

# 4

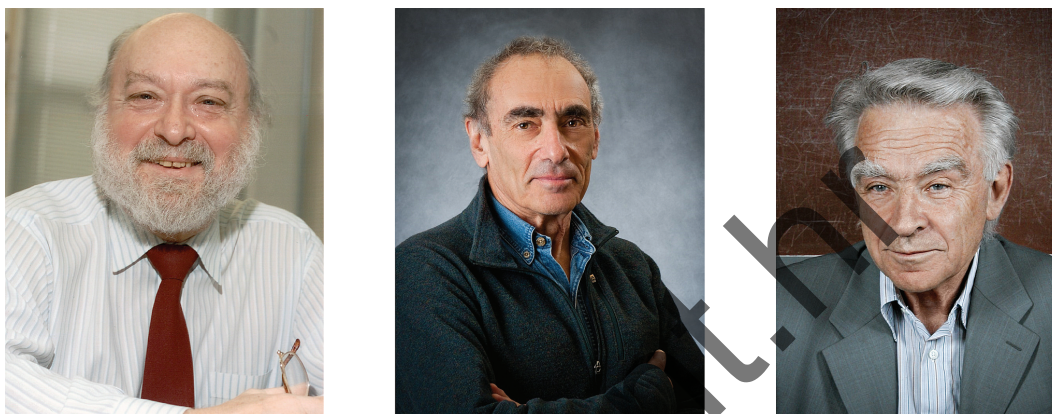
## KOHERENTNI KVANTNI TRANSPORT

### 4.1. Koherentni transport i neinterakcijski NEGF formalizam

Gradeći na materijalu izloženom u drugom i trećem poglavlju o temeljima kvantne mehanike te osnovama strukture energijskih vrpca, statističke mehanike i principa toka nosilaca, u ovom poglavlju se izlaže NEGF formalizam za koherentni kvantni transport. Pod koherentnim transportom podrazumijevamo izostanak bilo kakvih interakcija elektrona s fononima, drugim elektronima i ostalim centrima raspršenja pa se prilikom koherentnog transporta elektronu ili elektronskom valu ne mijenja ni faza, ni moment, ni energija. Međutim, utjecaj spajanja kontakata na izolirani nanosustav bit će opisan istim formalizmom interakcija koji je u originalnom NEGF formalizmu bio primijenjen na interakcijske sustave.

#### 4. Koherentni kvantni transport

Interakcijski NEGF formalizam je originalno nastao radovima i knjigama koje su objavili Paul Martin i Julian Schwinger (Martin i Schwinger, 1959.) te Leo Kadanoff i Gordon Baym (Kadanoff i Baym, 1962.), doktorski studenti prve dvojice, a zaokružen je za primjene u sustavima izvan termodinamičke ravnoteže formalizmom koji je objavio Leonid Keldysh (Keldysh, 1965.). Utemeljitelji NEGF formalizma Kadanoff, Baym i Keldysh prikazani su na Slici 4.1.

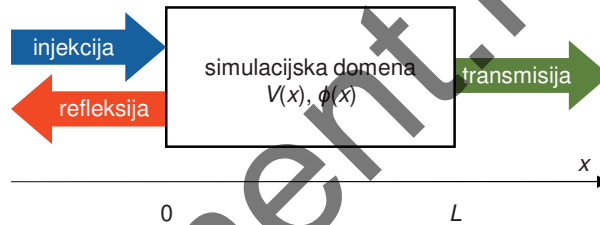


**Slika 4.1** L. Kadanoff (uz dozvolu Univ. of Chicago Library), G. Baym (uz dozvolu Department of Physics, University of Illinois Urbana-Champaign) i L. Keldysh (uz dozvolu ©Wiley-VCH)

Originalni NEGF formalizam nastao je iz potrebe opisa kompleksnih višečestičnih kvantnomehaničkih sustava s interakcijama, bilo u ravnoteži ili izvan nje, a temelji se na naprednim znanjima iz kvantne statističke mehanike, druge kvantizacije, svojstava propagatora, Feynmanove dijagramatske tehnike itd. Međutim, ovo poglavlje će izložiti NEGF formalizam za neinterakcijske sustave, odnosno za koherentni transport, korištenjem heurističkog pristupa koji je razvio Supriyo Datta (Datta, 1995.) i (Datta, 2005.). Ono s čim će se složiti fizičari jest da ovakav pristup nije zamjena za rigoroznu teoriju i Kadanoff-Baym-Keldysheve jednadžbe, ali ovim putem dolazimo do istog rezultata koji je usto pristupačniji inženjerima elektrotehnike i drugim zainteresiranim čitateljima koji nemaju potrebna predznanja formalizma druge kvantizacije i kvantne statističke fizike. Dattin pristup podrazumijeva da se pri izvodu NEGF formalizma za koherentni transport koristi jednočestična slika i jednostavni kinetički argumenti u stacionarnom stanju sustava, najčešće definirani i primijenjeni na elektronske ravne valove.

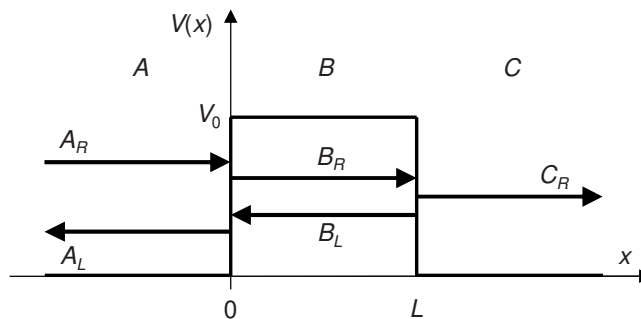
## 4.2. Transmisija kroz potencijalnu barijeru

Unutar kvantnog transporta, elektroni opisani u potpunosti kvantnomehanički su injektirani u simulacijsku domenu nanometarskih dimenzija, npr. atomski lanac ili kanal nanotransistora, kako je ilustrirano na Slici 4.2 za 1D nanosustav duljine  $L$ . Dio elektrona ili elektronskog vala se reflektira (za  $x < 0$ ), a dio transmitira (za  $x > L$ ) što uzrokuje tok struje. U slučaju transporta kroz strukturu ne vrijede zatvoreni rubni uvjeti na valnu funkciju,  $\phi(x < 0) = \phi(x > L) = 0$ , nego moramo definirati **otvorene rubne uvjete** (engl. *open boundary conditions*, OBC) koji će biti u stanju opisati transport u nanosustavu koji je s vanjskim svijetom povezan preko električkih kontakata.



Slika 4.2 Ilustracija simulacijske domene s komponentama elektronskih valova

Pri izvodu glavne jednadžbe NEGF formalizma problematiku će ilustrirati primjer transporta odnosno tuneliranja kroz potencijalnu barijeru. Razmotrimo slučaj konačne pravokutne potencijalne barijere visine  $V_0$  i širine  $L$  prikazan na Slici 4.3. Ako je potencijal u nekom području homogen (konstantan), generalno rješenje Schrödingerove jednadžbe bit će ravni val, opisan u odjeljku 2.4, odnosno linearna



Slika 4.3 Potencijalna barijera s oznakama komponenti elektronskih valova

#### 4. Koherentni kvantni transport

kombinacija eksponencijalnih funkcija. Za  $E > V_0$  radi se o kompleksnim funkcijama, a za  $E < V_0$  radi se o realnim eksponencijalima. Za slučaj na Slici 4.3 valne funkcije u pripadnim područjima A, B i C glase:

$$\phi_A(x) = A_R e^{ikx} + A_L e^{-ikx} \quad (4.1)$$

$$\phi_B(x) = B_R e^{\kappa x} + B_L e^{-\kappa x} \quad (4.2)$$

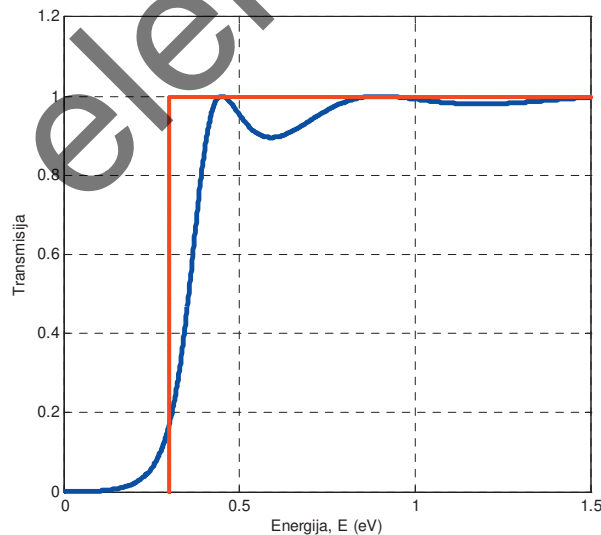
$$\phi_C(x) = C_R e^{ikx} \quad (4.3)$$

uz  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  i  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Postavljanjem rubnih uvjeta na kontinuiranost valne funkcije i njene prve derivacije na granicama područja, za **vjerojatnost transmisije** iz područja A u područje C vrijedi

$$T = |C_R|^2 \quad (4.4)$$

što nakon kraćeg izvoda daje sljedeće izraze ovisno o energiji čestice

$$T = \begin{cases} \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_1 L)}{4E(E - V_0)}}, & \text{za } E > V_0 \\ \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\kappa L)}{4E(V_0 - E)}}}, & \text{za } E < V_0. \end{cases} \quad (4.5)$$



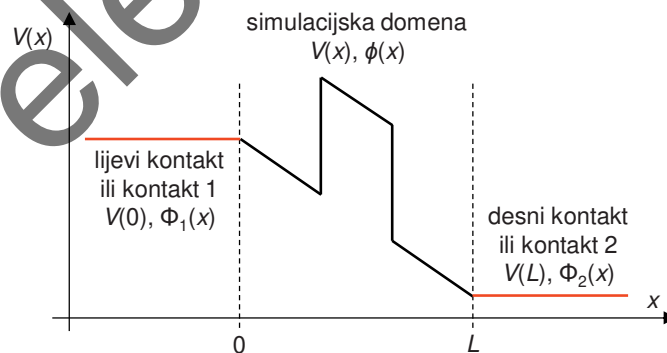
**Slika 4.4** Vjerojatnost transmisije kroz potencijalnu barijeru u ovisnosti o energiji čestice

Ovisnost vjerojatnosti transmisije o energiji, dobivena u (4.5), prikazana je na Slici 4.4 za  $V_0 = 0,3$  eV. U klasičnoj fizici čestica s energijama manjim od 0,3 eV doživljava totalnu refleksiju, a s energijama višim od vrha barijere totalnu transmisiju. Posljedice kvantnomehaničkog tretmana problema su u suprotnosti s klasičnom fizikom i uključuju činjenice da postoji transmisija i za  $E < V_0$ , koju zovemo **tuneliranje**, ali postoji i refleksija za  $E > V_0$ . Transmisija ima oscilacije i totalna transmisija, odnosno  $T(E) = 1$  postoji samo za slučajeve kada vrijedi  $k_1 L = n\pi$ .

Navedeni analitički postupak vrijedi samo za lokalno homogene potencijale jer *ansatz* ili pretpostavka ravnog vala vrijedi samo u tom slučaju. Međutim, u realnim nanoelektroničkim strukturama postoji narinuti napon, odnosno električno polje, pa potencijal neće biti konstantan, a u aktivnim elektroničkim nanokomponentama nije ni linearan. Kako riješiti ovaj problem?

### 4.3. Posljedice spajanja kontakta

Simulacijskoj domeni možemo dodati polubeskonačna područja konstantnog ili ravnog potencijala s lijeve i desne strane kako je ilustrirano na Slici 4.5. Ova područja zovu se **kontakti** ili **rezervoari** i nalaze se u stanju lokalne termodinamičke ravnoteže s definiranim elektrokemijskim potencijalom ili Fermijevom energijom.

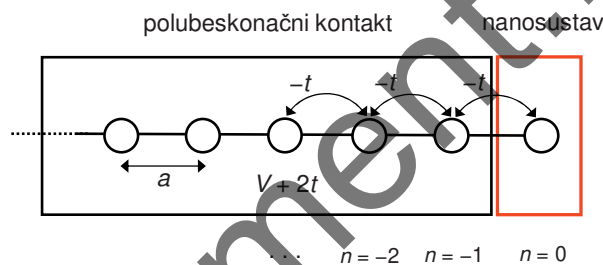


Slika 4.5 Ilustracija simulacijske domene sa spojenim kontaktima

Za izvod koji slijedi definiramo da je lijevi kontakt na potencijalu  $V(0)$  s ravnim valom  $\Phi_1(x)$ , a desni kontakt je na potencijalu  $V(L)$  s ravnim valom  $\Phi_2(x)$ . Između dvaju kontakata nalazi se nanosustav ili simulacijska domena koju modeliramo,

npr. kanal tranzistora, čije je stanje opisano valnom funkcijom  $\phi(x)$ . Za sva tri područja rješava se diskretizirana Schrödingerova jednadžba metodom konačnih razlika kako je opisano u odjeljku 2.6. U nastavku se fokusiramo na najjednostavniju moguću 1D strukturu: samo jedan polubeskonačni kontakt (lijevi, kontakt 1) spojen na nanosustav koji čini samo jedno stanje, npr. jedan izolirani atom s jednom orbitalom ili kanal tranzistora opisan samo jednom prostornom točkom. Ovim pristupom ćemo na jednostavan način doći do oblika Schrödingerove jednadžbe koji uključuje utjecaj jednog kontakta, čime ćemo na heuristički način doći do Greenove funkcije nanosustava.

Neka je zadana 1D struktura kao na Slici 4.6, s polubeskonačnim kontaktom ulijevo, i nanosustavom koji ima samo jedno stanje za TB hamiltonijan ili jednu točku za EMA hamiltonijan. Struktura energijskih vrpca je aproksimirana EMA modelom i radi jednostavnosti uzimamo da je efektivna masa jednaka u oba područja iz čega slijedi isti parametar preklapanja,  $-t$  uz  $t > 0$ , u cijelom sustavu.



**Slika 4.6** Shematski prikaz 0D nanosustava spojenog na beskonačni 1D kontakt za izvod diskretne Schrödingerove jednadžbe s utjecajem kontakta

Jednadžba za izoliranu strukturu glasi

$$E\phi = H\phi \quad (4.6)$$

što prelazi u

$$E\phi_0 = (V + 2t)\phi_0 \quad (4.7)$$

jer se radi o samo jednoj točki u  $n = 0$ , gdje radi preglednosti indekse ostavljamo samo u valnim funkcijama. Ako je kanal povezan na kontakt, onda postoji doprinos kontakta u Schrödingerovoj jednadžbi kanala, i to samo u jedinjoj točki  $n = 0$ . Doprinos preklapanja kontakta i kanala iznosi  $-t$  pa vrijedi

$$E\phi_0 = (V + 2t)\phi_0 - t\Phi_{-1}, \quad (4.8)$$

gdje je  $\Phi_{-1}$  valna funkcija kontakta u točki  $n = -1$ , jer je ta točka prva susjedna točki  $n = 0$ . Valne funkcije u kontaktu zadovoljavaju beskonačnu seriju Schrödingerovih

jednadžbi u EMA modelu za  $n < 0$  sljedećeg oblika

$$E\Phi_n = -t\Phi_{n-1} + (V + 2t)\Phi_n - t\Phi_{n+1}. \quad (4.9)$$

Pretpostavlja se rješenje u obliku ravnog vala koji propagira udesno (prema nanosustavu) i koji se sastoji od injektirane (u nanosustav) i reflektirane (iz nanosustava) komponente, odnosno

$$\Phi_n = I \exp(+ikna) + R \exp(-ikna). \quad (4.10)$$

Raspisivanjem (4.10) za  $n = 0$  i  $n = -1$  slijedi

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= I + R = \phi_0 \quad \rightarrow \quad R = \phi_0 - I \\ \Phi_{-1} &= I \exp(-ika) + R \exp(+ika) \\ \Phi_{-1} &= \phi_0 \exp(+ika) + I [\exp(-ika) - \exp(+ika)]. \end{aligned}$$

Ubacivanjem dobivenog u polaznu jednadžbu strukture gdje su povezani kanal i kontakt, izraz (4.8), dobije se

$$E\phi_0 = \underbrace{(V + 2t)}_H \phi_0 - \underbrace{t \exp(+ika)}_\Sigma \phi_0 + \underbrace{tI [\exp(+ika) - \exp(-ika)]}_S. \quad (4.11)$$

Uz uvođenje pokrata

$$\begin{aligned} H &= V + 2t \\ \Sigma &= -t \exp(+ika) \\ S &= tI [\exp(+ika) - \exp(-ika)] \end{aligned} \quad (4.12)$$

jednadžba (4.6), odnosno  $(E - H)\phi = 0$ , prelazi u sljedeći oblik

$$(E - H - \Sigma)\phi = S. \quad (4.13)$$

Dakle, postavljanjem otvorenih rubnih uvjeta dobijemo nehomogenu diferencijalnu jednadžbu koja nalikuje Schrödingerovoj jednadžbi s određenim dodatnim članovima koji očito opisuju doprinos kontakta u nanosustavu koji analiziramo. Novi parametar  $\Sigma$  na lijevoj strani jednadžbe (4.13) kompleksna je veličina, ima dimenziju energije i naziva se **vlastita energija kontakta** (engl. *contact self-energy*) koja modificira hamiltonijan nanosustava da bi se uključio efekt spojenog kontakta. Novi parametar  $S$  na desnoj strani izraza (4.13) je **pobuda** ili ekscitacija nanosustava (engl. *source term*) elektronskim valovima iz kontakta. Treba naglasiti da dobivena jednadžba više nema oblik problema svojstvenih vrijednosti, kao što je to bio slučaj za kvantne jame sa zatvorenim rubnim uvjetima koje su analizirane u drugom poglavlju. Ovdje je nanosustav povezan s vanjskim svijetom, nije izoliran, pa energija  $E$  više nije svojstvena energija nekakvog novog efektivnog hamiltonijana strukture, nego kontinuirana nezavisna varijabla za čije vrijednosti iz traženog spektra treba riješiti jednadžbu (4.13).

## 4.4. Greenove funkcije i značenje vlastite energije kontakta

Sa zatvorenim rubnim uvjetima Schrödingerova jednadžba je definirana u (4.6), dok smo za spojen jedan kontakt dobili nehomogenu jednadžbu (4.13) koja se rješava pomoću Greenovih funkcija prema kojima je čitav formalizam kvantnog transporta opisan u ovom poglavlju i dobio ime. U fizici kondenzirane materije i kvantnoj statističkoj fizici, temeljima NEGF formalizma, Greenove funkcije su izuzetno moćan alat za analizu pogotovo interakcijskih sustava. Međutim, ovdje ćemo radi jednostavnosti opisati samo osnovna svojstva Greenovih funkcija na fenomenološkoj razini.

**Greenova funkcija** je matematički konstrukt koji se koristi u rješavanju nekih nehomogenih diferencijalnih jednadžbi. Na primjer, za linearni diferencijalni operator  $L(x)$  za koji vrijedi

$$L(x)\phi(x) = S(x), \quad (4.14)$$

Greenova funkcija  $G(x, x')$  je svako rješenje jednadžbe

$$L(x)G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (4.15)$$

Rješenje prve diferencijalne jednadžbe  $\phi(x)$ , može se dobiti pomoću Greenove funkcije preko izraza

$$\phi(x) = \int G(x, x')S(x')dx'. \quad (4.16)$$

Gledajući izraz (4.16), Greenova funkcija  $G(x, x')$  može se promatrati kao **propagator** zato što propagira utjecaj pobude ili perturbacije  $S(x')$  iz točke  $x'$  u točku  $x$  u kojoj se evaluira traženo rješenje, tj. funkcija  $\phi(x)$ . Također, Greenova funkcija  $G(x, x')$  se može gledati i kao **korelacijska funkcija** jer ako su točke  $x$  i  $x'$  jako korelirane, onda će  $S(x')$  jako utjecati na rješenje  $\phi(x)$ , dok obrnuto vrijedi za slabu korelaciju.

Ako se vratimo na Schrödingerovu jednadžbu za otvoreni sustav u kojoj se javljaju parametri  $\Sigma$  i  $S$ , izraz (4.13), onda za pripadnu Greenovu funkciju možemo pisati

$$\begin{aligned} (E - H - \Sigma)\phi &= S, \quad L\phi = S, \quad LG = \delta \quad \rightarrow \\ \rightarrow \left( E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V - \Sigma \right) \cdot G(x, x') &= \delta(x - x'). \end{aligned}$$

Bez ulaženja u detalje, za Greenovu funkciju prethodno navedene jednadžbe dobiju se dva rješenja. **Retardirana Greenova funkcija**  $G^R(x, x')$  je kauzalna u vremenskoj domeni i ona valnu funkciju uzrokovanu pobudom ili perturbacijom  $S$  u točki



$x'$  propagira u neku drugu točku  $x$ . **Avansirana Greenova funkcija**  $G^A(x, x')$  je drugo matematičko, ali nefizikalno rješenje. Ona nije kauzalna te propagira valnu funkciju iz neke točke  $x$  natrag u točku  $x'$  gdje je definirana pobuda ili perturbacija  $S$ . Detaljniji matematički formalizam i više informacija o svojstvima Greenovih funkcija zainteresirani čitatelj može naći primjerice u (Ryndyk, 2016.), (Pourfath, 2014.), (Di Ventura, 2008.) i (Šunjić, 2002.).

Da bismo razjasnili utjecaj vlastite energije kontakta, promatramo najjednostavniji slučaj kada u analiziranoj strukturi postoji samo jedno energijsko stanje ( $\varepsilon$ ) spojeno na beskonačni kontakt. U tom slučaju hamiltonijan po bazi svojstvenih stanja je skalar jednak jedinoj svojstvenoj energiji

$$\mathbf{H} = H = \varepsilon.$$

Greenova funkcija daje impulsni odziv ako na nju djeluje i vremenski ovisna Schrödingerova jednačica te u vremenskoj domeni imamo

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon - \Sigma \right) G^R(t, t') = \delta(t - t'), \quad (4.17)$$

pri čemu smo izostavili prostornu ovisnost jer imamo samo jedno stanje. Za vremenski invarijantne sustave vrijedi  $G^R(t, t') = G^R(t - t') = G^R(t)$ , pa za kauzalnu retardiranu funkciju rješenje gornje jednačice ima oblik

$$\begin{aligned} G^R(t) &= -\frac{i}{\hbar} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + \Sigma) t \right] \theta(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (\varepsilon + \text{Re} \Sigma + i \text{Im} \Sigma) t \right] \theta(t), \end{aligned} \quad (4.18)$$

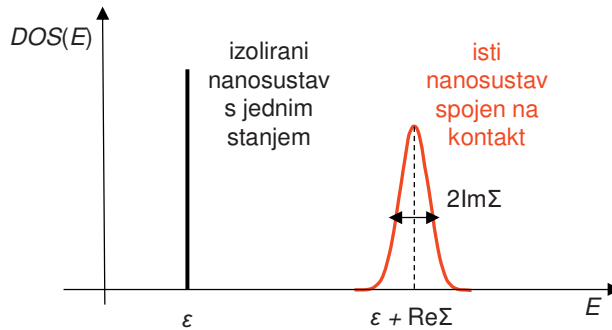
gdje je  $\theta(t)$  Heavisideova ili step-funkcija u vremenskoj domeni jednaka jedinici za  $t > 0$ , a vlastitu energiju smo rastavili na realni i imaginarni dio. Gornja jednačica može se izraziti kao

$$G^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \exp \left( -\frac{i\varepsilon' t}{\hbar} \right) \exp \left( -\frac{\gamma t}{2\hbar} \right) \theta(t), \quad (4.19)$$

gdje je

$$\varepsilon' = \varepsilon + \text{Re} \Sigma, \quad \gamma = -2 \text{Im} \Sigma. \quad (4.20)$$

Iz dobivenih izraza slijedi da je vlastita energija kontakta kompleksna veličina čiji realni dio uzrokuje **pomak energijske razine** (svojstvene energije ili stanja čestice) u strukturi, dok imaginarni dio uzrokuje **konačno vrijeme života** čestice u tom stanju, kako je ilustrirano na Slici 4.7.



Slika 4.7 Proširenje razine u gustoći stanja zbog utjecaja spojenog kontakta

Konačno vrijeme života vidi se iz kvadrata retardirane Greenove funkcije

$$|G^R(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \theta(t), \quad (4.21)$$

gdje je

$$\tau = \frac{\hbar}{\gamma} = -\frac{\hbar}{2 \operatorname{Im} \Sigma}. \quad (4.22)$$

Može se također reći da parametar  $\gamma = \hbar/\tau = -2 \operatorname{Im} \Sigma$  predstavlja frekvenciju ili **učestalost bijega** čestice (engl. *escape rate*) iz strukture zbog utjecaja spojenog kontakta, iako ima dimenziju energije. Dakle, povezivanje nanosustava s vanjskim svijetom rezultira stvaranjem kvazivezanih stanja u izoliranim kvantno ograničenim sustavima, što je logično jer spajanje kontakata omogućuje bijeg elektrona iz nanosustava preko kontakata, odnosno omogućuje pojavu električne struje.

Fourierova transformacija retardirane Greenove funkcije strukture definirane u (4.19) iz vremenske u frekvencijsku domenu, odnosno u energijsku domenu uz  $E = \hbar\omega$ , rezultira izrazom

$$G^R(E) = \left(E - \varepsilon' + i\frac{\gamma}{2}\right)^{-1} \quad (4.23)$$

što potvrđuje da je retardirana Greenova funkcija općenito kompleksna funkcija i u energijskoj domeni. Matematički gledano, ona mora sadržavati član  $i0^+$ , gdje je  $0^+$  infinitezimalno mali pozitivni realni broj. Ovo je nužno radi osiguravanja ispravne Fourierove transformacije i njene konvergencije, odnosno Laplaceove transformacije po kompleksnoj frekvenciji, i radi osiguravanja dobivanja kauzalne retardirane, a ne avansirane Greenove funkcije. Dakle, u budućim analizama očekujemo da retardirana Greenova funkcija mora biti općeg oblika

$$\mathbf{G}^R(E) \sim [\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H} + i0^+\mathbf{I}]^{-1} \quad (4.24)$$

za proizvoljno velike nanosustave s više stanja opisane hamiltonijanom  $\mathbf{H}$ .