_1 = 1$), а стік підтримувався порожнім ($f_2 = 0$).

Так було зроблено не з питання зручності міркувань. Якщо замість (34) у рівнянні Шредінгера одночасно врахувати обидва інжекційні контакти

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

то для хвильової функції отримаємо:

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

Отже, в виразі для електронної густини з'являться два перехресні інтерференційні доданки:

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

Насправді такі доданки ніколи не спостерігалися експериментально, бо при інжекції від двох окремих контактів електрони надходять у провідник з нескорельованими фазами, які змінюються в часі довільним чином і в середньому дають нульовий внесок. Перші ж два попарні добутки в (51) дають додатний внесок і спостерігаються експериментально.

Контакти в електронних пристроях зазвичай не когерентні і цю обставину потрібно враховувати при їх моделюванні. Тому в рівнянні Шредінгера не можна одночасно враховувати декілька електричних контактів. Враховувати контакти треба поодиноці, спершу обчислюю-

чи властивості, які залежать від добутку хвильових функцій (такі, як електронна густина, струм тощо), а потім підсумовуючи ці внески від різних контактів.

Квантовий транспорт у багаторівневному провіднику. Узагальнимо однорівневу модель (34) на багаторівневу (рис. 6) з матрицею гамільтоніану розмірності $N \times N$, що має N власних значень.

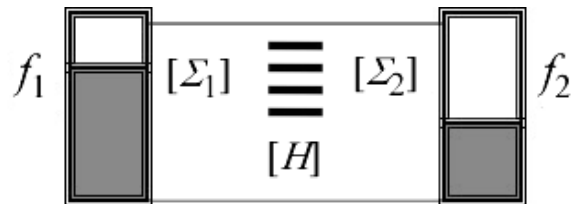


Рис. 6. Транспортна модель для багаторівневого провідника

Рівняння Шредінгера з двома контактами, один з яких інжектує носії, має вигляд

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

де хвильова функція й інжекційний контакт - стовпчики $N \times 1$, а контактні $N \times N$ матриці Σ_1 і Σ_2 неермітові з антиермітовими компонентами

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

$$\Gamma_2 = i[\Sigma_2 - \Sigma_2^+],$$

які виконують роль γ_1 і γ_2 в однорівневій задачі.

Спочатку покажемо, як чотири основні рівняння методу НРФГ (6), (13), (14) і (16) впливають з рівняння Шредінгера з врахованими контактами (52).

З (52) безпосередньо маємо

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

де запізнена функція Гріна G^R дається виразом (6) з

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

Нерівноважна функція Гріна записується як

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

де випереджаюча функція Гріна G^A ермітово спряжена з запізненою функцією (7).

Для однорівневої задачі $2\pi s_1 s_1^* = \gamma_1$ (39), а для багаторівневої – це матриці

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

отже

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

Це нерівноважна грінівська функція для одного інжекційного джерела. Для декількох джерел матриці електронної густини додаються, зважені відповідними фермівськими функціями, для отримання (13) з матрицею Σ^n , що є некогерентною сумою всіх незалежних джерел, так що для нашого випадку двох джерел

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

Рівняння (13) разом з (59) визначають матрицю електронної густини G^n через фермівські функції для двох контактів. Якщо обидві фермівські функції рівні одиниці, то всі стани зайняті електронами, і матриця електронної густини стає рівною матриці густини станів, яку в методі НРФГ називають матрицею спектральної функції $[A]$. Покладаючи в (13) і в (59) $f_1 = 1$ і $f_2 = 1$, для спектральної функції отримуємо:

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

де $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$.

Отримаємо два інші вирази для спектральної функції, наведені в (14). З (54) з урахуванням (52) і (55) запишемо:

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

Звідси для оберненої матриці запізненої функції Гріна маємо

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

Виконавши ермітово спряження рівності

(62), отримаємо

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

або інакше, враховуючи (7)

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

Віднімаючи (62) від (64) і враховуючи

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

що впливає з (53), отримаємо

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

Множачи (66) зліва на $[G^R]$, а справа на $[G^A]$, отримаємо ще один вираз для спектральної функції A (14):

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

Множачи (66) зліва на $[G^A]$, а справа на $[G^R]$, отримаємо також третій вираз для спектральної функції A (14):

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

Залишилося отримати вираз для струму. Як у випадку і класичного і квантового розгляду однорівневої моделі, вираз для струму отримуємо як зміну в часі числа електронів. Починаємо з нестационарного рівняння Шредінгера

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

і його ермітово спряженого

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

Звідси одержуємо:

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

де використовувалися вже відоме співвідношення (54) і ермітово спряжене до нього

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

Оскільки слід матриці $[\psi\psi^+]$ дає число електронів, то, визначивши похідну цієї матриці за часом, знайдемо матрицю оператора струму, слід якої дасть струм. Враховуючи (10) і (12), для матриці оператора струму з (71) маємо

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

Враховуючи те, що слід добутку матриць не залежить від порядку співмножників, для швидкості зміни числа електронів в каналі маємо

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

а з урахуванням (14) і (15) остаточно одержуємо:

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

Далі потрібно врахувати таке. У (73) обидві частини рівності дорівнюють нулеві, оскільки йдеться про струм у системі (рис. 6) в стані динамічної рівноваги. Обидві частини виразу (73) розбиваються на доданки, що відносяться до контактів 1 і 2. Сума їх дорівнює нулеві згідно із законом Кірхгофа для електричних кіл у стані динамічної рівноваги. Узагальнюючи це на довільний номер контакту m , одержуємо вже згадане рівняння (16) для струму

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

Класична і квантова моделі порівнюються на рис. 7, де множником D в класичній моделі враховується багаторівневість класичної задачі.

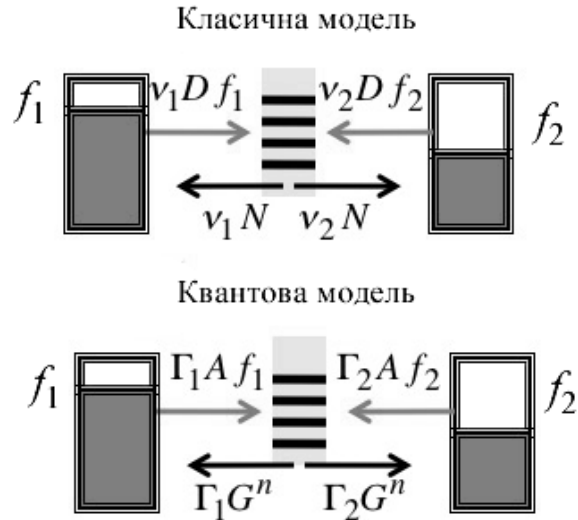


Рис. 7. Наповнення і спорожнення каналу провідності в класичній і квантовій моделях транспорту електронів

Функція провідності для когерентного транспорту. Перепишемо рівняння (76), врахувавши (13) і (14), а також те, що

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

В результаті одержуємо

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

де коефіцієнт проходження (transmission coefficient) між контактами m і n дорівнює:

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

Користуючись переставністю матриць під знаком сліду, легко довести корисну властивість коефіцієнта проходження:

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

Перепишемо вираз для струму (78) з використанням (79) для двотермінального пристрою:

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

Порівнюючи цей вираз для струму з аналогічним виразом для струму в пружному резисторі (32) з роботи [1], одержуємо квантовий аналог функції провідності:

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

Для інтерпретації експериментальних даних, отриманих на багатотермінальних пристроях, Бюттекер [22] запропонував елегантну формулу, що пов'язує струм I_m на контакті m з електрохімічними потенціалами на решті контактів:

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

де $G_{m,n}$ є провідність, визначувана коефіцієнтом проходження між контактами m і n .

В області лінійного відгуку скористаємося нашим звичайним розкладом різниці фермівських функцій в ряд Тейлора (див. вираз (21) роботи [1]) для отримання відповідної різниці електрохімічних потенціалів. Тоді рівняння (78) виявиться фактично рівнянням Бюттекера (83) з провідністю

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

яку потрібно ще усереднити для пружного резистора звичайним способом

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

Дотепер ми розглядали тільки фізичні контакти $[\Sigma_{1,2}]$ в квантовій моделі когерентного транспорту, в якій електрони рухаються когерентно від витоку до стоку по каналу, описуваному статичним гамільтоніаном $[H]$ за відсутності взаємодії електрона з оточенням $[\Sigma_0]$ при його русі по каналу (рис. 2а). Врахування взаємодії $[\Sigma_0]$ з формальної точки зору проблемою не є. Всі рівняння методу НРФГ залишаються колишніми, але в матрицях Σ , Γ та Σ^{in} з'являться додаткові члени

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

Проте, що собою фізично являє взаємодія $[\Sigma_0]$? З погляду електрона, що рухається в твердому тілі, середовище не є статичним, описуваним незалежним від часу гамільтоніаном $[H]$, а навпаки видається вельми турбулентним з випадково змінним потенціалом U_R , який флюктує в пікосекундній шкалі часу. Навіть при достатньо низьких температурах із замороженими фононними модами електрон рухається в полі флуктуацій потенціалу, створюваного всіма іншими електронами (наближення самоузгодженого поля). У цьому випадку мають місце фазові флуктуації (дефазування), що призводять до флуктуацій струму. Типові вимірювання струму дають нам його середнє значення в інтервалі декількох наносекунд, міросекунд або навіть мілісекунд. Цей ефект усереднювання потрібно адекватно моделювати, якщо ми хочемо правильно інтерпретувати експериментальні дані.

Метод НРФГ був спочатку розроблений саме для врахування непружних процесів квантового транспорту в масивних провідниках. Ми ж застосували його до пружних резисторів. Питання дефазування і узагальнення методу НРФГ на непружні процеси транспорту потребують окремої статті. Зараз же ми розглянемо модельні задачі квантового транспорту. Почнемо ми з квантового транспорту в 1D провідниках не тільки в режимі балістичного транспорту, але й з урахуванням розсіюючих центрів.

Чи обгрунтовано нехтувати ефектами інтерференції на дефектах і припускати, що електрони дифундують як класичні частинки? Таке питання поставив Андерсон ще в 1958 році [23] і прийшов до висновку, що дифузія може бути істотно пригнічена (або ж нею можна навіть повністю знехтувати) в результаті квантової інтерференції між розсіюючими центрами. Ми не маємо наміру заглиблюватися в теорію андерсонівської локалізації [24], покажемо лише як навіть спрощена модель НРФГ допомагає глибше зрозуміти фізику квантового транспорту.

Для будь-якої транспортної задачі потрібно записати гамільтоніан $[H]$ і матриці власної енергії $[\Sigma]$. Як тільки це зроблено, подальші

обчислення методом НРФГ виконуються стандартно.

У другій частині цієї статті розглядається застосування метода НРФГ до транспортних задач у 1D та 2D провідниках у моделі сильного зв'язку з ортогональним базисом і параметричним урахуванням взаємодії суміжних атомів. Буде також наведено загальний метод урахування електричних контактів у рівнянні Шредінгера з метою розв'язання задач квантового транспорту електронів.

На завершення наголосімо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts і «Fundamentals Nanoelectronics», Part II: Quantum Models», прочитаного он-лайн в січні – квітні 2012 року проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Автори щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

1. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsyst. Techn.* – 2012. – V. 3(9), N 4. – P. 5 – 29.
2. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: термоелектричні явища в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsyst. Techn.* – 2013. – V. 4(10), N 1. – P. 6 – 21.
3. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: спинтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsyst. Techn.* – 2013. – V. 4(10), N 2. – P. 5 – 35.
4. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport.* – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 474.
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, Berlin: 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.

Надійшла до редакції 05.12.12

Прийнята до публікації 03.04.2013