

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 НАНОЕЛЕКТОНІКИ: МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. II. МОДЕЛЬНІ ТРАНСПОРТНІ ЗАДАЧІ

*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.С.Лашкарьова НАН України
пр. Науки, 41, Київ, Україна

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

УРОКИ НАНОЕЛЕКТОНІКИ: МЕТОД НЕРІВНОВАЖНИХ ФУНКЦІЙ ГРІНА У МАТРИЧНОМУ ЗОБРАЖЕННІ. II. МОДЕЛЬНІ ТРАНСПОРТНІ ЗАДАЧІ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. В рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки розглядається застосування методу нерівноважних функцій Гріна в матричному зображенні до розв’язання транспортних задач у 1D та 2D провідниках у моделі сильного зв’язку з ортогональним базисом і параметричним урахуванням взаємодії сусідніх атомів. Наведено загальний метод урахування електричних контактів у рівнянні Шредінгера з метою розв’язання задач квантового транспорту електронів.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, «знизу–вгору», метод НРФГ, моделювання провідників, 1D провідник, 2D провідник, графен, коефіцієнт проходження

**LESSONS OF NANOELECTRONICS: NON-EQUILLIBRIUM GREEN'S FUNCTIONS METHOD IN MATRIX REPRESENTATION.
II. MODEL TRANSPORT PROBLEMS**

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. Non-equilibrium Green's functions method in matrix form is 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 the electric contacts in Schrödinger equation within solving of electron quantum transport problems is presented

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, “bottom – up”, NEGF method, conductor modeling, 1D conductor, 2D conductor, graphene, transmission coefficient

**УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: МЕТОД НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МАТРИЧНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ.
II. МОДЕЛЬНЫЕ ТРАНСПОРТНЫЕ ЗАДАЧИ**

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В рамках концепции «снизу – вверх» наноэлектроники рассматривается применение метода неравновесных функций Грина в матричном представлении к модельным транспортным задачам 1D и 2D проводников в модели сильной связи с ортогональным базисом и с параметрическим учетом взаимодействия соседних атомов. Сформулирован общий метод учета электрических контактов в уравнении Шредингера для решения задач квантового транспорта электронов.

Ключевые слова: нанопизика, наноэлектроника, молекулярная электроника, «снизу–вверх», метод НРФГ, моделирование проводников, 1D проводник, 2D проводник, графен, коэффициент прохождения

Вступ. Продовжуючи попередню публікацію [1], присвячену методу нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) в матричному зображенні, у цій статті ми в рамках концепції «знизу – вгору» наноелектроніки, викладеної в лекційних курсах [2, 3], застосуємо метод НРФГ для аналізу і розв'язання модельних транспортних задач перенесення електронів на прикладі однорідних і неоднорідних 1D і 2D провідників, у тому числі і графену, а та-

кож сформулюємо загальний метод врахування електричних контактів у рівнянні Шредингера.

Зауважмо, що в цій нашій статті ми продовжуємо наскрізну нумерацію формул і рисунків, розпочату в роботі [1]. При посиланні в цій статті на формули з роботи [1] ми додаємо до номеру формули позначку /[1]. При цьому нумерація посилань в обох роботах для зручності здійснюється окремо.

Моделювання 1D провідника. Для наших цілей достатньо одновимірної моделі необмеженого однорідного провідника в наближенні сильного зв'язку з урахуванням взаємодії лише сусідніх атомів (рис. 8) в ортогональному базисі. Це наближення відоме в квантовій хімії з 1931 р. як метод молекулярних орбіталей Гюккеля (див. напр. [4]). Навіть така проста модель коректно описує не всі, але багато властивостей протяжних полієнів $-(\text{CH}=\text{CH})_n\text{CH}=\text{[5-7]}$, графену [8, 9], поліацетиленів і кумуленів $=(\text{C}=\text{C})_n\text{C}=\text{[10-12]}$ (в останніх, щоправда, кожний атом постачає по два взаємно ортогональні π -електрони, що вимагає лише незначної модифікації моделі).

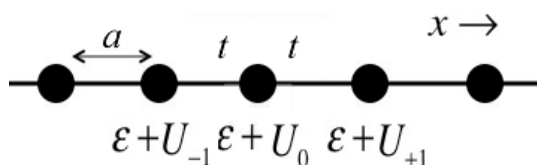


Рис. 8. Врахування змінного вздовж каналу провідності потенціалу $U(x)$ в трансляційно-інваріантному ланцюжку атомів з періодом a , де кожний атом постачає по одному електрону. Потенціал характеризується в наближенні Гюккеля двома параметрами – кулонівським інтегралом ε і резонансним інтегралом t .

Однорідний 1D провідник описується стандартною теорією одновимірної моделі кристалів Кроніга – Пенні і для нього справедливе параболічне дисперсійне співвідношення з ефективною масою

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

Нам потрібно переписати дисперсійне співвідношення (85) для використовуваного нами наближення сильного зв'язку з урахуванням взаємодії лише сусідніх атомів (рис. 8) в ортогональному базисі. Іншими словами, питання полягає в тому, як вибрати параметри ε і t , щоб апроксимувати дисперсійне співвідношення (85).

З рівняння Шредінгера

$$E\psi_n = \sum_m H_{nm}\psi_m \quad (86)$$

одержуємо:

$$E = \sum_m H_{nm} \frac{\psi_m}{\psi_n}. \quad (87)$$

Розв'язками рівняння Шредінгера (86) є плоскі хвилі (теорема Блоха)

$$\psi_n = \exp(ikna), \quad (88)$$

отже, з (87) випливає:

$$E(k) = \sum_m H_{nm} \exp(ik(m-n)a). \quad (89)$$

Матриця $[H]$ має подальшу структуру: по головній діагоналі стоять кулонівські інтеграли ε , на сусідніх верхній і нижній діагоналях стоять резонансні інтеграли t , решта елементів дорівнюють нулеві:

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

отже, для будь-якого рядка n матриці $[H]$ згідно з рівнянням Шредінгера (86) маємо:

$$E\psi_n = t\psi_{n-1} + \varepsilon\psi_n + t\psi_{n+1} \quad (90)$$

або інакше

$$E = t \frac{\psi_{n-1}}{\psi_n} + \varepsilon + t \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n}, \quad (91)$$

а з урахуванням (88) і після перегруповування

$$E(k) = \varepsilon + t \exp(+ika) + t \exp(-ika) = \varepsilon + 2t \cos ka. \quad (92)$$

В області малих k

$$\cos ka \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2}. \quad (93)$$

Порівнюючи дисперсійне співвідношення (92) для однорідного ланцюжка в гюккелівському наближенні в області малих k з правильним параболічним дисперсійним наближенням (85), знаходимо значення резонансного і кулонівського інтегралів

$$E_c = \varepsilon + 2t, \quad (94)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (95)$$

Якщо при моделюванні електронного пристрою буде потрібно врахувати змінний уздовж каналу провідності потенціал $U(x)$, це можна зробити шляхом додавання локального значення потенціалу U до кулонівського інтегралу (рис. 8).

Тепер, звичайно, трансляційна інваріантність порушується, дисперсійне співвідношення буде іншим, але новий гамільтоніан цілком придатний для чисельних розрахунків і задовільно описує фізику транспорту для потенціалів $U(x)$, які не дуже швидко змінюються в масштабі міжатомних відстаней.

Зі знайденими значеннями інтегралів ε (94) і t (95) легко виписати матрицю гамільтоніана $[H]$. Тепер обговоримо контактні матриці власних енергій. Основна ідея полягає в тому, щоб нескінченно протяжний провідник, описуваний гамільтоніаном $[H]$, замінити на провідник скінченної довжини, описуваний матрицею $[H + \Sigma_1 + \Sigma_2]$ з відкритими крайовими умовами на кінцях, передбачаючи цим «добрі контакти», що не створюють відбитих потоків (рис. 9).

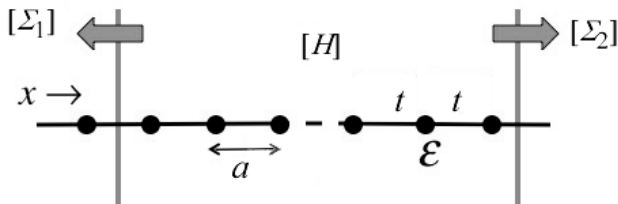


Рис. 9. Відкритим крайовим умовам відповідають «добрі контакти», які не створюють на кінцях провідника відбитих потоків

Проілюструємо цю ідею на одновимірних ґратах. Нехай провідник обмеженої довжини має n атомів, перенумерованих від 1 до n . Тоді лівий контакт 1 починається перед атомом ланцюжка з номером 1, а правий контакт 2 – після атома ланцюжка з номером n (рис. 10).

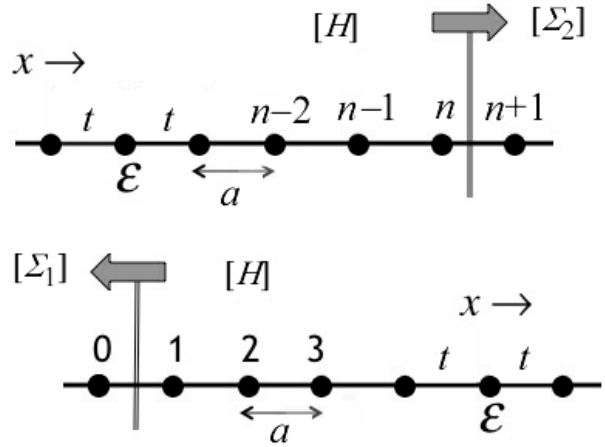


Рис. 10. До складання контактних матриць 1D провідника з n атомів

Контакти не мають вхідних потоків, тільки вихідні. В n -му рядку (90) рівняння Шредінґера (86) доданок $t\psi_{n+1}$ вже належить контакту 2, який, згідно з рівнянням (91), дає внесок в енергію, що дорівнює $t\psi_{n+1}/\psi_n$. Ця енергія і є власною енергією контакту 2. З урахуванням

$$\psi_{n+1} = \psi_n e^{ika} \quad (96)$$

замість (90) одержуємо:

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

де добавка до кулонівського інтегралу в n -му рядку (97) є власна енергія контакту 2 і входить вона як елемент (n, n) до відповідної контактної матриці

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

Таку ж власну енергію має контакт 1, а у відповідну контактну матрицю входить вона як елемент $(1, 1)$:

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} te^{ika} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix}. \quad (99)$$

Решта елементів матриць Σ_1 і Σ_2 нульова.

Балістичний 1D провідник. Енергетичні матриці H , Σ_1 і Σ_2 складені. Тепер можемо обчислити запізнену грінівську функцію G^R (6/[1]), випереджаючу функцію G^A (7/[1]), матриці Γ_1 і Γ_2 (53/[1]) і, нарешті, коефіцієнт проходження T_{12} і провідність $G(E)$ (82/[1]). Обчислення провідності балістичного 1D провідника є доброю перевіркою того, що контактні матриці були визначені правильно. Провідність повинна дорівнювати кванту провідності q^2/h , помноженому на число мод $M(E)$ 1D провідника, яке дорівнює одиниці (спіни ми не враховуємо). Згідно з (82/[1]) це означає, що в нашому прикладі коефіцієнт проходження повинен дорівнювати одиниці в області енергій

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

для якої справедливе дисперсійне співвідношення

$$E = \varepsilon + 2t \cos ka = E_c + 2t_0(1 - \cos ka), \quad (100)$$

і нулеві за межами цієї області (рис. 11, $U = 0$).

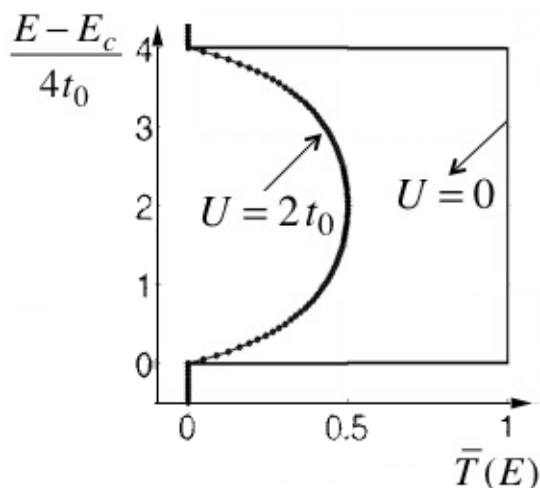


Рис. 11. Коефіцієнт проходження в балістичному 1D провіднику без розсіяння ($U = 0$) і з одним точковим центром розсіяння ($U = 2t_0$).

Густина станів 1D провідника. Обчислимо спочатку $D(E)$ 1D провідника, виходячи з елементарних міркувань. Згідно з виразом (82) роботи [13], число станів 1D провідника з довжиною L і зі значеннями імпульсу, менши-

ми, ніж задане значення p , дорівнює

$$N(p) = \frac{2L}{h/p}. \quad (101)$$

Густина станів звідси може бути записана як

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2L}{h} \frac{dp}{dE} = \frac{L}{\pi \hbar v}, \quad (102)$$

де була врахована та обставина, що для ізотропного закону дисперсії $E(p)$ швидкість $v = dE/dp$ (вираз (80) з роботи [13]).

Отримаємо цей же вираз для густини станів методом НРФГ. Для однорідного 1D провідника достатньо врахувати тільки один атом в ланцюжку (рис. 12). В цьому випадку роль довжини провідника L грає період ґратки a .

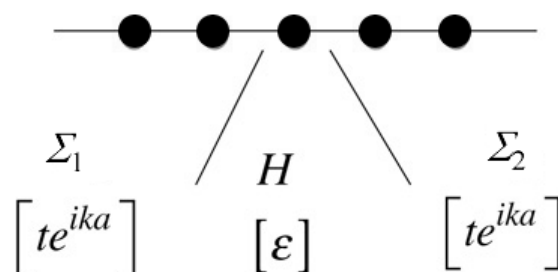


Рис. 12. До обчислення густини станів $D(E) = A/2p$ через спектральну функцію A (14/[1]).

Для запізненої грінівської функції маємо:

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

Записуючи експоненту через синус і косинус і враховуючи (100), отримаємо:

$$G^R = i / 2t \sin ka. \quad (104)$$

Маємо також

$$\hbar v = \frac{dE}{dk} = -2at \sin ka, \quad (105)$$

де перша рівність впливає з ізотропності 1D провідника, а друга - з (100). З урахуванням (105) для G^R остаточно маємо

$$G^R = \frac{i}{2t \sin ka} = \frac{-i}{\hbar v / a}, \quad (106)$$

а для випереджаючої функції Гріна

$$G^A = \frac{ia}{\hbar\nu}. \quad (107)$$

Звідси спектральна функція дорівнює

$$A = i[G^R - G^A] = \frac{2a}{\hbar\nu}, \quad (108)$$

а густина станів

$$D(E) = \frac{A}{2\pi} = \frac{a}{\pi\hbar\nu} \quad (109)$$

збігається з виразом (102), отриманим раніше з елементарних міркувань.

1D провідник з одним центром розсіяння.

В гамільтоніані центр розсіяння моделюємо шляхом додавання до кулонівського інтеграла одного з атомів ланцюжка постійного потенціалу U

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

При такій постановці задачі коефіцієнт проходження може бути обчислений аналітично (рис. 13).

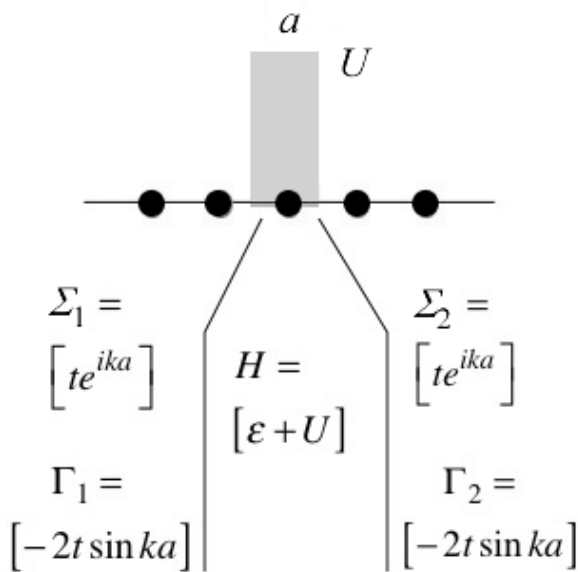


Рис. 13. До розрахунку коефіцієнта проходження в 1D провіднику з одним центром розсіяння методом НРФГ.

Контактні матриці 1×1 задані, за ними обчислимо Γ_1 і Γ_2 згідно з (53/[1]). Грінівська функція з урахуванням (100) дорівнює:

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

З неї комплексним спряженням отримуємо випереджаючу функцію G^A і відразу одержуємо коефіцієнт проходження:

$$\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2}. \quad (112)$$

З урахуванням (105) остаточно маємо:

$$\bar{T}(E) = \frac{(2t \sin ka)^2}{U^2 + (2t \sin ka)^2} = \frac{(\hbar\nu/a)^2}{U^2 + (\hbar\nu/a)^2}. \quad (113)$$

Результати обчислень у відсутності центру розсіяння ($U = 0$) і з його врахуванням ($U = 2t_0$) наведені на рис. 11.

Вираз для коефіцієнта проходження (113) корисно вивести також з елементарних міркувань (рис. 14).

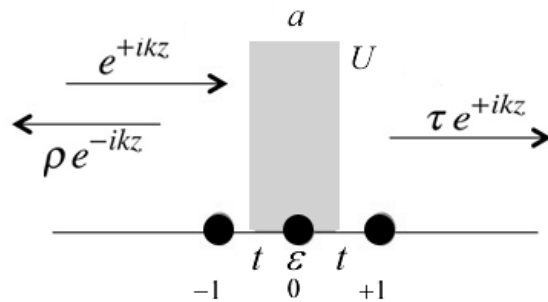


Рис. 14. До обчислення коефіцієнта проходження з умови неперервності хвильової функції.

Заради зручності, перенумеруємо атоми провідника так, щоб дефект знаходився на місці атома з номером 0. Падаючи на центр розсіяння, хвиля $\exp(+ikz)$ відбивається $\rho \cdot \exp(-ikz)$ з коефіцієнтом відбиття ρ і проходить далі $\tau \cdot \exp(+ikz)$ з коефіцієнтом проходження τ . З рівняння Шредінгера в гюккелівському наближенні маємо:

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

Із закону збереження й умови неперервності хвильової функції на дефекті ($z = 0$) маємо

$$1 + \rho = \tau = \psi_0. \quad (115)$$

Підстановка в (114) хвильових функцій на сусідніх з дефектом атомах з урахуванням (115) дає:

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

а після простих перетворень і перегруповувань з урахуванням (100) і (105) для коефіцієнта проходження τ одержуємо:

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

Після множення на його комплексно спряжене одержуємо вже виведений раніше методом НРФГ вираз для коефіцієнта проходження (113).

Моделювання 2D провідника. Серед фундаментальних експериментів 1980-х років, що привели до народження мезофізики, було вимірювання провідності балістичних 2D провідників, що виявилася цілочною пропорційною квантові провідності q^2/h . Для розуміння фізики й інтерпретації таких експериментів потрібна якомога простіша модель 2D провідника.

Для нашої мети, за аналогією з 1D провідниками, достатньо двовимірної моделі необмеженого однорідного провідника в наближенні сильного зв'язку з урахуванням взаємодії лише сусідніх атомів (рис. 15) в ортогональному базисі, - так званої гюккелівської моделі.

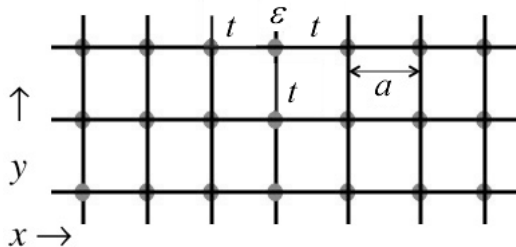


Рис. 15. Трансляційно інваріантна гратка атомів (з яких кожен постачає один електрон) з періодом a , що характеризується в наближенні Гюккеля двома параметрами – кулонівським інтегралом ε і резонансним інтегралом t .

Параметри моделі ε і t виберемо таким чином, щоб виконувалося стандартне дисперсійне співвідношення з ефективною масою

$$E(k_x, k_y) = E_c + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}. \quad (118)$$

Розв'язок рівняння Шредінгера (86) виберемо у вигляді:

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

де хвильовий вектор визначається його проекціями k_x і k_y у вибраній системі координат, а радіус-вектор вказує положення n -го атома в гратці. Підставляючи цей розв'язок у рівняння (87), одержуємо дисперсійне співвідношення

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

яке для гюккелівської моделі гратки дає

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

Користуючись тими ж міркуваннями, що й для одновимірного ланцюжка, для резонансного і кулонівського інтегралів як параметрів моделі одержуємо:

$$t = -\hbar^2 / 2ma^2, \quad (122)$$

$$\varepsilon = E_c - 4t \quad (123)$$

або, трохи інакше,

$$E_c = \varepsilon + 4t, \quad (124)$$

$$-t \equiv t_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (125)$$

Складання гюккелівського гамільтоніану H (рис. 16) не викликає утруднень, обговорити лише треба побудову контактних матриць для 2D провідника.

Проте спершу спробуємо зрозуміти причини появи сходинок у залежності коефіцієнта проходження від енергії. Просте пояснення цього експериментально спостережуваного факту може бути таким (див. вираз (105) роботи [13]).

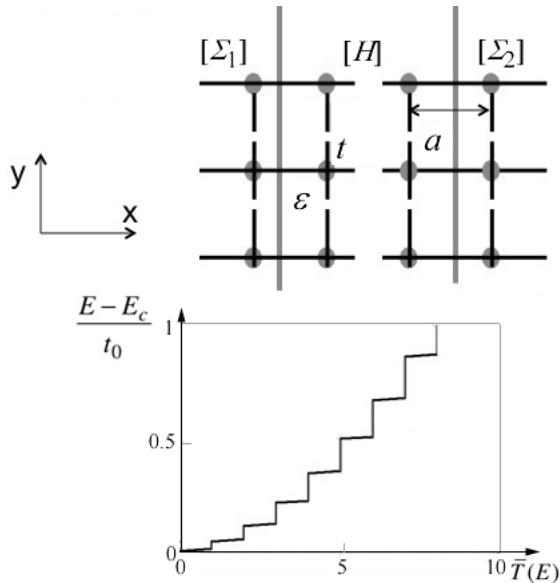


Рис. 16. Вичленування з двовимірної ґратки області власне провідника і контактів для методу НРФГ і результати розрахунку коефіцієнта проходження методом НРФГ при числі атомів по ширині провідника, рівному 25.

Для балістичного провідника коефіцієнт проходження є просто число мод $M(E)$, яке дорівнює половині числа де-бройлівських довжин хвиль, що укладаються в поперечному перерізі провідника W :

$$M = \text{Int} \left(\frac{2W}{h/p} \right) = \text{Int} \left(\frac{2W}{h} \sqrt{2mE'} \right), \quad (126)$$

де під $\text{Int}(x)$ мається на увазі найбільше ціле число, менше від значення x , а права частина (126) була виписана для параболічного закону дисперсії $E' = E - E_c = p^2/2m$. Експериментально при низьких температурах [14, 15] вимірюють число мод $M(E=\mu_0)$, яке, будучи за своєю фізичною природою цілочисельним, виявляє стрибки при зміні енергії $E = \mu_0$ і поперечного перерізу 2D провідника.

Правильна поведінка розрахункового коефіцієнту проходження із зростанням енергії (рис. 16), виявом чого є не тільки наявність сходинок, але і їхня рівноширинність, підтверджувана експериментальними даними [14, 15], свідчить про коректне визначення енергетичних матриць в розрахунку методом НРФГ.

Покажемо, як з'являються сходинки (рис. 16) і побудуємо гамільтоніан та контактні

матриці для 2D ґратки. Нехай провідник має p атомів по ширині і q атомів по довжині, тобто матриця провідника має розмірність $(p \times q)$. Такий 2D провідник умовно можна уявити собі як p сполучених паралельно 1D провідників, кожний завдовжки q . Матриця $(p \times q)$ є рядкова матриця довжини q , елементами якої є стовпчикові матриці довжини p . На рис. 17 зображений провідник з одним стовпцем розмірності $(p \times 1)$.

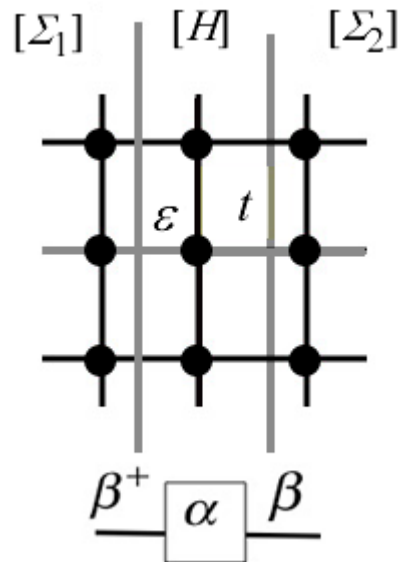


Рис. 17. Провідник розмірності $(p \times 1)$.

Кожний з q стовпців описується власною гюккелівською матрицею α порядку p . Наприклад, при $p = 3$ вона має вигляд

$$\alpha = \begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 \\ t & \varepsilon & t \\ 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix}. \quad (127)$$

Стовпці пов'язані один з одним резонансними інтегралами t . Розгляньмо зв'язок між стовпцями з сусідніми номерами n і $n + 1$. Цей зв'язок описується скалярною матрицею $\beta = tI$ порядку p , де I – одинична матриця. В нашій моделі, природно, $\beta = \beta^+$. Наприклад, при $p = 3$

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

Гамільтоніан H має блокову структуру. На його головній діагоналі розташовані однакові матриці α порядку p , а найближчі до неї діагоналі зверху і знизу заповнені матрицями β теж порядку p , решта елементів нульові. Якщо довжина провідника складає, скажімо, $q = 10$ атомів, а по ширині провідника розташовується $p = 5$ атомів, то порядок матриці H рівний $p \times q = 50$.

Розв'язання задачі на власні значення гамільтоніана H зводиться до діагоналізації матриці $[\alpha]$

$$[\tilde{\alpha}] = [V]^+ [\alpha] [V], \quad (129)$$

де стовпці матриці $[V]$ є власні вектори матриці $[\alpha]$, так що

$$\tilde{\alpha} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \quad (130)$$

Завжди можливе обернене перетворення з власного (інакше кажучи модового) базису в початковий ґратковий базис

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

Матриця β не зачіпається перетворенням базису, оскільки вона вже діагональна. Діагоналізація матриці α форми $(p \times p)$ призводить до занулення резонансних інтегралів t , що зв'язують рядки початкової матриці гамільтоніану, тобто до перетворення 2D провідника на p паралельно сполучених з контактами 1D провідників, кожний завдовжки q атомів (рис. 18) з енергіями $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_p$, які дорівнюють власним значенням матриці α :

$$\varepsilon_n = \varepsilon - 2t_0 \cos k_n a \quad (132)$$

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

Для кожного з p паралельних 1D провідників коефіцієнт проходження дорівнює одиниці в області енергій ($t_0 \equiv |t|$)

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

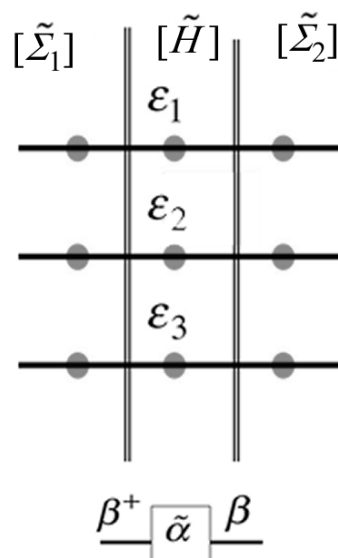


Рис. 18. 2D провідник в гюккелівському наближенні після діагоналізації гамільтоніану H .

як зображено на рис. 19. Додаючи коефіцієнти проходження для всіх p мод провідника, одержуємо залежність коефіцієнту проходження від енергії у вигляді висхідних сходинок у нижній частині графіка (рис. 16) і спадних сходинок у верхній частині графіка.

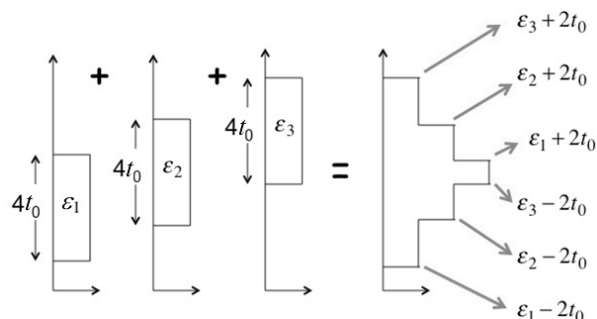


Рис. 19. До утворення сходинок (рис. 16) в залежності коефіцієнту проходження від енергії.

При моделюванні провідників n -типу зазвичай обчислюють нижню частину зони (рис. 16) і ми бачимо лише висхідні сходинок з енергіями $\varepsilon_n - 2t_0$.

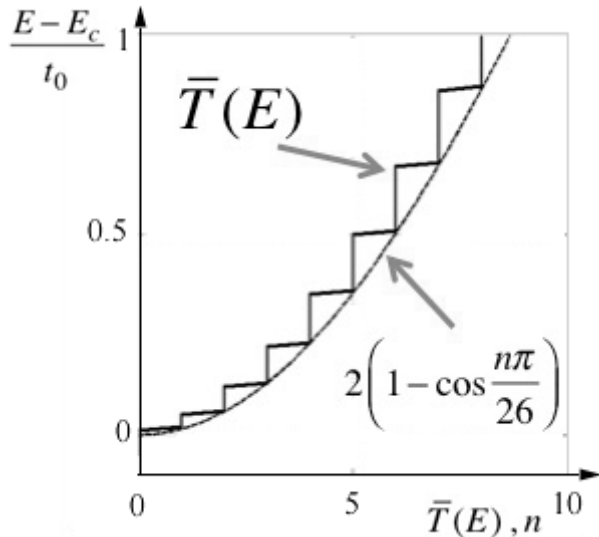


Рис. 20. Зіставлення чисельних результатів розрахунку коефіцієнта проходження методом НРФГ з аналітичною апроксимацією згідно з (134) при $p = 25$.

Використовуючи (132), (133) і (124), знаходимо положення сходинок:

$$\varepsilon_n - 2t_0 = E_c + 2t_0 \left(1 - \cos \frac{n\pi}{p+1} \right). \quad (134)$$

На рис. 20 результати розрахунку коефіцієнта проходження методом НРФГ при числі атомів по ширині провідника $p = 25$ (рис. 16) наведені разом з обвідною сходинок, обчисленою за (134) при тій же ширині провідника $p = 25$.

Представлення 2D/3D провідника у вигляді паралельних 1D провідників видається нам не тільки фізично коректним, але й винятково корисним підходом при інтерпретації експериментальних даних. Кожний з цих 1D провідників називають модою або підзоною з дисперсійним співвідношенням

$$E_n(k_x) = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_x a \quad (135)$$

як зображено на рис. 21.

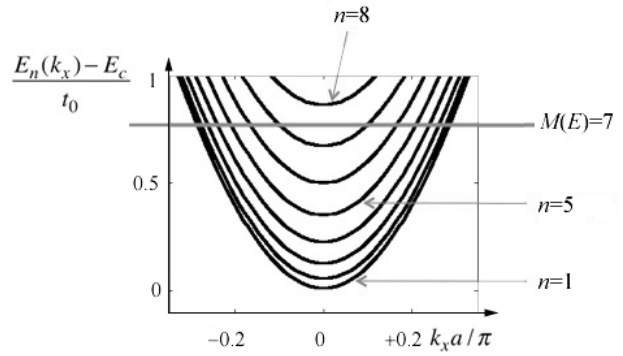


Рис. 21. Нижні вісім підзон гюккелівської моделі 2D провідника.

Дисперсійні співвідношення для підзон впливають із загального виразу (121) за тієї умови, що k_y набуває квантованих значень

$$k_y a = \frac{n\pi}{p+1}, \quad (136)$$

де кожне значення n породжує одну відповідну підзону (рис. 21).

Горизонтальна лінія, проведена при певній енергії E , перетинає число підзон, рівне подвоєному значенню мод при цій енергії, оскільки кожна мода породжує два перетини, один для стану з додатною швидкістю, а інший – з від’ємною.

Контактні власні енергії для 2D провідника. В ідеальному випадку контакти повинні бути такими, щоб електрони безперешкодно покидали провідник і не поверталися внаслідок відбиття від меж контактів. Ми розглянемо найпростішу модель таких контактів, яка зводиться до того, що контакт є природним продовженням самого провідника.

2D провідник ширини p еквівалентний p паралельним 1D провідникам після перетворення базису

$$[\tilde{X}] = [V]^+ [X] [V], \quad (137)$$

де матриця X в ґратковому базисі перетвориться на матрицю \tilde{X} в модовому базисі або навпаки

$$[X] = [V] [\tilde{X}] [V]^+, \quad (138)$$

як це було продемонстровано вище для

гамільтоніану H . В результаті для кожного з p незалежних 1D провідників легко виписується своя контактна матриця, а потім вони всі збираються в повну матрицю Σ .

В гюккелівській моделі 2D провідника кожний з p 1D провідників характеризується власною енергією контакту $t \cdot \exp(ika)$ з відповідним значенням ka для конкретного 1D провідника при певній енергії E . Для моди з номером n

$$E = \varepsilon_n - 2t_0 \cos k_n a, \quad (139)$$

отже, контактна матриця в модовому базисі запишеться як:

$$[\tilde{\Sigma}_1] = \begin{bmatrix} te^{ik_1 a} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & te^{ik_2 a} & 0 & \\ 0 & 0 & te^{ik_3 a} & \\ \dots & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (140)$$

а після перетворення в ґратковий базис матимемо (рис. 22):

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

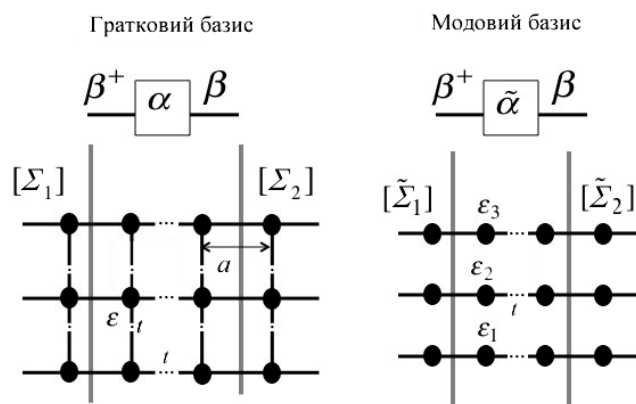


Рис. 22. До побудови контактних матриць у модовому базисі зі зворотним перетворенням у ґратковий базис.

Викладений вище метод побудови контактних матриць застосовний для однорідних ґраток, але не придатний у загальному випадку, оскільки далеко не завжди вдається одним і тим же перетворенням базису діагоналізувати одночасно і матрицю α і матрицю β . А в роз-

глянутому нами випадку матриця β взагалі скалярна, тобто вже діагоналізована. Прикладом такого роду може служити ґратка графену.

Графен. В розглянутих однорідних ґратках (рис. 15) кожний атом знаходиться в одному і тому ж оточенні. В правильній гексагональній ґратці графену (рис. 23) є два сорти атомів. Атоми сортів А і В перебувають у різному оточенні. У атома сорту А зліва один атом, а справа два, а у атома сорту В навпаки. Інваріантність трансляції графенової ґратки забезпечують два атоми, які створюють елементарну комірку у вигляді правильного ромба.

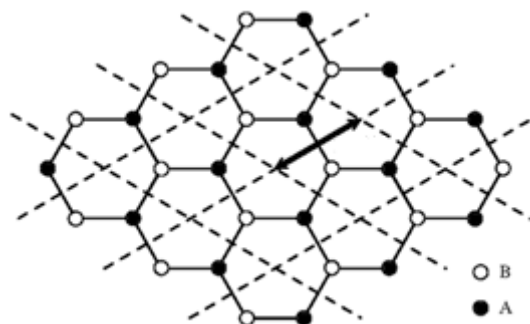


Рис. 23. Елементарна комірка ґратки графену (що не є ґраткою Браве) і вектори трансляції для ґраток Браве, сформованих атомами сортів А і В.

Враховуючи наявність двох нееквівалентних атомів в елементарній комірці, рівняння Шредінґера (86) перепишемо у вигляді

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

де $\{\psi\}_n$ - вектор-стовпець форми (2×1) , компоненти якого відповідають двом атомам сортів А і В, які створюють елементарну комірку з номером n . Гамільтоніан форми (2×2) встановлює зв'язок між атомами сорту А і В комірки з номером n і атомами сорту А і В комірки з номером m .

Розв'язок запишемо у вигляді

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

Після підстановки його в (142) одержуємо:

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

де гамільтоніан з урахуванням фазового множника

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

також має форму (2 x 2). Обчислимо його, скориставшись вирізкою з графену, що містить комірку в оточенні її чотирьох найближчих комірок-сусідів (рис. 24).

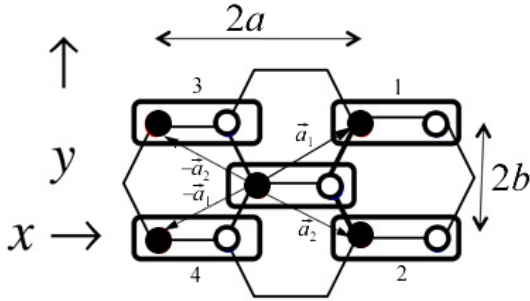


Рис. 24. Елементарна комірка графену з номером 0 в оточенні найближчих чотирьох комірок з номерами 1, 2, 3, 4.

Нам будуть потрібні також два вектори

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\hat{x} + b\hat{y}, \\ \vec{a}_2 &= a\hat{x} - b\hat{y}, \end{aligned} \quad (146)$$

пов'язані з геометричними параметрами графенової ґратки

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

де a_0 – довжина σ -зв'язку двох сусідніх вуглецевих атомів у графені, яка дорівнює 1.42 \AA .

Внески в гамільтоніан (145) від п'яти комірок з урахуванням векторів (146) запишемо як (рис. 24):

$$\begin{aligned} & e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \\ & + \begin{bmatrix} \varepsilon & t \\ t & \varepsilon \end{bmatrix} \\ & + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \begin{bmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t & 0 \end{bmatrix} e^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \end{aligned} \quad (148)$$

Їх потрібно підсумовувати разом з відповідними фазовими множниками. У центральній комірці фазовий множник відсутній, оскільки це діагональний внесок у гамільтоніан ($n = m = 0$). Взаємодія комірок з $n = 0$ і $m = 1$ в гюккелівській моделі зводиться лише до одного резонансного інтеграла t між атомом В центральній комірці і атомом А комірки $m = 1$. Аналогічно для взаємодії центральній комірці з коміркою $m = 2$. Відрізняються вони тільки фазовими множниками: зсув першої комірки щодо центральній визначається вектором \vec{a}_1 , а зсув другої – вектором \vec{a}_2 (рис. 24). Аналогічно одержуємо внески від комірок 3 і 4.

Підсумовування п'яти матриць (148) дає для гамільтоніана (145) вираз:

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

де

$$h_0 \equiv t + te^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + te^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \quad (150)$$

або з урахуванням (146)

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

Діагоналізація (144) з урахуванням (149) дає дисперсійне співвідношення:

$$E(\vec{k}) = \varepsilon \pm |h_0(\vec{k})|. \quad (152)$$

Його легко привести до звичного для графену вигляду

$$E = \pm v_0 p, \quad (153)$$

де v_0 – константа розмірності швидкості, що становить за величиною приблизно $1/300$ від швидкості світла, шляхом лінеаризації h_0 поблизу діраківських точок, у яких

$$h_0(\vec{k}) = 0, \quad (154)$$

отже

$$E(\vec{k}) = \varepsilon. \quad (155)$$

У цих точках рівноважний електрохімічний потенціал розташований при енергії для нейтральних систем, у яких рівно половина рівнів заповнена (валентна зона), а інша половина – порожня (зона провідності). Діраківських точок в елементарній комірці - дві (кожна з шести точок, зображених на рис. 25, рівною мірою належить трьом сусіднім шестикутникам).

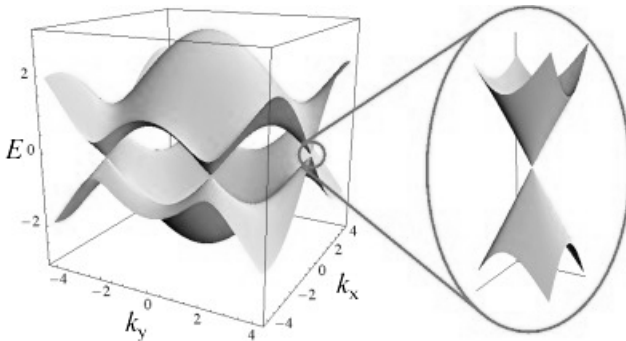


Рис. 25. Зонна структура графену. Збільшеним масштабом показаний лінійний спектр носіїв струму в околиці точки Дірака $k_x a = 0$ і $k_y b = +2\pi/3$ (рис. 26).

Виберемо пару точок Дірака, що відповідає $k_x = 0$. Тоді гамільтоніан (151) обертається в нуль при $k_y b = \pm 2\pi/3$.

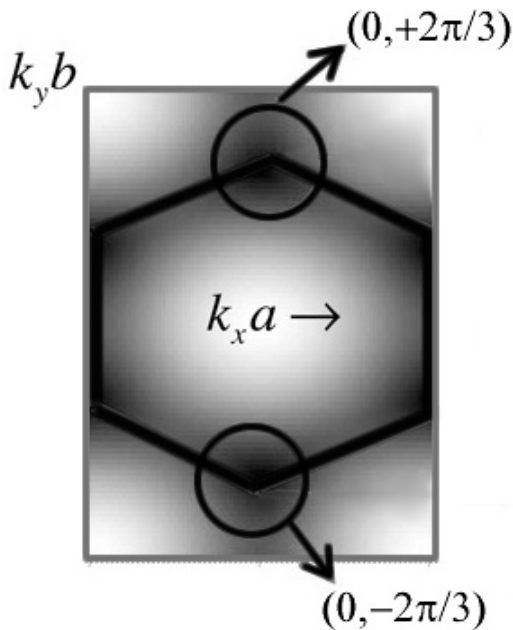


Рис. 26. Переріз зонної структури графену в околиці діраківських точок (область поблизу них зачорнено).

Розклад гамільтоніану (151) в ряд Тейлора поблизу цієї пари точок дає:

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

де

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

Після нескладних перетворень остаточно одержуємо дисперсійне співвідношення в околиці діраківських точок:

$$E = \varepsilon \pm at\sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (158)$$

що при $\varepsilon = 0$ еквівалентне стандартному записові (153). Далі розглянемо побудову контактних матриць для графену.

Загальний метод побудови контактних матриць. Будь-який 2D провідник (з однаковим по всій довжині перерізом) по ширині може бути розбито на фрагменти, що повторюють один одного по всій довжині провідника. Наприклад, у випадку графену таким фрагментом може бути вирізка, що повторюється по всій довжині графену й показана на рис. 27. Фрагмент описується матрицею гамільтоніану $[H] \equiv \alpha$ порядку n за числом використовуваних базисних функцій. Наприклад, для фрагменту на рис. 27 $n = 12$ в гюккелівському наближенні. Матриці фрагментів α зв'язуються між собою матрицями β .

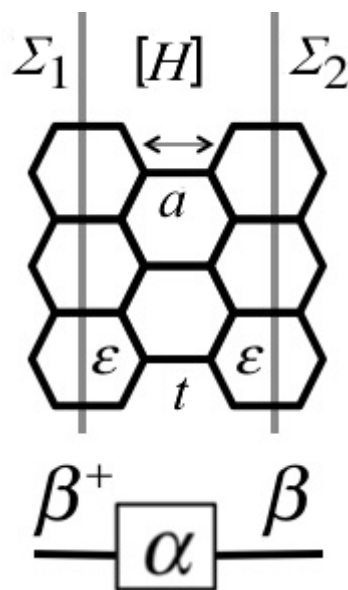


Рис. 27. До побудови контактних матриць для графену.

Розглянемо праву межу провідника з контактом (рис. 28).

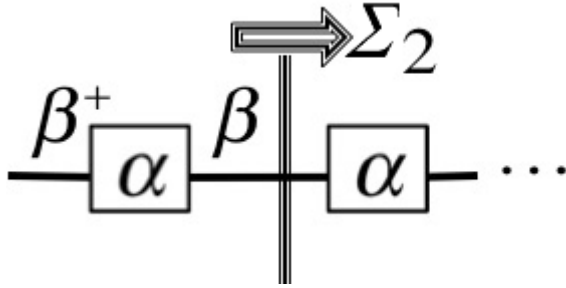


Рис. 28. Права межа провідника з контактом.

Контактна блокова матриця скрізь нульова, окрім останнього діагонального елемента з номером n :

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

В цьому ненульовому блоці g_2 називають межевою (surface) функцією Гріна для контакту 2. Обчислюють її ітераційно з рівняння

$$[g_2]^{-1} = (E + i0^+)I - \alpha - \beta^+ g_2 \beta, \quad (160)$$

де 0^+ – нескінченно мале додатне число, вибором якого управляють збіжністю ітераційного процесу, а доданок $i0^+I$ забезпечує від’ємність уявних частин і неермітовість матриць g і Σ .

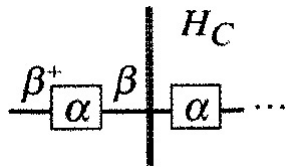


Рис. 29. Права межа провідника з контактом у загальному випадку.

Розгляньмо виведення рівняння (160) в більш загальному випадку (рис. 29), коли останній фрагмент провідника пов’язаний з необмеженим контактом, опишемо гамільтоніаном H_c

$$\begin{bmatrix} \alpha & B \\ B^+ & H_c \end{bmatrix}, \quad (161)$$

де

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

Результуюча запізнена функція Гріна обчислюється з рівності

$$\begin{bmatrix} A & -B \\ -B^+ & A_c \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} G^R & \dots \\ \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (163)$$

де

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

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

Для обчислення G^R з (163) звернімося до очевидної рівності для блокових матриць

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} \times \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}, \quad (166)$$

з якої після нескладних перетворень отримаємо:

$$p = (A - BD^{-1}C)^{-1}. \quad (167)$$

Скориставшись матричною рівністю (167), для G^R з (163) маємо

$$G^R = [A - BA_c^{-1}B^+]^{-1}, \quad (168)$$

отже, контактна матриця запишеться як:

$$\Sigma = BA_c^{-1}B^+. \quad (169)$$

Оскільки матриця B (162) має єдиний ненульовий елемент β , маємо

$$\Sigma = \beta g \beta^+, \quad (170)$$

де g є верхнім блоком матриці $[A_c]^{-1}$

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

Шукане рівняння (160) виходить, якщо рівняння (168) застосувати до матриці $N \times N$ (171), розглядаючи перший блок A як про-

відник, а інші $(N - 1) \times (N - 1)$ блоків як контакт. Тоді

$$g_N = [A - \beta g_{N-1} \beta^+]^{-1}, \quad (172)$$

де g_N відповідає g в правій частині рівняння (171), якщо матриця ліворуч має розмірність $N \times N$. Рівняння (172) розв'язується ітеративно, починаючи з відомого g_1 . Далі обчислюємо g_2 , g_3 тощо, аж поки g_N дорівнюватиме g_{N-1} з наперед заданою точністю, даючи розв'язок рівняння (160):

$$g = [A - \beta g \beta^+]^{-1}. \quad (173)$$

Корисно отримати вже відоме нам значення Σ для однорідного 1D провідника, скориставшись загальним методом побудови контактних матриць Σ згідно з рівнянням (170). Спочатку знайдемо g з рівняння (173), в якому $A = EI - \alpha$. Для однорідного провідника $\alpha = \varepsilon$, $\beta = t$, $I = 1$, так що:

$$g^{-1} = E - \varepsilon - t^2 g$$

або інакше

$$t^2 g^2 - (E - \varepsilon) g + 1 = 0,$$

розв'язком якого є

$$g = \frac{(E - \varepsilon) \pm \sqrt{(E - \varepsilon)^2 - 4t^2}}{2t^2} = \frac{1}{t} \left(\cos ka \pm \sqrt{\cos^2 ka - 1} \right) = \frac{e^{\pm ika}}{t}, \quad (174)$$

де ми скористалися дисперсійним співвідношенням для однорідного 1D провідника (92). Підставляючи (174) в (170), одержуємо вже відомий нам вираз для однорідного провідника $t \cdot \exp(ika)$, де в показнику експоненти знак «+» вибраний з фізичних міркувань.

Балістична провідність графену. Як ілюстративний приклад наведемо результати розрахунку коефіцієнта проходження і густини станів методом НРФГ зображені на рис. 31. Звертає на себе увагу висока густина станів при $E = 0$ для зигзагоподібної конфігурації графенової стрічки. Це так звані крайові локальні стани поблизу рівня Фермі, відсутні у кріслоподібній конфігурації [18, 19].

ки проводилися для стрічок шириною $W = 53$ нм з резонансним інтегралом $t_0 = 2.7$ eВ.

Оскільки ідеальні графенові стрічки є балістичними провідниками, то коефіцієнти проходження дорівнюють числу мод

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

де було використано дисперсійне співвідношення для графену (153). Швидкість v_0 вважаємо рівною 10^6 м/с [17].

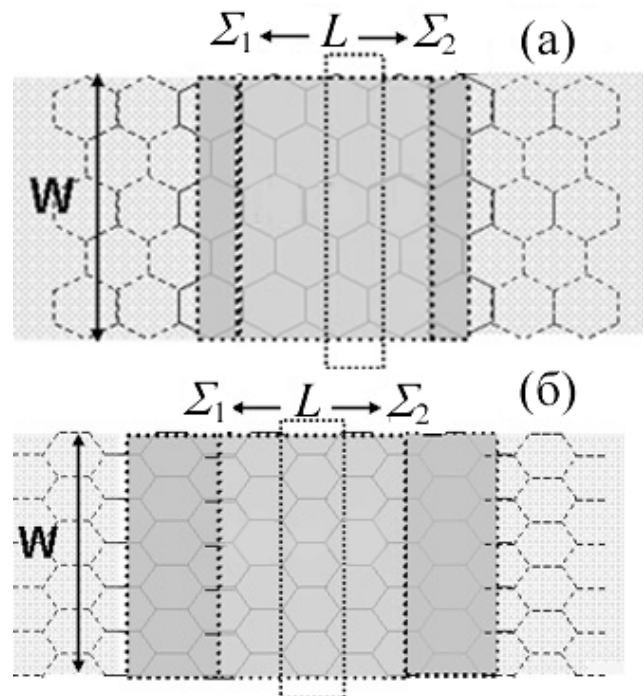


Рис. 30. Вибір повторюваних фрагментів (показані прямокутниками, що виступають за межі ширини стрічки W) двох конфігурацій меж – зигзагоподібної (а) і кріслоподібної (б).

Результати розрахунку коефіцієнта проходження і густини станів методом НРФГ зображені на рис. 31. Звертає на себе увагу висока густина станів при $E = 0$ для зигзагоподібної конфігурації графенової стрічки. Це так звані крайові локальні стани поблизу рівня Фермі, відсутні у кріслоподібній конфігурації [18, 19].

Нашою метою не є аналіз результатів розрахунку, тим паче, що роль конфігурації меж і ширини графенових стрічок детально вивча-

лися в багатьох роботах [18 – 23]. Відзначмо лише високу правдоподібність результатів, одержуваних навіть у рамках такої найпростішої моделі графену, як наближення сильного зв'язку в ортогональному базисі з параметричним урахуванням взаємодії лише сусідніх атомів.

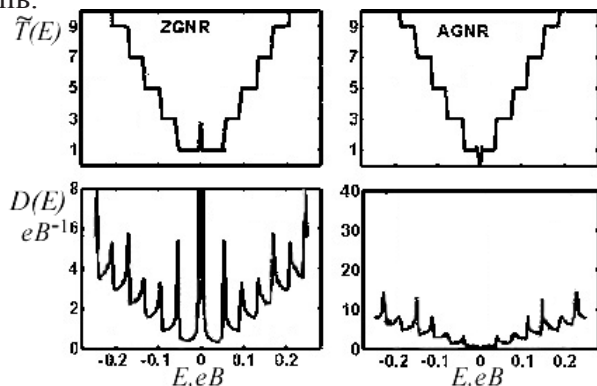


Рис. 31. Коефіцієнт проходження і густина станів для двох конфігурацій меж – зигзагоподібної ZGNR (ліворуч) і і крилоподібної AGNR (праворуч).

Також відзначмо, що методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів нещодавно отримані [23] розподіли густини валентних електронів та електронні енергетичні спектри для графенових нанострічок, декорованих воднем, фтором або киснем. Продемонстровано відкриття забороненої зони для графенових нанострічок шириною в 9.23 \AA з зигзагоподібним краєм, при її відсутності у необмеженій графеновій площині. Заборонена зона зі збільшенням ширини графенових нанострічок зменшується. Для графенових нанострічок, декорованих по краях воднем, заборонена зона зникає. Продемонстровано, що взаємодія атомів водню з атомами вуглецю площини графенових нанострічок, що координовані у відповідності до sp^2 -гібридизації, приводить до локальних змін гібридизації до типу sp^3 .

Ці результати підтверджують висновки [24] щодо можливості «інженерії» графенових плівок з метою внесення локальних збурень, які призводять до відкриття забороненої зони. Такі задачі є принципово важливими в контексті створення масової вуглецевої електроніки,

і розглянуті вище методи НРФГ виявляються вельми перспективними для розрахунку реальних графенових систем.

За межами нашого огляду залишилися такі важливі питання, як квантовий ефект Холла, дефазування при пружному транспорті, кулонівська блокада, переплутані стани і квантові обчислення, алгоритми реалізації методу НРФГ і багато інших, які ми маємо намір розглянути в подальших статтях.

На завершення наголосимо: 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.

Один із авторів (МВС) вдячний НАН України й УНТЦ за підтримку, надану в рамках виконання проекту № 5716 «Розвиток графенових технологій і дослідження базованих на графені наноструктур для наноелектроніки й оптоелектроніки».

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., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: метод нерівноважних функцій Гріна у матричному зображенні. I. Теорія // Sensor Electronics Microsyst. Techn. – 2013. – V. 4(10), N 3. – P. 22-35.
2. Datta Supriyo. **Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport.** – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 474.
3. 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.
4. *Кругляк Ю.А., Квакуш В.С., Дядюша Г.Г., Хильченко В.И.* Методы вычислений в квантовой химии. Расчет π -электронной структуры молекул простыми методами молекулярных орбиталей // Киев: Наукова думка. – 1967. – 150 с.
 5. *Kruglyak Yuri A., Ukrainsky I.I.* Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method // Intern. J. Quantum Chem. – 1970. – V. 4, N 1. – P. 57 – 72.
 6. *Украинский И.И., Кругляк Ю.А.* Изучение электронной структуры альтернантных радикалов методом расщепленных орбиталей // УФЖ. – 1970. – Т. 15, N 7. С. 1068 – 1081.
 7. *Kventsel G.F., Kruglyak Yuri A.* Local Electronic States in Long Polyene Chains // Theor. Chim.Acta. – 1968. – V. 12. – P. 1 – 17.
 8. *Стрїха М.В.* Фїзика графену: стан і перспективи // Sensor Electronics Microsyst. Techn. – 2010. – Т. 1(7), N 3. – С. 5 – 13.
 9. *Кругляк Ю.А., Кругляк Н.Е.* Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2012, В. 13. – С. 207 – 218.
 10. *Kruglyak Yuri A., Dyadyusha G.G.* Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration // Theor. Chim.Acta. – 1968. – V. 10. – P. 23 – 32.
 11. *Kruglyak Yuri A., Dyadyusha G.G.* Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. II. Results of Calculations and Discussion // Theor. Chim.Acta. – 1968. – V. 12. – P. 18–28.
 12. *Кругляк Ю.А., Дядюша Г.Г.* О поворотных барьерах концевых групп в органических кумуленах // Теор. эксперим. химия. – 1968. – Т. 4, N 4. – С. 431 – 437.
 13. *Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стрїха М.В.* Уроки наноелектронїки: виник-нення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsyst. Techn. – 2012. – V. 3(9), N 4. – P. 5 – 29.
 14. *van Wees B.J., van Houten H., Beenakker C.W.J., Williamson J.G., Kouwenhoven L.P., van der Marel D., Foxon C.T.* Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V. 60, N 9. – P. 848–850.
 15. *Wharam D.A., Thornton T.J., Newbury R., Pepper M., Ahmed H., Frost J.E.F., Hasko D.G., Peacock D.C., Ritchie D.A., Jones G.A.C.* One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1988. – V. 21, N 8. – P. L209 – L214.
 16. *Mojarad R.G., Zainuddin A.N.M., Klimeck G., Datta S.* Atomistic non-equilibrium Green's function simulations of graphene nano-ribbons in the quantum hall regime // J. Comput. Electron. – 2008. – V. 7. – P. 407 – 410.
 17. *Berger C., Zhimin Song, Xuebin Li, Xiaosong Wu, Brown N., Naud C., Mayou D., Tianbo Li, Hass J., Marchenkov A.N., Conrad E.H. First P.N., de Heer W.A.* Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene // Science. – 2006. – V. 312. – P. 1191 – 1196.
 18. *Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K.* Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge // J. Phys. Soc. Japan. – 1996. – V. 65, N 7. – P. 1920.
 19. *Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54, N 24. – P. 17954.

20. *Brey Luis, Fertig H.A.* Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 73, N 23. – P. 235411.
21. *Wakabayashi K., Takane Y., Yamamoto M., Sigrist M.* Electronic transport properties of graphene nanoribbons // *New J. Phys.* – 2009. – V. 11. – P. 095016.
22. *Koch, M., Ample F., Joachim C., Grill L.* Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon // *Nature Nanotechnology.* – 2012. – V. 7. – P. 713 – 717.
23. *Балабай Р.М.* Електронні властивості функціоналізованих графенових нанострічок // *УФЖ.* – 2013. – Т. 58, № 4. – С. 389 – 397.
24. *Литовченко В.Г., Стріха М.В., Клюй М.І.* Модифіковані графеноподібні плівки як новий клас напівпровідників зі змінною шириною забороненої зони // *УФЖ.* – 2011. – Т. 56, № 2. – С. 178 – 182.

Надійшла до редакції 05.12.12
Прийнята до публікації 03.04.2013