

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский университет
«Московский институт электронной техники»

На правах рукописи

Шубин Николай Михайлович

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСОВ И АНТИРЕЗОНАНСОВ В КВАНТОВЫХ
ПРОВОДНИКАХ И ЭЛЕМЕНТАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ
НА ИХ ОСНОВЕ

Специальность

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук, профессор
Горбацевич Александр Алексеевич

Москва – 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОГЛАВЛЕНИЕ.....	2
ВВЕДЕНИЕ	6
ГЛАВА 1. ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ..	12
1.1. Открытые квантовые системы.....	12
1.1.1. Описание открытых квантовых систем	12
1.1.2. Резонансное рассеяние	14
1.1.3. Резонансы Фано и связанные состояния в непрерывном спектре	17
1.2. Особые точки в открытых квантовых системах	20
1.2.1. PT -симметричные системы.....	20
1.2.2. Физическая реализация PT -симметричных систем.....	22
1.2.3. Слияние резонансов как особая точка	25
1.3. Перспективные направления применения свойств особых точек и слияния резонансов	26
1.3.1. Высокочувствительные сенсоры.....	26
1.3.2. Квантовые тепловые двигатели.....	27
1.4. Выводы по главе	28
ГЛАВА 2. ОБЩЕЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ТУННЕЛЬНОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ КВАНТОВОГО ПРОВОДНИКА.....	30
2.1. Выражение для тока и вероятность туннелирования.....	30
2.1.1. Общие соотношения для двухконтактных квантовых проводников.....	30
2.1.2. Линейная цепочка узлов.....	35
2.1.2.1. Произвольная линейная цепочка.....	35
2.1.2.2. Симметричная линейная цепочка	39
2.1.3. Произвольный двухконтактный квантовый проводник	43
2.1.3.1. Общие соотношения.....	43
2.1.3.2. Слияние антирезонансов.....	45

2.2. Спонтанное нарушение симметрии распределения электронной плотности в симметричной структуре при слиянии резонансов.....	48
2.2.1. Общие соотношения для линейных квантовых систем	48
2.2.2. Примеры численного расчета волновых функций в гетероструктурах	49
2.3. Связанные состояния в непрерывном спектре.....	52
2.3.1. Общие соотношения	52
2.3.1.1. Связанное состояние в непрерывном спектре как резонанс с нулевой шириной.....	52
2.3.1.2. Образование связанного состояния в непрерывном спектре как переход с нарушением симметрии.....	54
2.3.2. Примеры.....	56
2.3.2.1. Случай $m_Q < m_P$	58
2.3.2.2. Случай $m_Q = m_P$	60
2.3.2.3. Случай $m_Q > m_P$	61
2.4. Обобщение на случай многотерминальных систем	62
2.5. Выводы по главе	65
ГЛАВА 3. КВАНТОВЫЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ И ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ИХ ОСНОВЕ.....	67
3.1. Управление током в квантовых проводниках.....	67
3.1.1. Управление током за счет сдвига резонансов или антирезонансов	69
3.1.1.1. Сдвиг резонанса	69
3.1.1.2. Сдвиг антирезонанса	71
3.1.2. Управление током за счет изменения величины резонансного коэффициента прохождения.....	72
3.2. Резонансное туннелирование в квантовой системе с вырожденными уровнями.....	73
3.2.1. Модель квантовой системы с вырожденными уровнями	73

3.2.2. Коэффициент прохождения	75
3.2.3. Квантовый интерференционный транзистор	77
3.2.4. Реализация с использованием дирадикалов	81
3.2.4.1. Квантовый интерференционный транзистор на основе триметиленметана	82
3.2.4.2. Квантовый интерференционный транзистор на основе дивинилциклобутадиена	84
3.3. Квантовый интерференционный инвертор	88
3.3.1. Модельная передаточная характеристика	90
3.3.2. Реализация с использованием дирадикалов	92
3.3.2.1. Квантовый интерференционный инвертор на основе триметиленметана	92
3.3.2.2. Квантовый интерференционный инвертор на основе дивинилциклобутадиена	93
3.4. Ограничения	95
3.4.1. Шум	95
3.4.2. Межэлектронное взаимодействие	96
3.5. Выводы по главе	97
ГЛАВА 4. ВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ВБЛИЗИ ТОЧКИ СЛИЯНИЯ РЕЗОНАНСОВ	99
4.1. Общие соотношения для линейного отклика тока через квантовую систему на малый переменный сигнал	99
4.2. Некоторые предельные случаи	102
4.2.1. Симметричная квантовая система	102
4.2.2. Связь с одним контактом (обрыв цепи)	105
4.3. Статическая аналогия	106
4.3.1. Симметричная квантовая система	106

4.3.2. Связь с одним контактом (обрыв цепи).....	107
4.4. Пример: двухузельная модель	107
4.4.1. Линейная конфигурация	108
4.4.2. Конфигурация с нетривиальной топологией	112
4.4.3. Ток поляризации	114
4.5. Выводы по главе	117
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	119
ЛИТЕРАТУРА.....	123
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	135
Приложение А: Не PT -симметричный неэрмитовый гамильтониан с действительными собственными значениями	135
Приложение Б: Свойства функции Q в симметричных линейных структурах	136
Приложение В: Выражение для функции P в симметричной системе из двух линейных цепочек.....	138
Приложение Г: Плотность состояний в окрестности ССНС.....	139
Приложение Д: Неотрицательность функции $P_1^{\alpha\beta}$	140
Приложение Е: Расширенная модель квантового интерференционного ключа	142
Е.1. За пределами приближения широкой зоны	142
Е.2. Электростатическое влияние потенциала в токоведущих контактах	144
Е.3. Сильная туннельная связь с электродами.....	146

ВВЕДЕНИЕ

Современная элементная база интегральной электроники подходит к теоретически предельным размерам элементов, еще большие трудности возникают с масштабированием (уменьшением) порогового напряжения современных транзисторов и, соответственно, напряжения питания, энергопотребления и тепловыделения. Согласно дорожной карте развития электроники, одним из путей решения возникающих проблем служит поиск альтернативы современной элементной базы (Beyond CMOS) в принципиально новых физических системах, в частности, в молекулярных проводниках. Поэтому вопросы, относящиеся к методам теоретического описания квантовых (молекулярных) систем с учетом их взаимодействия с окружающей средой (открытых квантовых систем), представляют собой важное и перспективное направление исследований. Более того, задача моделирования открытых квантовых систем (ОКС) выходит за пределы физики твердого тела и повсеместно встречается при построении моделей в молекулярной биологии и квантовой химии.

Важной особенностью наноразмерных структур, лежащих в основе приборов наноэлектроники, служит, прежде всего, наличие принципиально отличных физических свойств и связанных с ними эффектов, существенно влияющих, а порой полностью определяющих функциональные возможности структуры. К таким свойствам следует отнести, в первую очередь, дискретность энергетического спектра носителей заряда в квантово-размерных структурах и туннельные эффекты. Однако, помимо особенностей самой структуры, существенное влияние на нее оказывает и ее окружение, с которым она может обмениваться как частицами (ток) так и энергией (диссипация). Все это сильно влияет на свойства ОКС и может приводить к их качественным изменениям, поэтому крайне важно научиться понимать, описывать и даже использовать эти эффекты для разработки принципиально новых приборов и элементов наноэлектроники.

Нетривиальные свойства ОКС поддаются теоретическому описанию, в том числе с привлечением неэрмитовых операторов, что существенно расширяет класс рассматриваемых явлений и различных особенностей в их свойствах. В качестве принципиального отличия неэрмитовых операторов от эрмитовых следует выделить наличие у неэрмитовых особых точек (ОТ) в спектре, где сливаются не только собственные значения, но и собственные вектора. Наиболее наглядно ОТ проявляются в PT -симметричных неэрми-

товых операторах (инвариантных относительно инверсии координат и обращения времени), где соответствуют точкам спонтанного нарушения PT -симметрии и переходу от действительного к комплексному спектру, что может проявляться в виде тех или иных качественных изменений свойств ОКС.

С точки зрения использования квантовых систем в качестве элементов наноэлектроники на первый план выходят их транспортные свойства, определяемые в первую очередь явлением резонансного туннелирования. Таким образом, исследование резонансных свойств ОКС представляется перспективной и актуальной задачей. Практически с самого зарождения квантовой механики задача рассеяния и вопрос о транспорте носителей заряда были одними из ключевых тем исследований. Нетривиальные особенности протекания тока через различные квантовые системы: полупроводниковые гетероструктуры, системы квантовых точек, а в настоящее время и молекулярные системы, привлекали и привлекают сегодня внимание множества ученых. В связи с этим тема транспортных свойств квантовых систем разработана как теоретически, так и экспериментально, наверное, лучше, чем любая другая тема физики конденсированного состояния. Однако, многие вопросы требуют более глубокого изучения. В частности, вопрос резонансных свойств ОКС, а именно – построение метода точного определения резонансных энергий, который позволил бы исследовать процесс резонансного туннелирования для произвольной системы с произвольным взаимодействием с электродами.

Цель данной работы состоит в исследовании возможности управления резонансами в открытых квантовых системах и интерференционных приборах на их основе. Для достижения этой цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Построение объединенной теории резонансов, антирезонансов и связанных состояний в непрерывном спектре, позволяющей, в частности, точно определять положения единичных резонансных максимумов и условия их коллапса.
2. Исследование особенностей туннельной прозрачности квантовых проводников в окрестности особых точек.
3. Исследование возможности построения квантовых интерференционных транзисторов и более сложных логических вентилях, работающих на основе эффекта коллапса резонансов.
4. Исследование особенностей динамических свойств квантовой системы в окрестности точки коллапса резонансов.

Научная новизна:

1. Построена объединенная теория резонансов, антирезонансов и связанных состояний в непрерывном спектре для произвольных квантовых проводников, позволяющая точно описать положения и условия наблюдения основных транспортных особенностей системы в едином формализме с привлечением неэрмитовых гамильтонианов.
2. Описана принципиальная разница между туннелированием через вырожденные и невырожденные состояния. Управляемое внешним полем обратимое снятие вырождения может быть использовано в качестве принципа работы квантового интерференционного транзистора с низким напряжением питания.
3. Предложены модели квантовых интерференционных транзисторов, работающих на эффекте коллапса резонансов, и инверторов на их основе, обладающих крайне низким энергопотреблением.
4. Исследовано проявление особой точки открытой квантовой системы в ее динамических свойствах, в частности, описано явление слияния резонансов в линейном отклике двухуровневой системы.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость работы, прежде всего, заключается в развитии методов описания свойств открытых квантовых систем с привлечением неэрмитовых гамильтонианов. Предложенный подход принципиально отличается от традиционных методов на основе эффективного гамильтониана Фешбаха и стимулирует дальнейшее развитие и поиск альтернативных способов описания открытых квантовых систем с привлечением неэрмитовых операторов.

Современная элементная база интегральной электроники подходит к теоретически предельным размерам элементов, еще большие трудности возникают с масштабированием (уменьшением) порогового напряжения современных транзисторов и, соответственно, напряжения питания, энергопотребления и тепловыделения. Согласно дорожной карте развития электроники, одним из путей решения возникающих проблем служит поиск альтернативы современной элементной базе (Beyond CMOS) в принципиально новых физических системах, в частности, в молекулярных проводниках. В связи с этим основная практическая значимость работы состоит в том, что ее результаты могут быть непосредственно использованы для разработки правил дизайна перспективных базовых элементов нанoeлектроники на основе молекулярных проводников. Также разви-

тый в работе подход может быть применен и к оптическим системам, например, фотонным кристаллам, системам связанных волноводов и др., для разработки правил создания структур с наперед заданными оптическими свойствами.

Методы исследования. В качестве основного метода теоретического исследования в работе используется метод неравновесных функций Грина в базисе сильной связи. Этот метод представляет собой один из основных современных общепринятых инструментов описания совершенно различных явлений в квантовых системах. Также в работе используется численный метод решения одномерного уравнения Шредингера с использованием матрицы переноса (transfer matrix), который широко используется, в частности, для моделирования транспортных свойств полупроводниковых гетероструктур.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Точное положение единичных максимумов туннельной прозрачности квантовой системы можно соотнести с действительными собственными значениями некоторого неэрмитового вспомогательного гамильтониана, особые точки которого описывают явление слияния (коллапса) резонансов. В симметричной структуре вспомогательный гамильтониан обладает PT -симметрией (инвариантен относительно инверсии координат и обращения времени) и коллапс резонансов соответствует спонтанному нарушению PT -симметрии вспомогательного гамильтониана. Слияние четного числа резонансов приводит к уменьшению пиковой величины туннельной прозрачности и спонтанному нарушению симметрии распределения электронной плотности в пространственно симметричной системе.
2. В многосвязных структурах возможно слияние антирезонансов, при котором образуется широкое окно непрозрачности, что служит комплементарным эффектом к явлению коллапса резонансов. В некоторых случаях, например, для кольцевой системы в обобщенном мета-соединении, такое слияние также может быть описано как особая точка некоторого неэрмитового гамильтониана.
3. Управляемое снятие вырождения в исходно вырожденных системах, например, органических молекулах с дважды вырожденными молекулярными орбиталями – дирадикалах, может при определенных условиях менять туннельную прозрачность квантового проводника в широких пределах. При этом логарифмическая крутизна такого квантового интерференционного транзистора (ключа) в

рамках модели оказывается не ограничена даже при комнатной температуре (300 К), в отличие от традиционных КМОП транзисторов, где она не превышает (при комнатной температуре): $S^{-1} < e/kT \approx 39 \text{ В}^{-1}$. Сильнее всего данный эффект проявляется в дирадикалах, вырожденные молекулярные орбитали которых локализованы на разных атомах.

4. На основе предложенных квантовых интерференционных транзисторов можно построить инвертор, с максимальным коэффициентом усиления больше единицы при комнатной температуре и напряжением питания существенно более низким, чем у наиболее перспективных в настоящее время приборах на основе туннельных транзисторов.
5. Эффект слияния резонансов и деструктивная квантовая интерференция проявляются в динамических свойствах квантового проводника в виде минимума линейного отклика при резонансной частоте.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением современных методов квантовой теории, а также сравнением результатов с работами других авторов.

Личный вклад автора. Все изложенные в диссертации результаты получены автором лично.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях:

1. 23-ая Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика – 2016» (Москва, 2016 г.)
2. The 19th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices ICSNN-2016 (Гонконг, 2016 г.)
3. International Conference “Micro- and Nanoelectronics – 2016” ICMNE-2016 (Звенигород, 2016 г.)
4. 24-ая Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика – 2017» (Москва, 2017 г.)
5. XIII Российская конференция по физике полупроводников (Екатеринбург, 2017 г.)

6. Научная сессия Отделения физических наук Российской академии наук по теории конденсированного состояния памяти академика Ю. В. Копаева (Москва, 13 декабря 2017 г.)
7. XVI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Троицк, 2018 г.)
8. The 20th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices ICSNN-2018 (Мадрид, 2018 г.)
9. International Conference “Micro- and Nanoelectronics – 2018” ICMNE-2018 (Звенигород, 2018 г.)
10. XXVI Международная конференция «Электромагнитное поле и материалы (фундаментальные физические исследования)» (Москва, 2018 г.)
11. 26-ая Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика – 2019» (Москва, 2019 г.)

Также результаты работы были доложены на семинарах Отделения физики твердого тела ФИАН и семинаре по теории твердого тела Отделения теоретической физики им. И. Е. Тамма ФИАН.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 15 работ, включая 5 статей в рецензируемых журналах, входящих в международные реферативные базы данных WoS и Scopus [1–5] и 10 тезисов докладов на российских и международных конференциях.

Объем и структура диссертации. Диссертация изложена на 147 страницах машинописного текста, имеет 36 рисунков и 1 таблицу. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и 6 приложений. Список литературы включает в себя 165 наименований.

ГЛАВА 1. ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

В настоящей главе приведен обзор литературных данных, посвященных открытым квантовым системам и их свойствам. Наиболее детально рассмотрены транспортные свойства таких систем. Обсуждается связь резонансного рассеяния с особыми точками неэрмитовых гамильтонианов, в частности – PT -симметричных. Также в главе обсуждаются возможные варианты физической реализации систем с особыми точками и перспективные направления, в которых они могут быть использованы.

1.1. Открытые квантовые системы

1.1.1. Описание открытых квантовых систем

Для исследования свойств любой квантовой системы необходимо, чтобы она взаимодействовала с классическим окружением. На практике такое окружение состоит не только из измерительного прибора, но и из естественного окружения, представляющего собой непрерывное множество состояний. Таким образом, фактически любая квантовая система является открытой. Главным отличием открытой квантовой системы (ОКС) от замкнутой состоит в том, что ОКС не имеет стационарных состояний, все состояния в ней приобретают конечное время жизни. Одними из первых примеров описания конечного времени жизни частицы в ОКС были работы Гамова об α -распаде [6], а также работы Нордгейма и Фаулера о термо- и автоэлектронной эмиссии [7,8].

Формально, отсутствие стационарных состояний в ОКС можно отразить введением комплексных энергий, отвечающих этим состояниям, действительная часть которых отвечает непосредственно энергии частицы на заданном уровне, а мнимая – ширине этого уровня ΔE (которая, согласно принципу неопределенности Гейзенберга: $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, связана с неопределенностью времени жизни частицы в этом состоянии Δt), определяемой средней величиной исходящего потока импульса [9]. Такой подход противоречит традиционным основам квантовой механики, где наблюдаемым величинам ставятся в соответствие эрмитовы операторы, имеющие действительные собственные значения [10]. Однако, следует отметить, что в реальности противоречия постулатам квантовой механики не происходит, так как для полной системы, состоящей из рассматриваемой квантовой системы и ее окружения вместе все наблюдаемые величины (в том числе и

энергия) остаются действительными. Возникновение комплексных величин энергии и неэрмитовых операторов есть результат перехода к редуцированному описанию только квантовой системы с учетом ее открытости. Наиболее наглядно это было формализовано в работах Фешбаха [11–13], где было введено понятие неэрмитового *эффективного гамильтониана* ОКС. Таким образом, описание свойств ОКС, в отличие от замкнутых квантовых систем, производится с использованием неэрмитовых операторов, что приводит к наличию принципиально новых свойств у таких систем по сравнению с замкнутыми.

Собственные состояния ОКС можно определить и как решения стационарного уравнения Шредингера (УШ) с граничными условиями в виде только расходящихся волн [14]. Такие состояния называются *резонансными состояниями* (resonant states). Они могут быть проклассифицированы в зависимости от знаков мнимых частей энергии и волновых векторов расходящихся волн (например, см. [9,15]). Подробное описание взаимодействия ОКС с окружением было построено Фано в работе [16]. В этой работе было показано, что взаимодействие связанных состояний квантовой системы с окружением может приводить к появлению несимметричных пиков сечения рассеяния – *резонансов Фано*. Им также было показано, что даже невзаимодействующие в изолированной системе состояния могут начаться взаимодействовать через окружение. В случае, когда ширины резонансных состояний (определяемые по их времени жизни) много меньше расстояния между соседними значениями энергии этих состояний, уход частиц с них происходит экспоненциальным образом независимо друг от друга, т.е. вероятность обнаружить частицу на таком состоянии будет: $P \propto e^{-\Gamma t}$, где $\Gamma = \hbar/\tau$ - ширина уровня, а τ - время жизни на этом уровне. Однако, когда расстояния между энергиями резонансных уровней становятся сравнимы с их ширинами, необходимо учитывать их взаимное влияние, которое может приводить к различным нетривиальным эффектам. Так в работе [17] было показано, что при увеличении взаимодействия ОКС с окружением увеличивается ширина не всех уровней, а только некоторых, количество которых совпадает с количеством каналов ухода из ОКС. В работе [18] был обобщен подход Фано на случай перекрытия резонансных состояний (overlapping resonances).

Отдельно стоит выделить явление «расталкивания уровней» (“level repulsion”) [19,20], которое приводит к тому, что комплексные энергии резонансных состояний не совпадают в комплексной плоскости при вариации параметров системы. В частности,

при увеличении взаимодействия ОКС с окружением некоторые уровни могут совпасть по действительной части энергии, но при этом иметь разную мнимую часть. Это приводит к нетривиальному эффекту – появлению долго живущих уровней (*resonance trapping*) вместе с коротко живущими при увеличении взаимодействия ОКС с окружением (например, см. [21]), что было подтверждено экспериментально, например, для открытого микроволнового резонатора [22].

1.1.2. Резонансное рассеяние

Резонансное рассеяние играет важную роль в физике открытых квантовых систем и оптических волноводов [23–25]. Поэтому возможность создавать нанoeлектронные и нанофотонные структуры с заданными резонансными свойствами имеет первостепенную важность. В последнее время наблюдается постоянное углубление в понимании свойств открытых квантовых систем, микроволновой электроники и оптических структур [23–26].

Традиционно, описание задачи рассеяния для наноразмерных систем производится в терминах *матрицы рассеяния* (S-матрицы) [10]. Матрица рассеяния связывает амплитуды падающих волн на систему (центр рассеяния) с амплитудами рассеянных волн. При этом особо выделяются состояния, в которых могут существовать расходящиеся волны без падающих, такие состояния отвечают полюсам матрицы рассеяния. Это есть не что иное, как резонансные состояния в формулировке Зигерта [14]. Таким образом, полюса матрицы рассеяния отвечают собственным значениям эффективного гамильтониана рассеивающей системы. Однако, энергии, отвечающие полюсам S-матрицы комплексные, а реальные процессы происходят только при действительных энергиях рассеивающихся частиц. Поэтому важно правильно соотносить свойства системы при действительных энергиях с аналитическими свойствами ее матрицы рассеяния.

Традиционный подход [27] к физической интерпретации комплексных энергий резонансных состояний в задаче рассеяния состоит в том, что сечение рассеяния (в одномерном случае – амплитуда прохождения) имеет симметричный максимум при энергии равной ее действительной части и полушириной равной ее мнимой части – *резонанс Брейта-Вигнера*. В одномерном случае соответствующая вероятность прохождения будет иметь вид:

$$T_{Breit-Wigner}(E) = \frac{4\Gamma_1\Gamma_2}{(\Gamma_1 + \Gamma_2)^2 + (E - E_0)^2}, \quad (1.1)$$

где E_0 – положение резонанса (действительная часть) и $\Gamma_1 + \Gamma_2$ – полуширина резонанса (мнимая часть), определяемая взаимодействием с континуумом состояний слева – Γ_1 и справа – Γ_2 от рассеивающей системы.

Однако, такая трактовка адекватна только в случае хорошо разделенных узких максимумов, когда мнимые части соответствующих полюсов малы по сравнению с расстоянием между их действительными частями. При сближении и утолщении резонансных максимумов, они могут сливаться друг с другом, несмотря на то, что у полюсов матрицы рассеяния по-прежнему будут различные действительные части. То есть, соответствие между полюсами и резонансными максимумами, в общем случае не однозначное. В 2010 г. в работе [28] было показано, что в случае широких, но по-прежнему изолированных резонансов более адекватной оценкой положения их максимума будет абсолютное значение полюса, а не его действительная часть. На Рис. 1.1 показано положение действительных частей и модулей полюсов матрицы рассеяния для одномерного потенциала в виде прямоугольной квантовой ямы из работы [28]. Из него видно, что для такой структуры абсолютные значения полюсов матрицы рассеяния $|E_n|$ лучше описывают истинные (аналитически вычисленные) положения резонансов λ_n .

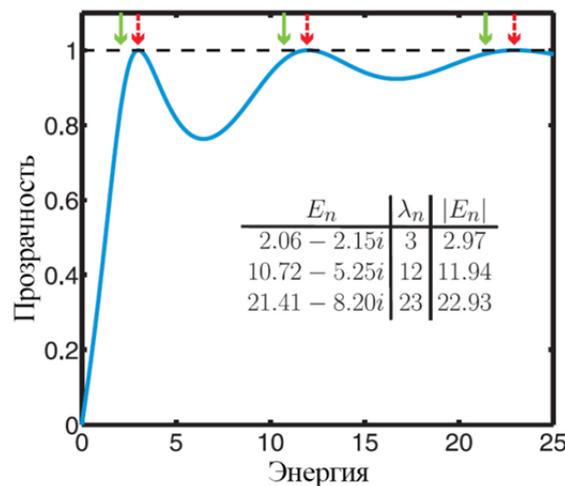


Рис. 1.1. Вероятность прохождения над прямоугольной потенциальной ямой [28]. Зеленые стрелки соответствуют положению действительных частей полюсов матрицы рассеяния $\text{Re}(E_n)$, а пунктирные красные – положению их абсолютных значений $|E_n|$.

Первым (более ранние явные описания в литературе не были обнаружены) примером явного описания слияния резонансов, не описывающегося полюсами матрицы рассеяния, служит, рассмотренное в 1994 г. слияние двух единичных резонансов в один неединичный в одномерной симметричной трехбарьерной структуре [29]. На Рис. 1.2а приведены положения максимумов прозрачности и действительных частей полюсов матрицы рассеяния из работы [29] в зависимости от ширины центрального барьера. Видно, что слияние резонансов никак не проявляется в поведении полюсов матрицы рассеяния. На Рис. 1.2б слияние резонансов проиллюстрировано профилями прозрачности системы из той же работы.

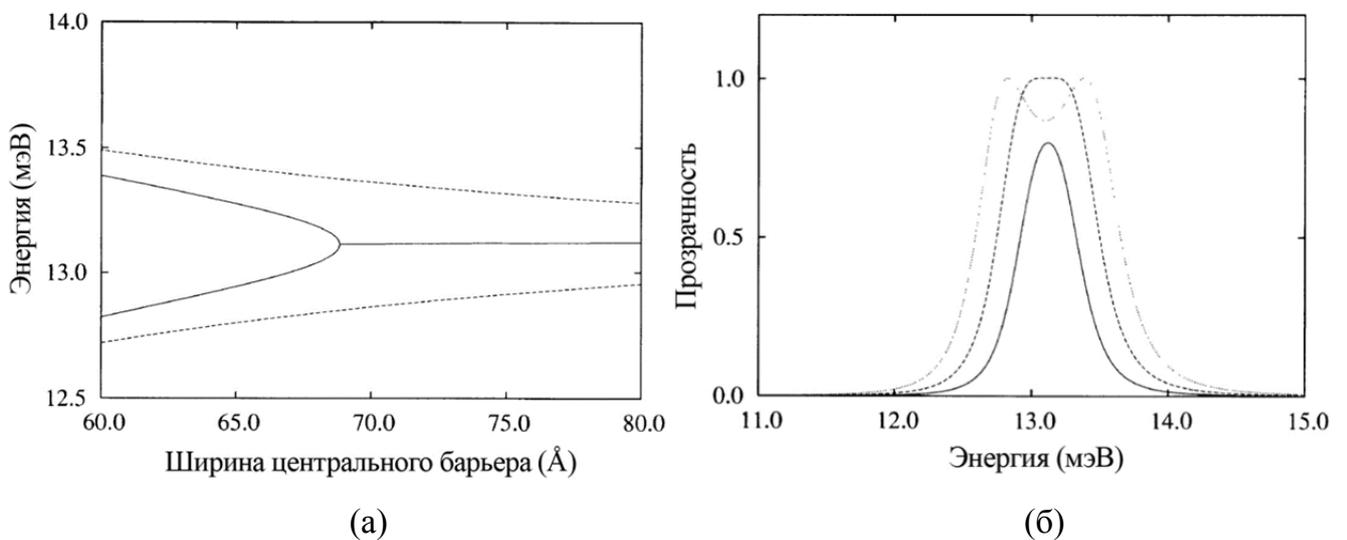


Рис. 1.2. Положения максимумов прозрачности трехбарьерной структуры (сплошные линии) и действительных частей полюсов матрицы рассеяния (пунктирные линии) (а) и профили прозрачности при различных ширинах среднего барьера (б) [29].

Позже было описано также и слияние трех единичных резонансов в системе квантовых точек [20]. В 2008 году было снова рассмотрено слияние (коллапс) двух единичных резонансов в трехбарьерной, инвертированной двухбарьерной и в некоторых других симметричных структурах, но уже как квантовый фазовый переход [30]. При этом в режиме слияния резонансов прозрачность системы имеет существенно не Брейт-Вигнеровский вид:

$$T_{Coalescence}(E) = \frac{4\Gamma^{2N}}{4\Gamma^{2N} + (E - E_0)^{2N}}, \quad (1.2)$$

где $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$ – туннельная связь с берегами в симметричной структуре и N – число сливающихся резонансов (в работе [30] $N = 2$).

В этой работе также было показано, что слияние резонансов в симметричной структуре сопровождается нарушением симметрии распределения электронной плотности. На Рис. 1.3 показана зависимость параметра асимметрии распределения электронной плотности в инвертированной двухбарьерной структуре из работы [30]. Наблюдается резкое нарушение симметрии при слиянии резонансов. Стоит отметить также, что такое же слияние резонансов было рассмотрено и в книге [31].

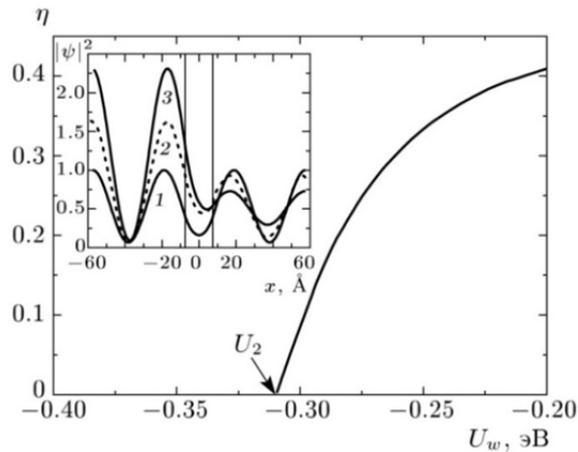


Рис. 1.3. Параметр асимметрии η для инвертированной двухбарьерной структуры [30]. На вставке показано симметричное и асимметричное распределение волновой функции в этой структуре.

Возможно также и слияние полюсов матрицы рассеяния (собственных значений эффективного гамильтониана) с образованием полюсов второго и более высоких порядков [32–34]. Однако, в общем случае это не имеет прямого отношения к слиянию резонансов и, соответственно, к свойствам наблюдаемых величин. Тем не менее, физические свойства системы меняются при слиянии собственных значений S-матрицы (они перестают быть унимодулярными), что возможно, например, в системах со сбалансированным затуханием и усилением [35,36].

1.1.3. Резонансы Фано и связанные состояния в непрерывном спектре

В 1961 году Фано показал, что при рассеянии частицы на системе со связанным состоянием может наблюдаться асимметричный профиль сечения рассеяния (коэффициента прохождения в одномерном случае) [16], связанный с возможностью деструктив-

ной интерференции волн прошедших через связанное состояние системы и «мимо» него. Одним из характерных примеров возможности подобной интерференции в квантовых системах служит эффект Ааронова-Бома [37], открытый незадолго до этого. Впоследствии было установлено, что явление резонанса Фано универсально и может встречаться в различных физических системах [24].

В одномерном случае вероятность туннелирования в окрестности резонанса Фано имеет вид:

$$T_{Fano}(E) = \frac{1}{1+q^2} \cdot \frac{(q+E)^2}{1+E^2}. \quad (1.3)$$

Здесь q – параметр асимметрии, который определяет положения единичной и нулевой прозрачности:

$$\begin{aligned} T_{Fano}(E) = 0 &\Rightarrow E = -q, \\ T_{Fano}(E) = 1 &\Rightarrow E = \frac{1}{q}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Из соотношений (1.4), в частности, видно, что выражение (1.3) не может описать коллапс резонанса Фано, то есть слияние его максимума и минимума ни при каких действительных значениях параметра q . На Рис. 1.4 приведен вид этого профиля из основополагающей работы [16].

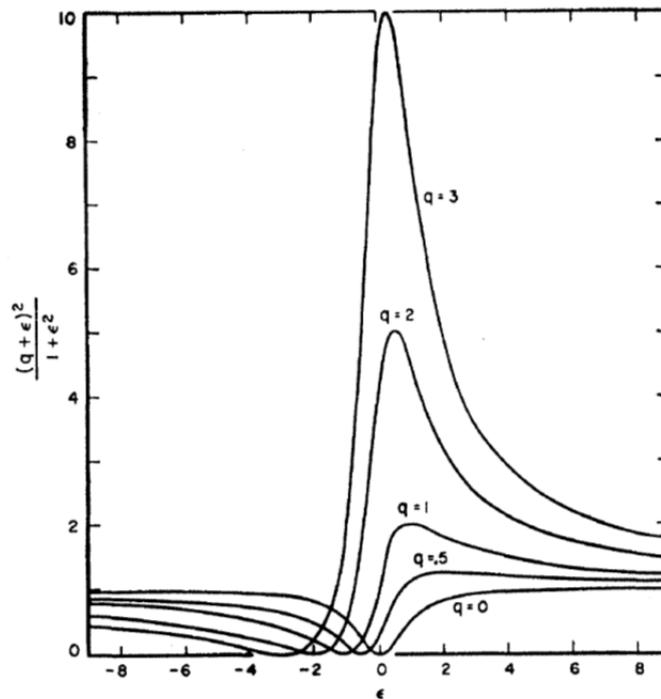


Рис. 1.4. Асимметричный профиль сечения рассеяния из работы Фано [16].

Еще на самой заре квантовой механики Вигнер и фон Нейман обнаружили [38], что в квантовых системах возможны связанные состояния с энергиями, лежащими в области непрерывного спектра – *связанные состояния в непрерывном спектре (ССНС)* [bound states in the continuum (BIC)]. Ими было исследовано это явление на примере системы со сложным потенциальным профилем, практически нереализуемым на практике. Однако, уже значительно позже было установлено, что это явление имеет волновую природу [39], и описано множество вариантов реализации таких состояний в различных системах, вплоть до очень простых (подробнее см. обзор [26]). В настоящее время уже получены результаты по практическому применению этого явления, например, для реализации лазеров [40].

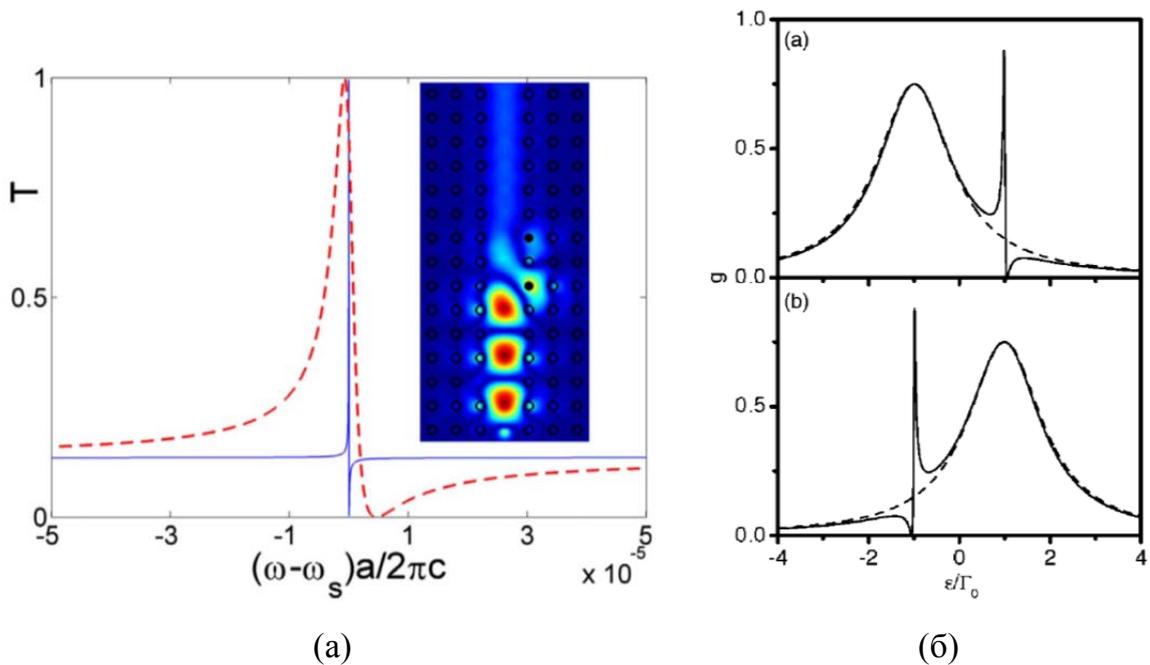


Рис. 1.5. Профили коэффициента прохождения при образовании ССНС в результате коллапса резонанса Фано для фотонного кристалла с дефектом [41] – (а) и для системы квантовых точек в магнитном поле [42] – (б). На вставке в рисунке (а) показано распределение интенсивности поля в образованном ССНС.

Простейшим примером системы с ССНС может служить структура из двух рассеивателей, обладающих одинаковыми резонансами типа Фано (точнее – имеющих нулевую амплитуду прохождения при одной энергии). В такой системе между рассеивателями при энергии, соответствующей нулевой прозрачности каждого из рассеивателей, мо-

жет образоваться полностью локализованное состояние по аналогии с интерферометром Фабри-Перо. В частности, такой тип ССНС был описан на примере квантовых систем («бильярдов») [43–46] и оптических систем [47]. Для ССНС такого типа прозрачность системы при энергии ССНС обращается в ноль. Другой тип ССНС, связанный с резонансами Фано, формируется при *коллapse резонанса Фано* – слиянии резонанса и антирезонанса (одного или нескольких). При этом прозрачности системы при энергии ССНС может, вообще говоря, быть произвольной и определяется свойствами конкретной рассматриваемой системы. Примеры таких ССНС в системах квантовых точек были теоретически описаны в [42,48–50], а также аналитически и численно рассчитаны в фотонных кристаллах, например в [41]. На Рис. 1.5 показаны профили прозрачности систем из работ [41] и [42] в окрестности коллапса резонанса Фано, то есть формирования ССНС.

1.2. Особые точки в открытых квантовых системах

1.2.1. *PT*-симметричные системы

Традиционно, в квантовой механике наблюдаемым величинам ставятся в соответствие эрмитовы операторы, что обеспечивает действительность их собственных значений [10]. Особо стоит выделить среди наблюдаемых величин – энергию и, соответствующий ей оператор – гамильтониан. Действительность энергии и эрмитовость гамильтониана обеспечивают унитарную эволюцию волновой функции системы, то есть обеспечивают сохранение нормы (числа частиц). Однако, оказалось, что действительность собственных значений может иметь место и для некоторых классов неэрмитовых операторов. В 1998 году Бендер и Боттчер опубликовали работу [51], в которой исследовали спектр неэрмитового гамильтониана обладающего симметрией по отношению к одновременной инверсии координат (P) и времени (T), но не симметричного относительно каждой из них по отдельности. Численными методами было показано, что в системах, обладающих *PT*-симметричными неэрмитовыми гамильтонианами возможно появление полностью действительных спектров энергии. Позже той же группой ученых была показана возможность обобщения традиционной квантовой механики на случай неэрмитовых *PT*-симметричных систем [52]. Также было описано решение проблемы возможной неунитарной эволюции системы, описываемой неэрмитовым *PT*-симметричным гамильтонианом [53]. Стоит отметить, что вскоре после открытия существования действитель-

ного спектра у PT -симметричных гамильтонианов, было показано, что необходимым условием действительности спектра гамильтониана служит его псевдоэрмитовость, а PT -симметричность представляет собой частный случай псевдоэрмитовости [54–56]. Однако, PT -симметричные системы стоит выделять особо, так как они играют особую роль в оптике [57].

Ключевой особенностью PT -симметричных операторов служит явление спонтанного нарушения PT -симметрии, сопровождаемое нарушением действительности собственных значений оператора. Это происходит при изменении некоторого параметра системы (tuning parameter), в результате чего действительные собственные значения сливаются и затем становятся комплексными. Этот процесс происходит попарно [58,59], в результате чего пара действительных собственных значений сливается и при дальнейшем изменении параметра системы переходит в пару комплексно-сопряженных значений. При значении параметра системы, при котором два действительных собственных значения оператора совпадают имеет место вырождение спектра. Однако, это вырождение принципиально отличается от того, что возможно для эрмитовых операторов. В точке вырождения эрмитовы операторы всегда диагонализуются и имеют ортогональные собственные вектора. Например, для двухуровневой системы гамильтониан при таком вырождении будет:

$$\hat{H}_{DP} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Точка в пространстве параметров, в которой происходит такое вырождение системы называется *двойственная точка* (diaboloic point). В случае же PT -симметричных операторов в точке вырождения они оказываются недиагонализуются, так как происходит слияние не только собственных значений, но и собственных векторов. При этом, опять же на примере двухуровневой системы, гамильтониан будет:

$$\hat{H}_{EP} = \begin{pmatrix} E_0 & A \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

где $A \neq 0$. Точка в пространстве параметров, соответствующая такому механизму вырождения называется *особой точкой* (exceptional point) [60]. Особые точки (ОТ) вызывают большой интерес в связи с неаналитическим характером поведения собственных значений оператора в их окрестности.

1.2.2. Физическая реализация PT -симметричных систем

Гамильтониан любой замкнутой системы есть эрмитовый оператор, поэтому необходимым условием реализации системы с неэрмитовым, в частности с PT -симметричным, гамильтонианом служит открытость квантовой системы. Возможность неунитарной эволюции с несохранением числа частиц в PT -симметричной системе делает неясной возможность реализации таких систем для фермионов. Хотя для экзотических майорановских фермионов была показана возможность возникновения связанных состояний, возникающих из-за ОТ [61,62]. Для бозонных систем реализация PT -симметричных систем представляет собой более адекватную задачу, так как PT -симметричность может быть реализована как зеркально-симметричное распределение областей рождения и уничтожения бозе-частиц. Подобная система бозе-эйнштейновского конденсата была рассмотрена, например в [63]. Еще один пример бозонных систем это сверхпроводники, для которых даже экспериментально было обнаружено нарушение PT -симметрии в спектре флуктуаций [64].

Волновое уравнение, описывающее распространение электромагнитных волн в параксиальном приближении [65,66], математически эквивалентно квантовомеханическому уравнению Шредингера, поэтому PT -симметричные системы можно реализовывать и в оптических структурах. В таких структурах мнимые поправки к диэлектрической проницаемости описывают хорошо определенные процессы поглощения и усиления сигнала. Поэтому первая экспериментальная реализация системы, демонстрирующей нарушение PT -симметрии была именно оптическая [67]. На Рис. 1.6 показаны профили собственных мод двухволноводной системы в PT -симметричной фазе и в фазе нарушенной PT -симметрии из работы [67], а также поведение действительных и мнимых частей постоянных распространения в окрестности точки нарушения PT -симметрии. Именно в области всевозможных оптических структур сейчас, в основном, и исследуются явления, связанные с PT -симметрией и ее нарушением. Многообразие рассматриваемых PT -симметричных оптических систем велико: фотонные кристаллы [68], СВЧ резонаторы [69], PT -симметричные плазмонные метаматериалы [70,71], лазеры [72] и т.д. Наличие ОТ в PT -симметричных системах качественно меняет многие свойства системы. Так, например, с увеличением поглощения прозрачность системы может расти [67], или, например, с увеличением мощности накачки может падать интенсив-

ность лазерного излучения [73]. На Рис. 1.7 показана зависимость прозрачности системы из работы [67], обладающей только потерями, от их величины. Поскольку в PT -симметричной системе усиление и затухание сбалансированы, то в окрестности ОТ при изменении параметров системы возможен переход из режима лазерной генерации в режим полного поглощения (coherent perfect absorber) [74–76]. Также в последнее время начинает развиваться область активных акустических систем, в которых оптическое излучение связано с механическими колебаниями (фононами). Теоретически и экспериментально было показано, что в таких системах под действием внешнего лазерного излучения фононы могут как появляться так и исчезать, то есть возможна реализация PT -симметричных акустических систем [77–79] и даже создание фононных лазеров [80].

Отдельно следует выделить область PT -симметричных волноводных структур, так как математически задача о распространении света в таких структурах полностью эквивалентна задаче о временной эволюции квантовой PT -симметричной системы. Как уже говорилось выше, в такой двухволноводной структуре и был впервые обнаружен эффект нарушения PT -симметрии [67]. На примере двух волноводной PT -симметричной системы была показана возможность увеличения амплитуды сигнала без увеличения его мощности [81]. Также исследуются многоволноводные PT -симметричные системы на примере многосердцевинных оптических волокон с симметрично расположенными сердцевинами с затуханием и усилением [82]. Особенность, потенциально важная для практических применений, таких многосердцевинных волокон состоит в том, что режим фазового перехода из PT -симметричного в PT -несимметричное состояние существенно зависит от продольного скручивания такого волокна [83].

Однако следует отметить, что, в отличие от квантово-механических систем, в оптических системах существует принципиальное ограничение, из-за которого диэлектрическая проницаемость среды не может быть произвольной. Любая функция отклика, и диэлектрическая проницаемость в том числе, должна удовлетворять условию причинности и, соответственно, соотношениям Крамерса-Кронига [84]. Из этого следует, что при наличии ненулевых мнимых частей у диэлектрической проницаемости, она вынуждена обладать дисперсией и тогда условие PT -симметричности может быть выполнено только для дискретного набора частот [85].

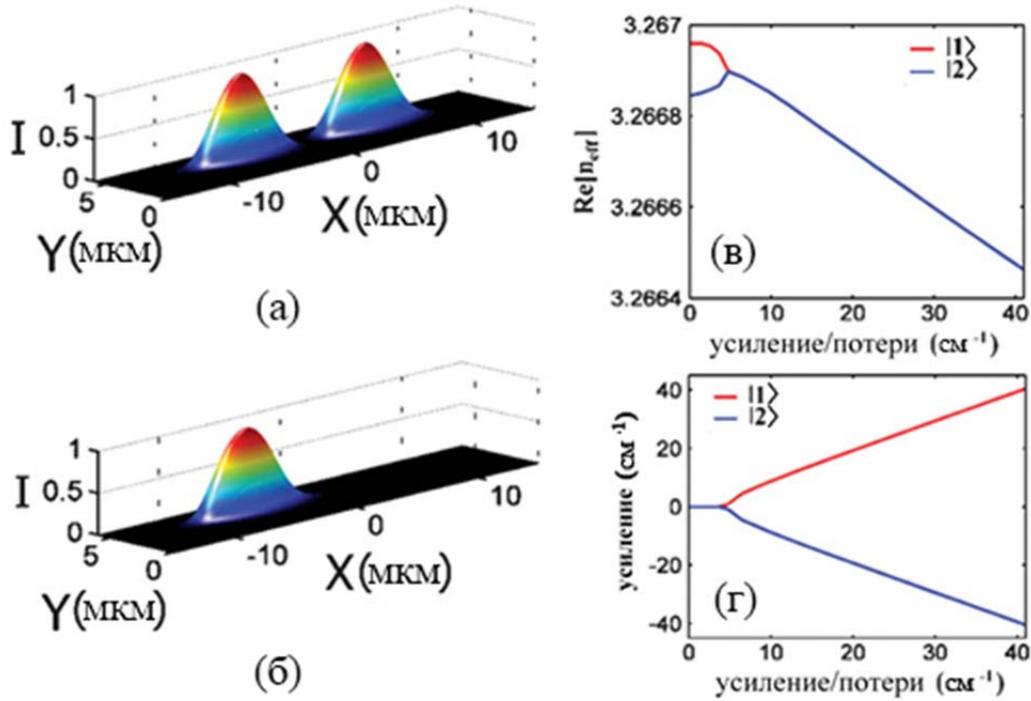


Рис. 1.6. Нарушение PT -симметрии в оптической системе связанных волноводов [67]. Профили интенсивности собственных мод системы до критического значения коэффициента потерь/усиления (а), когда интенсивность распределена равномерно между волноводами и после нарушения PT -симметрии (б), когда мода становится изолированной в своих волноводах. До особой точки спектр полностью действителен (в), (г), а после нарушения симметрии волновые вектора становятся комплексно сопряженными друг другу.

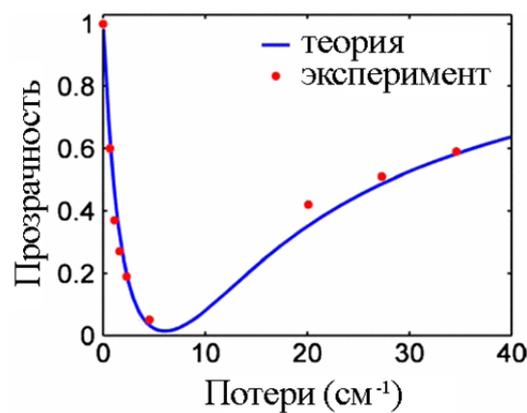


Рис. 1.7. Экспериментальное наблюдение спонтанного нарушения PT -симметрии в системе только с затуханием [67]. Прозрачность PT -симметричной системы в зависимости от величины потерь в одном из волноводов.

1.2.3. Слияние резонансов как особая точка

Впервые идеальную прозрачность эрмитовой системы связали с асимптотической PT -симметричностью эффективного гамильтониана в 2007 г. в работе [86]. В то же самое время был предложен метод потенциала стока-истока (source-sink potential) описания транспортных свойств отдельных молекул с привлечением неэрмитовых потенциалов [87]. Этот метод был развит в работах [88,89], где были получены компактные выражения для коэффициента прохождения молекулярных проводников. Однако, идея о связи резонансного (с единичной прозрачностью) состояния в эрмитовой системе с некоторой вспомогательной PT -симметричной задачей рассеяния была предложена в [90]. Позднее те же авторы обобщили свой результат и показали, что задача рассеяния в произвольной открытой эрмитовой системе с двумя контактами может быть переформулирована для некоторого неэрмитового гамильтониана, обладающего теми же собственными функциями, что и исходный эрмитовый [91].

Недавно в работах [1,2] идея о связи резонансных состояний эрмитовой задачи рассеяния со вспомогательным PT -симметричным гамильтонианом была использована для описания слияния резонансов в симметричной многобарьерной структуре как перехода с нарушением PT -симметрии во вспомогательном гамильтониане. Похожая идея была высказана и в [92], где слияние двух единичных резонансов описывалось как нарушение PT -симметрии в некотором вспомогательном уравнении Шредингера для огибающей волновой функции с граничными условиями типа Робина. Однако, в работах [1,2] были рассмотрены слияния произвольного числа резонансов и получен общий вид (в приближении сильной связи) выражения для прозрачности структур с произвольным числом барьеров. Также в них явно показано, что точное положение единичных максимумов прозрачности может быть соотнесено с задачей на собственные значения вспомогательного PT -симметричного гамильтониана и, соответственно, слияние резонансов представляет собой нарушение PT -симметрии вспомогательного гамильтониана и переход от действительных собственных значений к комплексным. В самой точке слияния прозрачность имеет не Брейт-Вигнеровский вид и с увеличением числа сливающихся резонансов приближается по форме к пропусканию «полосового фильтра». В работе [3] был обобщен данный подход на случай произвольных двухтерминальных эрмитовых

систем и показано, что кроме слияния резонансов также возможно и слияние антирезонансов с образованием широкого окна непрозрачности.

Еще один важный вывод, полученный в [1,2], состоит в принципиальном отличии слияния четного и нечетного числа резонансов. При слиянии четного числа единичных пиков прозрачности в результате получается максимум с прозрачностью меньше единицы, а при слиянии нечетного числа единичных пиков – единичный резонанс. При этом в [2] показано, что в первом случае симметрия распределения электронной плотности в пике прозрачности нарушается, а во втором – нет. Это обобщает результаты работы [30] на случай произвольного числа сливающихся (коллапсирующих) резонансов.

1.3. Перспективные направления применения свойств особых точек и слияния резонансов

1.3.1. Высокочувствительные сенсоры

Неаналитичность свойств гамильтониана в окрестности его ОТ приводит к тому, что малые возмущения системы приводят к неаналитическим отклонениям собственных значений гамильтониана. Такое поведение крайне актуально для создания высокочувствительных сенсоров, которые будут обладать теоретически неограниченной чувствительностью. Малое возмущение $\varepsilon \hat{H}_1$ двухуровневой системы ($\varepsilon \ll 1$), находящейся в состоянии вырождения по типу двойственной точки, то есть имеющей гамильтониан (1.5), приводит к отклонению ее собственных значений на величину:

$$\Delta E_{DP} = E - E_0 \propto \varepsilon. \quad (1.7)$$

В случае же вырождения по типу ОТ, то есть в системе с гамильтонианом (1.6), такое же малое возмущение приведет к совершенно другому отклонению значений:

$$\Delta E_{EP} = E - E_0 \propto \sqrt{\varepsilon}. \quad (1.8)$$

Такое отклонение неаналитично при $\varepsilon \rightarrow 0$ и приводит к тому, что в ОТ чувствительность собственных значений системы к внешнему возмущению:

$$S_{EP} = \frac{\Delta E_{EP}}{\varepsilon} \propto \varepsilon^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.9)$$

Таким образом, теоретически в ОТ система обладает неограниченной (бесконечной) чувствительностью к внешним возмущениям.

Впервые предложил использовать этот факт для реализации высокочувствительных сенсоров Вирциг в работах [93,94]. В этих работах сенсоры представляют собой кольцевые оптические резонаторы с двумя дефектами, которые очень чувствительны к появлению микрочастиц на их поверхности. Впоследствии подобные сенсоры были реализованы и экспериментально [95]. Также были реализованы и другие типы сенсоров, работающие в режиме ОТ [96,97]. Более того, из общих рассуждений очевидно, что чем выше порядок ОТ лежит в основе сенсора, тем выше будет его чувствительность. Так в работе [2] было отмечено, что в ОТ порядка N отклонение собственных значений гамильтониана будет

$$\Delta E_{N-EP} = E - E_0 \propto \sqrt[N]{\epsilon} \quad (1.10)$$

и, соответственно, чувствительность сенсора, работающего в таком режиме возрастает с ростом N :

$$S_{N-EP} = \frac{\Delta E_{N-EP}}{\epsilon} \propto \epsilon^{-\frac{N-1}{N}}. \quad (1.11)$$

Сенсор, работающий в режиме особой точки третьего порядка, был экспериментально реализован в системе трех PT -симметричных кольцевых резонаторов в работе [98].

1.3.2. Квантовые тепловые двигатели

Туннельная прозрачность квантовой системы в режиме слияния большого количества резонансов ($N \gg 1$) имеет почти прямоугольный профиль (1.2). Подобные свойства квантовых систем могут быть крайне востребованы для создания высокоэффективных квантовых тепловых двигателей [99,100], основанных на термоэлектрических эффектах [101]. Для таких систем максимальная эффективность при заданной выходной мощности достигается при определенном профиле туннельной прозрачности, который представляет из себя прямоугольное окно единичного пропускания в заданном диапазоне энергий [101]. Нижняя граница энергии такого окна прозрачности определяется условием того, что заселенность в более горячем контакте должна превышать заселенность в более холодном для создания теплового электрического тока (см. Рис. 1.8). Верхняя же граница окна прозрачности определяется из условия максимизации эффективности преобразования тепловой энергии в электрический ток.

Таким образом, используя явления слияния резонансов можно добиться требуемого профиля прозрачности, который при необходимости может быть изменен под про-

извольное положение и ширину. Для этого необходимо только изменить параметры системы такие как энергии связанных состояний и туннельные матричные элементы. Использование слияния резонансов для квантовых тепловых двигателях было предложено в [101] и более подробно рассмотрено в [102].

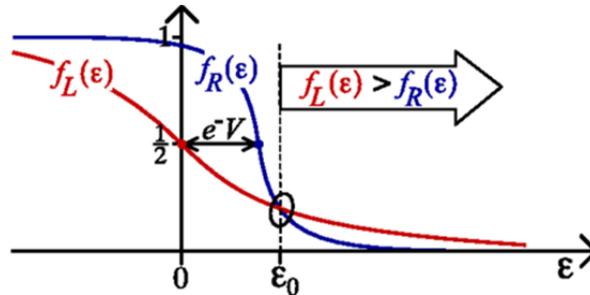


Рис. 1.8. Нижняя граница окна прозрачности в квантовом тепловом двигателе на термоэлектрических эффектах [101]. Она определяется условием превышения заселенности горячего контакта над заселенностью холодного: $f_L(\epsilon) > f_R(\epsilon)$.

1.4. Выводы по главе

Любая реальная квантовая система является открытой, так как взаимодействует и с измерительной аппаратурой, и с внешней средой. Принципиальным отличием открытой квантовой системы от замкнутой служит отсутствие стационарных состояний, то есть все состояния в открытой системе обладают конечным временем жизни. Традиционно этот факт описывается введением комплексных значений энергии состояний, действительная часть которой отвечает именно энергии частицы в заданном состоянии, а мнимая – времени жизни в этом состоянии. При этом описание свойств открытых систем производится с использованием неэрмитовых операторов, например – эффективно-го гамильтониана Фешбаха.

В открытой квантовой системе можно выделить два важных класса состояний – это резонансные состояния, описывающие уход частицы из системы (распад) и состояния рассеяния, описывающие рассеяние частицы на системе, в том числе и резонансное рассеяние. Для квазиодномерных систем формализм эффективного гамильтониана и матрицы рассеяния позволяет точно описывать только резонансные состояния, в то время как, например, энергия состояния резонансного рассеяния не может быть точно определена из собственных значений эффективного гамильтониана. Более того, макси-

мумы прозрачности в некоторых структурах могут сливаться, что, однако, никак не отражается на их резонансных состояниях.

При описании открытой системы возможно определить другой неэрмитовый гамильтониан – вспомогательный, собственные состояния которого определяют состояния резонансного рассеяния и, как будет показано, его действительные собственные значения в точности определяют положения единичных максимумов прозрачности. При этом слияние резонансов отождествляется с особой точкой вспомогательного PT -симметричного гамильтониана.

Детальное исследование свойств систем, описываемых неэрмитовыми гамильтонианами с особыми точками и построение взаимосвязи с эрмитовыми системами служит важным шагом для построения новых перспективных структур, таких как высокочувствительные сенсоры, квантовые тепловые двигатели, лазеры и др.

ГЛАВА 2. ОБЩЕЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ТУННЕЛЬНОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ КВАНТОВОГО ПРОВОДНИКА

Настоящая глава посвящена подробному описанию когерентного транспорта в произвольном квантовом проводнике. Помимо общего случая также отдельно рассматривается и линейная цепочка узлов, так как она представляет интерес в качестве самостоятельного объекта исследования.

Транспортные свойства (без учета процессов неупругого рассеяния) любой квантовой системы определяются ее туннельной прозрачностью, которая имеет сложную энергетическую зависимость в силу интерференционной природы квантового транспорта. В данной главе показывается, что для произвольной эрмитовой системы туннельный коэффициент прохождения может быть записан в виде, облегчающем нахождение его максимальных и минимальных значений.

В рамках всей диссертации, и в этой главе в частности, квантовый проводник моделируется как набор узлов с одним локализованным состоянием на каждом, которые туннельно связаны друг с другом. Такой подход позволяет на общих основаниях описывать системы разной природы: полупроводниковые гетероструктуры, квантовые точки, молекулярные проводники, системы оптических волноводов и др.

2.1. Выражение для тока и вероятность туннелирования

2.1.1. Общие соотношения для двухконтактных квантовых проводников

Рассмотрим квантовую структуру, состоящую из N узлов, подключенную к двум контактам, которые условно обозначены как левый (L) и правый (R). Схематично такая система изображена на Рис. 2.1. Гамильтониан всей системы с учетом контактов может быть записан в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_L^{\text{int}} + \hat{H}_R^{\text{int}}, \quad (2.1)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан изолированной структуры (без учета туннельной связи с контактами), $\hat{H}_{L(R)}$ – гамильтониан изолированного левого (правого) контакта и $\hat{H}_{L(R)}^{\text{int}}$ – гамильтониан, описывающий туннельное взаимодействие левого (правого) берега с самой

структурой (туннельный гамильтониан). В узельном представлении гамильтониан изолированной структуры может быть записан как

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i,j=1;i < j}^N (\tau_{ij} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + h.c.). \quad (2.2)$$

Здесь ε_i - энергия локализованного состояния на i -ом узле, τ_{ij} - туннельный интеграл перескока между i -ым и j -ым узлами и $\hat{a}_i^{(\dagger)}$ - оператор уничтожения (рождения) электрона на i -ом узле. Гамильтонианы контактов удобнее записать в диагональном представлении, то есть в базисе стационарных состояний в контактах:

$$\hat{H}_{L(R)} = \sum_p \varepsilon_p^{L(R)} \hat{a}_{L(R),p}^\dagger \hat{a}_{L(R),p}, \quad (2.3)$$

где $\varepsilon_p^{L(R)}$ - энергия электрона на стационарном состоянии в левом (правом) контакте, заданном квантовым числом p и $\hat{a}_{L(R),p}^{(\dagger)}$ - оператор уничтожения (рождения) электрона в этом состоянии. В выражении (2.3) суммирование происходит по всему набору квантовых чисел, определяющих различные состояния в контактах, например, для одномерного контакта переменной суммирования можно сделать квазиимпульс электронов. Наконец гамильтониан туннельного взаимодействия структуры с берегами в выбранных базисах имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{L(R)}^{\text{int}} = \sum_{i=1}^N \sum_p (\gamma_{p,i}^{L(R)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{L(R),p} + h.c.). \quad (2.4)$$

Здесь $\gamma_{p,i}^{L(R)}$ - туннельный матричный элемент между состоянием, локализованным на i -ом узле и состоянии в левом (правом) контакте с квантовым числом p .

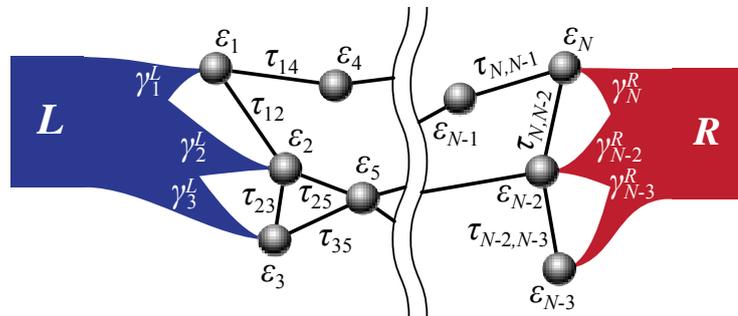


Рис. 2.1. Общий вид произвольного двухконтактного квантового проводника в узельном представлении.

Согласно стандартным методам вычисления стационарного тока в системе, его оператор можно сопоставить с производной по времени от оператора числа частиц в од-

ном из контактов [103,104]. Например, оператор тока из левого контакта можно записать как

$$\hat{I}_L = -e \frac{d\hat{n}_L}{dt} = -\frac{ie}{\hbar} [\hat{H}, \hat{n}_L] = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sum_p (\gamma_{p,i}^L \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{L,p} - \gamma_{p,i}^{L*} \hat{a}_{L,p}^\dagger \hat{a}_i), \quad (2.5)$$

где $\hat{n}_L = \sum_p \hat{a}_{L,p}^\dagger \hat{a}_{L,p}$ – оператор числа частиц в левом контакте и полный гамильтониан системы \hat{H} взят из (2.1). В силу стационарности рассматриваемой задачи ток через левый контакт (2.5) равен току и через всю систему в целом, поэтому далее мы не будем их различать. Усреднение выражения (2.5) по основному состоянию (способ усреднения в стационарном случае не существен) приводит к стандартному выражению для тока через кинетические функции Грина [103,104]:

$$I = I_L = \langle \hat{I}_L \rangle = -\frac{e}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sum_p (\gamma_{p,i}^L G_{L,p;i}^<(t,t) - \gamma_{p,i}^{L*} G_{i;L,p}^<(t,t)), \quad (2.6)$$

где $G_{x,y}^<(t_x, t_y) = i \langle \hat{a}_y^\dagger(t_y) \hat{a}_x(t_x) \rangle$ – кинетическая функция Грина, которая в стационарном случае зависит только от разности времен t_x и t_y и, соответственно, на совпадающих временах, как в (2.6), остается постоянной. В этом определении для кинетической функции Грина времена t_x и t_y берутся на разных ветвях келдышевского контура [105], а именно: t_x – на временно-упорядоченной ветви, а t_y – на анти-временно-упорядоченной ветви [106].

Получить выражение для функции Грина можно, используя метод уравнений движения (УД) [107]. Составим УД для функции Грина, в которой временные аргументы могут быть в произвольных ветвях келдышевского контура:

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p^{L(R)} \right) G_{L,p;i}(t, t') = \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{L*} G_{j;i}(t, t'). \quad (2.7)$$

Получившееся уравнение есть неоднородное линейное дифференциальное уравнение, решение которого можно записать с использованием функции Грина изолированного левого контакта $g_{L,p}$ [108]:

$$G_{L,p;i}(t, t') = \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{L*} \int_C dt_1 g_{L,p}(t, t_1) G_{j;i}(t_1, t'). \quad (2.8)$$

Теперь используем полученное выражение и найдем кинетическую функцию Грина $G_{L,p;i}^<(t, t')$. При этом необходимо учесть, что интегрирование в (2.8) производится по

келдышевскому контуру, который формально состоит из двух действительных временных осей, ориентированных в противоположных направлениях. В результате разбиения области интегрирования и последующего преобразования функций Грина [106], имеем:

$$G_{L,p;i}^<(t,t') = \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{L*} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \left[g_{L,p}^r(t,t_1) G_{j,i}^<(t_1,t') + g_{L,p}^<(t,t_1) G_{j,i}^a(t_1,t') \right]. \quad (2.9)$$

Здесь верхние индексы a и r соответствуют опережающим и запаздывающим функциям Грина соответственно.

Поскольку в стационарном режиме все функции Грина зависят только от разности своих временных аргументов, то в выражении (2.9) можно совершить преобразование Фурье:

$$G_{L,p;i}^<(E) = \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{L*} \left[g_{L,p}^r(E) G_{j,i}^<(E) + g_{L,p}^<(E) G_{j,i}^a(E) \right]. \quad (2.10)$$

Совершенно аналогичным образом можно получить и выражение для Фурье-образа функции $G_{i,L,p}^<$:

$$G_{i,L,p}^<(E) = \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^L \left[G_{i,j}^r(E) g_{L,p}^<(E) + G_{i,j}^<(E) g_{L,p}^a(E) \right]. \quad (2.11)$$

В выражении для тока (2.6) используются только функции Грина с совпадающими временными аргументами, поэтому его можно компактно переписать через Фурье-образы этих функций:

$$I = -\frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_{i,j=1}^N \sum_p \left\{ \gamma_{p,i}^L \gamma_{p,j}^{L*} \left[g_{L,p}^r(E) G_{j,i}^<(E) + g_{L,p}^<(E) G_{j,i}^a(E) \right] - \gamma_{p,i}^{L*} \gamma_{p,j}^L \left[G_{i,j}^r(E) g_{L,p}^<(E) + G_{i,j}^<(E) g_{L,p}^a(E) \right] \right\}. \quad (2.12)$$

Переобозначая индексы суммирования во втором слагаемом и используя стандартные соотношения между функциями Грина [106,109], можно записать выражение для тока через левый контакт следующим образом [110]:

$$I = \frac{ie}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_{i,j=1}^N \rho_L(E) \gamma_i^L(E) \gamma_j^{L*}(E) \left\{ G_{j,i}^<(E) + f_L(E) \left[G_{j,i}^r(E) - G_{j,i}^a(E) \right] \right\}, \quad (2.13)$$

где f_L – функция распределения Ферми-Дирака в левом контакте. При переходе от выражения (2.12) к (2.13) была произведена замена суммирования по квантовым числам в контакте интегрированием по энергии с учетом плотности состояний ρ_L , а также использовались стандартные выражения для функций Грина равновесной системы невза-

имодельствующих электронов. Более компактной записи выражения (2.13) можно добиться введением величины

$$\Gamma_{ij}^L(E) = \pi \rho_L(E) \gamma_i^L(E) \gamma_j^{L*}(E), \quad (2.14)$$

с помощью которой получим следующий вид записи:

$$I = \frac{2ie}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \text{Tr} \left(\Gamma^L(E) \left\{ \mathbf{G}^<(E) + f_L(E) [\mathbf{G}^r(E) - \mathbf{G}^a(E)] \right\} \right). \quad (2.15)$$

Здесь введены матричные функции Грина и величина Γ^L , в (i, j) позиции которых стоят их значения для соответствующих узельных индексов. При этом суммирование по узельным индексам заменяется матричным умножением и взятием следа.

В стационарном режиме можно воспользоваться соотношениями для функций Грина [106,111], которые в узельном представлении в матричном виде будут иметь следующий вид [110]:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^<(E) &= 2i\mathbf{G}^r(E) [f_L(E)\Gamma^L(E) + f_R(E)\Gamma^R(E)]\mathbf{G}^a(E), \\ \mathbf{G}^r(E) - \mathbf{G}^a(E) &= -2i\mathbf{G}^r(E) [\Gamma^L(E) + \Gamma^R(E)]\mathbf{G}^a(E). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Подставляя (2.16) в (2.15), можно получить стандартное выражение для тока через двух-контактную систему:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} 4 \text{Tr} [\Gamma^L(E)\mathbf{G}^r(E)\Gamma^R(E)\mathbf{G}^a(E)] \cdot [f_L(E) - f_R(E)] dE. \quad (2.17)$$

Исходя из вида формулы (2.17) можно интерпретировать подынтегральное выражение как вероятность туннелирования (коэффициент прохождения) через систему:

$$T(E) = 4 \text{Tr} [\Gamma^L(E)\mathbf{G}^r(E)\Gamma^R(E)\mathbf{G}^a(E)]. \quad (2.18)$$

Опережающая функция Грина в матричной записи легко соотносится с запаздывающей:

$\mathbf{G}^a = (\mathbf{G}^r)^\dagger$, которую, в свою очередь, нетрудно вычислить методом УД:

$$\mathbf{G}^r(E) = [\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}(E)]^{-1}, \quad (2.19)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица размера $N \times N$ и \mathbf{H}_{eff} – эффективный гамильтониан Фешбаха [11–13], записанный в узельном представлении в матричной форме:

$$\mathbf{H}_{eff}(E) = \mathbf{H}_0 + \delta^L(E) + \delta^R(E) - i\Gamma^L(E) - i\Gamma^R(E). \quad (2.20)$$

Здесь Γ^L определено в соответствии с (2.14), Γ^R определено аналогично и

$$\delta_{ij}^{L(R)}(E) = p.v. \int \frac{\rho_{L(R)}(E') \gamma_i^{L(R)}(E') \gamma_j^{L(R)*}(E')}{E - E'} dE'. \quad (2.21)$$

Определение прозрачности в виде (2.18) называется соотношением Фишера-Ли [112], и оно будет использовано далее для анализа свойств коэффициента прохождения квантовых систем.

2.1.2. Линейная цепочка узлов

2.1.2.1. Произвольная линейная цепочка

Одномерная линейная структура представляет собой важную модель для теоретических исследований, так как она позволяет описывать транспортные свойства не только молекулярных систем, но также, например, полупроводниковых резонансно-туннельных гетероструктур. Именно в таких системах впервые был рассмотрен эффект слияния (коллапса) резонансов [29,30]. Рассмотрим произвольную линейную структуру в виде набора из N локализованных состояний ε_i ($i \in \{1, \dots, N\}$), связанных с ближайшими соседями туннельными матричными элементами $\tau_{i,i+1} = \tau_i$ ($i \in \{1, \dots, N-1\}$). Схематично такая структура изображена на Рис. 2.2.

Гамильтониан системы может быть записан в виде (2.1) со следующими слагаемыми:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i=1}^{N-1} (\tau_i \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i + h.c.), \\ \hat{H}_L^{\text{int}} &= \sum_p (\gamma_p^L \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{L,p} + h.c.), \\ \hat{H}_R^{\text{int}} &= \sum_p (\gamma_p^R \hat{a}_N^\dagger \hat{a}_{R,p} + h.c.). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Поскольку связь берегов с системой осуществляется только через крайние узлы, то в матричной записи величин $\Gamma^{L(R)}$ будет только по одному ненулевому элементу:

$$\begin{aligned} \Gamma_{11}^L &= \Gamma_L = \pi \rho_L |\gamma^L|^2, \\ \Gamma_{NN}^R &= \Gamma_R = \pi \rho_R |\gamma^R|^2. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Поэтому в этом случае выражение (2.18) для вероятности туннелирования сильно упрощается:

$$T = 4\Gamma_L \Gamma_R G_{1N}^r G_{N1}^a = 4\Gamma_L \Gamma_R |G_{1N}^r|^2. \quad (2.24)$$

В формуле (2.24) для краткости не указана явно зависимость всех величин от энергии, она подразумевается. Явная зависимость в общих выражениях будет опущена и далее, кроме тех случаев, когда на этом необходимо заострить внимание.

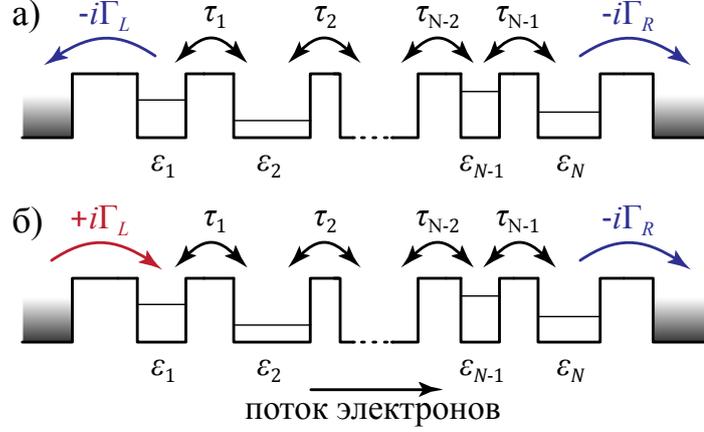


Рис. 2.2. Общий вид произвольной резонансно-туннельной структуры с одним уровнем в каждой яме [2]. Наглядное изображение граничных условий для эффективного гамильтониана (а) и для вспомогательного (б).

Еще одно существенное упрощение в линейной одномерной системе возникает в силу того, что связь между узлами описывается в виде интегралов перескока с ближайшими соседями, при этом эффективный гамильтониан в матричной форме принимает трехдиагональный вид:

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + \delta_L - i\Gamma_L & \tau_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \tau_1^* & \varepsilon_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{N-1} & \tau_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdots & \tau_{N-1}^* & \varepsilon_N + \delta_R - i\Gamma_R \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Здесь $\Gamma_{L(R)}$ определены в (2.23) и

$$\begin{aligned} \delta_L(E) &= \delta_{11}^L(E) = p.v. \int \frac{\rho_L(E') |\gamma_1^L(E')|^2}{E - E'} dE', \\ \delta_R(E) &= \delta_{NN}^R(E) = p.v. \int \frac{\rho_R(E') |\gamma_N^R(E')|^2}{E - E'} dE'. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Мнимые слагаемые на диагонали \mathbf{H}_{eff} в (2.25), нарушающие его эрмитовость, соответствуют только процессам ухода электронов из системы в берега (см. Рис. 2.2а). Появление такого рода неэрмитовости свидетельствует о том, что система перестала быть за-

крытой и стала открытой за счет обмена частицами с окружением. При этом все состояния в ней становятся квазистационарными с конечным временем жизни.

В соответствии с (2.24) для вычисления туннельной прозрачности системы необходимо знать запаздывающую функцию Грина G_{1N}^r , которая в силу трехдиагональности эффективного гамильтониана (2.25) может быть записана в виде:

$$G_{1N}^r = \left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})^{-1} \right]_{1N} = \frac{\tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1}}{\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})}. \quad (2.27)$$

Таким образом, прозрачность может быть записана как

$$T = \frac{|P|^2}{|\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})|^2}, \quad (2.28)$$

где введено обозначение

$$P = 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} \tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1}. \quad (2.29)$$

Важно отметить, что величина P не обращается в ноль везде, где не равны нулю Γ_L и Γ_R , то есть внутри зон обоих берегов $P \neq 0$ (обращается в ноль на краях зон). Поэтому при рассмотрении транспортной задачи условие $P \neq 0$ можно считать заведомо выполненным. Рассмотрим знаменатель выражения (2.27) более подробно. Используя явный вид эффективного гамильтониана, его характеристический определитель можно разложить следующим образом:

$$\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}) = D_0^0 + i\Gamma_L D_0^1 + i\Gamma_R D_1^0 - \Gamma_L \Gamma_R D_1^1. \quad (2.30)$$

Здесь D_q^p , обозначает определитель матрицы $(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0 - \delta^L - \delta^R)$ с вычеркнутыми p первыми строками и столбцами и q последними строками и столбцами. Величины D_q^p действительны (для действительных значений энергии E), так как единственно возможные комплексные величины, которые могут встретиться в выражении для D_q^p , входят в него умноженные на свои комплексно сопряженные. Таким образом, если из квадрата модуля выражения (2.30) вычесть и прибавить величину $|P|^2$, то его можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} |\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})|^2 &= |D_0^0 + i\Gamma_L D_0^1 + i\Gamma_R D_1^0 - \Gamma_L \Gamma_R D_1^1|^2 - |P|^2 + |P|^2 = \\ &= (D_0^0 - \Gamma_L \Gamma_R D_1^1)^2 + (\Gamma_L D_0^1 + \Gamma_R D_1^0)^2 + |P|^2 + \\ &+ 4\Gamma_L \Gamma_R (D_0^0 D_1^1 - D_0^1 D_1^0) = |Q|^2 + |P|^2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

где

$$|Q|^2 = (D_0^0 + \Gamma_L \Gamma_R D_1^1)^2 + (\Gamma_L D_0^1 - \Gamma_R D_1^0)^2. \quad (2.32)$$

Это выражение задает величину Q с точностью до произвольного фазового множителя.

Используя эту степень свободы Q можно определить как:

$$Q = D_0^0 - i\Gamma_L D_0^1 + i\Gamma_R D_1^0 + \Gamma_L \Gamma_R D_1^1. \quad (2.33)$$

Сравнивая выражения (2.33) и (2.30), нетрудно заметить, что Q представляет собой характеристический определитель некоторого неэрмитового *вспомогательного* гамильтониана \mathbf{H}_{aux} [2]:

$$Q = \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{aux}), \quad (2.34)$$

где

$$\mathbf{H}_{aux} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + \delta_L + i\Gamma_L & \tau_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \tau_1^* & \varepsilon_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{N-1} & \tau_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdots & \tau_{N-1}^* & \varepsilon_N + \delta_R - i\Gamma_R \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Вспомогательный гамильтониан имеет на главной диагонали мнимые слагаемые разного знака, что соответствует процессам прихода и ухода электронов (см. Рис. 2.2б). Впервые сведение задачи рассеяния к задаче на собственные функции неэрмитового гамильтониана с мнимыми поправками противоположных знаков было показано в [90,91].

Таким образом, подставляя (2.31) в (2.28), можно получить вероятность туннелирования в виде [1,2]:

$$T = \frac{|P|^2}{|P|^2 + |Q|^2}. \quad (2.36)$$

Нетрудно убедиться, что при $N=1$ узле с локализованным состоянием выражение для прозрачности переходит в обычное соотношение Брейта-Вигнера. В связи с этим это выражение можно трактовать как обобщение соотношения Брейта-Вигнера на случай линейных систем из $N > 1$ узлов. Ключевой особенностью выражения (2.36) служит то, что оно позволяет найти *точные* положения (энергии) единичных максимумов туннельной прозрачности как действительные нули величины Q , которые в силу определения (2.34) представляют собой действительные собственные значения неэрмитового вспомогательного гамильтониана. Важно отметить, что в силу наличия собственно-

энергетических частей $\delta_{L(R)}$ и $\Gamma_{L(R)}$, которые, вообще говоря, могут сами зависеть от энергии, задача на собственные значения вспомогательного гамильтониана становится нелинейной. Такого рода особенности могут приводить к разным нетривиальным эффектам как, например, в работе [113].

2.1.2.2. Симметричная линейная цепочка

Собственные значения неэрмитового гамильтониана \mathbf{H}_{aux} , вообще говоря, комплексны, хотя они могут быть и действительными (см. Приложение А). Однако, если этот гамильтониан еще дополнительно удовлетворяет условию PT -симметричности [53], то он может обладать полностью действительным спектром, то есть все резонансные максимумы прозрачности в такой структуре будут единичными. В этом случае при изменении параметров системы может произойти нарушение PT -симметричности вспомогательного гамильтониана, которое приводит к превращению действительных собственных значений в пары комплексно-сопряженных с ненулевой мнимой частью в особой точке вспомогательного гамильтониана. При этом будет наблюдаться слияние (коллапс) резонансов.

Нетрудно видеть, что PT -симметричным вспомогательным гамильтонианом будет обладать симметричная линейная система с одинаковым взаимодействием с каждым из контактов: $\varepsilon_i = \varepsilon_{N+1-i}$, $\tau_i = \tau_{N-i}$ для всех i , $\delta_L = \delta_R$ и $\Gamma_L = \Gamma_R$. Операция зеркального отражения (P) приводит к отображению: $\varepsilon_i \mapsto \varepsilon_{N+1-i}$, $\tau_i \mapsto \tau_{N-i}^*$, $\delta_L \mapsto \delta_R$ и $-i\Gamma_L \mapsto i\Gamma_R$, а последующая операция инверсии времени (T) соответствует комплексному сопряжению. В силу выше упомянутых свойств симметричной системы последовательное применение операций P и T переводит вспомогательный гамильтониан сам в себя.

Для дальнейших рассуждений ограничимся случаем $\varepsilon_i = \varepsilon_0$ для всех i и независимыми от энергии $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma = const$, что, в свою очередь, приводит к условию

$$\delta_L = \delta_R = 0, \quad (2.37)$$

которое физически соответствует *пределу широкой зоны* (wide band limit) или *золотому правилу Ферми* (Fermi golden rule) [114] (в случае резонансно-туннельных структур это также может соответствовать расположению энергии локализованных состояний в ямах на полувысоте барьеров [115,116]). В этом случае величина Q как функция энергии па-

дающего электрона будет многочленом с действительными коэффициентами. Более того, нетрудно показать (подробнее см. Приложение Б), что Q есть многочлен степени $N/2$ от $(E - \varepsilon_0)^2$ при четном N и многочлен степени $(N-1)/2$ от $(E - \varepsilon_0)^2$, умноженный на $(E - \varepsilon_0)$ при нечетном N . Проиллюстрируем этот вывод выражениями для многочлена Q для систем с $N = 2, 3, 4, 5$ узлами (квантовыми ямами) [1]:

$$\begin{aligned}
 Q_2(E) &= (E - \varepsilon_0)^2 - |\tau_1|^2 + \Gamma^2, \\
 Q_3(E) &= (E - \varepsilon_0) \left[(E - \varepsilon_0)^2 - 2|\tau_1|^2 + \Gamma^2 \right], \\
 Q_4(E) &= (E - \varepsilon_0)^4 - (E - \varepsilon_0)^2 (2|\tau_1|^2 + |\tau_2|^2 - \Gamma^2) + \\
 &\quad + |\tau_1|^4 - |\tau_2|^2 \Gamma^2, \\
 Q_5(E) &= (E - \varepsilon_0) \left[(E - \varepsilon_0)^4 - (E - \varepsilon_0)^2 (2|\tau_1|^2 + 2|\tau_2|^2 - \Gamma^2) + \right. \\
 &\quad \left. + |\tau_1|^4 + 2|\tau_1|^2 |\tau_2|^2 - 2|\tau_2|^2 \Gamma^2 \right].
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

Здесь нижний индекс соответствует количеству узлов в системе. Анализируя выражения (2.38), можно заметить, что корень $E = \varepsilon_0$ многочлена Q_N может стать N -кратно вырожденным при определенном (критическом) соотношении между интегралами перекока τ_i и Γ . Так, например, $Q_2(E) = (E - \varepsilon_0)^2$ при $|\tau_1| = \Gamma$ и $Q_3(E) = (E - \varepsilon_0)^3$ при $|\tau_1| = \Gamma/\sqrt{2}$. Вообще говоря, для произвольного N это утверждение не имеет строгого доказательства, хотя количество независимых параметров в N -узельной системе достаточно, чтобы полностью управлять коэффициентами многочлена Q_N . Тем не менее, в работе [102] была продемонстрирована справедливость этого утверждения вплоть до $N = 13$ (см. Табл. 2.1).

Процесс слияния действительных собственных значений в особой точке неэрмитового гамильтониана в пару комплексно сопряженных происходит попарно [58,117]. Применительно к вспомогательному гамильтониану это означает, что процесс слияния резонансов в общем положении происходит попарно, в результате чего пара единичных резонансов превращается сначала в один широкий резонанс и при дальнейшем варьировании параметра уменьшается по амплитуде. Однако, при определенных параметрах системы можно добиться того, что такие попарные слияние многих резонансов произойдут в одной точке. Очевидно, что если в слиянии участвует четное число резонансов, то при дальнейшем изменении параметров полученный резонанс будет по амплитуде

меньше единицы. Если же число сливающихся резонансов нечетное, то один резонанс останется без пары и ни с чем не сольется, что приведет сохранению прозрачности в резонансе на уровне единицы при дальнейшем варьировании параметров. В самой особой точке вспомогательного гамильтониана, где происходит N -кратное вырождение его действительного собственного значения коэффициент прохождения, в соответствии с (2.36) принимает существенно не Брейт-Вигнеровский вид:

$$T_{N \text{ Res. Coal.}}(E) = \frac{\tilde{\Gamma}^{2N}}{(E - \varepsilon_0)^{2N} + \tilde{\Gamma}^{2N}}. \quad (2.39)$$

Табл. 2.1. Критические соотношения между параметрами линейной N -узельной системы, при которых происходит N -кратное вырождение корня $E = \varepsilon_0$ многочлена $Q_N(E)$. В силу трудоемкости расчетов при $N > 6$ приведены только численные значения. По материалам работ [1,102].

N	$ \tau_1 /\Gamma$	$ \tau_2 /\Gamma$	$ \tau_3 /\Gamma$	$ \tau_4 /\Gamma$	$ \tau_5 /\Gamma$	$ \tau_6 /\Gamma$
2	1	–	–	–	–	–
3	$1/\sqrt{2}$	–	–	–	–	–
4	$\sqrt{\sqrt{2}-1}$	$\sqrt{2}-1$	–	–	–	–
5	$\sqrt{\frac{1}{2}(3-\sqrt{5})}$	$\sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{5}-1)}$	–	–	–	–
6	$\sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{3}-1)}$	$\sqrt{\frac{1}{2}(3\sqrt{3}-5)}$	$2-\sqrt{3}$	–	–	–
7	0,597408	0,296896	0,234432	–	–	–
8	0,593	0,287	0,216	0,199	–	–
9	0,589	0,281	0,205	0,179	–	–
10	0,587	0,276	0,197	0,167	0,158	–
11	0,585	0,273	0,192	0,158	0,145	–
12	0,584	0,270	0,188	0,152	0,136	0,132
13	0,583	0,268	0,185	0,148	0,130	0,122

Здесь $\tilde{\Gamma} = \sqrt[N]{\Gamma |\tau_1^{cr}| \cdots |\tau_{N-1}^{cr}|}$ – эффективная ширина полученного резонанса, а τ_i^{cr} – критические значения интегралов перескока, соответствующие слиянию резонансов. Впервые

такая особенность прозрачности для $N=2$ была установлена в [30]. Важно отметить, что при фиксированной величине связи с берегами Γ эффективная ширина резонанса $\tilde{\Gamma}$ уменьшается с ростом N , так как уменьшаются $|\tau_i^{cr}|$ (см. Табл. 2.1).

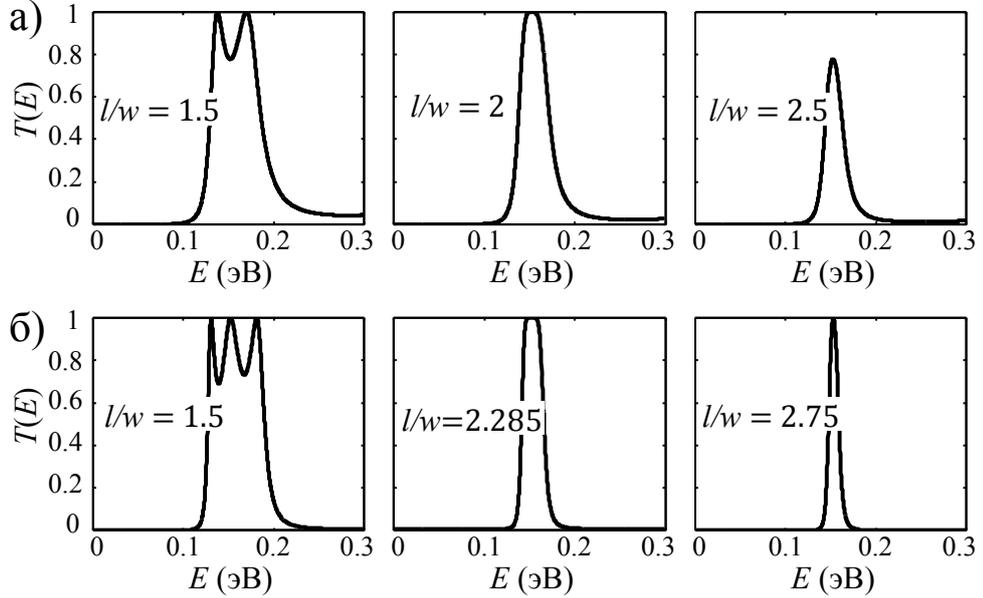


Рис. 2.3. Численно рассчитанные профили коэффициента прохождения для $N=2$ (а) и $N=3$ -явной (б) структур при различных соотношениях между толщинами центральных и крайних барьеров [2]. Центральные графики в каждом ряду соответствуют режиму слияния резонансов.

В качестве иллюстративного примера рассмотрим применимость полученных выводов к непрерывной одномерной модели. Для этого проведем численное решение одномерного уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (2.40)$$

где кусочно-постоянный потенциал $U(x)$ описывает N -ямную резонансно-туннельную структуру. Для численного решения этого уравнения воспользуемся методом матрицы переноса [118]. На Рис. 2.3 изображены профили вероятности туннелирования для $N=2$ и $N=3$ -явной структур при различных значениях ширины центрального(ых) барьера(ов) l . Остальные параметры приняты следующими: высота барьеров $V=0,3$ эВ, эффективная масса электронов $m^*=0,067m_0$, ширина крайних барьеров $w=2$ нм и ширина ям $a=3,0485$ нм, которая выбрана таким образом, чтобы расположить уровень локализованного состояния на середине высоты барьера для выполнения условия (2.37).

2.1.3. Произвольный двухконтактный квантовый проводник

В предыдущем разделе было показано, что прозрачность произвольной линейной структуры может быть записана в виде (2.36). Это было сделано с использованием свойства трехдиагональности гамильтониана линейной системы. Однако, этот вывод можно существенно обобщить и показать, что выражение (2.36) справедливо и в случае произвольной системы с двумя контактами.

2.1.3.1. Общие соотношения

Возвращаясь к описанию произвольной двухконтактной квантовой системы важно отметить, что величины, описывающие взаимодействие системы с контактами ($\Gamma^{L(R)}$), в соответствии с их определением (2.14), могут быть записаны в стандартном факторизованном виде [119]:

$$\Gamma^{L(R)} = \mathbf{u}_{L(R)} \mathbf{u}_{L(R)}^\dagger, \quad (2.41)$$

где

$$\mathbf{u}_{L(R)} = \sqrt{\pi \rho_{L(R)}} \begin{pmatrix} \gamma_1^{L(R)} \\ \vdots \\ \gamma_N^{L(R)} \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Здесь и далее в записях формул опускается явная зависимость величин от энергии, хотя она подразумевается.

Для компактности последующих выкладок введем следующее обозначение:

$$\mathbf{A} = E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0 - \delta^L - \delta^R. \quad (2.43)$$

Матрица \mathbf{A} эрмитова в силу эрмитовости гамильтониана \mathbf{H}_0 и величин $\delta^{L(R)}$, определяемых выражением (2.21). Этот факт служит необходимым условием справедливости всех следующих выкладок в данной главе. Используя это обозначение, факторизацию (2.41) и выражение для запаздывающей ФГ (2.19), можно переписать соотношение (2.18) в виде [3]:

$$T = 4 \left| \mathbf{u}_R^\dagger \left(\mathbf{A} + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger \right)^{-1} \mathbf{u}_L \right|^2. \quad (2.44)$$

Применим теперь формулу Шермана-Моррисона [120] и лемму об определителе матрицы [121], в результате чего получим:

$$T = \frac{4|\det \mathbf{A}|^2 |\mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L|^2}{\left| \det(\mathbf{A} + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger) \right|^2}. \quad (2.45)$$

Нетрудно, видеть, что в знаменателе формулы (2.45) стоит характеристический определитель эффективного гамильтониана системы. Числитель этого выражения можно представить как квадрат модуля некоторой, в общем случае, зависящей от энергии величины:

$$P = 2\mathbf{u}_R^\dagger \text{adj}(\mathbf{A}) \mathbf{u}_L, \quad (2.46)$$

которая определена с точностью до фазового множителя. Здесь $\text{adj}(\mathbf{A})$ – присоединенная матрица матрицы \mathbf{A} . Выделяя в знаменателе (2.45) слагаемое $4|\det \mathbf{A}|^2 |\mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L|^2 = |P|^2$ и используя лемму об определителе, можно получить, что

$$\left| \det(\mathbf{A} + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger) \right|^2 = |P|^2 + |Q|^2, \quad (2.47)$$

где

$$Q = \det(\mathbf{A} - i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger). \quad (2.48)$$

Таким образом, аналогично тому, что было показано для линейных структур, в случае произвольной двухтерминальной квантовой системы вероятность туннелирования может быть записана в виде (2.36), где Q также представляет собой характеристический определитель вспомогательного гамильтониана \mathbf{H}_{aux} :

$$\mathbf{H}_{aux} = \mathbf{H}_0 + \delta^L + \delta^R + i\Gamma^L - i\Gamma^R. \quad (2.49)$$

Изменение знака только перед одной из величин $\Gamma^{L(R)}$ в выражении для вспомогательного гамильтониана по сравнению с эффективным [см. (2.20)] соответствует другому типу граничных условий, а именно – условий задачи рассеяния [2,3,90,91]. Принципиальным отличием произвольной квантовой системы от линейной служит то, что в первом случае величина P может обращаться в ноль при действительных энергиях, лежащих внутри зоны берегов. Такие нули могут соответствовать нулям прозрачности всей системы, если только не совпадают с нулями Q . В этом случае возникают связанные состояния в непрерывном спектре, которые подробнее рассмотрены в ниже.

Важно отметить, что описанный формализм, позволяющий точно определять положения нулевой и единичной прозрачности произвольной двухтерминальной квантовой системы не ограничивается только действительными величинами интегралов пере-

скока τ_{ij} и $\gamma_i^{L(R)}$. Соответственно, фазовые сдвиги $\Delta\varphi = e/\hbar \int_{\text{tunn. path}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$ этих интегралов перескока за счет влияния внешнего поля с вектор-потенциалом \mathbf{A} могут быть корректно учтены, что позволяет описывать, интерференционные эффекты типа Ааронова-Бома [48,49,122,123].

2.1.3.2. Слияние антирезонансов

Выражение для туннельной прозрачности в форме (2.36) позволяет не только описывать точные положения резонансов и антирезонансов, но также и их слияние. В отличие от линейных структур, в многосвязных системах существуют нулевые антирезонансы, которые также могут сливаться подобно резонансам [3]. Рассмотрим структуру, состоящую из двух одинаковых линейных цепочек по N узлов в каждой, взаимодействующие друг с другом только через туннельные матричные элементы τ между крайними узлами (см. Рис. 2.4а). Контакты подключены только к одной из цепочек: левый – к первому узлу, а правый – к последнему через матричные элементы $\gamma_1^L = \gamma_L$ и $\gamma_N^R = \gamma_R$ соответственно. Такую структуру также можно рассматривать и как замкнутое кольцо, к которому контакты подключены так, что различные пути между ними отличаются числом узлов на два. Такое соединение можно назвать обобщенным мета-соединением, интенсивно изучаемым в области ароматических соединений [124]. Гамильтониан такой системы с учетом контактов имеет общий вид (2.1), с \hat{H}_0 имеющем блочную структуру [3]:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + (\hat{\Omega}_{12} + h.c.), \\ \hat{H}_1 &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i=1}^{N-1} (\tau_i \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i + h.c.), \\ \hat{H}_2 &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \sum_{i=1}^{N-1} (\tau_i \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i + h.c.), \\ \hat{\Omega}_{12} &= \tau \hat{b}_1^\dagger \hat{a}_1 + \tau \hat{b}_N^\dagger \hat{a}_N.\end{aligned}\tag{2.50}$$

Здесь операторы \hat{a}_i и \hat{b}_i относятся к i -ому узлу первой и второй цепочки соответственно. Слагаемое $\hat{H}_{1(2)}$ описывает первую (вторую) линейную структуру в отдельности, а $\hat{\Omega}_{12}$ – их взаимодействие.

Предположим теперь, что рассматриваемые цепочки симметричны ($\tau_i = \tau_{N-i}$) и имеют одинаковые энергии локализованных состояний на узлах ($\varepsilon_i = \varepsilon_0$ для всех i). Ис-

пользуя соотношение (2.46), можно получить выражение для функции P этой системы (Приложение В):

$$P = 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} \tau_1 \cdots \tau_{N-1} \det(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{zero}), \quad (2.51)$$

где \mathbf{H}_{zero} – PT -симметричный гамильтониан:

$$(\mathbf{H}_{zero})_{mn} = (\mathbf{H}_2)_{mn} + i|\tau|(\delta_{m1}\delta_{n1} - \delta_{mN}\delta_{nN}). \quad (2.52)$$

Действительные собственные значения этого гамильтониана определяют нули прозрачности. Таким образом, для зеркально симметричных цепочек с одинаковыми узлами может иметь место N кратное слияние нулей прозрачности, соответствующее N -кратной особой точке гамильтониана \mathbf{H}_{zero} . Исходя из результатов работ [1,2], можно сделать вывод о том, что при слиянии четного числа нулей образуется антирезонанс с ненулевой прозрачностью, а при слиянии нечетного числа – с нулевой. В самой точке слияния антирезонансов, в соответствии с общей формулой (2.36), выражение для прозрачности будет иметь вид:

$$T(E) = \frac{(E - \varepsilon_0)^{2N}}{(E - \varepsilon_0)^{2N} + \tilde{\Gamma}^{2N}}. \quad (2.53)$$

Здесь, вообще говоря, $\tilde{\Gamma}$ может быть функцией от энергии, но при этом $\tilde{\Gamma}(\varepsilon_0) \neq 0$.

Для иллюстрации рассмотрим две структуры, состоящие из двух цепочек по $N=2$ и $N=3$ узла в каждой. Берега в обоих случаях будем считать полубесконечными цепочками с межузельным интегралом перескока J , который принят за единицу энергии. На Рис. 2.4б показаны положения действительных корней и действительных частей комплексных корней функций P и Q структуры с двухузельными цепочками как функции величины $|\tau|$, а на Рис. 2.4в показано то же самое для структуры с трехузельными цепочками. В обоих случаях параметры выбраны следующим образом: $|\tau_1|=1$, $|\gamma_L|=|\gamma_R|=\gamma=1$ и $\varepsilon_0=0$. Слияние действительных корней функции P (показаны толстой зеленой линией на Рис. 2.4б и Рис. 2.4в) в самом деле соответствует слиянию нулей прозрачности, так как происходит в точке, где $Q \neq 0$. Для рассмотренных примеров нетрудно получить условия слияния резонансов: $|\tau|=1$ для двухузельных цепочек (Рис. 2.4б) и $|\tau|=\sqrt{2}$ для трехузельных (Рис. 2.4в). Также из этих графиков видна принципиальная разница между слиянием четного и нечетного числа антирезонансов. На Рис. 2.4г изоб-

ражены спектры пропускания структуры из двух трехузельных цепочек для значений $|\tau|$, соответствующих слиянию антирезонансов ($|\tau|=\sqrt{2}$), слиянию двух пар резонансов ($|\tau|=1$) и некоторому промежуточному положению ($|\tau|=1.2$). При $|\tau|=\sqrt{2}$ наблюдается единичная прозрачность на краю зоны, что соответствует положению действительных нулей Q точно на краю зоны (см. Рис. 2.4в).

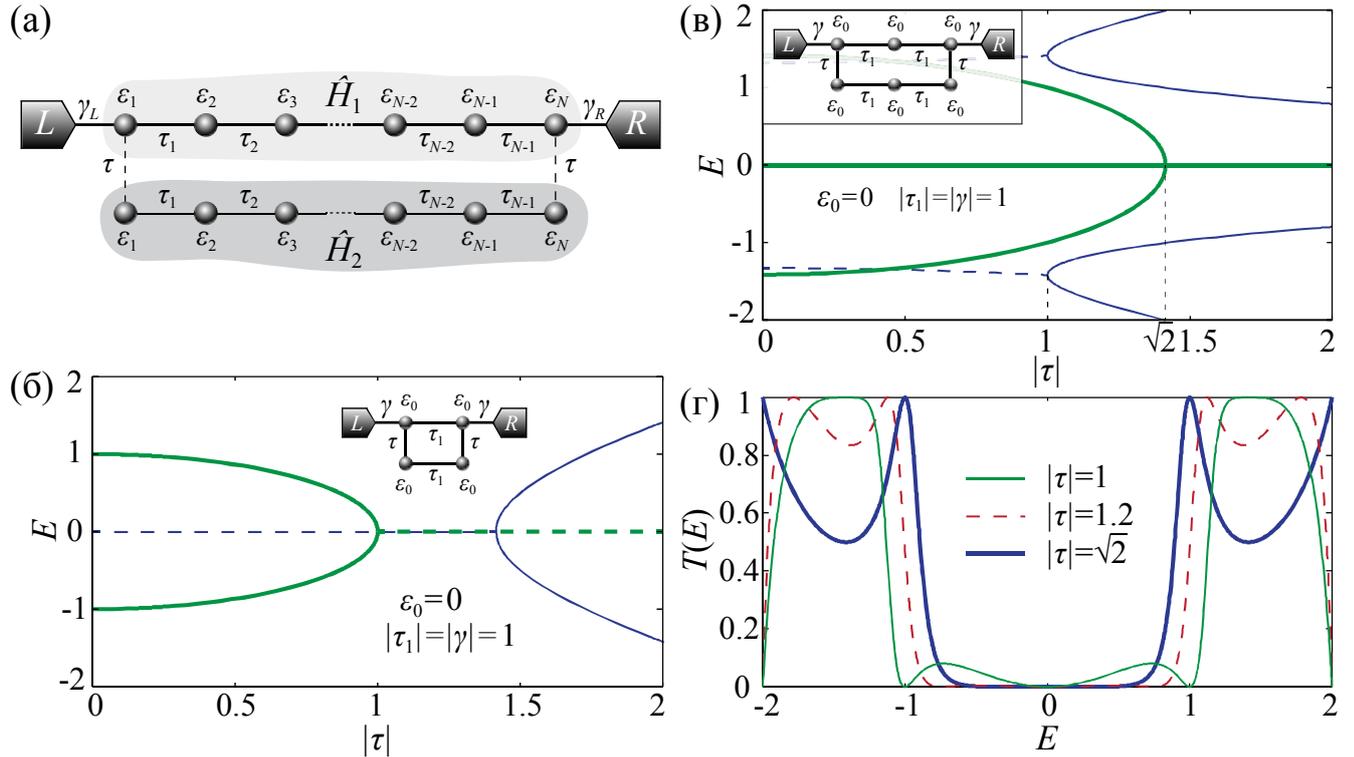


Рис. 2.4. Слияние антирезонансов в системе из двух одинаковых линейных структур [3]. Общий вид структуры, состоящей из двух линейных цепочек (а). Положение действительных нулей функции P (жирная зеленая линия) и функции Q (тонкая синяя линия), рассчитанных для двух-цепочечных структур, состоящих из двух (б) и трех (в) узлов (показаны на вставках). Сплошные линии соответствуют действительным нулям, а пунктирные – действительным частям комплексных нулей. Профиль спектра пропускания в режиме слияния антирезонансов (жирная синяя линия), слияния резонансов (тонкая зеленая линия) и в промежуточном положении (красная пунктирная линия). Все энергетические величины измерены в единицах J .

2.2. Спонтанное нарушение симметрии распределения электронной плотности в симметричной структуре при слиянии резонансов

2.2.1. Общие соотношения для линейных квантовых систем

В работе [30] было впервые отмечено, что слияние (коллапс) резонансов в задачи рассеяния на симметричной трехбарьерной структуре сопровождается нарушением симметрии волновой функции туннелирующего электрона. Однако, нарушение распределение электронной плотности при слиянии резонансов наблюдается и в произвольной симметричной линейной структуре [1,2]. В самом деле, рассмотрим симметричную линейную структуру из N узлов, в которой возможно слияние N резонансов (как было показано выше в разделе 2.1.2.2). В формализме неравновесных функций Грина концентрацию электронов в i -ом узле такой системы можно определить следующим образом [106,125]:

$$n_i = \frac{\Gamma}{2\pi} \left(f_L |G_{i1}^r|^2 + f_R |G_{iN}^r|^2 \right), \quad (2.54)$$

где $f_{L(R)}$ - функция распределения Ферми-Дирака в левом (правом) контакте. Пропагаторы G_{i1}^r и G_{iN}^r могут быть найдены как соответствующие матричные элементы резольвенты эффективного гамильтониана системы: $G_{i1}^r = \left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})^{-1} \right]_{i1}$ и $G_{iN}^r = \left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})^{-1} \right]_{iN}$.

Из выражения (2.54) видно, что концентрация в $(N+1-i)$ -ом узле системы, который симметричен i -ому, будет зависеть только от абсолютных значений пропагаторов $G_{N+1-i,1}^r$ и $G_{N+1-i,N}^r$, которые в силу симметрии системы будут равны абсолютным значениям G_{iN}^r и G_{i1}^r соответственно. Следовательно, разность концентраций электронов в симметричных узлах будет

$$n_i - n_{N+1-i} = \frac{\Gamma}{2\pi} (f_L - f_R) \left(|G_{i1}^r|^2 - |G_{iN}^r|^2 \right). \quad (2.55)$$

Используя обозначения раздела 2.1.2.1 для миноров D_q^p матрицы \mathbf{A} , можно записать следующее выражение для последнего сомножителя в правой части равенства соотношения (2.55):

$$|G_{i1}^r|^2 - |G_{iN}^r|^2 = \frac{(D_0^i)^2 |\tau_1|^2 \cdots |\tau_{i-1}|^2 - (D_{N+1-i}^0)^2 |\tau_i|^2 \cdots |\tau_{N-1}|^2}{(D_0^0)^4 \Delta^4} \times \\ \times \left\{ (D_0^0)^2 + \Gamma^2 \left[(D_0^1)^2 - |\tau_1|^2 \cdots |\tau_{N-1}|^2 \right] \right\}, \quad (2.56)$$

где учтено, что в симметричной структуре $D_q^p = D_p^q$ и

$$\Delta = 1 - 2(\delta - i\Gamma) \frac{D_1^0}{D_0^0}. \quad (2.57)$$

Второй сомножитель в правой части выражения (2.56) есть ни что иное как $D_0^0 Q$, что нетрудно заметить, зная, что в симметричной системе $Q = D_0^0 + \Gamma^2 D_1^1$, и используя тождество $D_1^0 D_0^1 - D_0^0 D_1^1 = |\tau_1|^2 \cdots |\tau_{N-1}|^2$. Таким образом, имеем разность электронной плотности в симметричных узлах:

$$n_i - n_{N+1-i} = \frac{\Gamma}{2\pi} (f_L - f_R) \frac{(D_0^i)^2 |\tau_1|^2 \cdots |\tau_{i-1}|^2 - (D_{N+1-i}^0)^2 |\tau_i|^2 \cdots |\tau_{N-1}|^2}{(D_0^0)^3 \Delta^2} \times Q. \quad (2.58)$$

Ключевая особенность выражения (2.58) состоит в том, что $n_i - n_{N+1-i} \propto Q$. Таким образом концентрация электронов соотносится с микроскопическими свойствами гамильтониана системы, которые включает в себя Q . Действительная энергия E_r , соответствующая единичной прозрачности, есть действительный корень Q . При энергии этого резонанса $Q(E_r) = 0$ и, соответственно, $n_i(E_r) - n_{N+1-i}(E_r) = 0$ для любого i , что означает симметричное распределение электронной плотности. Однако, для резонанса с прозрачностью меньшей единицы значение функции Q в точке резонанса E_c будет ненулевым. Соответственно, ненулевым будет и разность концентраций электронов в симметричных узлах. Таким образом, когда при слиянии четного числа резонансов происходит переход от идеальной прозрачности к резонансу с амплитудой меньше единицы, происходит и нарушение симметрии распределения электронной плотности.

2.2.2. Примеры численного расчета волновых функций в гетероструктурах

В качестве примера рассмотрим численный расчет коэффициента прохождения и волновой функции электрона при эффекте слияния резонансов в гетероструктурах. Для

этого численно решим одномерное уравнение Шредингера в приближении эффективной массы:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.59)$$

с кусочно-постоянным потенциалом $U(x)$, описывающим N -ямную гетероструктуру. Для решения этого уравнения воспользуемся методом матриц распространения (transfer matrix) [118,126]. Также подберем параметры системы таким образом, чтобы в каждой квантовой яме было только одно локализованное состояние и располагалось оно точно по середине высоты барьеров. При этом можно добиться выполнения условия $\delta_L = \delta_R = \delta = 0$ [115].

На Рис. 2.5 показаны положения максимумов прозрачности при изменении ширины центрального барьера по отношению к ширинам крайних (l/w), а также профили распределения электронной плотности (квадрата модуля волновой функции) для структур с $N=2$ и $N=3$ ямами. Высота барьеров выбрана равной $V=0.3$ эВ, эффективная масса $m^* = 0.067m_0$, толщины крайних барьеров фиксированы на значении $w=2$ нм и ширины ям равны $a=3.0485$ нм, что обеспечивает положение уровней энергии квазилокализованных состояний в ямах на половине высоты барьера. После слияния резонансов симметрия не нарушена и прозрачность имеет единичную величину для нечетного $N=3$ (Рис. 2.5б), в то время как для четного $N=2$ (Рис. 2.5а) максимум пропускания имеет величину меньше единицы и симметрия распределения электронов нарушена.

Приведем также, для полноты картины, распределение электронной плотности и спектра туннельной прозрачности в режиме после слияния резонансов в структурах с большим числом ям (Рис. 2.6). Из этого рисунка опять же отчетливо видна разница между слиянием четного и нечетного числа резонансов (в каждой структуре количество сливающихся резонансов равно количеству ям).

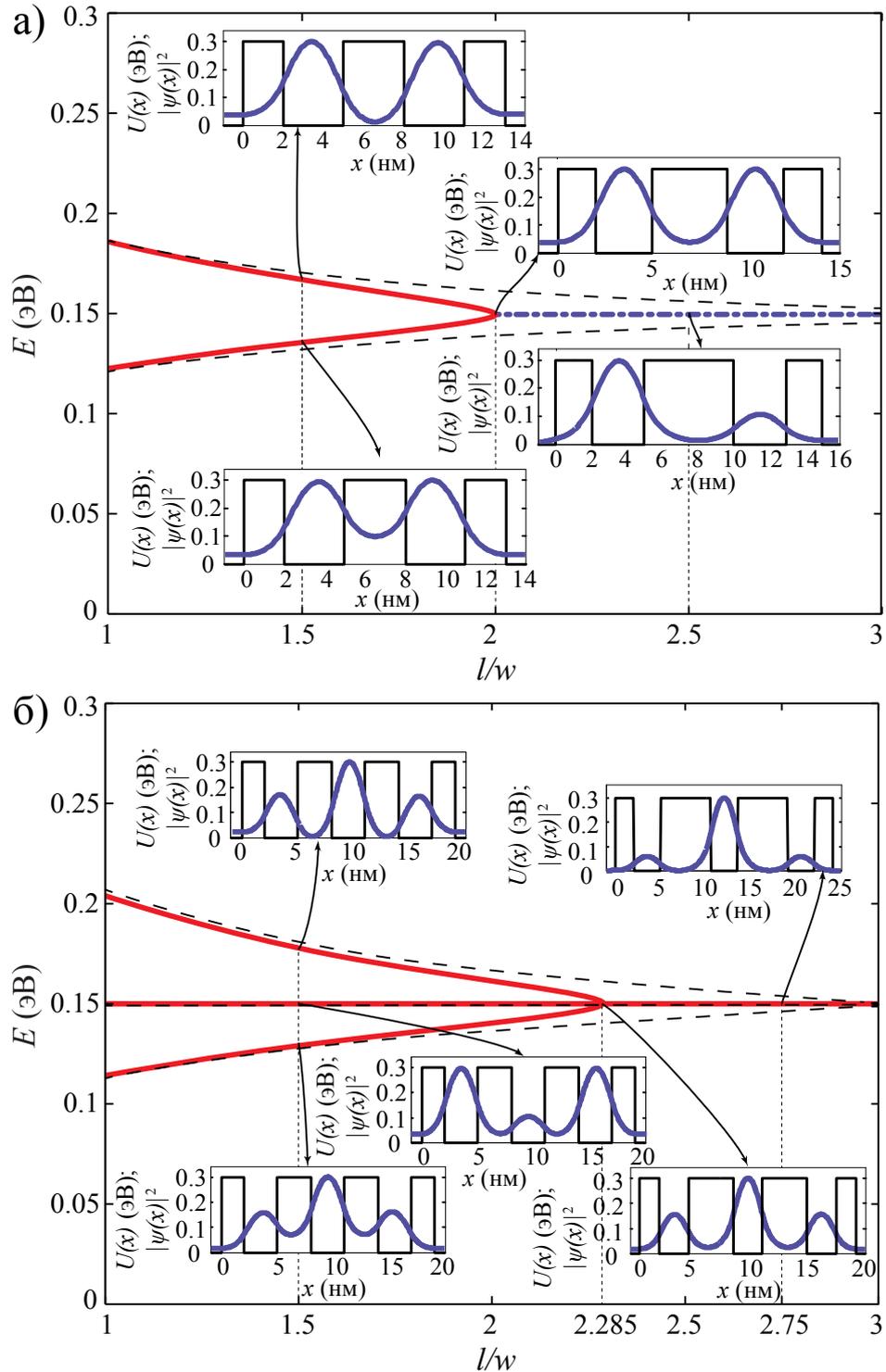


Рис. 2.5. Численно рассчитанные положения максимумов пропускания и действительных частей матрицы рассеяния при изменении соотношения между ширинами центрального и крайних барьеров l/w для $N=2$ (а) и $N=3$ (б) ямных структур [2]. Сплошные линии – единичные резонансы, штрихпунктирные – неединичные и пунктирные – действительные части полюсов S -матрицы. Также показаны распределения волновой функции в резонансе при различных соотношениях l/w .

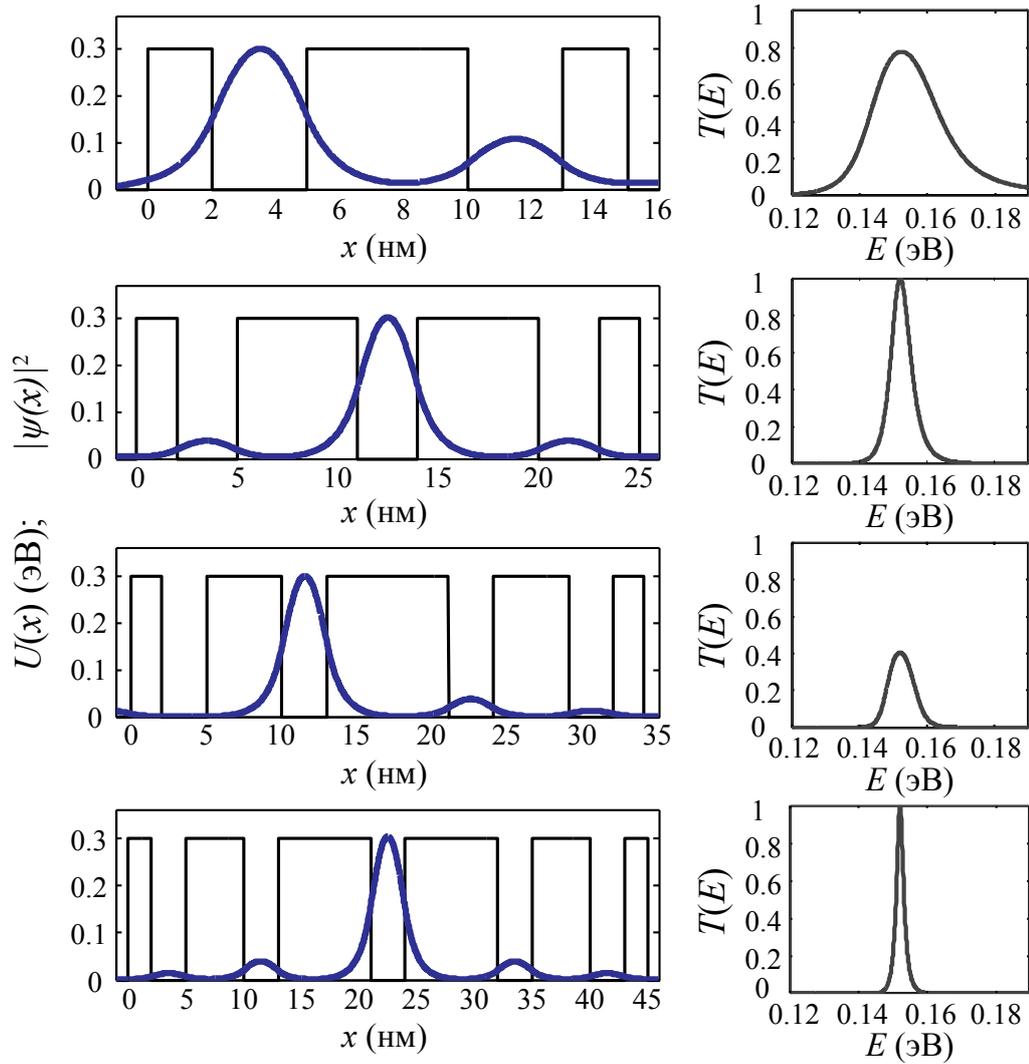


Рис. 2.6. Численно рассчитанные распределения электронной плотности и спектры пропускания симметричных гетероструктур с $N = 2, 3, 4, 5$ ямами в режиме после слияния резонансов [1].

2.3. Связанные состояния в непрерывном спектре

2.3.1. Общие соотношения

2.3.1.1. Связанное состояние в непрерывном спектре как резонанс с нулевой шириной

Связанные состояния в непрерывном спектре (ССНС) представляют собой полностью локализованные состояния (волновые функции которых принадлежат пространству L^2) с энергиями, лежащими в области непрерывного спектра [26]. Частицы не покидают такие состояния, потому что они не взаимодействуют с континуумом, то есть имеют нулевую ширину (бесконечное время жизни). Следовательно, такие состояния

соответствуют действительным собственным значениям эффективного гамильтониана, лежащим в области зоны непрерывного спектра электродов. В работах [42,48–50] на примере конкретных модельных систем было показано, что образование ССНС можно идентифицировать за счет появления δ -образного пика в плотности состояний. Этот результат можно обобщить и на случай произвольной двух-терминальной квантовой системы (Приложение Г).

Итак, предположим, что эффективный гамильтониан системы имеет действительное собственное значение E_0 , то есть

$$\det(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}) \propto (E - E_0). \quad (2.60)$$

В соответствии с общим соотношением (2.47), получаем:

$$|P(E)|^2 + |Q(E)|^2 = |\det(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})|^2 \propto (E - E_0)^2. \quad (2.61)$$

При $E = E_0$ сумма двух неотрицательных величин обращается в ноль, значит, в ноль обращается каждое из них по отдельности, то есть:

$$P(E), Q(E) \propto (E - E_0). \quad (2.62)$$

Отсюда можно сделать вывод, что в системе присутствует ССНС тогда и только тогда, когда функции P и Q имеют общий действительный корень.

Такое простое рассмотрение, основанное на наличии вспомогательного гамильтониана, показывает, что наличие ССНС с энергией E_0 неизбежно ведет к наличию корня функции P при той же энергии. Таким образом, в соответствии с (2.45) и общим соотношением (2.36) проблема расходимости коэффициента прохождения в окрестности ССНС, подробно обсуждаемая, например, в работе [127] легко разрешается. Однако, обратное, вообще говоря, неверно и наличие действительного нуля функции P само по себе не означает наличие в системе ССНС. В итоге кратко можно сформулировать следующие варианты:

- При энергии E_0 в системе наблюдается единичный резонанс, если $P(E_0) \neq 0$ и $Q(E_0) = 0$.
- При энергии E_0 в системе наблюдается нулевой антирезонанс, если $P(E_0) = 0$ и $Q(E_0) \neq 0$.
- При энергии E_0 в системе образуется ССНС, если $P(E_0) = 0$ и $Q(E_0) = 0$.

В более общем случае, когда E_0 служит корнем кратности m_Q для функции Q и корнем кратности m_P для функции P , тогда в системе присутствует $\min(m_Q, m_P)$ вырожденных ССНС с энергией E_0 и $m_Q - m_P$ слившихся единичных резонанса (если $m_Q > m_P$) или $m_P - m_Q$ слившихся нулевых антирезонансов (если $m_Q < m_P$). Если же $m_Q = m_P$, то E_0 не будет соответствовать экстремальной точки прозрачности вовсе. Таким образом, явно показано, что ССНС можно понимать как резонанс с нулевой шириной: условие $Q(E_0) = 0$ означает, что это резонанс, а условие $P(E_0) = 0$ – что его ширина равна нулю.

2.3.1.2. Образование связанного состояния в непрерывном спектре как переход с нарушением симметрии

Проследим за изменением состояния рассеяния при формировании ССНС (при изменении параметров системы и энергии к их значениям, соответствующим ССНС). Для этого рассмотрим квантовую систему из N узлов, туннельно взаимодействующую с левым и правым электродом только через один узел. Вектор узельных амплитуд в состоянии рассеяния $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_N)^T$ может быть найден из следующего уравнения:

$$(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})\mathbf{a} = \mathbf{s}, \quad (2.63)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица размерности N , а \mathbf{s} можно трактовать как «вектор источников», который в рассматриваемом случае имеет вид $\mathbf{s} = (2i\Gamma_L/\gamma_L, 0, \dots, 0)^T$, если считать, что поток электронов падает из электрода, подключенного к узлу с номером 1. Такое уравнение можно легко вывести из результатов работы [91]. Из уравнения (2.63) можно легко получить выражение для узельных амплитуд:

$$\mathbf{a} = (\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})^{-1} \mathbf{s} = (\mathbf{A} + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger)^{-1} \mathbf{s}. \quad (2.64)$$

С учетом того, что взаимодействие системы с контактами происходит только через отдельные узлы, можно сделать вывод о том, что у векторов $\mathbf{u}_{L(R)}$ в узельном базисе есть только по одному ненулевому элементу: $(\mathbf{u}_L)_i = \delta_{i1} \sqrt{\Gamma_L}$ и $(\mathbf{u}_R)_i = \delta_{iN} \sqrt{\Gamma_R}$.

Перейдем теперь к базису собственных состояний системы, гибридизованных за счет взаимодействия с непрерывным спектром электродов, то есть к базису диагонализующему матрицу \mathbf{A} . Обозначим состояние в этом базисе, которое при стремлении па-

раметров и энергии к ССНС перейдет в связанное состояние, как $|\tilde{1}\rangle$. Образование ССНС соответствует обращению в ноль связи этого состояния с континуумом в контактах: $(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}} \rightarrow 0$. Тильда над величинами указывает на то, что они рассматриваются в базисе собственных гибридизованных состояний. В окрестности (в пространстве параметров и энергии) ССНС нетрудно оценить амплитуду состояния $|\tilde{1}\rangle$:

$$\tilde{a}_{\tilde{1}} \sim \frac{\alpha(\sqrt{\tilde{\Gamma}_L}, \sqrt{\tilde{\Gamma}_R})}{\Delta E + \beta(\sqrt{\tilde{\Gamma}_L}, \sqrt{\tilde{\Gamma}_R})}. \quad (2.65)$$

Здесь $\Delta E = E - \tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$, где $\tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$ – энергия состояния $|\tilde{1}\rangle$, $\alpha(x, y)$ и $\beta(x, y)$ суть некоторые линейная и квадратичная форма величин x и y , а $\tilde{\Gamma}_{L(R)} = |(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}|^2$. Следует отметить, что и энергия состояния $\tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$ и его связь с контактами $(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}$ зависят от параметров системы. При этом $\tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$ стремится к своему значению, соответствующему ССНС, только при $(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}} \rightarrow 0$, поэтому можно считать, что $\tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$ есть неявная функция от $(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}$: $\tilde{\epsilon}_{\tilde{1}} = \tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}[(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}]$. Из выражения (2.65) можно сделать вывод, что при стремлении к ССНС в пространстве параметров и энергии по некоторой траектории $E = E[(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}]$, такой, что выполнено условие

$$\left. \frac{\partial E[(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}]}{\partial (\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}} \right|_{(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}=0} = \left. \frac{\partial \tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}[(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}]}{\partial (\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}} \right|_{(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}=0}, \quad (2.66)$$

то на этой траектории $\Delta E = E - \tilde{\epsilon}_{\tilde{1}} = O\left[|(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}}|^2\right] = O(\tilde{\Gamma}_{L(R)})$ и амплитуда $\tilde{a}_{\tilde{1}}$ формально расходится при приближении к ССНС как $1/\sqrt{\tilde{\Gamma}_{L(R)}}$ при $\tilde{\Gamma}_{L(R)} \rightarrow 0$ (см. Рис. 2.7).

С другой стороны, если условия возникновения ССНС выполнены точно (то есть $(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)})_{\tilde{1}} = 0$), тогда, как видно из (2.65), амплитуда $\tilde{a}_{\tilde{1}}$ равна нулю с устранимой особенностью при $E = \tilde{\epsilon}_{\tilde{1}}$. Таким образом, видно, что состояние рассеяния в окрестности ССНС соответствует гибридизованному состоянию $|\tilde{1}\rangle$ и резко меняется на ортогональное (так что $\tilde{a}_{\tilde{1}} = 0$) точно в ССНС. В этом смысле образование ССНС можно трактовать как «фазовый переход» с резким нарушением симметрии. В терминах теории Ландау о фазовых

переходах падающая волна может рассматриваться как сопряженное поле к «параметру порядка», который в свою очередь описывает амплитуду ССНС. Расходящаяся амплитуда \tilde{a}_i соответствует в такой трактовке кюри-вейсовскому поведению функции отклика вблизи точки перехода.

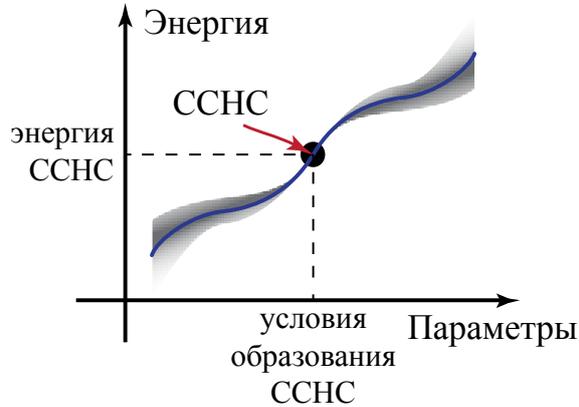


Рис. 2.7. Схематический вид траектории $\tilde{\varepsilon}_i = \tilde{\varepsilon}_i \left[\left(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)} \right)_i \right]$ (синяя линия) и области (затененная), в которой траектории $E = E \left[\left(\tilde{\mathbf{u}}_{L(R)} \right)_i \right]$ приводят к формальному расхождению амплитуды волновой функции состоянии рассеяния внутри системы [3].

2.3.2. Примеры

В качестве примера формирования ССНС разных типов (с разной кратностью корней P и Q) рассмотрим пример трехузельной модели (toy model) с гамильтонианом вида (2.1), с конкретными параметрами определенными ниже (см. вставку на Рис. 2.8а). Электроды моделируются как полубесконечные цепочки узлов с интегралом перескока J взятым за единицу энергии и энергиями локализованных состояний на узлах, которые выбраны в качестве начала отсчета энергии. Считаем, что оба контакта подсоединены к одному и тому же узлу (с номером 0) через матричные элементы $\gamma_0^L = \gamma_0^R = \gamma \in \mathbb{R}$. Интегралы перескока τ_a , τ_b и η считаем действительными и одного знака, например, положительными. Энергии локализованных состояний в узлах выбраны следующим образом: $\varepsilon_0 = 0$ и $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon$. Исходя из этого, можно получить точные выражения для функций P и Q этой системы:

$$\begin{aligned}
P(E) &= \gamma^2 \sqrt{4 - E^2} (E - \varepsilon - \eta)(E - \varepsilon + \eta), \\
Q(E) &= (E - \varepsilon + \eta)^3 (1 - \gamma^2) + (E - \varepsilon + \eta)^2 (\varepsilon - 3\eta)(1 - \gamma^2) + \\
&\quad + (E - \varepsilon + \eta) [2\eta(\eta - \varepsilon)(1 - \gamma^2) - \tau_a^2 - \tau_b^2] + \\
&\quad + \eta(\tau_a - \tau_b)^2.
\end{aligned} \tag{2.67}$$

Как отсюда видно, функция P имеет два действительных корня: $E = \varepsilon \pm \eta$, которые совпадают с собственными энергиями квантовой подсистемы, состоящей из узлов a и b . Еще два корня $E = \pm 2$ соответствуют краям зоны в контактах, где скорость носителей и, соответственно, прозрачность обращаются в ноль.

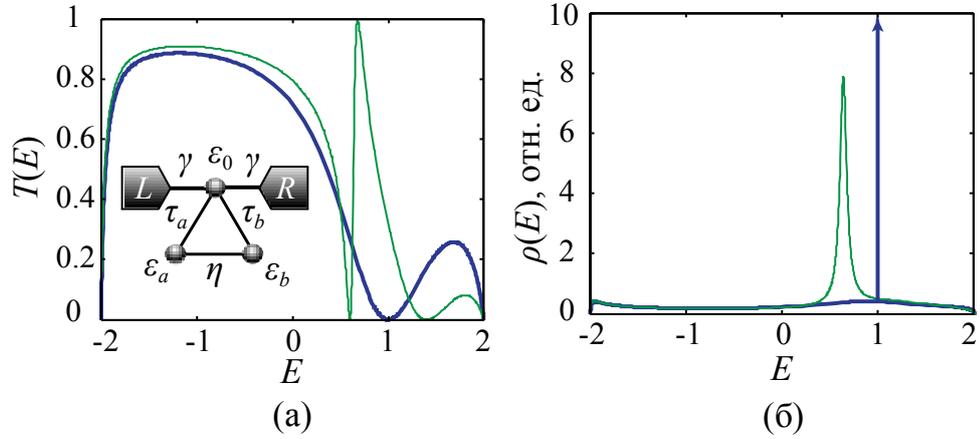


Рис. 2.8. ССНС в точке нулевой прозрачности [3]. Коэффициент прохождения модельной системы с $\eta = 0.4$ (тонкая зеленая линия) и $\eta = 0$ (жирная синяя линия), во вставке – схематичный вид рассматриваемой трехузельной модельной системы (а). Плотность состояний, рассчитанная для тех же параметров (б). При $\eta = 0$ образование ССНС проявляется в формировании δ -образного пика.

ССНС образуется при совпадении корней P и Q . В соответствии с (2.67) только корень $E = \varepsilon - \eta$ может быть для них общим, причем только при $\tau_a = \tau_b$ или $\eta = 0$. Если бы τ_a и τ_b были бы противоположных знаков, то ССНС образовался бы при $\tau_a = -\tau_b$ и энергии $E = \varepsilon + \eta$. Такое связанное состояние ничем не отличается от того ССНС при $\tau_a = \tau_b$ и $E = \varepsilon - \eta$, поэтому оно не рассматривается здесь. Кратности корней m_P и m_Q зависят от выбранных параметров и поэтому в такой системе возможна реализация всех описанных ранее вариантов формирования ССНС.

Волновые функции ССНС таковы, что амплитуда нахождения электрона равна нулю всюду кроме узлов a и b , для амплитуд в которых выполнены условия:

$$\tau_a a + \tau_b b = 0 \text{ для } \eta = 0, \quad (2.68)$$

$$a + b = 0 \text{ для } \tau_a = \tau_b. \quad (2.69)$$

Чтобы найти точные значения амплитуд необходимо провести соответствующую нормировку. Волновые функции состояния рассеяния можно определить, непосредственно решая узельное уравнение Шредингера с граничными условиями: $a_n^L = e^{ikn} + r e^{-ikn}$ – для левого контакта и $a_n^R = t e^{ikn}$ – для правого, где r и t есть коэффициенты отражения и прохождения соответственно. С учетом закона дисперсии в электродах ($E = -2 \cos k$), можно получить следующие значения амплитуд в узлах системы:

$$\begin{aligned} a_0 &= C(E - \varepsilon - \eta)(E - \varepsilon + \eta), \\ a &= C[\tau_a(E - \varepsilon + \eta) - \eta(\tau_a - \tau_b)], \\ b &= C[\tau_b(E - \varepsilon + \eta) - \eta(\tau_b - \tau_a)], \end{aligned} \quad (2.70)$$

где

$$C = \frac{i\gamma\sqrt{4-E^2}}{(E - \varepsilon + \eta)\left\{(E - \varepsilon - \eta)\left[E - \gamma^2\left(E - i\sqrt{4-E^2}\right)\right] - \tau_a^2 - \tau_b^2\right\} + \eta(\tau_a - \tau_b)^2} \quad (2.71)$$

Из соотношений (2.68)-(2.70) видно, что амплитуда a_0 равна нулю как в ССНС, так и в состоянии рассеяния при той же энергии.

2.3.2.1. Случай $m_Q < m_P$

Для рассматриваемой модельной системы условие $m_Q < m_P$ может быть выполнено только при условии $m_Q = 1$ и $m_P = 2$, что в свою очередь требует условия $\eta = 0$. В этом случае ССНС образуется при энергии $E = \varepsilon$, соответствующей нулевому антирезонансу. На Рис. 2.8 изображены графики коэффициента прохождения и плотности состояний при $\eta = 0$ и $\eta \neq 0$. Параметры выбраны следующие: $\gamma = 1$, $\tau_a = 1$, $\tau_b = 0.5$ и $\varepsilon = 1$. Формирование ССНС проявляется в возникновении δ -образного пика плотности состояний.

Рассмотрим теперь амплитуды состояний рассеяния вблизи ССНС. Из (2.70) видно, что для энергии $E = \varepsilon$ амплитуды не имеют никакой особенности ни при $\eta = 0$ ни при произвольной $\eta \neq 0$. Однако, если рассчитать амплитуды при энергии

$$E = \varepsilon' = \varepsilon - 2\eta \frac{\tau_a \tau_b}{\tau_a^2 + \tau_b^2}, \quad (2.72)$$

то они будут следующие:

$$(a_0, a, b) = \frac{i\gamma(\tau_a^2 + \tau_b^2)\sqrt{4 - \varepsilon'^2}}{(\tau_a^2 - \tau_b^2)[\varepsilon'(1 - \gamma^2) + i\gamma^2\sqrt{4 - \varepsilon'^2}]} \times \left(\frac{\tau_a^2 - \tau_b^2}{\tau_a^2 + \tau_b^2}, \frac{\tau_b}{\eta}, -\frac{\tau_a}{\eta} \right). \quad (2.73)$$

Как видно из (2.73), амплитуды в узлах a и b удовлетворяют условию (2.68), то есть соответствуют ССНС за исключением того, что a_0 остается конечной. В пределе $\eta \rightarrow 0$ (при образовании ССНС) амплитуды в узлах a и b формально расходятся, а в нулевом узле она остается конечной. Таким образом, относительные соотношения между амплитудами в состоянии рассеяния стремятся к таковым в ССНС при $\eta \rightarrow 0$. Дело в том, что в соответствии с выводами раздела 2.3.1.2, особой траекторией в пространстве параметров и энергии, которая обеспечивает расходимость амплитуд, будет именно траектория $E = \varepsilon'$ (см. Рис. 2.9).

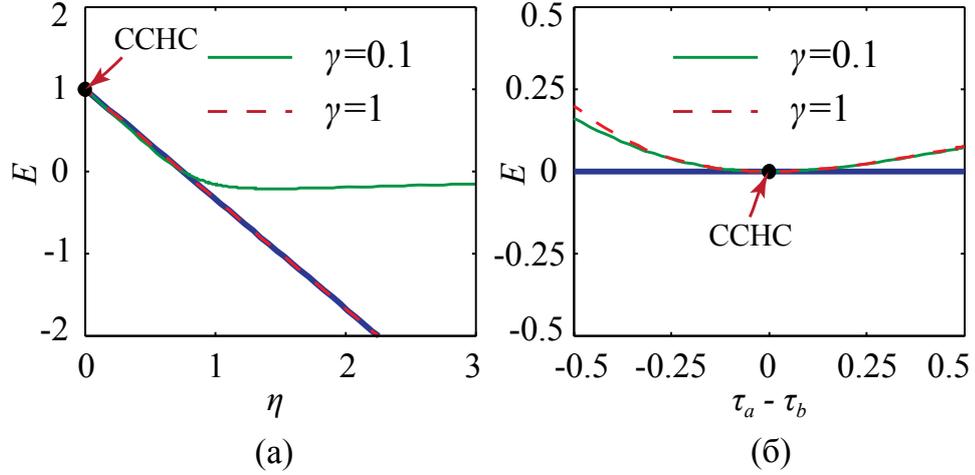


Рис. 2.9. Точные положения собственных энергий модельной системы, гибризованной контактами, для $\gamma = 0.1$ (тонкая сплошная зеленая линия) и $\gamma = 1$ (тонкая пунктирная красная линия) в окрестности ССНС при $\eta = 0$ и $E = \varepsilon$ (а) и $\tau_a = \tau_b$ и $E = \varepsilon - \eta$ (б). В (а) жирной синей линией изображена траектория $E = \varepsilon'$, которая, очевидно, удовлетворяет условию (2.66). В (б) жирной синей линией изображена траектория $E = \varepsilon - \eta$, которая также удовлетворяет условию (2.66) для этого случая.

Однако, с другой стороны, точно в условиях возникновения ССНС ($\eta=0$ и $\omega=\varepsilon$) амплитуды состояния рассеяния будут

$$(a_0, a, b) = -\frac{i\gamma\sqrt{4-\varepsilon^2}}{\tau_a^2 + \tau_b^2} \times (0, \tau_a, \tau_b). \quad (2.74)$$

Отсюда видно, что в этом случае узельные амплитуды состояния рассеяния ортогональны амплитудам ССНС.

2.3.2.2. Случай $m_Q = m_P$

Когда $m_Q = m_P$, то ССНС формируется при энергии, соответствующей ни максимуму ни минимуму прозрачности (неэкстремальная точка). Для рассматриваемой структуры единственно возможная ситуация это $m_Q = m_P = 1$. Исходя из (2.67), для этого необходимо условие $\tau_a = \tau_b$ и $\eta \neq 0$. В качестве примера рассмотрим случай $\eta = 1 \neq 0$, $\gamma = 1$, $\tau_a = \tau_b = 1$ и $\varepsilon = 1$. Для этих значений параметров ССНС сформируется при энергии $E = \varepsilon - \eta = 0$. На Рис. 2.10 показаны графики зависимостей коэффициента прохождения и плотности состояний от энергии при $\tau_a = \tau_b$ и $\tau_a \neq \tau_b$.

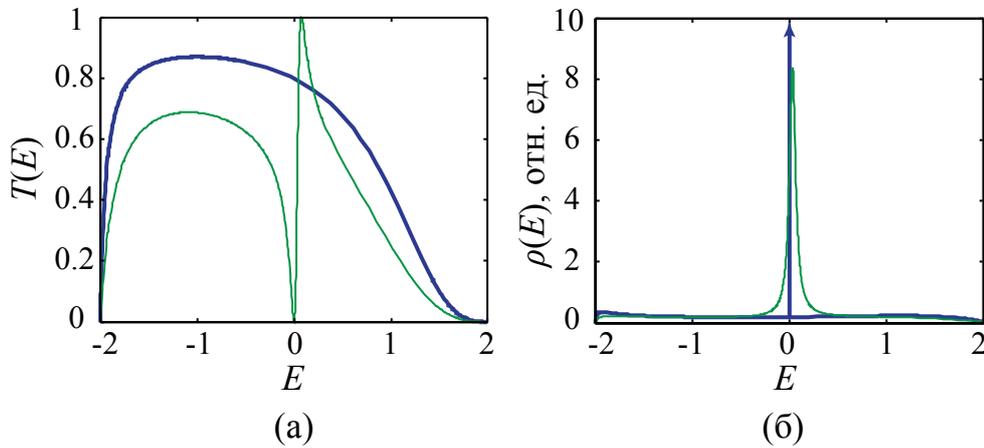


Рис. 2.10. ССНС в точке коллапса резонанса Фано [3]. Коэффициент прохождения модельной системы с $\tau_a = 1.5$ (тонкая зеленая линия) и $\tau_a = 1$ (жирная синяя линия) (а). Плотность состояний, рассчитанная для тех же параметров (б). При $\tau_a = 1$ образование ССНС проявляется в формировании δ -образного пика.

Как можно увидеть из общих соотношений (2.70), амплитуды состояния рассеяния в узлах системы возбуждаются антисимметричным образом, то есть в согласии с соотношением (2.69) для соответствующего ССНС:

$$a_0 = 0, \quad a = -b = \frac{i\gamma\sqrt{4-(\varepsilon-\eta)^2}}{\tau_b - \tau_a}. \quad (2.75)$$

В пределе $\tau_a \rightarrow \tau_b$ амплитуды в узлах a и b формально расходятся. Однако, точно в режиме, соответствующему возникновению ССНС ($\tau_a = \tau_b$) при энергии $E = \varepsilon - \eta = 0$ узловые амплитуды состояния рассеяния имеют вид:

$$(a_0, a, b) = -\frac{i\gamma\sqrt{4-(\varepsilon-\eta)^2}\tau_a}{2\eta\left[\varepsilon-\eta-\gamma^2\left(\varepsilon-\eta-i\sqrt{4-(\varepsilon-\eta)^2}\right)\right]-2\tau_a^2} \times (0, 1, 1). \quad (2.76)$$

Откуда следует, что в этом случае амплитуды в узлах a и b симметричны, то есть такое распределение ортогонально ССНС.

2.3.2.3. Случай $m_Q > m_P$

При $m_Q > m_P$ ССНС формируется при энергии, соответствующей единичному максимуму прозрачности. В исследуемой модели это возможно только для $m_Q = 2$ и $m_P = 1$, что приводит к следующим условиям [см. (2.67)]: $\eta \neq 0$ и $\tau_a = \tau_b = \sqrt{\eta(\eta - \varepsilon)(1 - \gamma^2)}$. Чтобы рассматриваемая структура была связанной, необходимо, чтобы также $\tau_{a,b}$ не обращались в ноль, то есть выполнялись дополнительные условия: $\eta > \varepsilon$ и $\gamma < 1$ или $\eta < \varepsilon$ и $\gamma > 1$. В качестве примера рассмотрим случай $\eta = 1 \neq 0$, $\varepsilon = 0.5 < \eta$ и $\gamma = 0.5 < 1$, откуда $\tau_a = \tau_b = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$. При этих условиях ССНС образуется при энергии $E = \varepsilon - \eta = -0.5$. На Рис. 2.11 показаны графики зависимостей коэффициента прохождения и плотности состояний от энергии при $\tau_a = \tau_b$ и $\tau_a \neq \tau_b$. Распределение узловых амплитуд в состоянии рассеяния полностью аналогично случаю с $m_Q = m_P$, только при специальном выборе параметров $\tau_a = \tau_b$, обеспечивающих совпадение энергии ССНС с единичным резонансом.

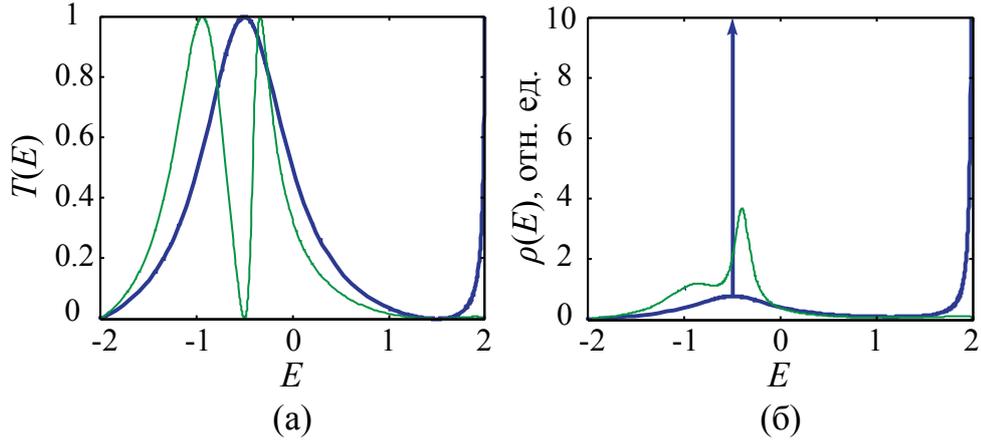


Рис. 2.11. ССНС в точке коллапса резонанса Фано [3]. Коэффициент прохождения модельной системы с $\tau_a = 1$ (тонкая зеленая линия) и $\tau_a = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$ (жирная синяя линия) (а). Плотность состояний, рассчитанная для тех же параметров (б). При $\tau_a = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$ образование ССНС проявляется в формировании δ -образного пика. Единичная прозрачность и особенность Ван-Хова на краю зоны происходит из-за наличия действительного корня функции Q точно на границе зоны при выбранных параметрах системы.

2.4. Обобщение на случай многотерминальных систем

Для применения изложенной теории к более сложным квантовым проводникам и приборам на их основе, необходимо обобщить предлагаемый подход на случай квантовых систем туннельно взаимодействующих с несколькими электродами – многотерминальных квантовых систем. Итак, рассмотрим N -узельную квантовую систему подключенную к M электродам. Общий гамильтониан можно записать в виде, аналогичном (2.1):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{\alpha=1}^M (\hat{H}_\alpha + \hat{H}_\alpha^{\text{int}}), \quad (2.77)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан изолированной квантовой системы, \hat{H}_α – изолированного α -го электрода и $\hat{H}_\alpha^{\text{int}}$ описывает туннельную связь между системой и α -ым контактом. Все эти гамильтонианы имеют вид, аналогичный (2.2), (2.3) и (2.4) соответственно. Следуя

общему подходу из раздела 2.1.1, нетрудно получить стандартное выражение для статического коэффициента туннелирования из α -го контакта в β -ый [128]:

$$T_{\alpha\beta}(E) = 4 \text{Tr} \left[\Gamma^\alpha(E) \mathbf{G}^r(E) \Gamma^\beta(E) \mathbf{G}^a(E) \right], \quad (2.78)$$

где $\mathbf{G}^{r,a}$ суть матрицы запаздывающей и опережающей функций Грина системы в матричной форме (например, в узельном базисе), а Γ^α – матричная форма антиэрмитовой компоненты собственно-энергетической части α -го контакта $\Sigma^\alpha = \delta^\alpha - i\Gamma^\alpha$. Эрмитова δ^α и антиэрмитова Γ^α компоненты этой собственно-энергетической части имеют вид:

$$\begin{aligned} \delta_{ij}^\alpha(E) &= p.v. \int \frac{\rho_\alpha(E') \gamma_i^\alpha(E') \gamma_j^{\alpha*}(E')}{E - E'} dE', \\ \Gamma_{ij}^\alpha(E) &= \pi \rho_\alpha(E) \gamma_i^\alpha(E) \gamma_j^{\alpha*}(E). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Здесь $\gamma_i^\alpha(E)$ – туннельный матричный элемент между i -ым узлом системы и состоянием с энергией E в α -ом контакте. Отсюда видно, что матричная форма Γ^α может быть записана аналогично (2.41):

$$\Gamma^\alpha = \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger, \quad (2.80)$$

с вектором $\mathbf{u}_\alpha = \sqrt{\pi \rho_\alpha} (\gamma_1^\alpha, \dots, \gamma_N^\alpha)^\top$.

Форма (2.80) позволяет, как и в случае двухтерминальной структуры, преобразовать выражение для коэффициента прохождения к следующему виду:

$$T_{\alpha\beta} = 4 \left| \mathbf{u}_\beta^\dagger \left(\mathbf{A}^{\alpha\beta} + i \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger + i \mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger \right)^{-1} \mathbf{u}_\alpha \right|^2, \quad (2.81)$$

где введено обозначение:

$$\mathbf{A}^{\alpha\beta} = E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0 - \sum_{\sigma=1}^M \delta^\sigma + i \sum_{\substack{\sigma=1, \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M \Gamma^\sigma. \quad (2.82)$$

Матрица $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$ неэрмитова в отличие от матрицы \mathbf{A} из (2.43) для двухтерминальной системы. В связи с этим дальнейшие выводы, сделанные для двухтерминальной системы не применимы к случаю с большим числом контактов. Применяя формулу Шермана-Моррисона [120], можно переписать выражение для коэффициента прохождения $T_{\alpha\beta}$ в виде:

$$T_{\alpha\beta} = \frac{4 \left| \det \mathbf{A}^{\alpha\beta} \right|^2 \left| \mathbf{u}_\beta^\dagger \left(\mathbf{A}^{\alpha\beta} \right)^{-1} \mathbf{u}_\alpha \right|^2}{\left| \det \left(\mathbf{A}^{\alpha\beta} + i \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger + i \mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger \right) \right|^2}. \quad (2.83)$$

Знаменатель этого выражения представляет собой квадрат модуля характеристического определителя эффективного гамильтониана Фешбаха $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_0 + \sum_{\sigma=1}^M (\delta^\sigma - i\Gamma^\sigma)$ рассматриваемой квантовой системы с контактами. Числитель же здесь, в полной аналогии с двухтерминальным случаем, можно представить как квадрат модуля от следующей величины (с точностью до фазового множителя):

$$P_0^{\alpha\beta} = 2\mathbf{u}_\beta^\dagger (\text{adj } \mathbf{A}^{\alpha\beta}) \mathbf{u}_\alpha, \quad (2.84)$$

где $\text{adj } \mathbf{A}^{\alpha\beta}$ это присоединенная матрица к матрице $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$.

Теперь, выделим в знаменателе выражения (2.83) слагаемое, равное числителю $4|\det \mathbf{A}^{\alpha\beta}|^2 \left| \mathbf{u}_\beta^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\alpha \right|^2 = |P_0^{\alpha\beta}|^2$ и упростим оставшуюся часть, используя лемму об определителе матрицы [121]:

$$\left| \det (\mathbf{E} \mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}) \right|^2 = \left| \det (\mathbf{A}^{\alpha\beta} + i\mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger + i\mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger) \right|^2 = |P_0^{\alpha\beta}|^2 + |Q^{\alpha\beta}|^2 + P_1^{\alpha\beta}. \quad (2.85)$$

Здесь $Q^{\alpha\beta}$ также определенная с точностью до фазового множителя функция:

$$Q^{\alpha\beta} = \det (\mathbf{A}^{\alpha\beta} - i\mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger + i\mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger) = \det (\mathbf{A}^{\alpha\beta} - i\Gamma^\alpha + i\Gamma^\beta). \quad (2.86)$$

Нетрудно заметить, что $Q^{\alpha\beta}$ есть непосредственный аналог двухтерминальной функции Q из (2.48), то есть характеристический определитель вспомогательного гамильтониана:

$$\mathbf{H}_{aux} = \mathbf{H}_0 + \sum_{\sigma=1}^M \delta^\sigma - i \sum_{\substack{\sigma=1, \\ \sigma \neq \alpha}}^M \Gamma^\sigma + i\Gamma^\alpha. \quad (2.87)$$

Изменение знака в выражении для \mathbf{H}_{aux} по сравнению с \mathbf{H}_{eff} происходит только перед Γ^α , что соответствует падающему потоку электронов из α -го электрода.

Принципиальным же отличием системы со многими контактами от двухтерминальной служит наличие дополнительного слагаемого $P_1^{\alpha\beta}$ в разложении (2.85) по сравнению с (2.47). Этот член отличен от нуля только в силу неэрмитовости матрицы $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} P_1^{\alpha\beta} = & 4|\det \mathbf{A}^{\alpha\beta}|^2 \times \left(-\text{Im} \left[\mathbf{u}_\alpha^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\alpha \right] \left| 1 + i\mathbf{u}_\beta^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\beta \right|^2 + \right. \\ & + \text{Re} \left\{ \mathbf{u}_\alpha^\dagger \left[(\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} - (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{\dagger-1} \right] \mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\alpha \right\} + \\ & \left. + \text{Im} \left[\mathbf{u}_\beta^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} \mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{\dagger-1} \mathbf{u}_\beta \right] \right). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Видно, что при условии $\mathbf{A}^{\alpha\beta} = (\mathbf{A}^{\alpha\beta})^\dagger$ выражение (2.88) обратится в ноль. Таким образом, мы получили обобщение формулы (2.36) на случай системы с несколькими контактами:

$$T_{\alpha\beta} = \frac{|P_0^{\alpha\beta}|^2}{|P_0^{\alpha\beta}|^2 + |Q^{\alpha\beta}|^2 + P_1^{\alpha\beta}}. \quad (2.89)$$

Следует сделать важное замечание: выражение (2.88) не учитывает причину возникновения неэрмитовости матрицы $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$, определенной в (2.82), которая происходит из-за наличия более чем двух контактов с электродами. С учетом этого, можно показать (Приложение Д), что $P_1^{\alpha\beta}$ есть неотрицательная величина, что сразу же накладывает естественные границы на $T_{\alpha\beta}$: $0 \leq T_{\alpha\beta} \leq 1$. Однако, если же неэрмитовость матрицы $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$ происходит, скажем, из-за того, что она была рассчитана для комплексного значения энергии E , то $P_1^{\alpha\beta}$ может принимать и отрицательные значения приводя к $T_{\alpha\beta} > 1$, что конечно же имеет место, например, вблизи полюса матрицы рассеяния.

2.5. Выводы по главе

1. Описание транспортных свойств произвольной двухконтактной квантовой системы можно проводить с помощью введенных функций P и Q , вычисленных с привлечением неэрмитового вспомогательного гамильтониана, действительные собственные значения которого в точности соответствуют единичным максимумам коэффициента прохождения. При этом явление слияния резонансов описывается вырождением вспомогательного гамильтониана по типу особой точки.
2. Слияние четного и нечетного числа единичных резонансов (максимумов коэффициента прохождения) принципиально отличаются. Четное число резонансов при слиянии переходят в один с пиковой прозрачностью меньше единицы, и при этом наблюдается нарушение пространственной симметрии распределения электронной плотности в исходно симметричных квантовых системах. Слияние же нечетного числа резонансов оставляет пиковую прозрачность на единичном уровне и не нарушает симметрию распределения электронов.
3. Слияние могут испытывать и антирезонансы (минимумы коэффициента прохождения) в некоторых системах, в которых функция P представима в виде характе-

ристического многочлена некоторого неэрмитового (в частности PT -симметричного) гамильтониана.

4. Привлечение функций P и Q позволяет наглядно описать возникновение связанных состояний в непрерывном спектре, как резонансов с нулевой шириной. Такие состояния возникают при наличии общих корней этих функций.

ГЛАВА 3. КВАНТОВЫЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ И ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Настоящая глава посвящена описанию общих транспортных свойств квантовых проводников и исследованию возможности управления ими за счет изменения тех или иных параметров квантовой системы. Рассматриваются различные варианты управления током через квантовую систему, основанные на различных эффектах квантовой интерференции (конструктивной и деструктивной).

Подробно описаны системы с вырожденными уровнями, в которых процессы туннелирования сильно отличаются от систем без вырождения. На основе таких структур, например, молекулярных, возможно построение полностью электрических квантовых интерференционных переключателей, обладающих потенциально крайне низким энергопотреблением.

Также в конце главы рассмотрены более сложные логические вентили, работающие на эффектах квантовой интерференции. В частности, подробно описан молекулярный инвертор с очень низким необходимым напряжением питания.

3.1. Управление током в квантовых проводниках

Стационарный когерентный ток через двухконтактный квантовый проводник вне зависимости от используемого подхода определяется заселенностью состояний в контактах $f_{L,R}(E)$ и вероятностью туннелирования через квантовую систему $T(E)$ [ср., например, с выражением (2.17), полученным в формализме неравновесных функций Грина]:

$$I = \frac{e}{h} \int T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE. \quad (3.1)$$

Таким образом, ток через систему определяется наличием и величиной резонансных максимумов прозрачности в области энергий, где разность $f_L(E) - f_R(E)$ существенно отлична от нуля. Управлять током через систему можно за счет сдвига резонансов из области, задаваемой разностью функций заполнения (см. Рис. 3.1а). Этого можно добиться, например, созданием однородного электрического поля, которое бы сдвигало энергетический спектр и, соответственно, положения резонансов квантовой системы.

Именно такой способ управления проводимостью квантовой системы в основном и используется в существующих прототипах и моделях молекулярных транзисторов [129].

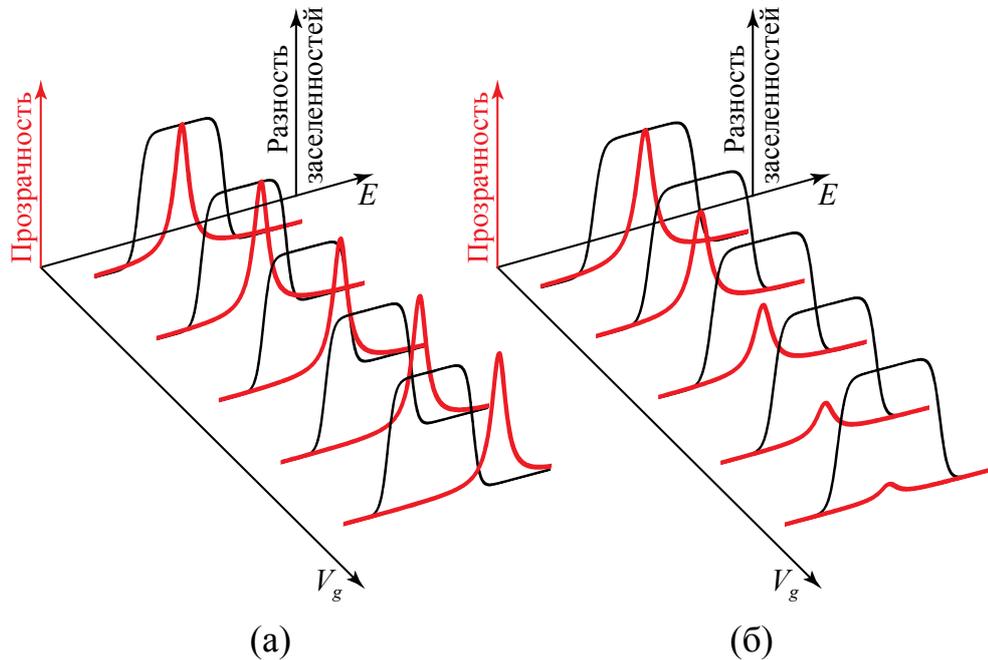


Рис. 3.1. Схематичная иллюстрация двух способов управления током: сдвиг резонансов коэффициента прохождения (а) и изменение их высоты (б). Черной линией показана разность функций заполнения в левом и правом контактах $f_L(E) - f_R(E)$, а красной – коэффициент прохождения $T(E)$.

Однако существует и другой подход – управлять величиной резонансов $T(E)$ за счет тех или иных квантовых интерференционных эффектов [5,130] (см. Рис. 3.1б). Этот подход имеет принципиальное преимущество над простым сдвигом резонансов. Для сдвига резонансного максимума за пределы области, заданной разностью $f_L(E) - f_R(E)$, необходимо, чтобы внешнее воздействие (например, потенциал управляющего затвора), как минимум, превышало ширину этой области, которая даже при малой разности потенциалов оказывается пропорциональной kT . То есть, для сдвига уровней существует принципиальная неустранимая (при фиксированной температуре, например, комнатной) нижняя граница величины рабочего напряжения. В случае же интерференционного изменения величины резонансов, необходимое внешнее воздействие определяется шириной пиков прозрачности, которая является параметром системы и может варьироваться для достижения оптимального результата.

3.1.1. Управление током за счет сдвига резонансов или антирезонансов

Для наглядного качественного сравнения выше описанных подходов к управлению током через квантовый проводник необходимо рассмотреть примеры модельных систем, в которых управление резонансами или антирезонансами происходит по приведенным принципам.

3.1.1.1. Сдвиг резонанса

Пусть прозрачность квантовой системы имеет максимум при энергии E_0 , тогда в его окрестности коэффициент прохождения можно феноменологически записать в виде [4]:

$$T(E) = T_b + A \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + (E - E_0)^2}, \quad (3.2)$$

где $T_b \ll 1$ - некоторая «фооновая» составляющая прозрачности, возникающая от удаленных по энергии других резонансов (из результатов численного моделирования [131–133] $T_b \sim 10^{-1} - 10^{-3}$), Γ определяют ширину резонанса, и соответствует величине туннельной связи с контактами, а $0 \leq A \leq 1 - T_b \approx 1$ задает высоту резонансного пика. Например, в случае одиночного резонанса в несимметричной двухбарьерной структуре: $\Gamma = (\Gamma_L + \Gamma_R)/2$ и $A = \Gamma_L \Gamma_R / \Gamma^2$, где $\Gamma_{L,R}$ определяет величину туннельной связи с правым/левым контактом.

Для обеспечения максимальной крутизны изменения тока за счет сдвига положения резонанса $g_{E_0} = \left| \frac{\partial I}{\partial V_g} \right| = \left| \frac{\partial I}{\partial E_0} \right| \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$ положим, что $\Gamma \ll kT, V_0$, где V_0 – приложенное к системе напряжение (величина $\left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$ определяет чувствительность положения уровней квантовой системы к изменению управляющего напряжения V_g). В противном случае ток (3.1) будет заведомо менее чувствителен к изменению E_0 . При условии $\Gamma \ll kT, V_0$, можно приближенно рассчитать ток (3.1) через систему с коэффициентом прохождения (3.2):

$$I \approx \frac{e}{h} \left(T_b V_0 + \frac{A\Gamma \pi \operatorname{sh} \frac{V_0}{2kT}}{\operatorname{ch} \frac{E_0}{kT} + \operatorname{ch} \frac{V_0}{2kT}} \right). \quad (3.3)$$

Здесь учтено, что напряжение приложено симметричным образом: $V_L = V_0/2$, $V_R = -V_0/2$ и E_0 отсчитывается от уровня Ферми несмещенных контактов. Из выражения (3.3) трудно оценить максимальное значение крутизны g_{a_0} :

$$\max(g_{E_0}) = \frac{4eA\Gamma \operatorname{sh}^3 \frac{V_0}{2kT} \sqrt{\sqrt{2 \operatorname{ch} \frac{V_0}{kT} + 34 \operatorname{ch} \frac{V_0}{2kT} + \operatorname{ch} \frac{V_0}{kT} + 5}}}{\hbar kT \left(\sqrt{32 \operatorname{sh}^2 \frac{V_0}{2kT} + \operatorname{sh}^2 \frac{V_0}{kT} + 3 \operatorname{sh} \frac{V_0}{kT}} \right)^2} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|. \quad (3.4)$$

Для малого напряжения питания $V_0 \ll kT$ имеем:

$$\max(g_{E_0}) \approx \frac{Ae^2}{12\hbar\sqrt{3}} \cdot \frac{\Gamma}{kT} \cdot \frac{V_0}{kT} \cdot \frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|. \quad (3.5)$$

Величина $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$ не превышает единицы, а в реальных системах она сильно зависит от толщины диэлектрического слоя, разделяющего управляющий электрод и квантовую систему [134]. Типичные экспериментальные значения для нее оказываются не более 0.1–0.3 [135–137], однако, для толщин диэлектрика порядка 1 нм $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$ может достигать 0.5–0.7 [134].

Поскольку $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right| < 1$ и $A < 1$, то из (3.5) видно, что крутизна изменения тока за счет сдвига положения резонанса заведомо оказывается малой величиной (пропорциональна произведению малых величин Γ/kT и V_0/kT). В связи с этим очевидно, что при комнатной температуре заведомо невозможно добиться контрастного переключения тока для диапазона напряжений меньше нескольких kT/e (~ 0.1 В). На практике, с учетом неполной передачи потенциала управляющего напряжения энергии квантовой системы и, соответственно, положению резонанса, это минимальное ограничение напряжения питания ставится как минимум вдвое больше.

Также наглядно оценить максимальную величину крутизны в логарифмическом масштабе $S^{-1} = \left| \frac{\partial I}{\partial V_g} \right| \cdot I^{-1}$. Без учета «фоновой» составляющей логарифмическая крутизна оказывается ограничена: $S^{-1} < \frac{e}{kT} \cdot \frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$ и в идеальном случае $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right| \rightarrow 1$ не превышает стандартный предел подпорогового размаха полевого транзистора [138]. Достигается предельное значение лишь при бесконечном удалении резонансной энергии от уровней Ферми контактов.

3.1.1.2. Сдвиг антирезонанса

Управление током через квантовую систему с помощью сдвига антирезонанса еще менее эффективно, чем посредством сдвига резонанса. В самом деле, в случае одиночного антирезонанса при энергии E_0 прозрачность системы в его окрестности можно записать в виде [4]:

$$T(E) = \frac{4\Gamma^2 (E - E_0)^2}{4\Gamma^2 (E - E_0)^2 + \Delta^4}, \quad (3.6)$$

где Δ – среднее расстояние (по оси энергий) от E_0 до ближайшего резонансного пика. Для существенного изменения тока необходимо сдвинуть положение антирезонанса на величину порядка $\Delta E_0 \sim \Delta^2 / (2\Gamma)$. При этом само изменение тока окажется пропорциональным малой величине «фоновой» прозрачности, которая достигается при энергиях далеких от E_0 , то есть при $|E - E_0| \sim \Delta$:

$$T_b \approx \frac{4\Gamma^2}{4\Gamma^2 + \Delta^2}. \quad (3.7)$$

В квантовых системах, обладающих антирезонансами, например, в молекулярных структурах, типично выполнено условие $\Gamma \ll \Delta$, откуда можно сделать вывод, что при сдвиге антирезонанса на большую величину ΔE_0 изменение тока происходит на малую величину, пропорциональную $T_b \approx 4\Gamma^2 / \Delta^2$. Следует, однако, отметить, что наличие резонансного максимума вблизи антирезонанса, то есть уменьшение Δ , приводит к улучшению крутизны переключения, что было проиллюстрировано в [4].

3.1.2. Управление током за счет изменения величины резонансного коэффициента прохождения

Управление током за счет изменения величины резонансной прозрачности феноменологически можно описать, основываясь по-прежнему на выражении (3.2) для коэффициента прохождения. Однако, теперь рассмотрим крутизну $g_A = \left| \frac{\partial I}{\partial V_g} \right| = \left| \frac{\partial I}{\partial A} \right| \cdot \left| \frac{\partial A}{\partial V_g} \right|$ вместо g_{E_0} , описывающую изменение тока за счет изменения величины A , которое может происходить под действием потенциала управляющего затвора, например, в силу различных интерференционных эффектов [5,130]. В этом случае требование малости ширины резонанса Γ по сравнению с шириной эффективной области интегрирования в (3.1), определяемой температурой и приложенной разностью потенциалов, не обязательно. Тем не менее, как будет показано ниже для конкретного физического механизма управления высотой резонанса, малость Γ представляется существенным требованием для обеспечения малости рабочих напряжений. Поэтому для качественной оценки крутизны g_A воспользуемся приближенным выражением для тока (3.3), откуда рассчитаем максимально возможную величину g_A :

$$\max(g_A) = \frac{\Gamma e}{2\hbar} \operatorname{th} \frac{V_0}{4kT} \cdot \left| \frac{\partial A}{\partial V_g} \right|. \quad (3.8)$$

Для малого напряжения питания $V_0 \ll kT$ имеем:

$$\max(g_A) \approx \frac{\Gamma e^2}{8\hbar} \cdot \frac{V_0}{kT} \cdot \frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial A}{\partial V_g} \right|. \quad (3.9)$$

Здесь отношение V_0/kT есть малая величина, однако $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial A}{\partial V_g} \right|$ не ограничена единицей,

как в случае $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial E_0}{\partial V_g} \right|$, потому что в силу интерференционной природы явления изменение

высоты резонансного пика может происходить крайне резко. Как будет показано ниже

на конкретном примере, резкость этого изменения (величина $\frac{1}{e} \cdot \left| \frac{\partial A}{\partial V_g} \right|$) растет с уменьше-

нием ширины резонанса Γ .

Таким образом, на качественном уровне видно существенное преимущество переключения тока за счет интерференционных эффектов, ведущих к изменению высоты резонанса, по сравнению с традиционным способом сдвига положений максимума пропускания в однородном поле затвора. Еще более наглядно это преимущество при рассмотрении логарифмической крутизны $S^{-1} = \left| \frac{\partial I}{\partial V_g} \right| \cdot I^{-1}$. При интерференционном управлении высотой резонанса эта величина, очевидно $S^{-1} \propto A^{-1}$ и, соответственно, может быть сколь угодно большой и существенно превышать ограничение $\frac{e}{kT}$ при достаточно малой A [130].

3.2. Резонансное туннелирование в квантовой системе с вырожденными уровнями

3.2.1. Модель квантовой системы с вырожденными уровнями

Рассмотрим некоторую квантовую систему, в которой есть два вырожденных состояния: $|1\rangle$ и $|2\rangle$, с энергией ε . Поскольку система вырожденная, то она имеет нетривиальную симметрию, определяемую соответствующей группой преобразований G . Пусть эта система подключена к двум одинаковым контактам (левый и правый) симметричным образом так, что операция отражения σ_{LR} , отображающая контакты друг в друга, будет также и операцией симметрии самой системы, то есть $\sigma_{LR} \in G$. В силу наличия вырождения у группы G должно быть двумерное неприводимое представление на подпространстве $\mathcal{H}_{12} = \text{span}(|1\rangle, |2\rangle)$ всего гильбертова пространства состояний \mathcal{H} изолированной квантовой системы [10]. Выберем в качестве базиса в \mathcal{H}_{12} симметричное $|s\rangle$ и антисимметричное $|a\rangle$ состояния, которые представляют собой собственные состояния оператора σ_{LR} : $\sigma_{LR}|s\rangle = |s\rangle$ и $\sigma_{LR}|a\rangle = -|a\rangle$. Эти состояния сохраняют свою симметрию даже при наличии возмущения, снимающего вырождение, но инвариантного относительно σ_{LR} . Туннельные матричные элементы взаимодействия состояния $|s\rangle$ с левым и правым контактом будут одинаковы в силу его симметрии, а для состояния $|a\rangle$ будут иметь раз-

ный знак, но одинаковую абсолютную величину в силу его антисимметрии (см. Рис. 3.2). То есть их можно записать в виде аналогичном (2.42) следующим образом:

$$\mathbf{u}_L = \sqrt{\Gamma} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \sqrt{\Gamma} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ -\gamma_a \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Здесь Γ определяет величину туннельной связи с контактами, а безразмерные параметры $0 \leq \gamma_{s,a} \leq 1$ описывают относительную величину связи с контактами симметричного и антисимметричного состояний. Параметры $\gamma_{s,a}$ могут быть, например, рассчитаны как проекции нормированных множителем $\Gamma^{-1/2}$ векторов туннельных матричных элементов связи с контактами $\mathbf{u}_{L,R}$ в, например, узельном базисе на состояния $|s\rangle$ и $|a\rangle$ соответственно.

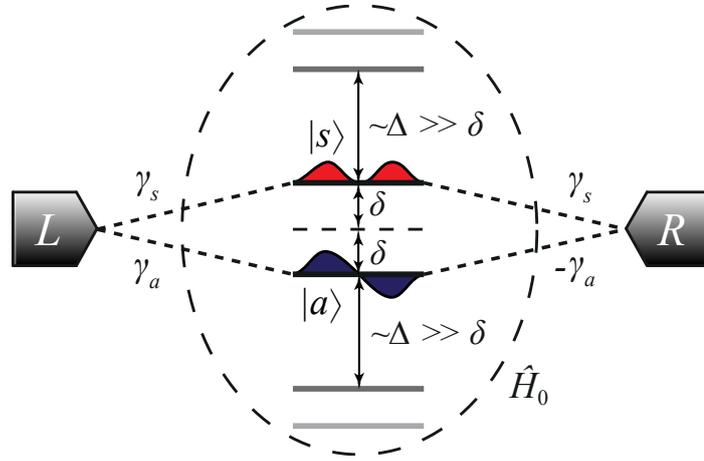


Рис. 3.2. Схема микроскопической модели квантовой системы с вырожденными симметричным $|s\rangle$ и антисимметричным $|a\rangle$ состояниями [5], взаимодействующими туннельным образом с контактами через матричные элементы (3.10). Параметр Γ принят за единицу, а $k_s = -k_a = 1$ для наглядности.

Предположим, что воздействие потенциала управляющего электрода (затвора) вносит возмущение в квантовую систему, которое снимает вырождение. При этом симметрия квантовой системы снижается с группы G до некоторой ее нетривиальной подгруппы $H \subset G$, причем $\sigma_{LR} \in H$. Такое возмущение вносит расстройку энергий симметричного и антисимметричного состояний: $\varepsilon_{s,a}(\delta) = \varepsilon + k_{s,a}\delta$, где δ характеризует величину этой расстройки, а безразмерные параметры $-1 \leq k_{s,a} \leq 1$ показывают восприимчивость симметричного и антисимметричного состояния к возмущению. Они могут быть

определены, например, по теории возмущений. Считаем, что $k_s \neq k_a$, так как возмущение снимает вырождение. Пренебрежем влиянием потенциала затвора на Γ и $\gamma_{s,a}$, так как учет этого не повлияет на качественную картину явления.

3.2.2. Коэффициент прохождения

Пренебрегая вкладом от других состояний квантовой системы, удаленных по шкале энергии на величину порядка $\Delta \gg \delta$ от исследуемой пары вырожденных уровней (см. Рис. 3.2), можно рассчитать коэффициент прохождения в приближении широкой зоны. Следуя общему подходу, подробно изложенному выше, этот коэффициент прохождения может быть записан в форме (2.36) с

$$\begin{aligned} P(E) &= 2 \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0) \times \mathbf{u}_L^\dagger (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{u}_R, \\ Q(E) &= \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{aux}), \end{aligned} \quad (3.11)$$

где

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon + k_s \delta & 0 \\ 0 & \varepsilon + k_a \delta \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

есть гамильтониан изолированной системы и

$$\mathbf{H}_{aux} = \mathbf{H}_0 + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger - i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger = \begin{pmatrix} \varepsilon + k_s \delta & 2i\Gamma \gamma_s \gamma_a \\ 2i\Gamma \gamma_s \gamma_a & \varepsilon + k_a \delta \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

представляет собой неэрмитов вспомогательный гамильтониан, который, однако, является PT -симметричным. Здесь операция $\mathcal{P} = \sigma_{LR}$ соответствует зеркальному отражению, а \mathcal{T} – обращению времени (комплексному сопряжению). В самом деле, легко проверить, что оператор $\mathcal{PT}\mathbf{H}_{aux}\mathcal{PT}$ действует на любой вектор $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^2$ точно также как и оператор \mathbf{H}_{aux} , что и означает его PT -симметричность [53]. Следовательно, вспомогательный гамильтониан может иметь действительные собственные значения, соответствующие единичным резонансам прозрачности, которые могут слиться в резонанс меньше единицы при нарушении PT -симметрии вспомогательного гамильтониана. При этом слиянии также произойдет и нарушение симметрии распределения электронной плотности в резонансе [5].

Используя выражения (3.11)-(3.13), можно записать явный вид коэффициента прохождения рассматриваемой системы:

$$T(E) = \frac{P^2(E)}{P^2(E) + Q^2(E)}, \quad (3.14)$$

где

$$\begin{aligned} P(E) &= 2\Gamma \left[(k_a \gamma_s^2 - k_s \gamma_a^2) \delta - (\gamma_s^2 - \gamma_a^2)(E - \varepsilon) \right], \\ Q(E) &= \left[E - \varepsilon - \frac{1}{2} \delta (k_a + k_s) \right]^2 + 4\gamma_s^2 \gamma_a^2 \Gamma^2 - \delta^2 \frac{(k_a - k_s)^2}{4}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Из этого выражения следует, что для достаточно большой величины δ прозрачность имеет два единичных максимума (два действительных корня Q , т. е. два действительных собственных значения вспомогательного гамильтониана) при энергиях

$$E = \varepsilon + \frac{1}{2} \delta (k_s + k_a) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \delta^2 (k_s - k_a)^2 - 4\gamma_s^2 \gamma_a^2 \Gamma^2}.$$

Уменьшение δ приводит к слиянию резонансов при $\delta = 4\gamma_s \gamma_a \Gamma |k_a - k_s|^{-1}$, что соответствует особой точке вспомогательного гамильтониана. Дальнейшее уменьшение δ также приводит к уменьшению амплитуды резонансного пика прозрачности. Кроме того, здесь присутствует и антирезонанс при энергии $E = \varepsilon + \delta (k_a \gamma_s^2 - k_s \gamma_a^2) / (\gamma_s^2 - \gamma_a^2)$ дополнительно способствующий снижению прозрачности при уменьшении δ .

Наименьший коэффициент прохождения соответствует вырожденному случаю $\delta = 0$. При этом, как следует из общего выражения (3.14), он будет иметь антирезонанс при $E = \varepsilon$ и два максимума при $E = \varepsilon \pm 2\gamma_s \gamma_a \Gamma$, высота которых будет определяться соотношением между γ_s и γ_a :

$$T_{peak} = \left(\frac{\gamma_s^2 - \gamma_a^2}{\gamma_s^2 + \gamma_a^2} \right)^2. \quad (3.16)$$

Из (3.16) и (3.14) видно, что при $\gamma_s / \gamma_a \rightarrow 1$ система становится полностью непрозрачной: $T(E) \equiv 0$ при $\delta = 0$ (в вырожденном режиме). На практике, конечно же, это невозможно в силу наличия вклада в туннельную прозрачность от других энергетических уровней квантовой системы, который не учитывался при выводе соотношения (3.14). Следует отметить, что в пределе одиночного уровня ($\gamma_s = 0$ или $\gamma_a = 0$) выражение (3.16) естественно обращается в единицу, так как все интерференционные эффекты, связанные с наличием вырождения отсутствуют. Рис. 3.3 иллюстрирует эволюцию коэффициента прохождения при изменении δ .

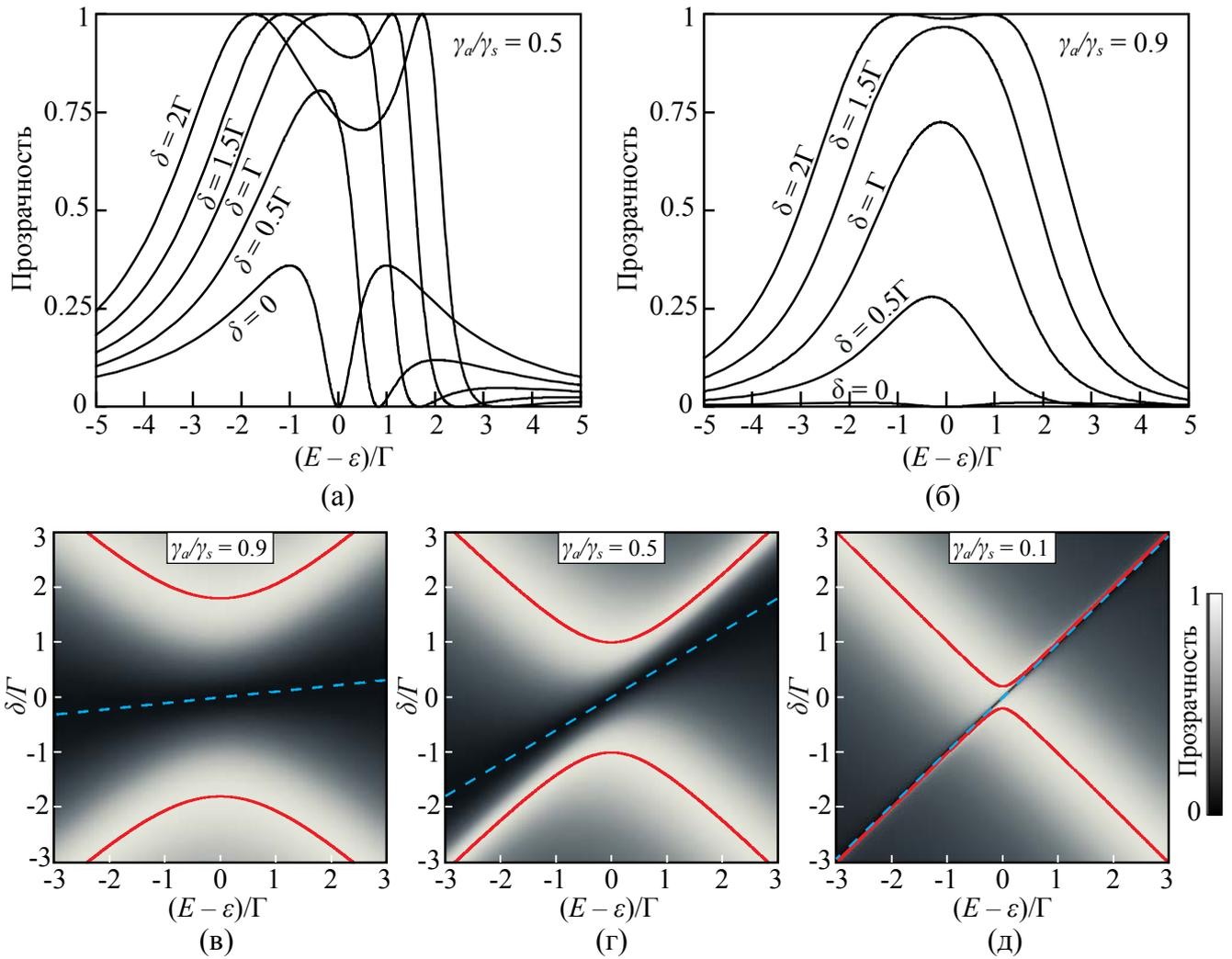


Рис. 3.3. Эволюция спектра коэффициента прохождения при изменении δ (γ_s положена равной единице и $k_s = -k_a = 1$). Профили прозрачности для некоторых значений параметра δ и $\gamma_a = 0.5$ (а) и $\gamma_a = 0.9$ (б). Графики, демонстрирующие непрерывное изменение коэффициента прохождения для $\gamma_a = 0.9$ (в), $\gamma_a = 0.5$ (г) и $\gamma_a = 0.1$ (д). Красные сплошные линии показывают положение единичных резонансов и пунктирные голубые – положение нулей прозрачности.

3.2.3. Квантовый интерференционный транзистор

Используя общее соотношение (3.1), можно приближенно (при $\Gamma \ll kT, V_0$) оценить ток через исследуемую систему с коэффициентом прохождения (3.14):

$$I \approx \frac{e\Gamma}{\hbar} \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT} \times \frac{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2) \left[\delta^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 - \gamma_s^2)^2 \right]}{\delta^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 + \gamma_s^2)^2}. \quad (3.17)$$

Здесь V_{LR} – приложенное напряжение к системе (между левым и правым контактами). Чтобы исследовать возможности управления током за счет изменения параметра δ , прежде всего, необходимо оценить ток квантового ключа в открытом I_{on} и в закрытом состоянии I_{off} и их отношение. Ток (3.17) достигает минимального значения при $\delta = 0$ и монотонно растет с увеличением $|\delta|$. Поэтому можно взять $\delta = 0$ для вычисления тока I_{off} и некоторое значение $\delta = \delta_0 \neq 0$ для вычисления I_{on} . Например, возьмем $\delta_0 = 4\gamma_s\gamma_a\Gamma|k_a - k_s|^{-1}$, соответствующее слиянию резонансов, тогда получим:

$$I_{on} \approx \frac{e\Gamma}{\hbar} \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT} \times \frac{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2)^3}{\gamma_a^4 + \gamma_s^4 + 6\gamma_s^2\gamma_a^2}, \quad (3.18)$$

$$I_{off} \approx \frac{e\Gamma}{\hbar} \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT} \times \frac{(\gamma_s^2 - \gamma_a^2)^2}{\gamma_s^2 + \gamma_a^2}.$$

Отсюда видно, что отношение тока в открытом состоянии к току в закрытом оказывается пропорциональным $I_{on}/I_{off} \propto (\gamma_s - \gamma_a)^{-2}$. Таким образом, теоретически оно может быть неограниченно большим при $\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$ (без учета вклада в туннельную проводимость от остальных уровней системы).

Одним из важнейших параметров электрического ключа (транзистора) служит крутизна его передаточной характеристики, которая показывает чувствительность изменения тока к изменению управляющего напряжения. Пусть управляющее напряжение V_g приложено к системе таким образом, что оно определяет то возмущение, которое снимает вырождение, то есть можно положить:

$$\delta = \alpha e V_g, \quad (3.19)$$

где $0 < \alpha < 1$ определяет долю влияния управляющего напряжения на энергетический спектр квантовой системы [130,134]. Используя выражение (3.17), можно оценить максимальную крутизну (фактически – производную от тока по напряжению V_g), достигае-

мую при $V_g = 2\Gamma \frac{\gamma_s^2 + \gamma_a^2}{\sqrt{3}\alpha e |k_a - k_s|}$:

$$g_{\max} = \frac{e^2}{h} \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT} \times \frac{3\sqrt{3}\alpha\gamma_s^2\gamma_a^2|k_a - k_s|\pi}{2(\gamma_s^2 + \gamma_a^2)^2}. \quad (3.20)$$

Максимально достижимое значение g_{\max} соответствует идеальному случаю ($\alpha \rightarrow 1$, $\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$ и $k_s = -k_a = 1$), при этом $g_{\max} \rightarrow \frac{e^2}{h} \times \frac{3\sqrt{3}}{4} \pi \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT}$. Аналогично можно оценить и среднюю крутизну $g_{\text{avg}} = (I_{\text{on}} - I_{\text{off}})/\Delta V_g$, где $\Delta V_g = 4\gamma_s\gamma_a\Gamma|k_a - k_s|^{-1}(\alpha e)^{-1}$ необходимое изменение управляющего напряжения для переключения между закрытым и открытым режимами. Используя выражения (3.18), нетрудно получить:

$$g_{\text{avg}} = \frac{e^2}{h} \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT} \times \frac{8\pi\alpha\gamma_s^3\gamma_a^3|k_a - k_s|}{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2)(\gamma_s^4 + \gamma_a^4 + 6\gamma_s^2\gamma_a^2)}. \quad (3.21)$$

В оптимальном случае ($\alpha \rightarrow 1$, $\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$ и $k_s = -k_a = 1$) $g_{\max} \rightarrow \frac{e^2}{h} \times \pi \times \text{th} \frac{eV_{LR}}{4kT}$, что всего в $3\sqrt{3}/4 \approx 1.3$ раза меньше максимальной крутизны. В качестве иллюстрации управления током в такой квантовой системе на Рис. 3.4 и Рис. 3.5 приведены выходные и передаточные ВАХ, рассчитанные численным интегрированием выражения (3.1) с коэффициентом прохождения (3.14).

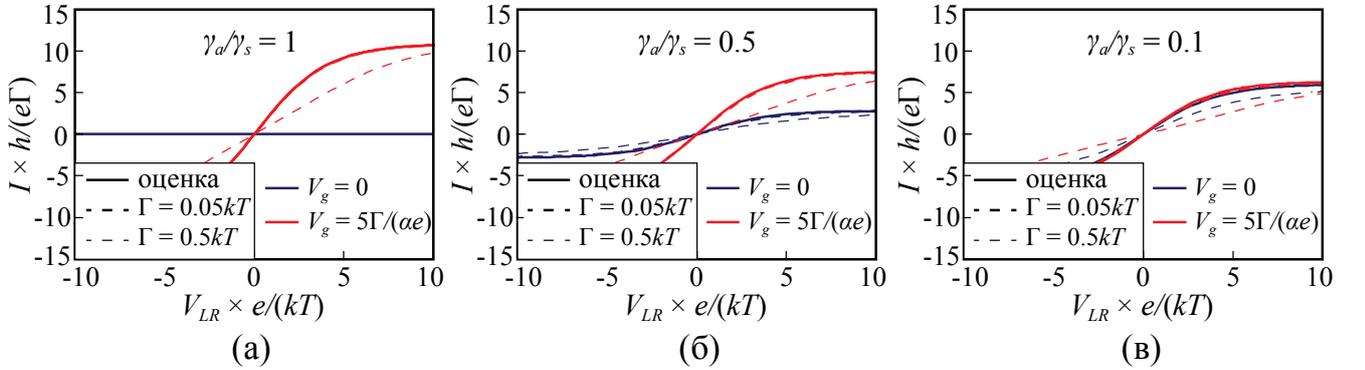


Рис. 3.4. Выходные ВАХ квантового интерференционного транзистора с $k_s = -k_a = 1$, $\gamma_s = 1$ и $\gamma_a = 1$ (а), $\gamma_a = 0.5$ (б) и $\gamma_a = 0.1$ (в). Синие линии соответствуют закрытому состоянию ($V_g = 0$), а красные – открытому ($V_g > 0$). Сплошные жирные линии соответствуют оценке тока по выражению (3.17), а пунктирные – численному расчету по соотношению (3.1) с различными ширинами резонансов. Очевидно, чем тоньше резонансы, тем точнее оценка (3.17). Также видно ухудшение переключающих свойств, когда разница между γ_s и γ_a становится существенной.

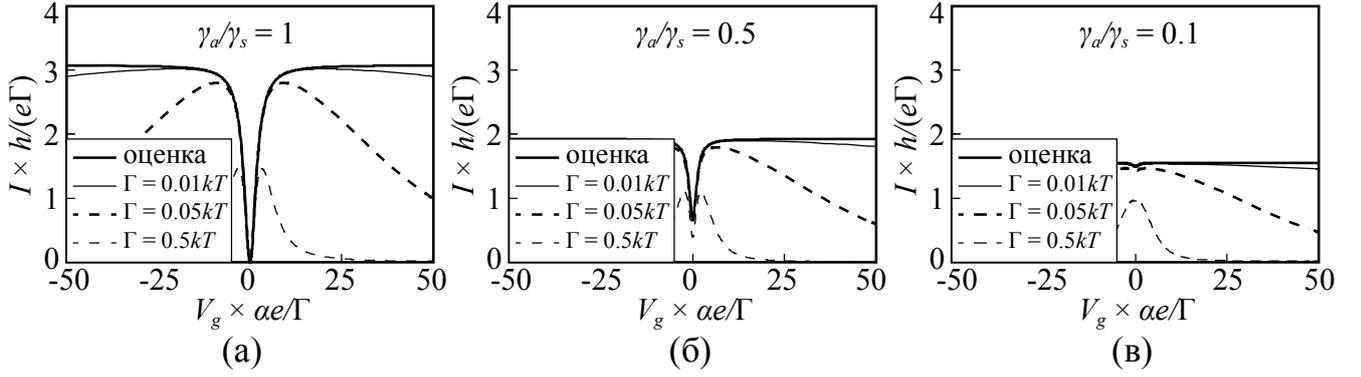


Рис. 3.5. Передаточные ВАХ квантового интерференционного транзистора с $k_s = -k_a = 1$, $\gamma_s = 1$ и $\gamma_a = 1$ (а), $\gamma_a = 0.5$ (б) и $\gamma_a = 0.1$ (в) при $V_{LR} = kT/e$. Сплошные жирные линии соответствуют оценке тока по выражению (3.17), а пунктирные – численному расчету по соотношению (3.1) с различными ширинами резонансов. Отклонение от оценки (3.17) здесь происходит в силу частичного выхода резонансов за эффективную область интегрирования в (3.1), определяемую разностью функций заполнения в контактах. Для более широких резонансов этот эффект более заметен. Также видно ухудшение переключающих свойств, когда разница между γ_s и γ_a становится существенной.

Логарифмическая крутизна этой модели квантового интерференционного транзистора может быть вычислена из выражения (3.17). Максимального значения она достигает при

$V_g = 2\Gamma \frac{\sqrt{2\sqrt{\gamma_a^8 - \gamma_a^4 \gamma_s^4 + \gamma_s^8 - \gamma_a^4 - \gamma_s^4}}}{\sqrt{3}\alpha e |k_a - k_s|}$, которое в идеальном случае ($\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$) может быть не-

ограниченно большим: $S^{-1} \propto \frac{|k_a - k_s|}{4\Gamma \gamma_a \gamma_s |1 - \gamma_s/\gamma_a|}$.

Другим важным параметром транзистора (ключа) служит коэффициент усиления K , которого можно добиться в простейшем усилителе на этом транзисторе с некоторой нагрузкой R_{load} [138]:

$$K = \frac{g}{g_0 + R_{load}^{-1}}. \quad (3.22)$$

Здесь g – крутизна, а $g_0 = \partial I / \partial V_{LR}$ – выходная проводимость ключа. Из (3.17) можно оценить g_0 для малого смещения между левым и правым контактами ($eV_{LR} < kT$):

$$g_0 \approx \frac{e^2}{h} \times \frac{\pi\Gamma}{2kT} \times \frac{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2) [\delta^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 - \gamma_s^2)^2]}{\delta^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 + \gamma_s^2)^2}. \quad (3.23)$$

Для напряжения $eV_{LR} \gg kT$ выходная проводимость отсутствует: $g_0 \approx 0$. Таким образом, исходя из (3.22), коэффициент усиления может быть сделан сколь угодно большим при $eV_{LR} \gg kT$ и $R_{load} \rightarrow \infty$, однако, при $eV_{LR} < kT$ он остается ограничен и не превышает $K_{max} = g/g_0$, что для идеального случая ($\alpha \rightarrow 1, \gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$ и $k_s = -k_a = 1$) дает

$$K_{max} = \frac{g}{g_0} = \frac{V_{LR}}{V_g} \times \frac{8}{4 + \left(\frac{eV_g}{\Gamma}\right)^2}, \quad (3.24)$$

где значение V_g определяется выбором рабочей точки транзистора, при которой будет функционировать усилитель.

3.2.4. Реализация с использованием дирадикалов

В качестве возможных кандидатов для физической реализации таких квантовых интерференционных транзисторов могут выступать молекулы с вырожденными орбиталями – дирадикалы [139], для которых уже было показано наличие деструктивной интерференции при квантовом транспорте [140]. При подключении к контактам через якорные группы дирадикальный характер таких соединений стабилизируется [141]. Таким образом, можно ожидать, что подключение контактов к таким молекулам не разрушит вырождение их орбиталей, а может даже дополнительно и стабилизирует их. Дирадикалы могут быть проклассифицированы на два типа: несвязные (disjoint) и связные (non-disjoint) в зависимости от того имеют ли их вырожденные орбитали общие атомы. Установить принадлежность к типу оказывается возможным благодаря простой процедуре разметки атомов [142,143]. Несвязные дирадикалы кажутся более подходящими для создания квантового интерференционного транзистора. В самом деле, подключение контактов к атомам, входящим в разные вырожденные орбитали ведет к тому, что симметричная и антисимметричная комбинация этих молекулярных орбиталей будет взаимодействовать с контактами одинаково, то есть параметры γ_s и γ_a будут в этом случае одинаковы. Как было показано выше это приводит к существенному улучшению всех

характеристик прибора в силу полного (без учета других орбиталей) отсутствия тока в закрытом состоянии.

3.2.4.1. Квантовый интерференционный транзистор на основе триметиленметана

В качестве примера связанного дирадикала рассмотрим триметиленметан [140]. На Рис. 3.6а схематично изображена его модель в формализме Хюккеля, состоящая из p -орбиталей атомов углерода. Гамильтониан изолированной молекулы в этом приближении имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} . \quad (3.25)$$

где

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & \tau_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_0 & \tau & 0 \\ \tau_1 & \tau & \varepsilon_0 & \tau_1 \\ 0 & 0 & \tau_1 & \varepsilon_0 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 - \varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 - \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Здесь \hat{H}_0 определяет систему с вырожденными уровнями, ε_0 – энергии атомных орбиталей, а τ и τ_1 туннельные матричные элементы двойной и одинарной связи. Возмущение \hat{V} , создаваемое внешним управляющим электродом, приводит к электростатическому сдвигу энергий некоторых атомных орбиталей. Гамильтониан (3.26) записан в базисе локализованных на атомных орбиталях состояний, пронумерованных в соответствии с Рис. 3.6а. Без возмущения в молекуле есть вырожденные состояния с энергией $E = \varepsilon_0$, чьи симметричные и антисимметричные комбинации можно записать как:

$$\begin{aligned} |s\rangle &= \frac{\tau}{\sqrt{2\tau_1^2 + \tau^2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\sqrt{2} \frac{\tau_1}{\tau}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^T, \\ |a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 0, 0, -1)^T. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Помимо $|s\rangle$ и $|a\rangle$ у системы есть еще два собственных состояния, удаленные от них по энергии, которые не учитываются в рамках упрощенной модели, изложенной выше, но которые естественным образом входят в описание системы через 4×4 гамильтониан (3.26). Связь состояний $|s\rangle$ и $|a\rangle$ с контактами может быть описана векторами из соответствующих матричных элементов:

$$\mathbf{u}_L = \sqrt{\Gamma} \begin{pmatrix} \frac{\tau}{\sqrt{2(2\tau_1^2 + \tau^2)}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \sqrt{\Gamma} \begin{pmatrix} \frac{\tau}{\sqrt{2(2\tau_1^2 + \tau^2)}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Следовательно, параметры γ_s и γ_a для такого подключения молекулы к контактам будут

$$\gamma_s = \frac{\tau}{\sqrt{2(2\tau_1^2 + \tau^2)}}, \quad \gamma_a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (3.29)$$

Используя теорию возмущений для вырожденных состояний в первом приближении [10], можно рассчитать сдвиг энергий симметричного и антисимметричного состояний под воздействием возмущения \hat{V} :

$$k_s = \frac{2\tau_1^2}{2\tau_1^2 + \tau^2}, \quad k_a = 0. \quad (3.30)$$

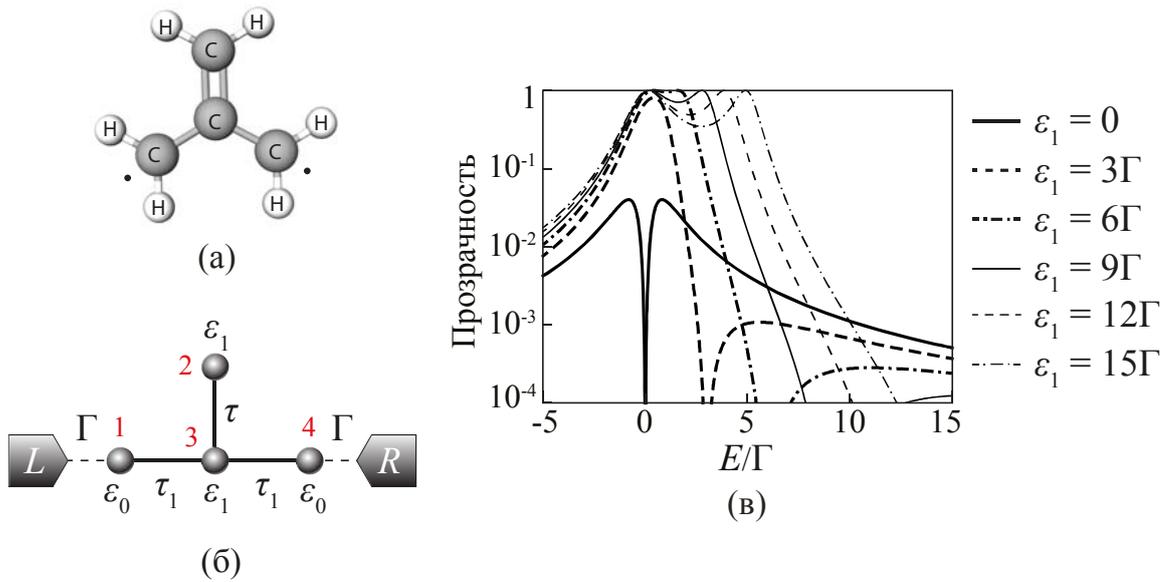


Рис. 3.6. Модель связанного дирадикала. Структурная модель дирадикальной конфигурации молекулы триметиленметана (а). Схематичный вид соответствующей структуры Хюккеля, у которой два атома углерода (2 и 3) подвергаются электростатическому воздействию управляющего электрода (а). Коэффициент прохождения системы при различных значениях ϵ_1 (б). Параметры выбраны следующим образом: $\epsilon_0 = 0$, $\tau = 100\Gamma$ и $\tau_1 = 50\Gamma$.

Наконец, можно рассчитать точное выражение для коэффициента прохождения через эту систему, используя полный гамильтониан (3.26):

$$T_{ND} = \frac{4\Gamma^2 \tau_1^4 \tilde{E}^2}{Q_{ND} + 4\Gamma^2 \tau_1^4 \tilde{E}^2}, \quad (3.31)$$

где

$$Q_{ND} = \tilde{E}^4 - 2\tilde{\varepsilon}_1 \tilde{E}^3 + (\tilde{\varepsilon}_1^2 + \Gamma^2 - \tau^2 - 2\tau_1^2) \tilde{E}^2 + 2\tilde{\varepsilon}_1 (\tau_1^2 - \Gamma^2) \tilde{E} + \Gamma^2 (\tilde{\varepsilon}_1^2 - \tau^2). \quad (3.32)$$

Здесь $\tilde{E} = E - \varepsilon_0$ и $\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$. Рис. 3.7 показывает соответствие между точным коэффициентом прохождения (3.31) и модельным, рассчитанным по формуле (3.14) с параметрами для тримителенметана.

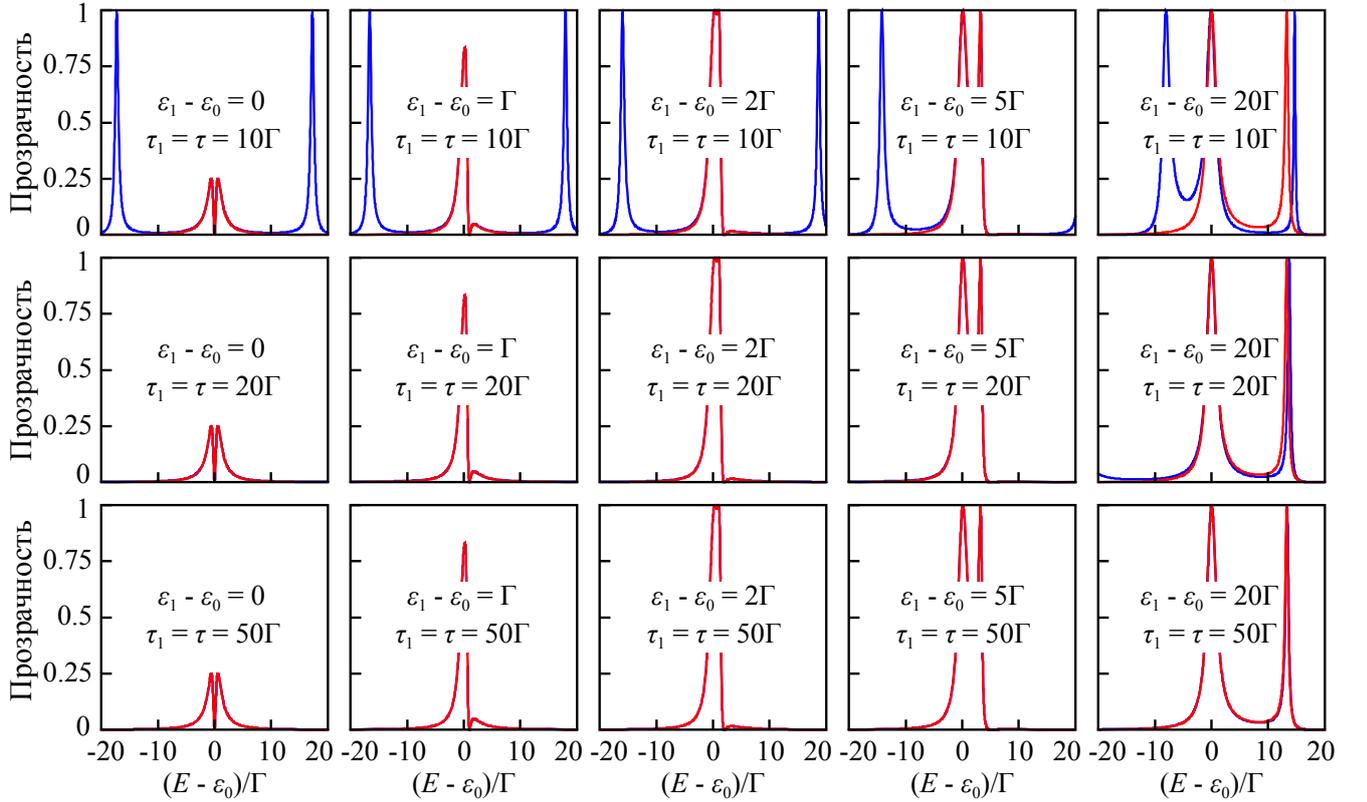


Рис. 3.7. Точный расчет (синие линии) и модельный расчет (красные линии) коэффициента прохождения для тримителенметана. Видно, что когда ширины резонансов Γ становятся малыми по сравнению с расстоянием между резонансами, модельное приближение хорошо согласуется с более точным расчетом.

3.2.4.2. Квантовый интерференционный транзистор на основе дивинилциклобутадиена

В качестве примера несвязного дирадикала рассмотрим дивинилциклобутадиен [140]. На Рис. 3.8а схематично изображена его модель в формализме Хюккеля, состоящая из р-орбиталей атомов углерода. Гамильтониан изолированной молекулы в этом приближении имеет вид (3.25) с

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \tau & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tau & \varepsilon_0 & 0 & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tau & 0 & \varepsilon_0 & \tau & \tau & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & \tau & \varepsilon_0 & 0 & \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau & 0 & \varepsilon_0 & 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau & 0 & \varepsilon_0 & 0 & \tau \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 & \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 & \varepsilon_0 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 - \varepsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 - \varepsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Здесь \hat{H}_0 определяет систему с вырожденными уровнями, ε_0 – энергии атомных орбиталей, а туннельные матричные элементы τ приняты одинаковыми для всех связей (в силу ароматичности). Возмущение \hat{V} , создаваемое внешним управляющим электродом, приводит к электростатическому сдвигу энергий некоторых атомных орбиталей. Гамильтониан (3.33) записан в базисе локализованных на атомных орбиталях состояний, пронумерованных в соответствии с Рис. 3.8а. Без возмущения (при $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$) молекула имеет две вырожденные молекулярные орбитали с энергией $E = \varepsilon_0$. С точки зрения зеркальной симметрии σ_{LR} , отображающей левый и правый контакты друг в друга и действующей на пронумерованные атомы молекулы как подстановка $\sigma_{LR} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 6 & 5 & 8 & 7 \end{pmatrix}$, можно выделить симметричную $|s\rangle$ и антисимметричную $|a\rangle$ комбинации вырожденных орбиталей:

$$\begin{aligned} |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, -1, -1, 0, 0, 1, 1)^T, \\ |a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(1, -1, -1, 1, 0, 0, 1, -1)^T. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Также помимо этих состояний в системе есть еще 6, удаленных от них по энергии, которые не учитываются в рамках упрощенной модели, но которые естественным образом входят в описание системы через 8×8 гамильтониан (3.33). Контакты подключены к 7-му и 8-му атомам и поэтому их связь с состояниями $|s\rangle$ и $|a\rangle$ может быть записана как

$$\mathbf{u}_L = \sqrt{\frac{\Gamma}{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \sqrt{\frac{\Gamma}{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

В этом случае нетрудно видеть, что $\gamma_s = \gamma_a = 6^{-1/2}$ и, следовательно, в соответствии с модельной формулой (3.14), прозрачность системы должна быть нулевой при $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$. Од-

нако, как видно из , где приведены графики точного расчета (в приближении сильной связи) коэффициента прохождения, система имеет конечную прозрачность даже при $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$ в силу туннелирования через другие энергетические уровни.

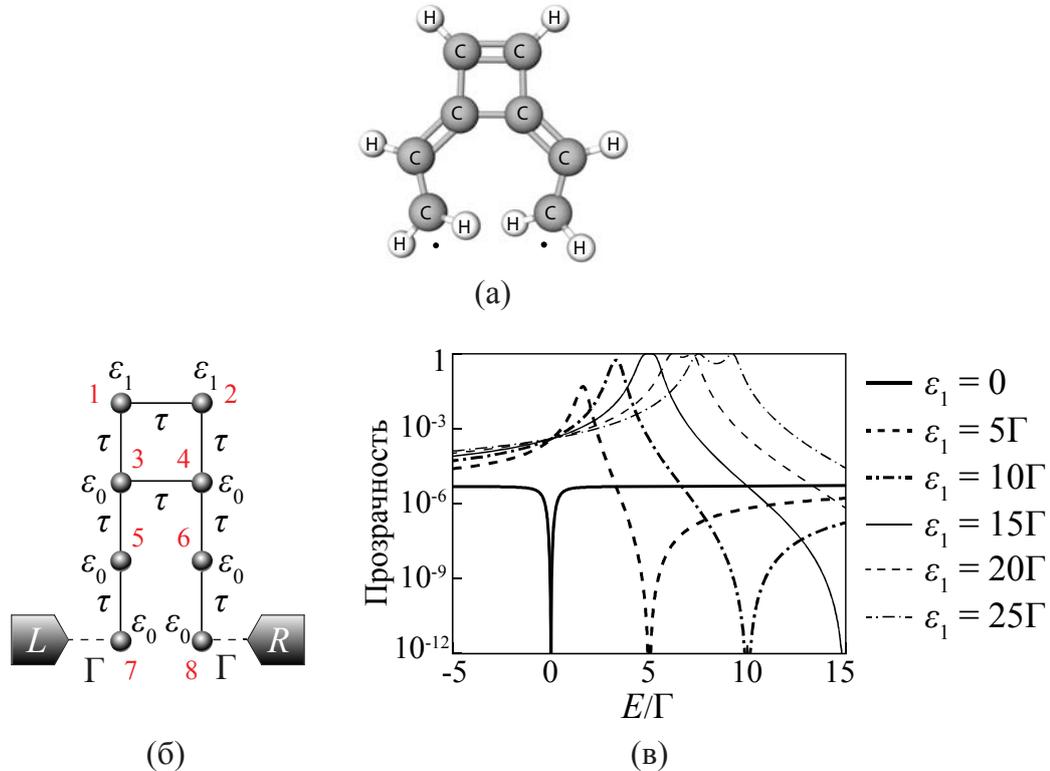


Рис. 3.8. Модель несвязного дирадикала. Структурная модель дирадикальной конфигурации молекулы дивинилциклобутадиена (а). Схематичный вид соответствующей структуры Хюккеля, у которой два атома углерода (1 и 2) подвергаются электростатическому воздействию управляющего электрода (а). Коэффициент прохождения системы при различных значениях ε_1 (б). Параметры выбраны следующим образом: $\varepsilon_0 = 0$ и $\tau = 100\Gamma$. При $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$ прозрачность обращается в ноль только в одной точке $E = \varepsilon_0$ в силу наличия «фоновой» составляющей, порожденной другими энергетическими уровнями.

Используя теорию возмущений для вырожденных состояний, можно заметить, что поправки первого порядка по \hat{V} к энергиям симметричного и антисимметричного состояний оказываются одинаковыми и вырождение снимается только во втором порядке. Следовательно, параметры $k_{s,a}$ становятся зависящими от величины возмущения, то есть от разности $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$:

$$k_s = \frac{1}{3} + \frac{4}{27}(\varepsilon_1 - \varepsilon_0), \quad k_a = \frac{1}{3} - \frac{4}{27}(\varepsilon_1 - \varepsilon_0). \quad (3.36)$$

Точное выражение для прозрачности такой системы может быть получено из полного гамильтониана (3.33):

$$T_{ND} = \frac{4\Gamma^2 \tau^{10} \tilde{E}^4}{Q_{ND} + 4\Gamma^2 \tau^{10} \tilde{E}^4}, \quad (3.37)$$

где

$$\begin{aligned} Q_D = & \tilde{E}^8 - 2\tilde{\varepsilon}_1 \tilde{E}^7 + (\tilde{\varepsilon}_1^2 + \Gamma^2 - 8\tau^2) \tilde{E}^6 + 2\tilde{\varepsilon}_1 (6\tau^2 - \Gamma^2) \tilde{E}^5 + \\ & + [\tilde{\varepsilon}_1^2 \Gamma^2 - (5\tilde{\varepsilon}_1^2 + 6\Gamma^2) \tau^2 + 16\tau^4] \tilde{E}^4 - 2\tilde{\varepsilon}_1 \tau^2 (9\tau^2 - 4\Gamma^2) \tilde{E}^3 + \\ & + [(6\tilde{\varepsilon}_1^2 + 5\Gamma^2) \tau^4 - 3\tilde{\varepsilon}_1^2 \Gamma^2 \tau^2 - 9\tau^6] \tilde{E}^2 + 2\tilde{\varepsilon}_1 \tau^4 (3\tau^2 - 2\Gamma^2) \tilde{E} - \tau^4 [\tilde{\varepsilon}_1^2 (\tau^2 - \Gamma^2) + \Gamma^2 \tau^2]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

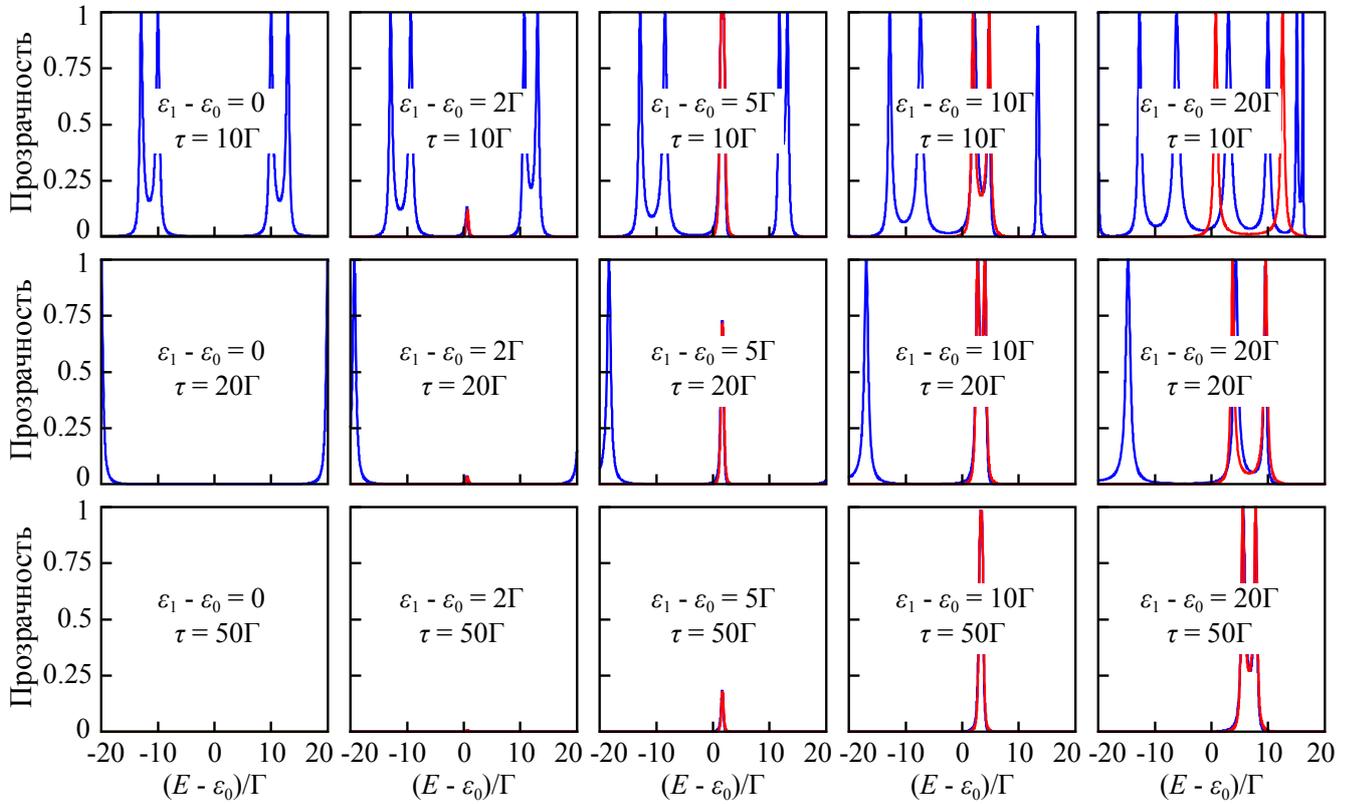


Рис. 3.9. Точный расчет (синие линии) и модельный расчет (красные линии) коэффициента прохождения для дивинилциклобутадиена. При малых ширинах резонансов Γ по сравнению с расстоянием между резонансами, модельное приближение хорошо согласуется с более точным расчетом. Также видно, что чувствительность изменения коэффициента прохождения к возмущению уменьшается при уменьшении величины возмущения по отношению к τ .

Рис. 3.9 показывает соответствие между точным коэффициентом прохождения (3.37) и модельным, рассчитанным по формуле (3.14) с параметрами для дивинилциклобутадие-на. В отличие от связного дирадикала, здесь чувствительность изменения коэффициента прохождения к возмущению зависит не только от величины возмущения по отношению к Γ , но и к τ . Это связано с нелинейностью реакции энергий вырожденных состояний на возмущение и приводит к ослаблению реакции, когда δ/τ мало.

3.3. Квантовый интерференционный инвертор

Рассмотрим модельную структуру квантового интерференционного инвертора (Рис. 3.10), которая аналогична структуре классического КМОП-инвертора с заменой комплементарных МОП транзисторов невзаимодействующими между собой квантовыми системами с гамильтонианами \hat{H}_1 и \hat{H}_2 соответственно. Эти квантовые системы играют роль управляемых ключей (квантовых интерференционных транзисторов), они имеют туннельную связь с общим выходным контактом и контактами, на которые подаются опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} , задаваемые чаще всего потенциалом общей шины («земля») и напряжением питания V_0 . Входное напряжение подается на общий контакт к управляющим электродам (затворам) квантовых интерференционных транзисторов.

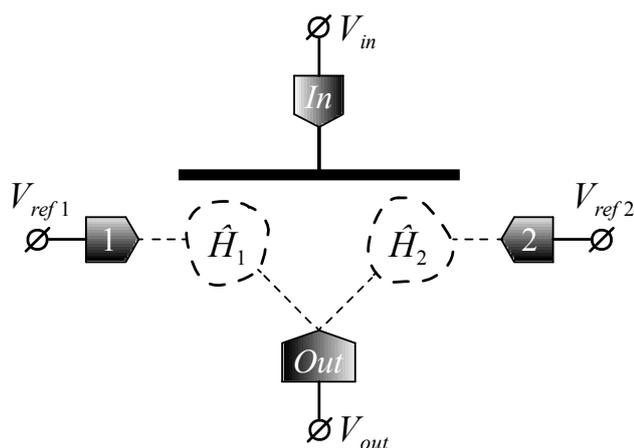


Рис. 3.10. Схема квантового интерференционного инвертора, состоящего из двух квантовых интерференционных транзисторов, соединенных в конфигурации классического КМОП-инвертора [4].

Используя общее соотношение (3.1), можно определить токи всех контактов инвертора (кроме входного, так как он считается гальванически развязанным с квантовыми системами):

$$\begin{aligned} I_{ref1} &= \frac{e}{h} \int \{T_{1out}(E)[f_1(E) - f_{out}(E)] + T_{12}(E)[f_1(E) - f_2(E)]\} dE, \\ I_{ref2} &= \frac{e}{h} \int \{T_{2out}(E)[f_2(E) - f_{out}(E)] + T_{12}(E)[f_2(E) - f_1(E)]\} dE, \\ I_{out} &= \frac{e}{h} \int \{T_{1out}(E)[f_{out}(E) - f_1(E)] + T_{2out}(E)[f_{out}(E) - f_2(E)]\} dE. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Здесь T_{1out} , T_{2out} и T_{12} есть вероятности туннелирования между соответствующими контактами, а $f_{1,2,out}$ – функции распределения в них (отличающиеся друг от друга только сдвигом химического потенциала на величину электростатического потенциала контакта). Выражения для токов (3.39), по сути, представляют собой пример формализма Бюттикера для конечных значений падения напряжения [144]. Считая квантовые системы невзаимодействующими, можно положить $T_{12} \approx T_{1out} T_{2out}$. Опорные напряжения V_{ref1} и V_{ref2} (для определенности положим, что $V_{ref2} > V_{ref1}$) заданы внешними идеальными источниками и считаются постоянными.

Принцип работы квантового инвертора (Рис. 3.10) аналогичен принципу работы классического КМОП-инвертора. При подключении к выходному контакту квантового инвертора высокоомной нагрузки (например, входа следующего инвертора или другого логического вентиля) ток через этот контакт равен нулю $I_{out} = 0$. Предположим, что из-за приложенного входного напряжения прозрачность первой квантовой системы стала очень мала $T_{1out} \approx 0$. Тогда первое слагаемое под интегралом в выражении для выходного тока [см. (3.39)] обратится в ноль, а из условия $I_{out} = 0$ следует, что второе слагаемое также должно стать нулевым. Полагая прозрачность T_{2out} ненулевой, отсутствие выходного тока возможно только при $V_{out} \approx V_{ref2}$. При этом, нетрудно видеть из выражений (3.39), что в условиях $T_{1out} \approx 0$ и $V_{out} \approx V_{ref2}$ токи I_{ref1} и I_{ref2} также обратятся в ноль. Совершенно аналогичная ситуация будет и при другом входном напряжении, обеспечивающем $T_{2out} \approx 0$. В этом случае условие $I_{out} = 0$ приведет к $V_{out} \approx V_{ref1}$ и опять же к обнуле-

нию токов I_{ref1} и I_{ref2} . Для обеспечения самосогласованности необходимо подобрать параметры системы, чтобы $T_{1out} \approx 0$ при $V_{in} \approx V_{ref1}$ и $T_{2out} \approx 0$ при $V_{in} \approx V_{ref2}$ соответственно.

Отсутствие токов и, как следствие, энергопотребления в стационарном состоянии есть основное преимущество КМОП схем. Потребление энергии КМОП схемой имеет место в процессе переключения. При этом величина потребляемой мощности пропорциональна квадрату питающего напряжения ($V_0 = V_{ref2} - V_{ref1}$) [145] и обратно пропорциональна времени переключения. Таким образом, необходимым условием повышения быстродействия, помимо уменьшения характерных размеров, служит также уменьшение потребляемой мощности. Однако, несмотря на значительные успехи в масштабировании элементов нанoeлектроники, напряжение питания современных кремниевых КМОП вентилях пока не удается сделать существенно меньше 1 В [145], что стимулирует поиск новых приборных решений. К их числу, например, относятся туннельные транзисторы с межзонным туннелированием с напряжением питания ниже 0.5 В [146]. Соответственно, верхнюю границу диапазона значений питающих напряжений, представляющих практический интерес для использования в перспективных квантовых молекулярных вентилях, можно оценить как 0.1-0.2 В. Следует отметить, что возможность существенного снижения рабочего напряжения (до 0.1 В) была недавно продемонстрирована для нового типа хорошо масштабируемых транзисторов, основанных на спин-орбитальном взаимодействии [147].

3.3.1. Модельная передаточная характеристика

Пусть квантовые системы, входящие в состав инвертора, представляют собой одинаковые квантовые интерференционные транзисторы, описанные выше, отличающиеся только энергией вырожденных состояний: ε_1 и ε_2 . Тогда, при условии, что резонансы достаточно узкие, требование $I_{out} = 0$, отвечающие высокоомной нагрузке инвертора, можно переписать в виде уравнения:

$$\begin{aligned}
& \left[f(\varepsilon_1 - eV_{out}) - f(\varepsilon_1 - eV_{ref1}) \right] \times \frac{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2) \left[\delta_1^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 - \gamma_s^2)^2 \right]}{\delta_1^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 + \gamma_s^2)^2} = \\
& = \left[f(\varepsilon_2 - eV_{ref2}) - f(\varepsilon_2 - eV_{out}) \right] \times \frac{(\gamma_s^2 + \gamma_a^2) \left[\delta_2^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 - \gamma_s^2)^2 \right]}{\delta_2^2 (k_a - k_s)^2 + 4\Gamma^2 (\gamma_a^2 + \gamma_s^2)^2}.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Предположим, что $\varepsilon_{1,2} = eV_{ref1,2}$, а входной потенциал V_{in} влияет на параметры отстройки от вырожденных режимов $\delta_{1,2}$ следующим образом:

$$\delta_{1,2} = \alpha(eV_{in} - \varepsilon_{1,2}). \tag{3.41}$$

Управление квантовыми ключами в соответствии с (3.41) обеспечивает симметричное переключение каждого из них при изменении входного напряжения в диапазоне $V_{in} \in [V_{ref1}, V_{ref2}]$.

Подставляя (3.41) в (3.40), можно получить неявный вид передаточной характеристики инвертора $V_{out} = V_{out}(V_{in})$. Поскольку зависимость $V_{out}(V_{in})$ симметрична относительно точки $V_{out} = V_{in} = (V_{ref1} + V_{ref2})/2$, то максимальный (по абсолютной величине) отрицательный коэффициент усиления $G = |\partial V_{out} / \partial V_{in}|$ будет достигнут именно при $V_{in} = (V_{ref1} + V_{ref2})/2$:

$$\begin{aligned}
G_{\max} &= G \left(V_{in} = \frac{V_{ref1} + V_{ref2}}{2} \right) = \text{sh} \frac{eV_0}{2kT} \times \\
& \times \frac{256\alpha^2 \Gamma^2 \gamma_a^2 \gamma_s^2 (k_a - k_s)^2 kTeV_0}{\left[16\Gamma^2 (\gamma_a^2 - \gamma_s^2)^2 + \alpha^2 (k_a - k_s)^2 e^2 V_0^2 \right] \cdot \left[16\Gamma^2 (\gamma_a^2 + \gamma_s^2)^2 + \alpha^2 (k_a - k_s)^2 e^2 V_0^2 \right]},
\end{aligned} \tag{3.42}$$

где $V_0 = V_{ref2} - V_{ref1}$. При $eV_0 \gg kT$ коэффициент усиления экспоненциально большой из-за множителя $\text{sh} \frac{eV_0}{2kT}$. В случае же $eV_0 \ll kT$ коэффициент усиления становится независимым от температуры и возможно оценить минимальное напряжение питания V_0^{crit} , обеспечивающее пороговое значение максимального коэффициента усиления $G_{\max} = 1$, при котором инвертор будет функционировать:

$$V_0^{crit} \approx \frac{4\Gamma}{\alpha e |k_a - k_s|} \sqrt{4\gamma_a^2 \gamma_s^2 - \gamma_a^4 - \gamma_s^4 - 2\gamma_a \gamma_s \sqrt{5\gamma_a^2 \gamma_s^2 - 2\gamma_a^4 - 2\gamma_s^4}} \sim |\gamma_a - \gamma_s| \text{ при } \frac{\gamma_s}{\gamma_a} \rightarrow 1. \tag{3.43}$$

Из (3.43) видно, что V_0^{crit} может быть бесконечно малым при $\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$. Однако, с другой стороны G_{max} все равно остается ограниченным сверху даже при $\gamma_s/\gamma_a \rightarrow 1$. Из формулы (3.42) можно сделать вывод о том, что при $V_0 = 4\Gamma/(\alpha e|k_a - k_s|)\sqrt{|\gamma_a^4 - \gamma_s^4|}$ максимальный коэффициент усиления G_{max} достигает своего наибольшего значения $2(\gamma_s/\gamma_a)^2$ для $\gamma_s/\gamma_a < 1$ или $2(\gamma_a/\gamma_s)^2$ для $\gamma_s/\gamma_a > 1$. Таким образом, наибольший коэффициент усиления при крайне малом напряжении питания не превышает 2, что, тем не менее, достаточно для функционирования инвертора.

3.3.2. Реализация с использованием дирадикалов

Принцип работы инвертора требует, чтобы при одном и том же напряжении на общем управляющем затворе один из ключей (транзисторов) был в открытом состоянии, а другой – в закрытом. Возможны два способа достижения этой цели. Прежде всего, можно выбрать два разных типа квантовых систем (молекул), аналогично тому, как в классической КМОП технологии используются два разных типа транзисторов: n-канальный и p-канальный. Этот подход требует наличия технология синтеза двух различных молекул со строго заданными свойствами. С другой стороны, возможно использовать одну и ту же квантовую систему для создания обоих ключей, но за счет электростатического влияния дополнительных затворов можно сдвинуть спектр этих систем в нужном направлении. Этот метод требует технологии синтеза только одного типа молекул, но вводит дополнительные затворы, что лишь немного усложняет технологию. Далее будут рассмотрены примеры инверторов с одинаковыми молекулами в качестве интерференционных транзисторов. Положим, что разные энергии переключения достигаются за счет дополнительных затворов, подключенных к соответствующим источникам опорных напряжений.

3.3.2.1. Квантовый интерференционный инвертор на основе триметиленметана

Схематично квантовый интерференционный инвертор из двух молекул триметиленметана изображен на Рис. 3.11а. Пусть опорные напряжения заданы следующим образом: $V_{ref1} = 0$ и $V_{ref2} = V_0$, где V_0 – напряжение питания. Входное напряжение V_{in} изменяет только энергию узлов в затемненной области (см. Рис. 3.11):

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_{1,2}^0 + \alpha(eV_{in} - \varepsilon_{1,2}^0). \quad (3.44)$$

Электростатическое влияние опорных и выходного контактов также может быть учтено, однако, это приведет лишь к небольшому искажению передаточной характеристики. Поэтому для понимания принципа работы инвертора учет этого не обязателен [5].

Рассмотрим следующий пример: $\varepsilon_1^0 = eV_{ref1} = 0$, $\varepsilon_2^0 = eV_{ref2} = eV_0$, $\alpha = 0.5$, $\tau_1 = 2.75$ эВ, $\tau = 3.65$ эВ и $\Gamma = 1$ мэВ. Энергия отсчитывается от уровня ферми первого опорного источника. Величины интегралов перескока τ_1 и τ взяты в соответствии с типичными значениями для одинарных и двойных связей соответственно [148]. Рис. 3.12а показывает штрихпунктирной линией передаточные характеристики инвертора для $V_0 = 5$ мВ и Рис. 3.12б – для $V_0 = 10$ мВ. При большем напряжении передаточная характеристика ожидаемо лучше (большой коэффициент усиления).

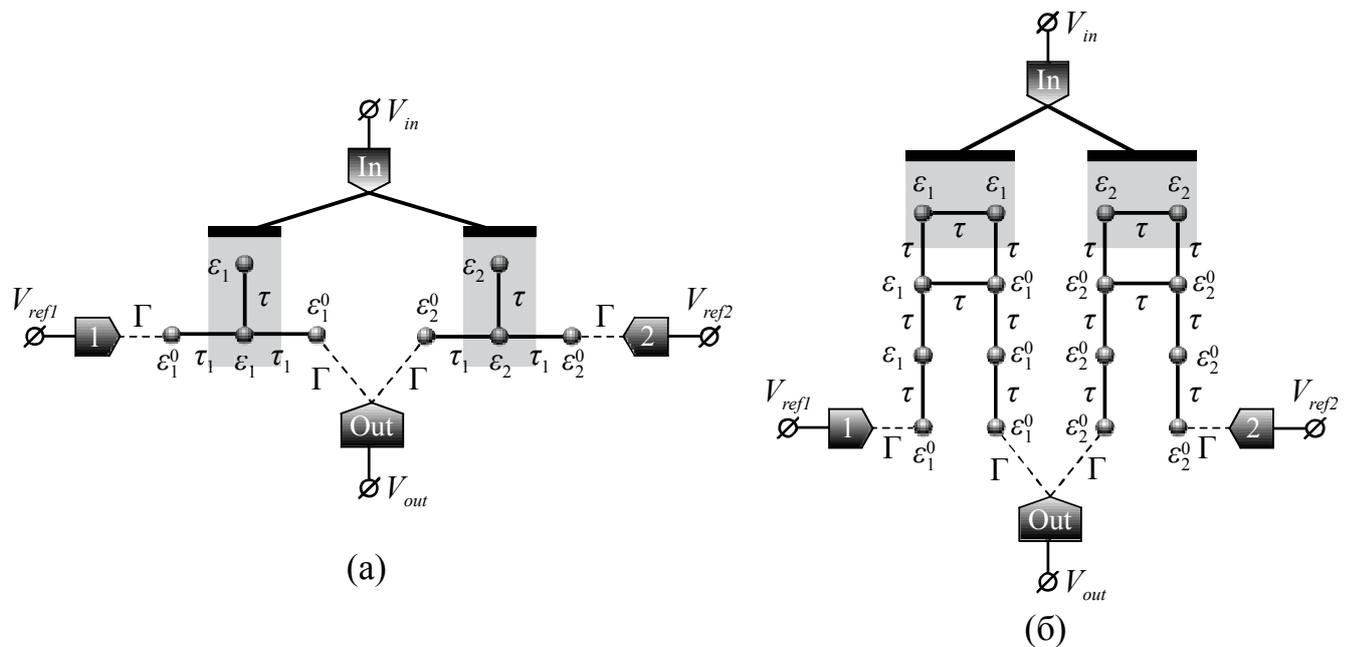


Рис. 3.11. Схемы квантовых интерференционных инверторов, состоящих из молекул связанного дирадикала (а) и несвязного дирадикала (б). Молекулы показаны в виде соответствующих диаграмм Хюккеля для р-орбиталей атомов углерода. Затемненная область показывает атомы, на которых электростатически влияет затвор.

3.3.2.2. Квантовый интерференционный инвертор на основе дивинилциклобутадиена

Схематично квантовый интерференционный инвертор из двух молекул триметиленметана изображен на Рис. 3.11б. Аналогично предыдущему случаю, считаем, что

входное напряжение изменяет энергии узлов только в затемненной области Рис. 3.11б. На Рис. 3.12а показаны передаточные характеристики инвертора при $V_0 = 5$ мВ и на Рис. 3.12б – при $V_0 = 10$ мВ (сплошными линиями). Параметры выбраны следующим образом: $\varepsilon_1^0 = eV_{ref1} = 0$, $\varepsilon_2^0 = eV_{ref2} = eV_0$, $\alpha = 0.5$ и $\Gamma = 1$ мэВ, а туннельный матричный элемент $\tau = 3$ эВ взят в соответствии с типичным значением для ароматических углеродных соединений [148].

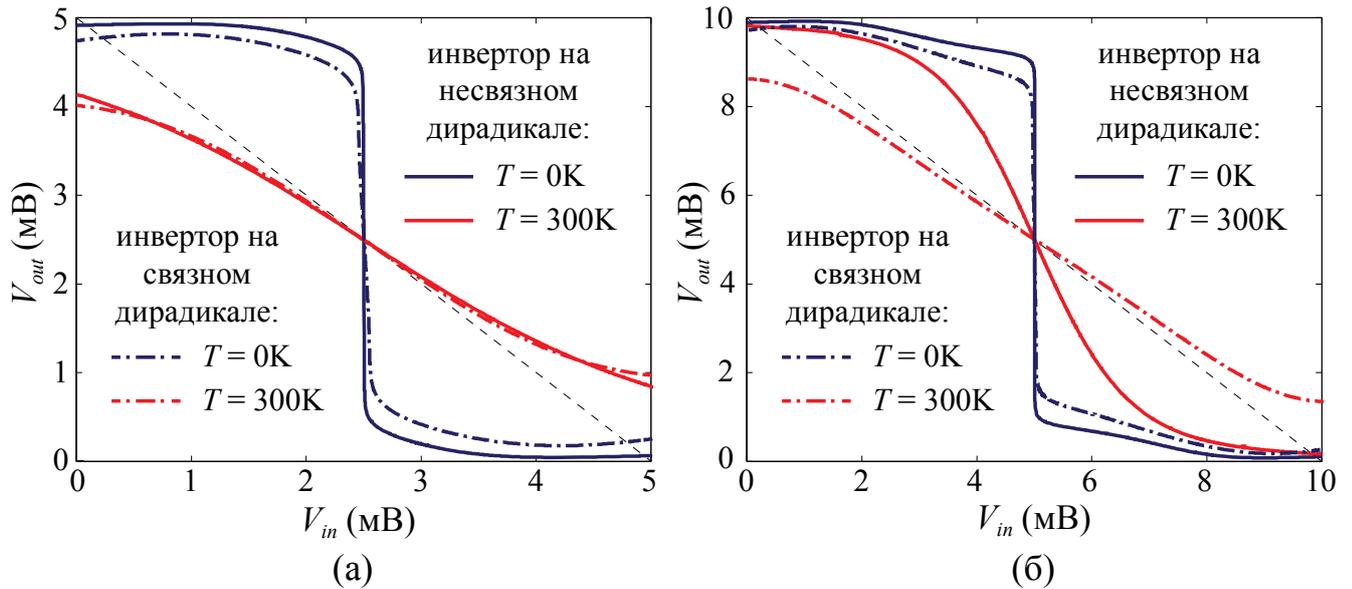


Рис. 3.12. Численно рассчитанные передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора [5] на основе связанных дирадикалов (штрихпунктирная линия) и несвязных дирадикалов (сплошная линия) при комнатной и нулевой температуре и различных напряжениях питания: $V_0 = 5$ мВ (а) и $V_0 = 10$ мВ (б). Для сравнения приведена прямая с коэффициентом наклона -1 (черная пунктирная линия).

Из Рис. 3.12б видно, что для больших напряжений питания передаточная характеристика инвертора на несвязном дирадикале (дивинилциклобутadiен) имеет больший максимальный коэффициент усиления, чем у инвертора на связанном дирадикале (триметиленметан). Это можно объяснить тем, что для несвязных дирадикалов выполнено условие $\gamma_s = \gamma_a$, и, соответственно, ток в закрытом состоянии гораздо ниже (он отличен от нуля только в силу наличия «фоновой» составляющей, происходящей от других состояний молекулы), чем у связанных дирадикалов. Однако, для более низких напряжений

питания (Рис. 3.12а) этот «фоновый» вклад может стать достаточно существенным, чтобы скомпенсировать преимущество несвязного дирадикала ($\gamma_s = \gamma_a$). Более того, вырождение в несвязных дирадикалах снимается лишь во втором порядке по величине возмущения. Следовательно, для низких напряжений чувствительность к изменению потенциала на затворе у несвязных дирадикалов снижается относительно таковой у связанных, что и приводит к выигрышу в коэффициенте усиления у инвертора, построенному на последнем типе дирадикалов. Из Рис. 3.12 можно сделать вывод, что для конкретных выбранных значений параметров только инвертор на основе дивинилциклобутадиена будет корректно функционировать при комнатной температуре при напряжении питания $V_0 = 10$ мВ.

3.4. Ограничения

3.4.1. Шум

Производительность реальных устройств заведомо ограничена из-за шума, что особенно существенно для низких напряжений. В квантовой системе шум не разделяется на дробовой и тепловой – всегда присутствует суперпозиция обоих вкладов [149]. Тем не менее, крайне наглядно обсудить эти вклады отдельно. Спектральная мощность дробового шума пропорциональна величине тока и поэтому становится пренебрежимо малой, когда напряжения и, соответственно, токи через систему уменьшаются. С другой стороны, при комнатной температуре влияние теплового шума может быть существенным. Таким образом, именно тепловой шум ограничивает снижение питающего напряжения [145].

Среднеквадратичный разброс напряжения из-за теплового шума есть $\Delta V_{therm} = \sqrt{kT/C}$, где C – емкость нагрузки, которая обычно определяется затворной емкостью следующего транзистора. Используя несколько молекул, включенных параллельно друг другу можно добиться использования большего затвора, что приведет к увеличению емкости C и снижению шума. Однако, с другой стороны увеличение C приводит к уменьшению возможной частоты переключений $\nu \propto \tau^{-1} = (RC)^{-1}$, где R а – сопротивление квантового интерференционного транзистора в открытом состоянии, ко-

торое может быть оценено из (3.18): $R \approx \frac{h}{e^2} \times \frac{2kT}{\pi\Gamma}$. Предположим, что затвор имеет размер 10×10 нм, расположен на слое диэлектрика с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 5$ толщиной 2 нм, тогда можно оценить емкость $C \approx 2$ аФ. Из этого следует, что без учета шума, возможные частоты переключения квантового интерференционного транзистора могут достигать 500 ГГц даже для слабо проводящего в открытом состоянии транзистора с $R \approx 1$ МОм ($\Gamma \approx 0.04kT$ для комнатной температуры). Однако, наличие шума существенно снижает этот показатель. В самом деле, ограничимся минимальной желаемой частотой переключений ν_{\min} , чтобы оценить минимальное напряжение питания необходимое для этого, которое принимается в 8 раз превышающем ΔV_{therm} для обеспечения уровня ошибки порядка 10^{-15} [145]:

$$V_0 > \sqrt{2 \frac{h}{e^2} \times \frac{2(kT)^2}{\pi\Gamma} \times \nu_{\min}}. \quad (3.45)$$

Для комнатной температуры и $\Gamma \approx 1$ мэВ условие (3.45) можно переписать как $V_0 \gtrsim \sqrt{\nu_{\min}} \times 10$ мВ, где ν_{\min} взята в ГГц. Таким образом, напряжения питания меньше чем kT/e при комнатной температуре вынуждают ограничиться частотой переключения порядка 7 ГГц.

3.4.2. Межэлектронное взаимодействие

Приведенная в этой главе модель квантового интерференционного транзистора основана на приближении Хюккеля [150] и не учитывает межэлектронные корреляционные эффекты. Однако, например, в работе [151] было показано, что интерференционные эффекты в чередующихся углеводородах (alternant hydrocarbons), предсказанные в приближении Хюккеля, могут оставаться и при учете кулоновского взаимодействия. Дирадикалы, которые рассматриваются в качестве потенциальных объектов для реализации предлагаемого квантового интерференционного транзистора представляют собой именно чередующиеся углеводороды, поэтому ожидаемо, что предсказанные в них эффекты сохраняться и в более реалистичной модели.

С другой стороны, отталкивание электронов приводит к формированию, например, кулоновской блокады [152], что может оказаться существенным для слабой туннельной связи с контактами, и не принципиальным для сильной туннельной связи. В

Приложении Е приведены вычисления для бОльших (по сравнению с приведенными в тексте) значений Γ : $\Gamma = 0.1$ эВ и $\Gamma = 0.2$ эВ. При таких значениях параметра Γ переключающие свойства сохраняются, однако, необходимое напряжение питания увеличивается. Таким образом, напряжение питания не может быть сколь угодно малым, а должно определяться также и исходя из оптимального значения Γ , которое, с одной стороны, должно предотвращаться эффект кулоновской блокады, а с другой – обеспечивать достаточно резкие максимумы прозрачности, необходимые для высокого контраста переключения тока.

В предлагаемой модели квантового интерференционного транзистора работает и деструктивная квантовая интерференция (антирезонанс) и ОТ вспомгательного гамильтониана (слияние резонансов). Оба эти явления существенно определяются наличием симметрии у рассматриваемой квантовой системы, поэтому ожидаемо, что предсказанные эффекты сохраняться с учетом межэлектронных взаимодействий, так как они основаны на симметричных свойствах системы.

3.5. Выводы по главе

1. Наиболее оптимальный для минимизации необходимых напряжений питания способ управления током через квантовую систему это изменение интерференционным путем высоты резонансных максимумов коэффициента прохождения, например, в неоднородном электростатическом поле затвора.
2. Квантовая система с вырожденными уровнями при некоторых условиях может под действием внешнего возмущения менять свою туннельную прозрачность вплоть до тождественного нуля (теоретическая модель). Таким образом, в такой системе можно добиться крайне высокого (в пределе – бесконечного) соотношения между током в открытом и закрытом состояниях, что приводит к сверхвысокой чувствительности такого квантового интерференционного транзистора (ключа) к изменению напряжения на затворе даже при комнатной температуре.
3. В качестве объектов для физической реализации таких квантовых интерференционных транзисторов можно использовать органические молекулы с дважды вырожденными молекулярными орбиталями – дирадикалы. Наиболее привле-

кательны несвязные дирадикалы, в которых вырожденным орбитали не имеют общих атомов.

4. На основе предложенных квантовых интерференционных транзисторов можно построить инвертор, аналогичный классическому КМОП-инвертору. В идеальном случае этот квантовый интерференционный логический вентиль может функционировать при комнатной температуре при крайне малом (в пределе – нулевом) напряжении питания. Было показано, что инвертор на основе молекул дивинилциклобутадиена может работать при напряжении питания 10 мВ при комнатной температуре.
5. Существенным ограничением для уменьшения напряжения питания предлагаемых квантовых интерференционных приборов может быть шум и межэлектронное взаимодействие. Наличие шума определяет также и возможное быстрое действие приборов. Подавление межэлектронного отталкивания и эффекта кулоновской блокады можно сделать за счет улучшения контактов между молекулярной квантовой системой и электродами.

ГЛАВА 4. ВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ВБЛИЗИ ТОЧКИ СЛИЯНИЯ РЕЗОНАНСОВ

Настоящая глава посвящена описанию динамических свойств квантовых систем и исследованию проявления в них эффекта слияния резонансов. В качестве величины, характеризующей динамические транспортные свойства квантовой системы, рассмотрена разрешенная по частоте проводимость, то есть линейный отклик тока на малый внешний переменный сигнал.

Для произвольной симметричной квантовой системы проводимость имеет наглядную статическую аналогию, которая исследована в общем случае для симметричной связи с контактами и для случая обрыва цепи, когда связь с одним из контактов отсутствует. В конце главы рассмотрены примеры структур, иллюстрирующие общие выводы.

4.1. Общие соотношения для линейного отклика тока через квантовую систему на малый переменный сигнал

Пусть к произвольной квантовой системе из N узлов, подключенной к M электродам, имеющей гамильтониан общего вида (2.77), приложен малый переменный сигнал частоты ω , который вносит следующее возмущение:

$$\begin{aligned}\delta\hat{H}_\alpha(t) &= ev_\alpha(t) \sum_p a_{\alpha,p}^\dagger a_{\alpha,p}, \\ \delta\hat{H}_0(t) &= \sum_{\alpha=1}^M ev_\alpha(t) \delta\hat{H}_0^\alpha,\end{aligned}\tag{4.1}$$

где $v_\alpha(t) = v_\alpha \cos \omega t$ – малый переменный сигнал, приложенный к α -ому контакту и матрица $\delta\hat{H}_0^\alpha$ определяет электростатическое влияние потенциала в α -ом контакте на гамильтониан изолированной квантовой системы. Элементы матрицы $\delta\hat{H}_0^\alpha$ должны быть определены из решения соответствующей электростатической задачи. В этом случае усредненный ток α -ого контакта уже не будет постоянным и будет меняться со временем в соответствии с общим выражением вида (2.6):

$$I_\alpha(t) = \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = -\frac{e}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sum_p \left(\gamma_{p,i}^\alpha G_{\alpha,p;i}^<(t,t) - \gamma_{p,i}^{\alpha*} G_{i,\alpha;p}^<(t,t) \right),\tag{4.2}$$

При этом функции Грина $G_{\alpha,p,i}^<$ и $G_{i,\alpha,p}^<$ можно определить согласно соотношению вида (2.9):

$$\begin{aligned} G_{\alpha,p,i}^<(t,t') &= \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{\alpha*} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \left[g_{\alpha,p}^r(t,t_1) G_{j,i}^<(t_1,t') + g_{\alpha,p}^<(t,t_1) G_{j,i}^a(t_1,t') \right], \\ G_{i,\alpha,p}^<(t,t') &= \sum_{j=1}^N \gamma_{p,j}^{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \left[G_{i,j}^r(t,t_1) g_{\alpha,p}^<(t_1,t') + G_{i,j}^<(t,t_1) g_{\alpha,p}^a(t_1,t') \right]. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Подставляя (4.3) в (4.2) и производя двухвременное преобразование Фурье [153], можно получить следующее выражение для тока из α -ого контакта в систему:

$$\begin{aligned} I_{\alpha}(\omega) &= \frac{e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} \int \frac{dE_1}{2\pi} \text{Tr} \left[\mathbf{G}^r(E + \hbar\omega, E_1) \Sigma_{\alpha}^<(E_1, E) + \mathbf{G}^<(E + \hbar\omega, E_1) \Sigma_{\alpha}^a(E_1, E) - \right. \\ &\quad \left. - \Sigma_{\alpha}^r(E + \hbar\omega, E_1) \mathbf{G}^<(E_1, E) - \Sigma_{\alpha}^<(E + \hbar\omega, E_1) \mathbf{G}^a(E_1, E) \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Здесь \mathbf{G}^x – функция Грина системы с учетом взаимодействия с контактами в некотором базисе изолированной квантовой системы и Σ_{α}^x – собственно-энергетическая часть α -ого электрода в том же базисе:

$$\Sigma_{\alpha;ij}^x(E, E_1) = \sum_p \gamma_{p,i}^{\alpha} \gamma_{p,j}^{\alpha*} g_{\alpha,p;\alpha,p}^x(E, E_1), \quad (4.5)$$

где x соответствует запаздывающей (r), опережающей (a) или кинетической компоненте ($<$), а $g_{\alpha,p;\alpha,p}^x$ – соответствующая функция Грина изолированного α -ого контакта.

Для вычисления линейного отклика тока (4.4) на возмущение (4.1) необходимо рассчитать линейризованные (по амплитуде переменного сигнала v_{α}) функции Грина и собственно-энергетические части, входящие в подынтегральное выражение (4.4). Начнем с выражения для функций Грина [153,154]:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^{r,a}(E + \hbar\omega, E) &= \mathbf{G}_0^{r,a}(E + \hbar\omega) \boldsymbol{\sigma}^{r,a}(E + \hbar\omega, E) \mathbf{G}_0^{r,a}(E), \\ \mathbf{g}^<(E + \hbar\omega, E) &= \mathbf{G}_0^r(E + \hbar\omega) \boldsymbol{\sigma}^<(E + \hbar\omega, E) \mathbf{G}_0^a(E) + \mathbf{g}^r(E + \hbar\omega, E) \Sigma_0^<(E) \mathbf{G}_0^a(E) + \\ &\quad + \mathbf{G}_0^r(E + \hbar\omega) \Sigma_0^<(E + \hbar\omega) \mathbf{g}^a(E + \hbar\omega, E). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Здесь строчные буквы соответствуют линейризованным величинам, а заглавные с нулевым подиндексом – величинам в отсутствие периодического возмущения (4.1). Линейные поправки к запаздывающим/опережающим собственно-энергетическим частям, входящим в (4.6) таковы:

$$\boldsymbol{\sigma}^{r,a}(E + \hbar\omega, E) = \sum_{\alpha=1}^M \boldsymbol{\sigma}_{\alpha}^{r,a}(E + \hbar\omega, E) = \sum_{\alpha=1}^M \frac{ev_{\alpha}}{\hbar\omega} \left[\Sigma_{\alpha,0}^{r,a}(E) - \Sigma_{\alpha,0}^{r,a}(E + \hbar\omega) \right] + \sum_{\alpha=1}^N ev_{\alpha} \delta \mathbf{H}_0^{\alpha}. \quad (4.7)$$

Второе слагаемое в (4.7) происходит из-за электростатического сдвига уровней квантовой системы [155]. Линейные поправки к кинетической собственно-энергетической части:

$$\begin{aligned}\sigma^{\leftarrow}(E + \hbar\omega, E) &= \sum_{\alpha=1}^M \sigma_{\alpha}^{\leftarrow}(E + \hbar\omega, E) = \\ &= 2i \sum_{\alpha=1}^M \frac{ev_{\alpha}}{\hbar\omega} \left[f_{\alpha}(E) \Gamma_{\alpha,0}(E) - f_{\alpha}(E + \hbar\omega) \Gamma_{\alpha,0}(E + \hbar\omega) \right].\end{aligned}\quad (4.8)$$

В соответствии с (4.1) можно выделить два «источника» отклика: возмущение контактов [первая строка в (4.1)] и возмущение самой системы за счет электрического поля, создаваемого потенциалом в электродах [вторая строка в (4.1)]. Первый вклад проявляется в первом слагаемом для $\sigma_{\alpha}^{r,a}$ и в $\sigma_{\alpha}^{\leftarrow}$, а второй вклад – во втором слагаемом для $\sigma_{\alpha}^{r,a}$. Каждый из вкладов создает два типа тока: ток носителей непосредственно через контакт квантовой системы и электрода и ток носителей внутри квантовой системы. Первый из них непосредственно течет по внешней цепи и может быть зафиксирован, второй же – наводит во внешней цепи ток, компенсирующий изменение зарядовой плотности внутри квантовой системы (в соответствии с теоремой Рамо-Шокли [156,157]). Таким образом, всего есть 4 различных типа вкладов в линейный отклик квантового проводника:

1. Ток носителей через контакты с электродами, созданный периодическим возмущением в электродах.
2. Ток носителей через контакты с электродами, созданный электростатическим влиянием поля в электродах на квантовую систему.
3. Ток носителей во внешней цепи, наведенный током внутри квантовой системы, который был создан периодическим возмущением в электродах.
4. Ток носителей во внешней цепи, наведенный током внутри квантовой системы, который был создан электростатическим влиянием поля в электродах на квантовую систему.

Первый тип считается основным вкладом в линейный отклик, когда полем внутри квантового проводника можно пренебречь, и именно этот вклад изучается во многих теоретических исследованиях. Последний тип представляет собой ток во внешней цепи, наведенный током поляризации в квантовой системе. Этот вклад оказывается доминирующим, например, в случае поглощения электромагнитного поля гетероструктурами [158–

161]. Остальные вклады, в основном, учитываются лишь в точных численных расчетах или в рамках различных приближений [162]. В настоящей работе основное внимание уделено первому типу вклада в линейный отклик, но также проанализированы и все остальные с разной степени детализации.

Итак, рассмотрим сначала подробнее только первый тип вклада в линейный отклик (согласно классификации, приведенной выше) в приближении сильной связи. В этом случае выражения (4.6)-(4.8) сильно упростятся:

$$\begin{aligned}\sigma^{r,a}(E + \hbar\omega, E) &= 0, \\ \sigma^<(E + \hbar\omega, E) &= \sum_{\alpha=1}^M \sigma_{\alpha}^<(E + \hbar\omega, E) = 2i \sum_{\alpha=1}^M \frac{ev_{\alpha}}{\hbar\omega} \Gamma_{\alpha,0} [f_{\alpha}(E) - f_{\alpha}(E + \hbar\omega)], \\ \mathbf{g}^{r,a}(E + \hbar\omega, E) &= 0, \\ \mathbf{g}^<(E + \hbar\omega, E) &= \mathbf{G}_0^r(E + \hbar\omega) \sigma^<(E + \hbar\omega, E) \mathbf{G}_0^a(E).\end{aligned}\quad (4.9)$$

Используя (4.9) можно записать выражение для линейного отклика тока в приближении широкой зоны в следующем виде [154]:

$$i_{\alpha}(\omega) = \sum_{\beta=1}^M G_{\alpha\beta}(\omega) v_{\beta}, \quad (4.10)$$

где введен тензор проводимости:

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{h} \int dE \frac{f_{\beta}(E) - f_{\beta}(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \times T_{\alpha\beta}(E, \omega) \quad (4.11)$$

с

$$T_{\alpha\beta}(E, \omega) = 4 \text{Tr} [\mathbf{G}_0^r(E + \hbar\omega) \Gamma_{\beta,0} \mathbf{G}_0^a(E) \Gamma_{\alpha,0}] - 2i \delta_{\alpha\beta} \text{Tr} [(\mathbf{G}_0^r(E + \hbar\omega) - \mathbf{G}_0^a(E)) \Gamma_{\alpha,0}]. \quad (4.12)$$

Нетрудно убедиться, что величина $T_{\alpha\beta}(E, \omega)$ при $\alpha \neq \beta$ переходит в пределе нулевой частоты в статический коэффициент прохождения (2.78) и выражение (4.11) превращается в стандартную формулу Бюттикера [128].

4.2. Некоторые предельные случаи

4.2.1. Симметричная квантовая система

Рассмотрим симметричную квантовую систему, симметрично подключенную к двум одинаковым электродам (левому и правому). В этом случае интерес представляет усредненный ток через систему [163,164]:

$$i(\omega) = \frac{1}{2} [i_L(\omega) - i_R(\omega)]. \quad (4.13)$$

Здесь стоит знак минус, так как ток контакта считается положительным, если он втекает внутрь системы. Поэтому для усреднения вклада токов в одном направлении необходимо взять их разность. Пусть переменный сигнал с малой амплитудой v_{AC} приложен только к правому контакту (т.е. $v_L = 0$ и $v_R = v_{AC}$), тогда, используя (4.10) и (4.13), получим следующее выражение для среднего тока:

$$i(\omega) = \frac{1}{2} \underbrace{[G_{LR}(\omega) - G_{RR}(\omega)]}_{G(\omega)} v_{AC}. \quad (4.14)$$

Коэффициент перед v_{AC} в (4.14) будем считать проводимостью системы $G(\omega)$, то есть первым типом вклада в линейный отклик (в соответствии с вышеприведенной классификацией).

Нетрудно видеть, что $G(\omega)$ имеет вид (4.11) с $T = 1/2(T_{LR} - T_{RR})$ вместо $T_{\alpha\beta}$. Рассчитаем коэффициент прохождения T , используя (4.12) и факторизацию матриц $\Gamma_{L,R}$ вида (2.41):

$$\begin{aligned} T(E, \omega) &= \\ &= \frac{|F_{LR}(E) + F_{LR}(E')|^2 + [F_{LL}(E) - F_{LL}(E')] \times [F_{RR}(E') - F_{RR}(E)]}{\left\{ [1 + iF_{LL}(E')] \times [1 + iF_{RR}(E')] + |F_{LR}(E')|^2 \right\} \times \left\{ [1 - iF_{LL}(E)] \times [1 - iF_{RR}(E)] + |F_{LR}(E)|^2 \right\}} + \\ &+ i \frac{|F_{LR}(E)|^2 F_{LL}(E') - |F_{LR}(E')|^2 F_{LL}(E) + [1 + F_{LL}(E) F_{LL}(E')] \times [F_{RR}(E') - F_{RR}(E)]}{\left\{ [1 + iF_{LL}(E')] \times [1 + iF_{RR}(E')] + |F_{LR}(E')|^2 \right\} \times \left\{ [1 - iF_{LL}(E)] \times [1 - iF_{RR}(E)] + |F_{LR}(E)|^2 \right\}}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

где для краткости введены следующие обозначения:

$$F_{LL}(E) = \mathbf{u}_L^\dagger (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{u}_L, \quad F_{LR}(E) = \mathbf{u}_L^\dagger (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{u}_R, \quad F_{RR}(E) = \mathbf{u}_R^\dagger (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{u}_R \quad (4.16)$$

и $E' = E + \hbar\omega$. Легко проверить, что в пределе $\omega \rightarrow 0$ комплексная величина $T(E, \omega)$ стремится к действительному статическому коэффициенту прохождения, поэтому назовем ее *обобщенным коэффициентом прохождения* для ненулевой частоты.

Поскольку рассматриваемая система симметрична, то все ее собственные состояния можно проклассифицировать на симметричные и антисимметричные в зависимости от их знака после действия оператора зеркальной симметрии, отражающего контакты друг в друга. В базисе собственных состояний гамильтониан изолированной системы можно записать в виде:

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^s & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \varepsilon_{n_s}^s & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \varepsilon_1^a & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{n_a}^s \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

где $\varepsilon_i^{(a)s}$ – энергия i -го (анти)симметричного состояния и $n_{(a)s}$ – их количество ($n_s + n_a = N$). Вектора \mathbf{u}_L и \mathbf{u}_R в этом базисе имеют следующий вид (обобщение ситуации, описанной в [5]):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_L &= \sqrt{\pi\rho} \left(\gamma_1^s, \dots, \gamma_{n_s}^s, \gamma_1^a, \dots, \gamma_{n_a}^a \right)^\top, \\ \mathbf{u}_R &= \sqrt{\pi\rho} \left(\gamma_1^s, \dots, \gamma_{n_s}^s, -\gamma_1^a, \dots, -\gamma_{n_a}^a \right)^\top. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Здесь ρ – плотность состояний в контактах, которая в приближении широкой зоны считается постоянной во всем интересующем нас диапазоне энергий. Соотношения (4.18) учитывают тот факт, что симметричные состояния взаимодействуют с электродами одинаковым образом, а антисимметричные связаны с левым и правым контактами матричными элементами разного знака, но одинаковой абсолютной величины.

Подставляя (4.17)-(4.18) в общее соотношение (4.15), получим следующие выражения для действительной и мнимой части обобщенного коэффициента прохождения симметричной квантовой системы:

$$\begin{aligned} T_{\text{Re}}^{\text{symm}}(E, \omega) &= \frac{1}{2} \left(\frac{4[F_a(E + \hbar\omega) - F_s(E)]^2}{4[F_a(E + \hbar\omega) - F_s(E)]^2 + [1 + 4F_s(E)F_a(E + \hbar\omega)]^2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{4[F_s(E + \hbar\omega) - F_a(E)]^2}{4[F_s(E + \hbar\omega) - F_a(E)]^2 + [1 + 4F_a(E)F_s(E + \hbar\omega)]^2} \right), \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} T_{\text{Im}}^{\text{symm}}(E, \omega) &= \frac{[F_a(E + \hbar\omega) - F_s(E)] \times [1 + 4F_s(E)F_a(E + \hbar\omega)]}{[1 + 4F_s^2(E)] \times [1 + 4F_a^2(E + \hbar\omega)]} + \\ &\quad + \frac{[F_s(E + \hbar\omega) - F_a(E)] \times [1 + 4F_a(E)F_s(E + \hbar\omega)]}{[1 + 4F_a^2(E)] \times [1 + 4F_s^2(E + \hbar\omega)]}, \end{aligned}$$

где

$$F_{s,a}(E) = \sum_{i=1}^{n_{s,a}} \frac{\pi\rho |\gamma_i^{s,a}|^2}{E - \varepsilon_i^{s,a}}. \quad (4.20)$$

Проводимость симметричной системы вычисляется через соотношение вида (4.11) с использованием действительной и мнимой частей обобщенной прозрачности, рассчитанных по формулам (4.19).

4.2.2. Связь с одним контактом (обрыв цепи)

В случае, когда квантовая система туннельно связана только с одним электродом (разрыв цепи), не существует никакой симметрии, навязываемой системе контактами. Следуя (4.10), ток единственного контакта можно рассчитать как $I_1(\omega) = G_{11}(\omega)v_1$, где проводимость $G_{11}(\omega)$ имеет вид (4.11). Для расчета выражения $T_{11}(E, \omega)$ удобнее всего воспользоваться базисом собственных состояний системы, в котором гамильтониан имеет диагональный вид:

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \varepsilon_N \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

а туннельная связь с единственным электродом описывается вектором \mathbf{u} :

$$\mathbf{u} = \sqrt{\pi\rho} (\gamma_1, \dots, \gamma_N)^\top. \quad (4.22)$$

Подставляя (4.21)-(4.22) в (4.12), получим следующие выражения для действительной и мнимой части обобщенного коэффициента прохождения квантовой системы, взаимодействующей с одним электродом:

$$\begin{aligned} T_{\text{Re}}(E, \omega) &= 2 \frac{[F_0(E) - F_0(E + \hbar\omega)]^2}{[F_0(E) - F_0(E + \hbar\omega)]^2 + [1 + F_0(E)F_0(E + \hbar\omega)]^2}, \\ T_{\text{Im}}(E, \omega) &= 2 \frac{[F_0(E) - F_0(E + \hbar\omega)] \times [1 + F_0(E)F_0(E + \hbar\omega)]^2}{[F_0(E) - F_0(E + \hbar\omega)]^2 + [1 + F_0(E)F_0(E + \hbar\omega)]^2}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

где

$$F_0(E) = \sum_{i=1}^N \frac{\pi\rho |\gamma_i|^2}{E - \varepsilon_i}. \quad (4.24)$$

Важно отметить, что в статическом пределе действительная и мнимая части обобщенного коэффициента прохождения и, соответственно, проводимости обращаются в ноль, как и должно быть в случае разрыва цепи (однотерминальная система).

4.3. Статическая аналогия

Можно заметить, что выражения для действительных частей обобщенных коэффициентов прохождения в предельных случаях, рассмотренных выше (симметричная система и система с одним электродом) имеют вид $P^2/(P^2 + Q^2)$. Такая форма соответствует статическому коэффициенту прохождения некоторой квантовой системы. Соответственно, возможно построить аналогию между динамической задачей линейного отклика и статической задачей рассеяния.

4.3.1. Симметричная квантовая система

Рассмотрим статическую задачу рассеяния для симметричной системы с гамильтонианом (4.17), взаимодействующую с двумя контактами через матричные элементы (4.18). Предположим, что энергетические уровни всех антисимметричных состояний сдвинуты на некоторую величину δ . Используя стандартный подход для решения статической задачи рассеяния и формализм, приведенный в предыдущих главах настоящей работы, получим выражение для туннельной прозрачности такой системы в виде:

$$T_a(E) = \frac{P_a^2(E)}{P_a^2(E) + Q_a^2(E)} \quad (4.25)$$

с

$$\begin{aligned} P_a(E) &= 2[F_a(E - \delta) - F_s(E)], \\ Q_a(E) &= 1 + 4F_s(E)F_a(E - \delta). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Здесь используются функции $F_{s,a}(E)$, определенные в (4.20). Можно заметить, что при $\delta = -\hbar\omega$ выражение (4.25) полностью совпадает с первым слагаемым в $T_{\text{Re}}^{\text{symm}}(E, \omega)$ из (4.19).

Совершенно аналогично можно рассмотреть ситуацию, когда энергии всех симметричных состояний сдвинуты на δ . В этом случае прозрачность системы будет

$$T_s(E) = \frac{P_s^2(E)}{P_s^2(E) + Q_s^2(E)} \quad (4.27)$$

с

$$\begin{aligned} P_s(E) &= 2[F_s(E - \delta) - F_a(E)], \\ Q_s(E) &= 1 + 4F_a(E)F_s(E - \delta). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Выражение (4.27) в точности равно второму слагаемому в $T_{\text{Re}}^{\text{symm}}(E, \omega)$ из формулы (4.19) при $\delta = -\hbar\omega$.

Таким образом, действительная часть обобщенного коэффициента прохождения в задаче линейного отклика симметричной квантовой системы может быть соотнесена со средним значением двух статических коэффициентов прохождения той же квантовой системы, в которой сдвинуты энергии всех симметричных или антисимметричных состояний на величину $-\hbar\omega$.

4.3.2. Связь с одним контактом (обрыв цепи)

Рассмотрим статическую задачу рассеяния для квантовой системы, состоящей из двух невзаимодействующих между собой частей: первая имеет гамильтониан \mathbf{H}_0 из (4.21), а вторая – $\mathbf{H}_0 - \hbar\omega\mathbf{I}$ (то есть энергия всех состояний второй подсистемы снижены на $\hbar\omega$). Гамильтониан всей системы может быть записан в блочно-диагональной форме:

$$\mathbf{H}_0^{\text{Total}} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_0 - \hbar\omega\mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Пусть эта система подключена к двум одинаковым электродам (левому и правому) через следующие матричные элементы:

$$\mathbf{u}_L = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ -\mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

где вектор \mathbf{u} определен в (4.22). Рассчитав туннельную прозрачность этой сложной системы, нетрудно убедиться, что она будет в точности совпадать с $T_{\text{Re}}(E, \omega)/2$ из (4.23).

4.4. Пример: двухузельная модель

В качестве иллюстративного примера рассмотрим двухузельную модель с гамильтонианом

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \tau \\ \tau & \varepsilon_0 \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

У такой системы есть два собственных состояния: $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^\top$ и $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)^\top$ с энергиями $\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + \tau$ и $\varepsilon_2 = \varepsilon_0 - \tau$ соответственно. Эта система может быть подключена к электродам двумя не эквивалентными способами (см. Рис. 4.1). В обоих случаях мы классифицируем состояния системы по их четности относительно операции зеркальной симметрии, отражающей контакты друг в друга, и исследуем действительную и мнимую части обобщенного коэффициента прохождения на основе общих соотношений (4.19).

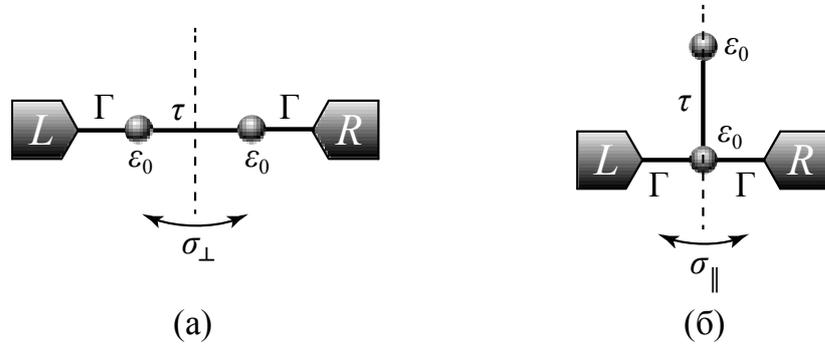


Рис. 4.1. Два неэквивалентных способа подключения контактов к двухузельной системе: (а) линейная конфигурация и (б) конфигурация с нетривиальной топологией – с наличием бокового дефекта (отростка).

4.4.1. Линейная конфигурация

Туннельная связь с левым и правым контактами в линейной конфигурации описывается векторами: $\mathbf{u}_L = \sqrt{\pi\rho}(\gamma, 0)^\top$ и $\mathbf{u}_R = \sqrt{\pi\rho}(0, \gamma)^\top$ соответственно. Согласно общим соотношениям (4.19) действительная и мнимая части обобщенного коэффициента прохождения линейной структуры имеют следующий вид. Действительная часть:

$$T_{\text{Re}}(E, \omega) = \frac{1}{2}(T_0^- + T_0^+), \quad (4.32)$$

где T_0^\pm имеют вид (2.36) с

$$\begin{aligned} P_\pm &= \Gamma(\hbar\omega \pm 2\tau), \\ Q_\pm &= \left[\tilde{E} \mp \tau + \frac{1}{2}(\hbar\omega \pm 2\tau) \right]^2 + \Gamma^2 - \frac{1}{4}(\hbar\omega \pm 2\tau)^2. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Здесь введены обозначения $\tilde{E} = E - \varepsilon_0$ и $\Gamma = \pi\rho\gamma^2$. Мнимая часть:

$$T_{\text{Im}}(E, \omega) = \frac{\Gamma \hbar \omega \left[\tilde{E}(\tilde{E} + \hbar \omega) + \Gamma^2 + \tau^2 \right] \times \left[4\Gamma^2 \tau^2 - X(E)X(E + \hbar \omega) \right]}{\left[X^2(E) + 4\Gamma^2 \tau^2 \right] \times \left[X^2(E + \hbar \omega) + 4\Gamma^2 \tau^2 \right]}, \quad (4.34)$$

где для краткости введено обозначение

$$X(E) = \tilde{E}^2 + \Gamma^2 - \tau^2. \quad (4.35)$$

В пределе нулевой частоты мнимая часть обобщенной прозрачности и, соответственно, проводимости стремятся к нулю, а действительная – к статическому коэффициенту прохождения двухузельной линейно структуры. При $\omega = 0$ функции Q_+ и Q_- совпадают и представляют собой характеристические многочлены вспомогательного гамильтониана с ОТ, соответствующей слиянию (коллапсу) резонансов при $\Gamma = \tau$.

Для конечной частоты внешнего возмущения, функции Q_{\pm} также могут быть представлены в виде характеристических многочленов некоторых вспомогательных гамильтонианов $\mathbf{H}_{\text{aux}}^{\pm}$:

$$\mathbf{H}_{\text{aux}}^{\pm} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 \mp \tau - \hbar \omega & i\Gamma \\ i\Gamma & \varepsilon_0 \pm \tau \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Из (4.36) видно, что при $\omega \neq 0$ у вспомогательных гамильтонианов также есть ОТ, но их условия меняются на $\Gamma = |\tau \pm \hbar \omega / 2|$. Таким образом, переменное поле эффективно меняет матричный элемент τ , который определяет расстояние между собственными энергетическими уровнями системы. При $\hbar \omega = \pm 2\tau$ это расстояние эффективно обращается в ноль, что соответствует возникновению вырожденных состояний в статической задаче рассеяния, рассмотренной в работе [5]. Более того, из (4.33) видно, что при $\hbar \omega = \pm 2\tau$ (нули P_{\mp}) проявляется и деструктивная квантовая интерференция, стимулированная взаимодействием с переменным полем. То есть переменное возмущение полностью меняет интерференционные свойства простой линейной структуры.

На Рис. 4.2 показана действительная и мнимая часть обобщенного коэффициента прохождения линейной конфигурации двухузельной структуры, рассчитанные для $\Gamma = 0.2\tau$. В соответствии с (4.33) при $\hbar \omega = 2\tau \pm 2\Gamma$ происходит слияние резонансов $T_{\text{Re}}(E, \omega)$ при энергии $E = \varepsilon_0 - \tau \mp \Gamma$, что соответствует ОТ $\mathbf{H}_{\text{aux}}^-$. Это приводит к провалу в спектре проводимости (отчетливо видно на Рис. 4.2г при $E_F = \varepsilon_0$) для частоты $\hbar \omega = 2\tau$. Мнимая часть обобщенной прозрачности испытывает изменение знака (штриховая чер-

ная линия на Рис. 4.2б), то есть переход от емкостного ($T_{\text{Im}} > 0$) к индуктивному ($T_{\text{Im}} < 0$) характеру и наоборот в окрестности резонансов.

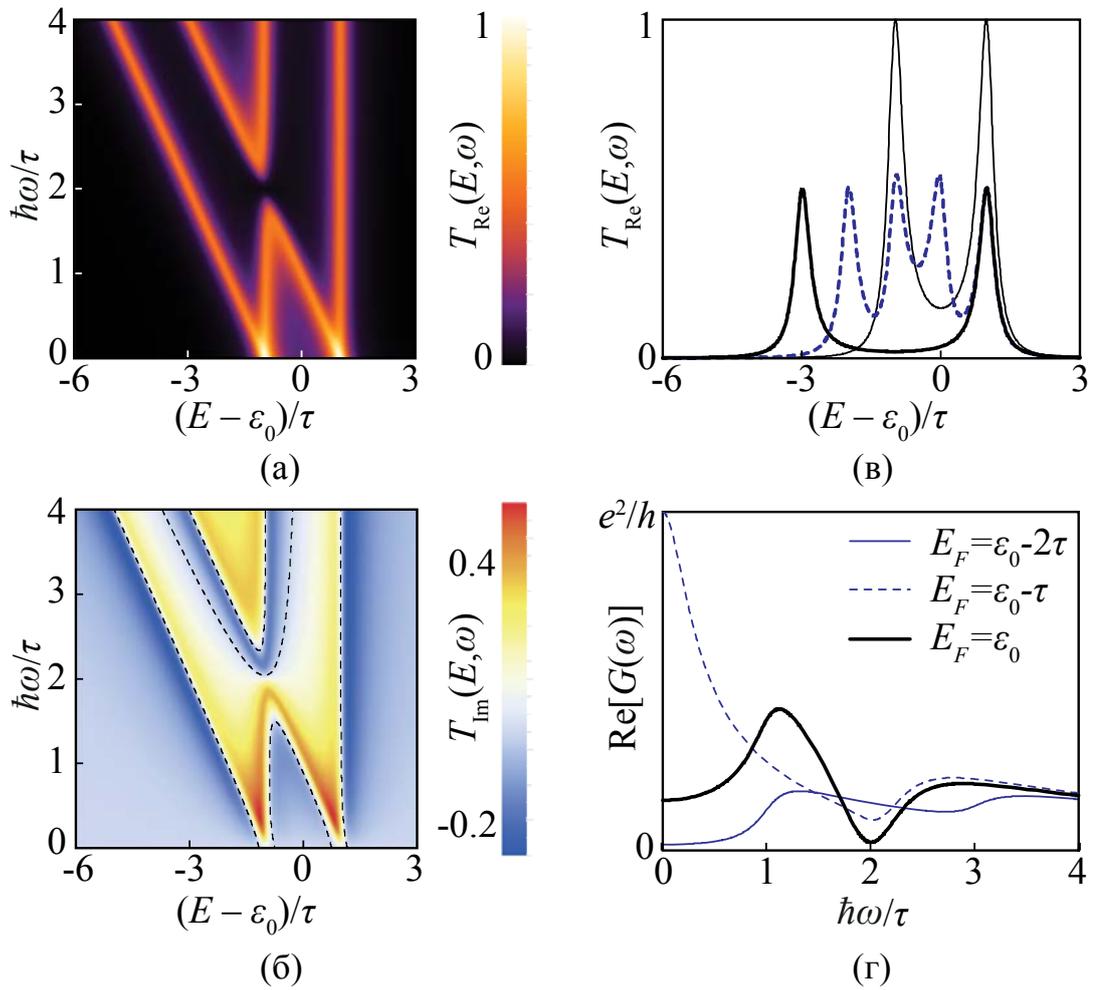


Рис. 4.2. Разрешенная по энергии и частоте действительная (а) и мнимая (б) части обобщенного коэффициента прохождения двухузельной системы в линейной конфигурации. Черная штриховая линия есть нулевая линия уровня $T_{\text{Im}}(E, \omega)$. Графики зависимости $T_{\text{Re}}(E, \omega)$ от энергии (в) при нулевой частоте (тонкая черная линия), при $\hbar\omega = \tau$ (синяя штриховая линия) и при $\hbar\omega = 2\tau$ (жирная черная линия). Частотная зависимость действительной части проводимости системы при нулевом постоянном смещении, нулевой температуре и различных значениях энергии Ферми в контактах (г).

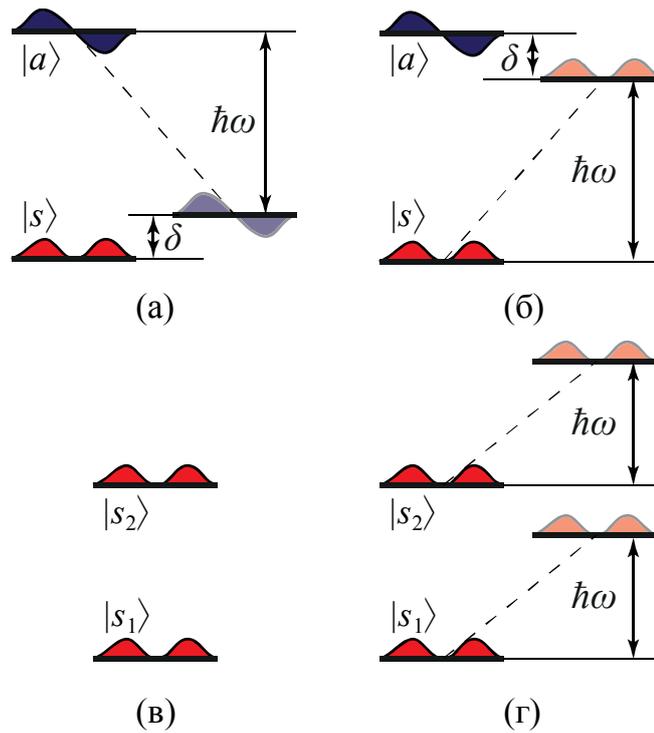


Рис. 4.3. Статическая аналогия действительной части обобщенного коэффициента прохождения. Сдвиг антисимметричного (а) и симметричного (б) состояния на $\hbar\omega$, при котором уровень становится вырожденным с другим в линейной конфигурации двухузельной модели. Отсутствие сдвига (в) и сдвиг всех уровней (г) в двухузельной модели с нетривиальной топологией.

Чтобы построить статическую аналогию к действительной части обобщенного коэффициента прохождения двухузельной системы в линейной конфигурации необходимо проклассифицировать ее собственные состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ по четности относительно операции зеркального отражения σ_{\perp} (см. Рис. 4.1а). Очевидно, что $|1\rangle = |s\rangle$ – симметричное состояние, а $|2\rangle = |a\rangle$ – антисимметричное. Согласно общему методу построения статической аналогии для симметричной системы, следует рассмотреть две задачи, в которых антисимметричный или симметричный уровень сдвигается на $\hbar\omega$. При этом в каждом случае для некоторого значения частоты может произойти вырождение симметричного и антисимметричного состояния. В общем виде статический коэффициент прохождения для системы с вырожденными уровнями разной симметрии приведен в (3.14). Для того чтобы описать сдвиг антисимметричного состояния (см. Рис. 4.3а) необходимо положить в этом выражении $\gamma_s = \gamma_a$, $k_s = 0$, $k_a = -1$ и отсчитывать энергию от энергии вырожденных состояний $\varepsilon_0 - \tau$. Вырождение происходит при $\hbar\omega_0 = 2\tau$, следовательно

$\delta = \hbar\omega - \hbar\omega_0 = \hbar\omega - 2\tau$. Подставляя все это в формулу (3.14), можно получить в точности первое слагаемое в (4.32). Аналогично можно рассмотреть возникновение вырождения при сдвиге симметричного уровня, для чего необходимо взять $\gamma_s = \gamma_a$, $k_s = -1$, $k_a = 0$ и отсчитывать энергию от $\varepsilon_0 + \tau$. В этом случае вырождение происходит при $\hbar\omega_0 = -2\tau$ и $\delta = \hbar\omega + 2\tau$. При этих значениях параметров формула (3.14) дает точно второе слагаемое в выражении (4.32).

4.4.2. Конфигурация с нетривиальной топологией

Туннельная связь с левым и правым контактами в конфигурации с нетривиальной топологией (боковым дефектом) описывается векторами $\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_R = \sqrt{\pi\rho}(\gamma, 0)^\top$. Обобщенный коэффициент такой структуры также вычисляется по общим соотношениям (4.19). Действительная его часть имеет вид

$$T_{\text{Re}}(E, \omega) = \frac{1}{2} [T_0(E) + T_0(E + \hbar\omega)], \quad (4.37)$$

где $T_0(E)$ – статическая туннельная прозрачность, имеющая стандартный вид (2.36) с

$$P(E) = 2\Gamma(E - \varepsilon_0), \quad Q(E) = (E - \varepsilon_0)^2 - \tau^2. \quad (4.38)$$

и $\Gamma = \pi\rho\gamma^2$. Мнимая часть обобщенной прозрачности:

$$T_{\text{Im}}(E, \omega) = \frac{\hbar\omega [Q(E)Q(E + \hbar\omega) - P(E)P(E + \hbar\omega)] \times R(E)}{[P(E + \hbar\omega)^2 + Q(E + \hbar\omega)^2] \times [P(E)^2 + Q(E)^2]}, \quad (4.39)$$

где функции P и Q определены в (4.38) и

$$R(E) = (E + \hbar\omega - \varepsilon_0) \frac{P(E)}{2} + (E - \varepsilon_0) \frac{P(E + \hbar\omega)}{2} + \Gamma [\tau^2 - (E - \varepsilon_0)(E + \hbar\omega - \varepsilon_0)]. \quad (4.40)$$

Из формулы (4.37) видно, что действительная часть обобщенной туннельной прозрачности $T_{\text{Re}}(E, \omega)$ состоит из двух слагаемых, соответствующих статическому коэффициенту прохождения для энергии E и $E + \hbar\omega$. Такое простое соотношение говорит об отсутствии дополнительных интерференционных явлений, наведенных переменным полем, в отличие от случая структуры в линейной конфигурации. На Рис. 4.4 приведены графики действительной и мнимой частей обобщенного коэффициента прохождения двухузельной структуры с нетривиальной топологией. В спектре проводимости (Рис. 4.4г) наблюдаются только максимумы, соответствующие поглощению/испусканию

фотона для частот равных разнице между энергией ферми и энергией локализованного состояния.

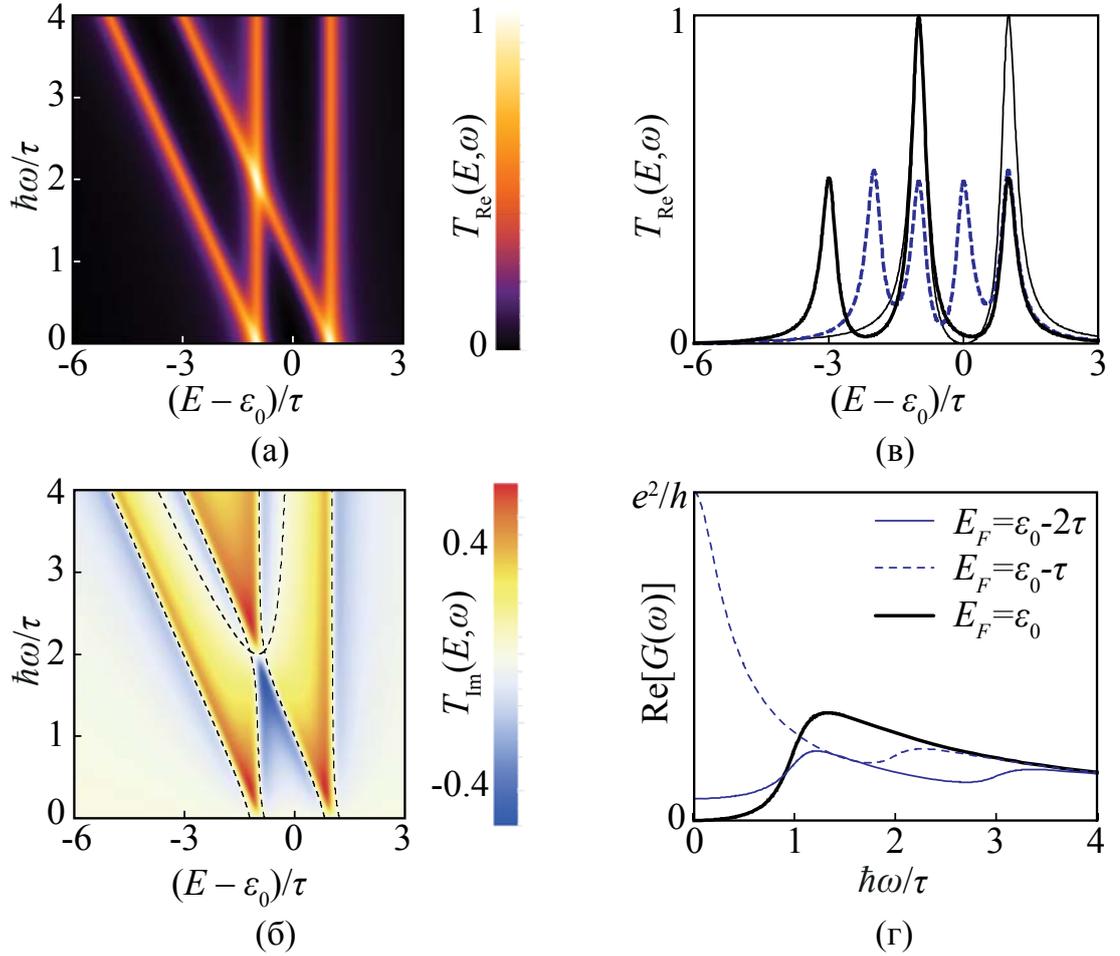


Рис. 4.4. Разрешенная по энергии и частоте действительная (а) и мнимая (б) части обобщенного коэффициента прохождения двухузельной системы в конфигурации с нетривиальной топологией для $\Gamma = 0.2\tau$. Черная штриховая линия есть нулевая линия уровня $T_{\text{Im}}(E, \omega)$. Графики зависимости $T_{\text{Re}}(E, \omega)$ от энергии (в) при нулевой частоте (тонкая черная линия), при $\hbar\omega = \tau$ (синяя штриховая линия), $\hbar\omega = 2\tau$ (жирная черная линия) и при $\hbar\omega = 3\tau$ (красная штрих-пунктирная линия). Частотная зависимость действительной части проводимости системы при нулевом постоянном смещении, нулевой температуре и различных значениях энергии Ферми в контактах (г).

Выражение для действительной части обобщенного коэффициента прохождения конфигурации с нетривиальной топологией (4.37) в соответствие с общими выводами представляется в виде среднего значения двух статических коэффициентов прохожде-

ния. Однако, в отличие от случая структуры с линейной конфигурацией, здесь оба собственных состояния симметричны относительно операции отражения σ_{\parallel} (см. Рис. 4.1б). Поэтому, слагаемое, которое учитывает сдвиг антисимметричных уровней тождественно равно обычному статическому коэффициенту прохождения этой системы (Рис. 4.3в), а слагаемое, которое учитывает сдвиг симметричных уровней, соответствует статической прозрачности, полностью сдвинутой по энергии на $-\hbar\omega$ (Рис. 4.3г). В этой конфигурации отсутствуют дополнительные интерференционные эффекты наведенные переменным возмущением, и увеличение действительной части обобщенной прозрачности при совпадении частоты с разницей между собственными энергиями, которое видно на Рис. 4.4а не имеет интерференционной природы и происходит лишь из-за суммы разных вкладов.

4.4.3. Ток поляризации

Из предыдущих расчетов для двухузельной системы в линейной конфигурации следует наличие деструктивной интерференции, которая приводит к снижению действительной части проводимости для частоты равной разнице между энергиями собственных состояний системы (см. Рис. 4.2г). На первый взгляд это противоречит тому факту, что при такой частоте в двухуровневой системе происходит резонансное поглощение, то есть в линейном отклике проводимости должна наблюдаться конструктивная, а не деструктивная интерференция. Дело в том, что при этих вычислениях был учтен только один вклад (первый) из списка, приведенного в разделе 4.1, который не учитывает влияния электрического поля, создаваемого переменным сигналом на внутренние свойства самой квантовой системы. Наиболее ярко это влияние проявляется, если учесть четвертый тип вклада в линейный отклик (из того же списка в разделе 4.1).

Чтобы рассчитать этот вклад, во-первых, необходимо самосогласованно решить квантово-механическую и электростатическую задачи. Во-вторых, следует учесть определить вклад каждого поляризационного тока, текущего внутри системы в ток, наводимый во внешней цепи. В случае одномерной системы, описываемой в непрерывном пределе это можно сделать, усреднив ток вдоль всей системы:

$$i(\omega) = \frac{1}{d} \int_0^d i(x, \omega) dx . \quad (4.41)$$

Здесь $x \in [0, d]$ – координата во внутренней части системы и $i(x, \omega)$ – распределение тока при фиксированной частоте. Этот подход, например, использовался в работах [158–161] для аналитического и численного расчета высокочастотного отклика в гетероструктурах и показал физически обоснованные и качественно согласующиеся с экспериментами результаты. В приближении сильной связи не возможно построить распределение тока по системе $i(x, \omega)$, а можно лишь рассчитать все возможные токи $i_{ij}(\omega)$ между различными узлами системы. Таким образом, чтобы получить ток, наводимый во внешней цепи, необходимо просуммировать все токи внутри системы $i_{ij}(\omega)$ и токи непосредственно через контакты $i_{L,R}(\omega)$ с некоторыми коэффициентами c_{ij} и $c_{L,R}$, которые следует определить из соответствующей электродинамической задачи.

В двухузельной системе в линейной конфигурации влияние поля переменного потенциала на энергии узлов можно учесть в следующем виде:

$$\delta \hat{H}_0^L = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + a & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - a \end{pmatrix}, \quad \delta \hat{H}_0^R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - a & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} + a \end{pmatrix}, \quad (4.42)$$

где безразмерный параметр a характеризует неоднородность влияния потенциалов на энергии узлов, то есть, величину напряженности электрического поля внутри системы. Для определения этого параметра также необходимо решать электростатическую задачу. Линейная (по амплитуде переменного сигнала) компонента тока внутри системы i_{12} может быть рассчитана следующим образом:

$$i_{12}(\omega) = \frac{e}{h} \tau \int dE \left[g_{21}^<(E + \hbar\omega, E) - g_{12}^<(E + \hbar\omega, E) \right], \quad (4.43)$$

где $g_{ij}^<$ – соответствующий матричный элемент линеаризованной функции Грина, определенной в (4.9).

Считая, что переменный сигнал приложен только к правому электроду, можно рассчитать вклад в проводимость от наведенного тока во внешней цепи, действительная часть которого имеет вид:

$$\text{Re} \left[G^{in}(\omega) \right] = \frac{e^2}{h} \int dE \frac{f_R(E) - f_R(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \times T_{\text{Re}}^{in}(E, \omega) \quad (4.44)$$

$$T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega) = \frac{2a\Gamma^2\hbar\omega\tau}{\left[(\tilde{E} + \tau)^2 + \Gamma^2 \right] \times \left[(\tilde{E} + \hbar\omega - \tau)^2 + \Gamma^2 \right]} - \frac{2a\Gamma^2\hbar\omega\tau}{\left[(\tilde{E} - \tau)^2 + \Gamma^2 \right] \times \left[(\tilde{E} + \hbar\omega + \tau)^2 + \Gamma^2 \right]}. \quad (4.45)$$

Из формулы (4.45) видно, что действительная часть этого вклада в проводимость имеет максимум при частоте $\hbar\omega = \pm 2\tau$. Соответственно, по теореме Рамо-Шокли во внешней цепи при данных частотах также будет наблюдаться резонансное усиление тока, что имеет ясную физическую картину в силу непосредственной аналогии между действительной частью проводимости системы и коэффициентом поглощения. В пределе нулевой частоты $T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, 0) \equiv 0$ и, следовательно, $\text{Re}[G^{\text{in}}(0)] = 0$. На Рис. 4.5 приведен график зависимости $T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega)$ от частоты и энергии и спектр действительной части проводимости при $\Gamma = 0.2\tau$ и $a = 1/6$.

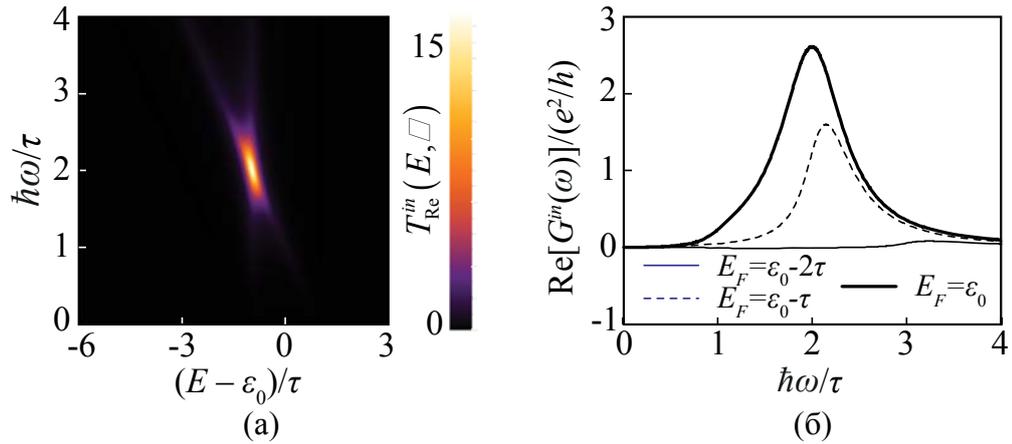


Рис. 4.5. Разрешенная по энергии и частоте величина $T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega)$, соответствующая вкладу, обусловленному поляризационным током (а). Частотная зависимость соответствующего вклада в действительную часть проводимости системы при нулевом постоянном смещении, нулевой температуре и различных значениях энергии Ферми в контактах (б).

Следует отметить, что величине $T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega)$ из выражения (4.45) нельзя придать смысл коэффициента прохождения и построить статическую аналогию, так как ни она целиком, ни составляющие ее слагаемые не ограничены отрезком $[0, 1]$. В частности, в пределе $\Gamma \rightarrow 0$ (полностью изолированная квантовая система):

$$T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega) \xrightarrow{\Gamma \rightarrow 0} 2\pi^2 a \hbar \omega \tau \times \left[\delta(E - \varepsilon_0 + \tau) \delta(E - \varepsilon_0 + \hbar\omega - \tau) - \delta(E - \varepsilon_0 - \tau) \delta(E - \varepsilon_0 + \hbar\omega + \tau) \right], \quad (4.46)$$

что приводит к δ -образным максимумам $\text{Re}[G^{\text{in}}(\omega)]$ при $\hbar\omega = \pm 2\tau$, что точно отражает спектр поглощения двухуровневой изолированной системы.

Из вышесказанного ясно, что для малых Γ и немалых a величина $T_{\text{Re}}^{\text{in}}(E, \omega)$ в резонансе (например, при $E = \varepsilon_0 - \tau$ и $\hbar\omega = 2\tau$) может оказаться доминирующим вкладом и скрыть эффект деструктивной квантовой интерференции, возникающей при слиянии резонансов. Это видно в численных расчетах отклика гетероструктур [160,161], где наблюдается только резонансный максимум при частоте совпадающей с разницей собственных энергий системы. Однако, этот вклад определяется параметром a , то есть неоднородностью влияния потенциала в контакте на энергии в узлах системы или что то же самое – величиной напряженности электрического поля внутри квантовой системы. Таким образом, если приложенное напряжение преимущественно падает на контактах с электродами, то падение напряжения (и соответственно напряженность поля) внутри квантовой системы может оказаться малой, что существенно ослабит вклад от поляриционных токов и может сделать наблюдаемым явление деструктивной интерференции. Подобное может быть справедливым для молекулярных проводников, где действительно зачастую падение напряжения на контактах оказывается доминирующим [165].

4.5. Выводы по главе

1. Один из вкладов в линейный отклик симметричной квантовой системы, который может доминировать, например, в молекулярных проводниках, имеет наглядную аналогию со статической транспортной задачей. Также такая аналогия может быть построена при рассмотрении однотерминального возбуждения системы.
2. Для простейшей двухузельной системы, в которой наблюдается коллапс резонансов в статическом транспорте, но отсутствует деструктивная квантовая интерференция, в динамической задаче возникают дополнительные интерференционные механизмы, наведенные переменным полем и приводящие к резо-

нансному (при резонансной частоте) слиянию максимумов обобщенной прозрачности и появлению минимума в частотной зависимости проводимости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Положение энергий, отвечающих резонансным максимумам туннельной прозрачности в одномерной статической задаче рассеяния, традиционно соотносилось с действительной частью соответствующего полюса матрицы рассеяния. Такой подход позволяет наглядно сопоставить спектр гибридизованной квантовой системы с конечным временем жизни и резонансные свойства, проявляемые в транспорте. Однако, такое соответствие справедливо только для достаточно узких, хорошо отделенных друг от друга резонансов, то есть для систем, в которых время жизни частицы на энергетических уровнях существенно превышает период Раби-осцилляций между ними. В частности, явление слияния (коллапса) резонансов невозможно идентифицировать, исследуя поведение полюсов матрицы рассеяния [2,29,30].

В данной работе был представлен новый подход для описания статического транспорта через квантовые системы, позволяющий точно определять резонансные энергии вне зависимости от ширины и взаимного расположения резонансов. Энергии, соответствующие единичным максимумам коэффициента прохождения, могут быть соотнесены с действительными собственными значениями некоторого неэрмитового вспомогательного гамильтониана, особые точки которого описывают эффект слияния (коллапса) резонансов.

Стандартный подход для управления проводимостью квантового проводника состоит в сдвиге спектра квантовой системы как целого (соответственно, и положений резонансного пропускания) во внешнем поле, например, электростатическом. При этом резонансы могут покидать или заходить в интервал энергий между уровнями Ферми контактов, что приводит к уменьшению или увеличению проводимости системы. При этом величина необходимого внешнего воздействия для существенного изменения тока через систему ограничена снизу температурой и не может быть существенно уменьшена никакой вариацией параметров квантовой системы.

В данной работе предложен другой способ управления проводимостью квантовой системы. Он основан на интерференционном изменении амплитуды туннельной прозрачности в резонансе. Физически его можно реализовать в квантовой системе с вырожденными уровнями, например, в дирадикалах (органических молекулах с двумя радикальными центрами) за счет управляемого слияния резонансов и деструктивной кванто-

вой интерференции. При этом температура уже не представляется ограничивающим фактором для уменьшения необходимого внешнего возмущения, переключающего проводимость системы.

При совпадении частоты внешнего переменного сигнала, приложенного к системе, с собственной частотой Раби-осцилляций в большинстве структур возникает резонансное поглощение и, соответственно, резкое увеличение линейного отклика проводимости. Природа этого явления состоит главным образом во взаимодействии электромагнитного поля внутри квантовой системы с ее дипольным моментом. Поскольку этот вклад зачастую оказывается доминирующим часто другие вклады в линейный отклик квантовой системы не принимаются во внимание.

В настоящей работе были описаны различные типы вкладов в линейный отклик тока через двухтерминальную квантовую систему при нулевом постоянном смещении. Был подробно исследован вклад, представляющий собой ток частиц через контакты квантовой системы с электродами, возникающий только из-за переменного изменения потенциала в электроде. Этот вклад демонстрирует слияние резонансов и деструктивную квантовую интерференцию (антирезонанс) при частоте, совпадающей с расстоянием между собственными состояниями системы. В некоторых системах, например, в молекулярных проводниках, это явление может оказаться наблюдаемым в силу ослабления поля непосредственно внутри проводника и, соответственно, ослабления резонансного вклада в проводимость.

Основные результаты и выводы диссертации:

1. Описание транспортных свойств произвольной двухконтактной квантовой системы можно проводить в формализме, описывающем точные положения резонансов, антирезонансов и связанных состояний в непрерывном спектре, с привлечением неэрмитового вспомогательного гамильтониана. Действительные собственные значения вспомогательного гамильтониана в точности соответствуют единичным максимумам коэффициента прохождения. При этом явление слияния резонансов описывается его вырождением по типу особой точки.
2. Разработанный подход позволяет наглядно описать возникновение связанных состояний в непрерывном спектре, как резонансов с нулевой шириной. Такие

состояния возникают при наличии общих корней некоторых функций от вспомогательного и эффективного гамильтонианов системы.

3. Квантовая система с вырожденными уровнями, например, органическая молекула с дважды вырожденными орбиталями – дирадикал, при некоторых условиях может под действием внешнего возмущения менять свою туннельную прозрачность вплоть до тождественного нуля (идеальный случай). Таким образом, можно добиться крайне высокого (в пределе – бесконечного) соотношения между током в открытом и закрытом состояниях, что приводит к сверхвысокой чувствительности такого квантового интерференционного транзистора (ключа) к изменению напряжения на затворе даже при комнатной температуре.
4. На основе предложенных квантовых интерференционных транзисторов можно построить инвертор, аналогичный классическому КМОП-инвертору. В идеальном случае этот квантовый интерференционный логический вентиль может функционировать при комнатной температуре при крайне малом (в пределе – нулевом) напряжении питания. Расчет в рамках построенной модели показал, что инвертор на основе молекулы дивинилциклобутана может работать при напряжении питания 10 мВ при комнатной температуре.
5. Для простейшей двухузельной системы, в которой наблюдается коллапс резонансов в статическом транспорте, но отсутствует деструктивная квантовая интерференция, в динамической задаче возникают дополнительные интерференционные механизмы, наведенные переменным полем и приводящие к резонансному (при резонансной частоте) слиянию максимумов обобщенной прозрачности и появлению минимума в частотной зависимости проводимости.

В рамках дальнейшей работы по теме диссертационного исследования планируется произвести учет влияния многочастичных корреляций на транспортные свойства молекулярных проводников. В частности, проверить справедливость разработанной теории описания резонансов, антирезонансов и связанных состояний в непрерывном спектре с учетом кулоновского взаимодействия. Большой интерес также вызывает непосредственный *ab initio* расчет транспортных свойств молекулярных проводников на основе дирадикалов и проверка сделанных в диссертации выводов в численном эксперименте.

Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю члену-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук, профессору Горбачевичу Александру Алексеевичу за внимательное и чуткое руководство, советы и замечания, немало способствующие улучшению диссертационной работы.

Автор крайне признателен своей семье за постоянную поддержку и терпение, без которых выполнение диссертационного исследования и написание настоящей работы были бы невозможны.

ЛИТЕРАТУРА

1. Горбацевич А.А., Шубин Н.М. Нарушение РТ-симметрии в резонансно-туннельных гетероструктурах // Письма в ЖЭТФ. — 2016. — Т. 103, № 12. — С. 866–871.
2. Gorbatsevich A.A., Shubin N.M. Coalescence of resonances in dissipationless resonant tunneling structures and PT-symmetry breaking // Ann. Phys. (N. Y). — 2017. — Т. 376. — С. 353–371.
3. Gorbatsevich A.A., Shubin N.M. Unified theory of resonances and bound states in the continuum in Hermitian tight-binding models // Phys. Rev. B. — 2017. — Т. 96, № 20. — С. 205441.
4. Горбацевич А.А., Шубин Н.М. Квантовые логические вентили // УФН. — 2018. — Т. 188, № 11. — С. 1209–1225.
5. Gorbatsevich A.A., Krasnikov G.Y., Shubin N.M. PT-symmetric interference transistor // Sci. Rep. — 2018. — Т. 8, № 1. — С. 15780.
6. Gamow G. Zur Quantentheorie des Atomkernes // Zeitschrift für Phys. — 1928. — Т. 51, № 3. — С. 204–212.
7. Nordheim L. Zur Theorie der thermischen Emission und der Reflexion von Elektronen an Metallen // Zeitschrift für Phys. — 1928. — Т. 46, № 11. — С. 833–855.
8. Fowler R.H., Nordheim L. Electron emission in intense electric fields // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 1928. — Т. 119, № 781. — С. 173–181.
9. Hatano N. и др. Some Properties of the Resonant State in Quantum Mechanics and Its Computation // Prog. Theor. Phys. — 2008. — Т. 119, № 2. — С. 187–222.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Т. 3: Квантовая механика: нерелятивист. теория. Физматлит, 2013.
11. Feshbach H. Unified theory of nuclear reactions // Ann. Phys. (N. Y). — 1958. — Т. 5, № 4. — С. 357–390.
12. Feshbach H. A unified theory of nuclear reactions. II // Ann. Phys. (N. Y). — 1962. — Т. 19, № 2. — С. 287–313.
13. Feshbach H. The unified theory of nuclear reactions // Ann. Phys. (N. Y). — 1967. — Т. 43, № 3. — С. 410–420.

14. Siegert A.J.F. On the Derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions // *Phys. Rev.* — 1939. — T. 56, № 8. — C. 750–752.
15. Sasada K., Hatano N., Ordonez G. Resonant Spectrum Analysis of the Conductance of an Open Quantum System and Three Types of Fano Parameter // *J. Phys. Soc. Japan.* — 2011. — T. 80, № 10. — C. 104707.
16. Fano U. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts // *Phys. Rev.* — 1961. — T. 124, № 6. C. — 1866–1878.
17. Mies F.H., Krauss M. Time-Dependent Behavior of Activated Molecules. High-Pressure Unimolecular Rate Constant and Mass Spectra // *J. Chem. Phys.* — 1966. — T. 45, № 12. — C. 4455–4468.
18. Mies F.H. Configuration Interaction Theory. Effects of Overlapping Resonances // *Phys. Rev.* — 1968. — T. 175, № 1. — C. 164–175.
19. Moldauer P.A. Statistical Theory of Intermediate Resonances // *Phys. Rev. Lett.* — 1967. — T. 18, № 7. — C. 249–252.
20. Müller M. и др. Level repulsion in the complex plane // *Phys. Rev. E.* — 1995. — T. 52, № 6. — C. 5961–5973.
21. Persson E., Rotter I. Doorway concept at high excitation energy // *Phys. Rev. C.* — 1999. — T. 59, № 1. — C. 164–171.
22. Persson E. и др. Observation of Resonance Trapping in an Open Microwave Cavity // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — T. 85, № 12. — C. 2478–2481.
23. Moiseyev N. *Non-Hermitian quantum mechanics.* Cambridge University Press, 2011.
24. Miroshnichenko A.E., Flach S., Kivshar Y.S. Fano resonances in nanoscale structures // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — T. 82, № 3. — C. 2257–2298.
25. Monticone F., Alù A. Metamaterial, plasmonic and nanophotonic devices // *Reports Prog. Phys.* — 2017. — T. 80, № 3. — C. 036401.
26. Hsu C.W. и др. Bound states in the continuum // *Nat. Rev. Mater.* — 2016. — T. 1, № 9. — C. 16048.
27. Breit G., Wigner E. Capture of Slow Neutrons // *Phys. Rev.* — 1936. — T. 49, № 7. — C. 519–531.
28. Klaiman S., Moiseyev N. The absolute position of a resonance peak // *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* — 2010. — T. 43, № 18. — C. 185205.
29. Romo R., García-Calderón G. Strong overlap and transmission in triple-barrier resonant

- structures // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Т. 49, № 19. — С. 14016–14019.
30. Горбацевич А.А., Журавлев М.Н., Капаев В.В. Коллапс резонансов в полупроводниковых гетероструктурах как переход с нарушением симметрии в открытой квантовой системе // *ЖЭТФ.* — 2008. — Т. 134, № 2. — С. 338–354.
 31. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. Логос, Москва, 2006.
 32. Vanroose W. и др. Double poles of the S-matrix in a two-channel model // *J. Phys. A. Math. Gen.* — 1997. — Т. 30, № 15. — С. 5543–5549.
 33. Vanroose W. Double pole of the S-matrix in a double-well system // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Т. 64, № 6. — С. 062708.
 34. Heiss W.D., Wunner G. Fano-Feshbach resonances in two-channel scattering around exceptional points // *Eur. Phys. J. D.* — 2014. — Т. 68, № 10. — С. 284.
 35. Ambichl P. и др. Breaking of PT Symmetry in Bounded and Unbounded Scattering Systems // *Phys. Rev. X.* — 2013. — Т. 3, № 4. — С. 41030.
 36. Chong Y.D., Ge L., Stone A.D. PT-Symmetry Breaking and Laser-Absorber Modes in Optical Scattering Systems // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Т. 106, № 9. — С. 93902.
 37. Aharonov Y., Bohm D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory // *Phys. Rev.* — 1959. — Т. 115, № 3. — С. 485–491.
 38. Von Neuman J., Wigner E. Uber merkwürdige diskrete Eigenwerte. Uber das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen // *Phys. Zeitschrift.* — 1929. — Т. 30. — С. 467–470.
 39. Friedrich H., Wintgen D. Interfering resonances and bound states in the continuum // *Phys. Rev. A.* — 1985. — Т. 32, № 6. — С. 3231–3242.
 40. Kodigala A. и др. Lasing action from photonic bound states in continuum // *Nature.* — 2017. — Т. 541, № 7636. — С. 196–199.
 41. Bulgakov E.N., Sadreev A.F. Bound states in the continuum in photonic waveguides inspired by defects // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Т. 78, № 7. — С. 075105.
 42. Orellana P.A., Ladrón de Guevara M.L., Claro F. Controlling Fano and Dicke effects via a magnetic flux in a two-site Anderson model // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Т. 70, № 23. — С. 233315.
 43. Rotter I., Sadreev A.F. Zeros in single-channel transmission through double quantum dots // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Т. 71, № 4. — С. 046204.

44. Sadreev A.F., Bulgakov E.N., Rotter I. S -matrix formalism of transmission through two quantum billiards coupled by a waveguide // *J. Phys. A. Math. Gen.* — 2005. — T. 38, № 49. — C. 10647–10661.
45. Sadreev A.F., Pilipchuk A.S. Bound states in the continuum in zigzag quantum wire enforced by a finger gate // *JETP Lett.* — 2015. — T. 100, № 9. — C. 585–590.
46. Ordonez G., Na K., Kim S. Bound states in the continuum in quantum-dot pairs // *Phys. Rev. A.* — 2006. — T. 73, № 2. — C. 022113.
47. Bulgakov E.N., Sadreev A.F. Bound states in photonic Fabry-Perot resonator with nonlinear off-channel defects // *Phys. Rev. B.* — 2010. — T. 81, № 11. — C. 115128.
48. de Guevara M.L., Orellana P.A. Electronic transport through a parallel-coupled triple quantum dot molecule: Fano resonances and bound states in the continuum // *Phys. Rev. B.* — 2006. — T. 73, № 20. — C. 205303.
49. Yan J.-X., Fu H.-H. Bound states in the continuum and Fano antiresonance in electronic transport through a four-quantum-dot system // *Phys. B Condens. Matter.* — 2013. — T. 410. — C. 197–200.
50. Guevara M.L.L. de, Claro F., Orellana P.A. Ghost Fano resonance in a double quantum dot molecule attached to leads // *Phys. Rev. B.* — 2003. — T. 67, № 19. — C. 195335.
51. Bender C.M., Boettcher S. Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT-Symmetry // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — T. 80, № 24. — C. 5243–5246.
52. Bender C.M., Boettcher S., Meisinger P.N. PT-symmetric quantum mechanics // *J. Math. Phys.* — 1999. — T. 40, № 5. — C. 2201–2229.
53. Bender C.M. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians // *Reports Prog. Phys.* — 2007. — T. 70, № 6. — C. 947.
54. Mostafazadeh A. Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian // *J. Math. Phys.* — 2002. — T. 43, № 1. — C. 205–214.
55. Mostafazadeh A. Pseudo-Hermiticity versus PT-symmetry. II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum // *J. Math. Phys.* — 2002. — T. 43, № 5. — C. 2814.
56. Mostafazadeh A. Pseudo-Hermiticity versus PT-symmetry III: Equivalence of pseudo-Hermiticity and the presence of antilinear symmetries // *J. Math. Phys.* — 2002. — T. 43, № 8. — C. 3944–3951.

57. Зябловский А.А. и др. РТ-симметрия в оптике // УФН. — 2014. — Т. 184, № 11. — С. 1177–1198.
58. Eleuch H., Rotter I. Nearby states in non-Hermitian quantum systems I: Two states // Eur. Phys. J. D. — 2015. — Т. 69, № 10. — С. 229.
59. Eleuch H., Rotter I. Nearby states in non-Hermitian quantum systems II: Three and more states // Eur. Phys. J. D. — 2015. — Т. 69, № 10. — С. 1–10.
60. Kato T. Perturbation Theory for Linear Operators. Springer Berlin Heidelberg, 1995.
61. Mandal I. Exceptional points for chiral Majorana fermions in arbitrary dimensions // EPL. — 2015. — Т. 110, № 6. — С. 67005.
62. San-Jose P. и др. Majorana bound states from exceptional points in non-topological superconductors // Sci. Rep. — 2016. — Т. 6. — С. 21427.
63. Kreibich M. и др. Hermitian four-well potential as a realization of a РТ-symmetric system // Phys. Rev. A. — 2013. — Т. 87, № 5. — С. 51601.
64. Chtchelkatchev N.M. и др. Stimulation of the Fluctuation Superconductivity by РТ-Symmetry // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Т. 109, № 15. — С. 150405.
65. Леонтович М.А. Об одном методе решения задач о распространении электромагнитных волн вдоль поверхности земли // Изв. АН СССР. Сер. Физ. — 1944. — Т. 8, № 1. — С. 16–22.
66. Леонтович М.А., Фок В.А. Решение задачи о распространении электромагнитных волн вдоль поверхности земли по методу параболического уравнения // ЖЭТФ. — 1946. — Т. 16. — С. 557–573.
67. Guo A. и др. Observation of РТ-Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Т. 103, № 9. — С. 93902.
68. Regensburger A. и др. Parity-time synthetic photonic lattices // Nature. — 2012. — Т. 488, № 7410. — С. 167–171.
69. Bittner S. и др. РТ-Symmetry and Spontaneous Symmetry Breaking in a Microwave Billiard // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Т. 108, № 2. — С. 24101.
70. Alaeian H., Dionne J.A. Parity-time-symmetric plasmonic metamaterials // Phys. Rev. A. — 2014. — Т. 89, № 3. — С. 33829.
71. Mostafazadeh A. Point interactions, metamaterials, and РТ-symmetry // Ann. Phys. (N. Y.). — 2016. — Т. 368. — С. 56–69.
72. Liertzer M. и др. Pump-Induced Exceptional Points in Lasers // Phys. Rev. Lett. —

2012. — Т. 108, № 17. — С. 173901.
73. Brandstetter M. и др. Reversing the pump dependence of a laser at an exceptional point // *Nat Commun.* — 2014. — Т. 5. — С. 4034.
74. Chong Y.D. и др. Coherent Perfect Absorbers: Time-Reversed Lasers // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Т. 105, № 5. — С. 53901.
75. Longhi S. PT-symmetric laser absorber // *Phys. Rev. A.* — 2010. — Т. 82, № 3. — С. 31801.
76. Feng S. Loss-induced super scattering and gain-induced absorption // *Opt. Express.* — 2016. — Т. 24, № 2. — С. 1291–1304.
77. Jusserand B. и др. Polariton Resonances for Ultrastrong Coupling Cavity Optomechanics in GaAs/AlAs Multiple Quantum Wells // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Т. 115, № 26. — С. 267402.
78. Poshakinskiy A. V., Poddubny A.N., Fainstein A. Multiple Quantum Wells for PT-Symmetric Phononic Crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2016. — Т. 117, № 22. — С. 224302.
79. Poshakinskiy A. V., Poddubny A.N. Phonoritonic Crystals with a Synthetic Magnetic Field for an Acoustic Diode // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Т. 118, № 15. — С. 156801.
80. Jing H. и др. PT -Symmetric Phonon Laser // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Т. 113, № 5. — С. 053604.
81. Zyablovsky A.A., Andrianov E.S., Pukhov A.A. Parametric instability of optical non-Hermitian systems near the exceptional point // *Sci. Rep.* — 2016. — Т. 6, № 1. — С. 29709.
82. Barashenkov I. V., Baker L., Alexeeva N. V. PT-symmetry breaking in a necklace of coupled optical waveguides // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Т. 87, № 3. — С. 033819.
83. Longhi S. PT phase control in circular multi-core fibers // *Opt. Lett.*, — 2016. — Т. 41, № 9. — С. 1897–1900.
84. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том VIII. Электродинамика сплошных сред. Физматлит, 2003. 656 с.
85. Zyablovsky A.A. и др. Causality and phase transitions in PT-symmetric optical systems // *Phys. Rev. A.* — 2014. — Т. 89, № 3. — С. 033808.
86. Cannata F., Dedonder J.-P., Ventura A. Scattering in PT-symmetric quantum mechanics // *Ann. Phys. (N. Y).* — 2007. — Т. 322, № 2. — С. 397–433.

87. Goyer F., Ernzerhof M., Zhuang M. Source and sink potentials for the description of open systems with a stationary current passing through // *J. Chem. Phys.* — 2007. — Т. 126, № 14. — С. 144104.
88. Pickup B.T., Fowler P.W. An analytical model for steady-state currents in conjugated systems // *Chem. Phys. Lett.* — 2008. — Т. 459, № 1–6. — С. 198–202.
89. Stuyver T. и др. Enhancing the conductivity of molecular electronic devices // *J. Chem. Phys.* — 2017. — Т. 146, № 9. — С. 092310.
90. Jin L., Song Z. Physics counterpart of the PT non-Hermitian tight-binding chain // *Phys. Rev. A.* — 2010. — Т. 81, № 3. — С. 32109.
91. Jin L., Song Z. A physical interpretation for the non-Hermitian Hamiltonian // *J. Phys. A Math. Theor.* — 2011. — Т. 44, № 37. — С. 375304.
92. Hernandez-Coronado H., Krejčířík D., Siegl P. Perfect transmission scattering as a PT-symmetric spectral problem // *Phys. Lett. A.* — 2011. — Т. 375, № 22. — С. 2149–2152.
93. Wiersig J. Enhancing the Sensitivity of Frequency and Energy Splitting Detection by Using Exceptional Points: Application to Microcavity Sensors for Single-Particle Detection // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Т. 112, № 20. — С. 203901.
94. Wiersig J. Sensors operating at exceptional points: General theory // *Phys. Rev. A.* — 2016. — Т. 93, № 3. — С. 33809.
95. Chen W. и др. Exceptional points enhance sensing in an optical microcavity // *Nature.* — 2017. — Т. 548, № 7666. — С. 192–196.
96. Hodaеi H. и др. Enhanced sensitivity in PT-symmetric coupled resonators / под ред. Kudryashov A. V., Paxton A.H., Ilchenko V.S. 2017. С. 100901С.
97. Ren J. и др. Ultrasensitive micro-scale parity-time-symmetric ring laser gyroscope // *Opt. Lett.* — 2017. — Т. 42, № 8. — С. 1556.
98. Hodaеi H. и др. Enhanced sensitivity at higher-order exceptional points // *Nature.* — 2017. — Т. 548, № 7666. — С. 187–191.
99. Alicki R. The quantum open system as a model of the heat engine // *J. Phys. A. Math. Gen.* — 1979. — Т. 12, № 5. — С. L103–L107.
100. Kosloff R., Levy A. Quantum Heat Engines and Refrigerators: Continuous Devices // *Annu. Rev. Phys. Chem.* — 2014. — Т. 65, № 1. — С. 365–393.
101. Whitney R.S. Finding the quantum thermoelectric with maximal efficiency and minimal

- entropy production at given power output // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Т. 91, № 11. — С. 115425.
102. Schiegg C.H., Dzierzawa M., Eckern U. Implementation of transmission functions for an optimized three-terminal quantum dot heat engine // *J. Phys. Condens. Matter.* — 2017. — Т. 29, № 8. — С. 85303.
103. Caroli C. и др. A direct calculation of the tunnelling current: IV. Electron-phonon interaction effects // *J. Phys. C Solid State Phys.* — 1972. — Т. 5, № 1. — С. 21.
104. Ryndyk D.A. и др. Green function techniques in the treatment of quantum transport at the molecular scale // *Energy Transfer Dynamics in Biomaterial Systems.* Springer, 2009. С. 213–335.
105. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ.* — 1965. — Т. 48, № 4. С. — 1515–1527.
106. Арсеев П.И. О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения // *УФН.* — 2015. — Т. 185, № 12. — С. 1271–1321.
107. Абрикосов А.А. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Рипол Классик, 2013.
108. Stone M., Goldbart P. *Mathematics for physics: a guided tour for graduate students.* Cambridge University Press, 2009.
109. Mahan G.D. *Many-Particle Physics.* Boston, MA: Springer US, 2000.
110. Meir Y., Wingreen N.S. Landauer formula for the current through an interacting electron region // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Т. 68, № 16. — С. 2512–2515.
111. Datta S. A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys. Condens. Matter.* — 1990. — Т. 2, № 40. — С. 8023.
112. Fisher D.S., Lee P.A. Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B.* — 1981. — Т. 23, № 12. — С. 6851–6854.
113. Tanaka S. и др. Higher-order time-symmetry-breaking phase transition due to meeting of an exceptional point and a Fano resonance // *Phys. Rev. A.* — 2016. — Т. 94, № 2. — С. 22105.
114. Dente A.D., Bustos-Marún R.A., Pastawski H.M. Dynamical regimes of a quantum SWAP gate beyond the Fermi golden rule // *Phys. Rev. A.* — 2008. — Т. 78, № 6. — С. 62116.

115. Celardo G.L., Kaplan L. Superradiance transition in one-dimensional nanostructures: An effective non-Hermitian Hamiltonian formalism // *Phys. Rev. B.* — 2009. — T. 79, № 15. — C. 155108.
116. Celardo G.L. и др. Transport through nanostructures with asymmetric coupling to the leads // *Phys. Rev. B.* — 2010. — T. 82, № 16. — C. 165437.
117. Eleuch H., Rotter I. Clustering of exceptional points and dynamical phase transitions // *Phys. Rev. A.* — 2016. — T. 93, № 4. — C. 42116.
118. Razavy M. Quantum theory of tunneling. World Scientific, 2003.
119. Sokolov V. V, Zelevinsky V.G. Collective dynamics of unstable quantum states // *Ann. Phys. (N. Y).* — 1992. — T. 216, № 2. — C. 323–350.
120. Sherman J., Morrison W.J. Adjustment of an Inverse Matrix Corresponding to a Change in One Element of a Given Matrix // *Ann. Math. Stat.* — 1950. — T. 21, № 1. — C. 124–127.
121. Harville D.A. Matrix algebra from a statistician's perspective. Springer, 1997. T. 1.
122. Lu H., Lü R., Zhu B. Tunable Fano effect in parallel-coupled double quantum dot system // *Phys. Rev. B.* — 2005. — T. 71, № 23. — C. 235320.
123. Gong W., Han Y., Wei G. Antiresonance and bound states in the continuum in electron transport through parallel-coupled quantum-dot structures // *J. Phys. Condens. Matter.* — 2009. — T. 21, № 17. — C. 175801.
124. Smith M.B. Organic Chemistry: An Acid-Base Approach. Taylor & Francis, 2011.
125. Dhar A., Sen D. Nonequilibrium Green's function formalism and the problem of bound states // *Phys. Rev. B.* — 2006. — T. 73, № 8. — C. 85119.
126. Sheng W.-D., Xia J.-B. A transfer matrix approach to conductance in quantum waveguides // *J. Phys. Condens. Matter.* — 1996. — T. 8, № 20. — C. 3635.
127. Blanchard C., Hugonin J.-P., Sauvan C. Fano resonances in photonic crystal slabs near optical bound states in the continuum // *Phys. Rev. B.* — 2016. — T. 94, № 15. — C. 155303.
128. Datta S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge University Press, 1997.
129. Richter S., Mentovich E., Elnathan R. Realization of Molecular-Based Transistors // *Adv. Mater.* — 2018. — T. 30, № 41. — C. 1706941.
130. Li Y. и др. Interference-based molecular transistors // *Sci. Rep.* — 2016. — T. 6, № 1.

- C. 33686.
131. Nitzan A., Ratner M.A. Electron Transport in Molecular Wire Junctions // *Science*. — 2003. — Т. 300, № 5624. — С. 1384–1389.
 132. Kergueris C. и др. Electron transport through a metal-molecule-metal junction // *Phys. Rev. B*. — 1999. — Т. 59, № 19. — С. 12505–12513.
 133. Papadopoulos T.A., Grace I.M., Lambert C.J. Control of electron transport through Fano resonances in molecular wires // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Т. 74, № 19. — С. 193306.
 134. Kaasbjerg K., Flensberg K. Strong Polarization-Induced Reduction of Addition Energies in Single-Molecule Nanojunctions // *Nano Lett.* — 2008. — Т. 8, № 11. — С. 3809–3814.
 135. Osorio E.A. и др. Electronic Excitations of a Single Molecule Contacted in a Three-Terminal Configuration // *Nano Lett.* — 2007. — Т. 7, № 11. — С. 3336–3342.
 136. Puczkarski P. и др. Three-terminal graphene single-electron transistor fabricated using feedback-controlled electroburning // *Appl. Phys. Lett.* — 2015. — Т. 107, № 13. — С. 133105.
 137. Perrin M.L. и др. Large tunable image-charge effects in single-molecule junctions // *Nat. Nanotechnol.* — 2013. — Т. 8, № 4. — С. 282–287.
 138. Hu C. *Modern semiconductor devices for integrated circuits*. Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2010. Т. 1.
 139. Abe M. Diradicals // *Chem. Rev.* — 2013. — Т. 113, № 9. — С. 7011–7088.
 140. Tsuji Y. и др. Close relation between quantum interference in molecular conductance and diradical existence // *Proc. Natl. Acad. Sci.* — 2016. — Т. 113, № 4. — С. E413–E419.
 141. Shimizu A. и др. Aromaticity and π -bond covalency: prominent intermolecular covalent bonding interaction of a Kekulé hydrocarbon with very significant singlet biradical character // *Chem. Commun.* — 2012. — Т. 48, № 45. — С. 5629.
 142. Borden W.T., Davidson E.R. Effects of electron repulsion in conjugated hydrocarbon diradicals // *J. Am. Chem. Soc.* — 1977. — Т. 99, № 14. — С. 4587–4594.
 143. Carl Lineberger W., Thatcher Borden W. The synergy between qualitative theory, quantitative calculations, and direct experiments in understanding, calculating, and measuring the energy differences between the lowest singlet and triplet states of organic diradicals // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2011. — Т. 13, № 25. — С. 11792.

144. Büttiker M. Four-Terminal Phase-Coherent Conductance // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Т. 57, № 14. — С. 1761–1764.
145. Theis T.N., Solomon P.M. In Quest of the “Next Switch”: Prospects for Greatly Reduced Power Dissipation in a Successor to the Silicon Field-Effect Transistor // *Proc. IEEE.* — 2010. — Т. 98, № 12. — С. 2005–2014.
146. Ionescu A.M., Riel H. Tunnel field-effect transistors as energy-efficient electronic switches // *Nature.* — 2011. — Т. 479, № 7373. — С. 329–337.
147. Manipatruni S. и др. Scalable energy-efficient magnetoelectric spin-orbit logic // *Nature.* — 2019. — Т. 565 — С. 35–42.
148. Heeger A.J. и др. Solitons in conducting polymers // *Rev. Mod. Phys.* — 1988. — Т. 60, № 3. — С. 781–850.
149. Blanter Y.M., Büttiker M. Shot noise in mesoscopic conductors // *Phys. Rep.* — 2000. — Т. 336, № 1–2. — С. 1–166.
150. Coulson C.A., O’Leary B., Mallion R.B. Huckel theory for organic chemists. Academic Press, 1978.
151. Pedersen K.G.L. и др. Quantum interference in off-resonant transport through single molecules // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Т. 90, № 12. — С. 125413.
152. Averin D. V., Likharev K.K. Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions // *J. Low Temp. Phys.* — 1986. — Т. 62, № 3–4. — С. 345–373.
153. Anantram M.P., Datta S. Effect of phase breaking on the ac response of mesoscopic systems // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Т. 51, № 12. — С. 7632–7639.
154. Wang B., Wang J., Guo H. Current Partition: A Nonequilibrium Green’s Function Approach // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Т. 82, № 2. — С. 398–401.
155. Kienle D., Vaidyanathan M., Léonard F. Self-consistent ac quantum transport using nonequilibrium Green functions // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Т. 81, № 11. — С. 115455.
156. Ramo S. Currents Induced by Electron Motion // *Proc. IRE.* — 1939. — Т. 27, № 9. — С. 584–585.
157. Shockley W. Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge // *J. Appl. Phys.* — 1938. — Т. 9, № 10. — С. 635–636.
158. Елесин В.Ф. К теории генерации резонансно-туннельного диода // *ЖЭТФ.* — 1999. — Т. 116, № 2. — С. 704.

159. Елесин В.Ф. Высокочастотный отклик двухбарьерных наноструктур // ЖЭТФ. — 2002. — Т. 121, № 4. — С. 925.
160. Капаев В.В. и др. Высокочастотный отклик и возможности перестраиваемого по частоте терагерцевого узкополосного усиления в резонансно-туннельных наноструктурах // ЖЭТФ. — 2013. — Т. 143, № 3. — С. 569.
161. Капаев В.В. Нелинейная теория узкополосной генерации и детектирования терагерцевого излучения в резонансно-туннельных гетероструктурах // ЖЭТФ. — 2015. — Т. 148, № 2. — С. 349.
162. Копаев Ю.В., Молотков С.Н. Блоховские осцилляции и динамическая проводимость сверхрешетки // Письма в ЖЭТФ. — 1994. — Т. 59, № 11. — С. 770.
163. Chen L.Y., Ting C.S. AC conductance of a double-barrier resonant tunneling system under a DC-bias voltage // Phys. Rev. Lett. — 1990. — Т. 64, № 26. — С. 3159–3162.
164. Ueda A., Entin-Wohlman O., Aharony A. Effects of coupling to vibrational modes on the ac conductance of molecular junctions // Phys. Rev. B. — 2011. — Т. 83, № 15. — С. 155438.
165. Xue Y., Ratner M.A. Microscopic study of electrical transport through individual molecules with metallic contacts. I. Band lineup, voltage drop, and high-field transport // Phys. Rev. B. — 2003. — Т. 68, № 11. — С. 115406.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приложение А: Не PT -симметричный неэрмитовый гамильтониан с действительными собственными значениями

Рассмотрим, как можно построить неэрмитовый не PT -симметричный гамильтониан \mathbf{H}_{aux} вида (2.35) с хотя бы одним действительным заранее заданным собственным значением $E_0 \in \mathbb{R}$. Чтобы это соответствовало действительности, необходимо, чтобы было выполнено следующее условие:

$$Q(E_0) = \det(E_0 \mathbf{I} - \mathbf{H}_{aux}) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Раскладывая определитель, получим следующее комплексное уравнение:

$$(E_0 - \varepsilon_1 - \delta_L - i\Gamma_L) \check{D}_0^1(E_0) - |\tau_1|^2 \check{D}_0^2(E_0) = 0, \quad (\text{A.2})$$

где $\check{D}_q^p(E_0)$ – миноры матрицы $E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}$, вычисленные при $E = E_0$. Приравнивая к нулю действительную и мнимую часть уравнения (A.2), можно разрешить его относительно ε_1 и Γ_L :

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= E_0 - \delta_L - \frac{|\tau_1|^2}{|\check{D}_0^1(E_0)|^2} \left\{ \text{Re}[\check{D}_0^2(E_0)] \text{Re}[\check{D}_0^1(E_0)] + \text{Im}[\check{D}_0^2(E_0)] \text{Im}[\check{D}_0^1(E_0)] \right\}, \\ \Gamma_L &= \frac{|\tau_1|^2}{|\check{D}_0^1(E_0)|^2} \left\{ \text{Re}[\check{D}_0^2(E_0)] \text{Im}[\check{D}_0^1(E_0)] - \text{Im}[\check{D}_0^2(E_0)] \text{Re}[\check{D}_0^1(E_0)] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Таким образом, оказывается, что изменяя всего два параметра можно получить любое наперед заданное действительное собственное значение трехдиагонального неэрмитового не PT -симметричного гамильтониана.

Более того, оказывается возможным получить два и более действительных собственных значений. Чтобы сделать это придется разложить определитель в (A.1) дальше, чем это сделано в (A.2) и получить нелинейную систему уравнений. Очевидно, что число параметров, которые необходимо изменить, чтобы гамильтониан стал иметь k действительных собственных значений, равно $2k$. Следовательно, можно добиться наличия k единичных резонансов в любой несимметричной линейной структуре путем изменения $2k$ ее параметров, если, конечно, их целевые значения будут действительными. В качестве примера рассмотрим $N = 2$ -ух узельную несимметричную систему, в ко-

торой добьемся единичной прозрачности для энергии E_0 . Эффективный гамильтониан этой системы имеет следующий вид [частный случай выражения (2.25) для $N = 2$]:

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + \delta_L - i\Gamma_L & \tau_1 \\ \tau_1^* & \varepsilon_2 + \delta_R - i\Gamma_R \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Из выражения (A.4) нетрудно вычислить миноры: $\tilde{D}_0^1(E_0) = E_0 - \varepsilon_2 - \delta_R + i\Gamma_R$ и $\tilde{D}_0^2(E_0) = 1$.

Тогда, в соответствии с (A.3) можно изменить параметры ε_1 и Γ_L следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= E_0 - \delta_L - \frac{|\tau_1|^2 (E_0 - \varepsilon_2 - \delta_R)}{(E_0 - \varepsilon_2 - \delta_R)^2 + \Gamma_R^2}, \\ \Gamma_L &= \frac{|\tau_1|^2 \Gamma_R}{(E_0 - \varepsilon_2 - \delta_R)^2 + \Gamma_R^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Используя (A.5), можно рассчитать выражение для функции Q :

$$Q(E) = (E - E_0) \left(E - \varepsilon_2 - \delta_R + i\Gamma_R + \frac{|\tau_1|^2}{E_0 - \varepsilon_2 - \delta_R + i\Gamma_R} \right), \quad (\text{A.6})$$

из которого видно, что $Q(E_0) = 0$ и, следовательно, E_0 есть действительное собственное значение неэрмитового не PT -симметричного гамильтониана.

Приложение Б: Свойства функции Q в симметричных линейных структурах

В симметричной линейной структуре ($\varepsilon_i = \varepsilon_0$ для всех i , $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma = const$ и $\delta_L = \delta_R = 0$) вспомогательный гамильтониан (2.35) становится PT -симметричным. Поэтому выражение для функции Q в этом случае имеет вид многочлена:

$$Q(E) = \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{aux}) = \left[(E - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \right] D_1^1 - 2(E - \varepsilon_0) |\tau_1|^2 D_1^2 + |\tau_1|^4 D_2^2. \quad (\text{B.1})$$

Рассмотрим цепочку с четным числом узлов N . В этом случае Q оказывается многочленом от $(E - \varepsilon_0)^2$, то есть в него входят только четные степени $(E - \varepsilon_0)$. Для $N = 2$ это очевидно: $Q = (E - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 - |\tau_1|^2$, для $N \geq 2$ прежде всего необходимо доказать следующее утверждение:

$$\begin{aligned}
(D_1^1)_N &= p_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right], \\
(D_1^2)_N &= (E - \varepsilon_0) q_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right], \\
(D_2^2)_N &= r_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right],
\end{aligned} \tag{Б.2}$$

где $p_N[x]$, $q_N[x]$ и $r_N[x]$ – некоторые многочлены.

Используем метод математической индукции по четным N . В качестве базы индукции выберем случай $N=4$: $(D_1^1)_4 = (E - \varepsilon_0)^2 - |\tau_2|^2$, $(D_1^2)_4 = (E - \varepsilon_0)$ и $(D_2^2)_4 = 1$. Теперь предположим, что (Б.2) верно для $N-2$ и покажем, что оно будет верно для N . Используя разложение определителя трехдиагональной матрицы, получим:

$$\begin{aligned}
(D_1^1)_N &= (E - \varepsilon_0)^2 (D_2^2)_N - 2(E - \varepsilon_0) |\tau_2|^2 (D_2^3)_N + |\tau_2|^4 (D_3^3)_N, \\
(D_1^2)_N &= (E - \varepsilon_0) (D_2^2)_N - |\tau_2|^2 (D_2^3)_N.
\end{aligned} \tag{Б.3}$$

Нетрудно видеть, что $(D_j^i)_N$ есть то же самое, что и $(D_{j-1}^{i-1})_{N-2}$ при соответствующем переименовании величин τ_i . Следовательно, в предположении правдивости (Б.2) для $N-2$, из (Б.3) следует то, что (Б.2) верно и для N . Исходя из этого и выражения (Б.1), нетрудно видеть, что Q есть многочлен степени $N/2$ от $(E - \varepsilon_0)^2$.

Для нечетного N многочлен Q будет содержать только нечетные степени $(E - \varepsilon_0)$, то есть его можно представить как многочлен степени $(N-1)/2$ от $(E - \varepsilon_0)^2$, умноженный на $(E - \varepsilon_0)$. В случае $N=1$: $Q = (E - \varepsilon_0)$ и $N=3$: $Q = (E - \varepsilon_0) \left[(E - \varepsilon_0)^2 - 2|\tau_1|^2 + \Gamma^2 \right]$ это очевидно. При $N > 3$ снова воспользуемся методом математической индукции и покажем для начала, что

$$\begin{aligned}
(D_1^1)_N &= (E - \varepsilon_0) \tilde{p}_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right], \\
(D_1^2)_N &= \tilde{q}_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right], \\
(D_2^2)_N &= (E - \varepsilon_0) \tilde{r}_N \left[(E - \varepsilon_0)^2 \right].
\end{aligned} \tag{Б.4}$$

Это также легко доказать используя разложения (Б.3). Наконец из (Б.4) следует, что при нечетном N многочлен Q из (Б.1) есть многочлен степени $(N-1)/2$ от $(E - \varepsilon_0)^2$, умноженный на $(E - \varepsilon_0)$.

Приложение В: Выражение для функции P в симметричной системе из двух линейных цепочек

Так как система из двух цепочек взаимодействует с контактами только через один узел (с каждым), то формула (2.46) для расчета функции P существенно упроститься [3]:

$$P = 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} M_{N1}, \quad (\text{B.1})$$

где M_{N1} – соответствующий минор матрицы $(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})$. Поскольку гамильтониан изолированной системы (2.50) в матричном виде имеет блочную структуру, то и \mathbf{H}_{eff} также будет иметь блочную структуру:

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1^{eff} & \mathbf{\Omega}_{12} \\ \mathbf{\Omega}_{12}^\dagger & \mathbf{H}_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

где \mathbf{H}_1^{eff} гамильтониан первой цепочки (к которой подключены контакты) с учетом контактных собственно-энергетических частей. Используя формулу для вычисления обратной матрицы к блочной, нетрудно определить величину M_{N1} и, соответственно выражение для функции P :

$$P = 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2) \times \begin{vmatrix} -\tau_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -|\tau|^2 \left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)^{-1} \right]_{1N} \\ E & -\tau_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -\tau_2^* & E & -\tau_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\tau_{N-3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E & -\tau_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\tau_{N-2}^* & E & -\tau_{N-1} \end{vmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Матричный элемент $\left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)^{-1} \right]_{1N}$ нетрудно вычислить непосредственно из определения гамильтониана \mathbf{H}_2 в формуле (2.50):

$$\left[(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)^{-1} \right]_{1N} = \frac{\tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1}}{\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)}. \quad (\text{B.4})$$

Подставляя (B.4) в (B.3) и раскладывая определитель по первой строке, получим:

$$\begin{aligned} P &= 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2) \left[(-1)^{N-1} \tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1} - (-1)^N |\tau|^2 \frac{\tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1}}{\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)} D_1^1 \right] = \\ &= 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R} \cdot (-1)^{N-1} \tau_1 \cdot \dots \cdot \tau_{N-1} \left[\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2) + |\tau|^2 D_1^1 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Здесь D_q^p обозначает минор матрицы $(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2)$ с вычеркнутыми первыми p столбцов и строк и последними q столбцов и строк.

Поскольку рассматриваемая структура симметрична, то нетрудно заметить, что выражение в квадратных скобках в правой части (B.5) есть характеристический определитель PT -симметричной матрицы \mathbf{H}_{zero} :

$$(\mathbf{H}_{zero})_{mn} = (\mathbf{H}_2)_{mn} + i|\tau|(\delta_{m1}\delta_{n1} - \delta_{mN}\delta_{nN}). \quad (\text{B.6})$$

В самом деле,

$$\det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{zero}) = \det(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_2) + i|\tau|(D_0^1 - D_1^0) + |\tau|^2 D_1^1. \quad (\text{B.7})$$

В симметричной структуре $D_0^1 = D_1^0$ и (B.7) в точности обращается в выражение в квадратных скобках в правой части (B.5). Поскольку функция P определена с точностью до фазового множителя, то можно пренебречь множителем $(-1)^{N-1}$ и получить в точности выражение (2.51).

Приложение Г: Плотность состояний в окрестности ССНС

Покажем, что в любой двухтерминальной квантовой системе образование ССНС сопровождается формированием δ -образных пиков в плотности состояний (ПС). ПС может быть получена, например, из запаздывающей функции Грина системы:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr}(\mathbf{G}^r) \right]. \quad (\text{Г.1})$$

В терминах матрицы \mathbf{A} и векторов $\mathbf{u}_{L,R}$ можно записать:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr} \left(\mathbf{A} + i\mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger + i\mathbf{u}_R \mathbf{u}_R^\dagger \right)^{-1} \right], \quad (\text{Г.2})$$

откуда, используя формулу Шермана-Моррисона и лемму об определителе матрицы, получим выражение для ПС:

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \frac{R(E)}{|P(E)|^2 + |Q(E)|^2}, \quad (\text{Г.3})$$

где функции P и Q определены в (2.46) и (2.48) соответственно, а функция R имеет вид:

$$R = (\det \mathbf{A})^2 \left\{ \mathbf{u}_L^\dagger \mathbf{A}^{-2} \mathbf{u}_L \left[1 + (\mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_R)^2 \right] + \mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-2} \mathbf{u}_R \left[1 + (\mathbf{u}_L^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L)^2 \right] - \right. \\ \left. - 2(\mathbf{u}_L^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_R) \operatorname{Re} \left[\mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L \mathbf{u}_L^\dagger \mathbf{A}^{-2} \mathbf{u}_R \right] + \left| \mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}_L \right|^2 (\mathbf{u}_L^\dagger \mathbf{A}^{-2} \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_R^\dagger \mathbf{A}^{-2} \mathbf{u}_R) \right\}. \quad (\Gamma.4)$$

Рассмотрим теперь поведение ПС вблизи ССНС. ССНС это связанное состояние, поэтому в диагональном базисе гибридной квантовой системы (базис, диагонализующий матрицу \mathbf{A}) ССНС можно охарактеризовать как состояние $|\tilde{n}\rangle$ такое, что его связь с контактами $\tilde{\gamma}_{\tilde{n}}^{L,R}$ стремиться к нулю. Здесь тильда отражает выбранный диагональный базис. Предположим, что $\tilde{\epsilon}_1, \dots, \tilde{\epsilon}_N$ есть собственные энергии гибридной квантовой системы и без потери общности положим, что ССНС образуется из состояния $|\tilde{1}\rangle$, то есть при $E \rightarrow \tilde{\epsilon}_1$, когда параметры системы меняются таким образом, что $(\tilde{\mathbf{u}}_{L,R})_{\tilde{1}} \rightarrow 0$. В этом случае матрица \mathbf{A} диагональна: $A_{ii} = E - \tilde{\epsilon}_i$. В окрестности ССНС положим, что $\Delta E = E - \tilde{\epsilon}_1$ и $\tilde{\Gamma}_{L,R} = \left| (\tilde{\mathbf{u}}_{L,R})_{\tilde{1}} \right|^2$ есть величины одного порядка, малые по сравнению с $\min_{i,j} |\tilde{\epsilon}_i - \tilde{\epsilon}_j|$ и $\min_{i \neq 1} \left| (\tilde{\mathbf{u}}_{L,R})_{\tilde{1}} \right|^2$. Тогда можно приблизительно оценить ПС в окрестности ССНС:

$$\rho(E) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\beta_1(\sqrt{\tilde{\Gamma}_L}, \sqrt{\tilde{\Gamma}_R})}{\left[\Delta E + \beta_2(\sqrt{\tilde{\Gamma}_L}, \sqrt{\tilde{\Gamma}_R}) \right]^2 + \left[\beta_3(\sqrt{\tilde{\Gamma}_L}, \sqrt{\tilde{\Gamma}_R}) \right]^2}, \quad (\Gamma.5)$$

где $\beta_i(x, y)$ суть некоторые билинейные формы от x и y . Из (Г.5) видно, что при образовании ССНС, то есть при $\tilde{\Gamma}_{L,R} \rightarrow 0$, ПС стремиться к δ -образному пику при энергии $E = \tilde{\epsilon}_1$.

Приложение Д: Неотрицательность функции $P_1^{\alpha\beta}$

Неэрмитова матрица $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$, задаваемая соотношением (2.82) может быть представлена как сумма эрмитовой и антиэрмитовой компонент: $\mathbf{A}^{\alpha\beta} = \mathbf{A}_1 + i\mathbf{A}_2$, где $\mathbf{A}_1 = E\mathbf{I} - \mathbf{H}_0 - \sum_{\sigma=1}^M \delta^\sigma$ и $\mathbf{A}_2 = \sum_{\substack{\sigma=1 \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M \Gamma^\sigma$ есть эрмитовы матрицы. В выражение (2.88) для $P_1^{\alpha\beta}$ входит матрица обратная к $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$, которую также можно представить в виде суммы эрмитовой и антиэрмитовой компонент:

$$(\mathbf{A}^{\alpha\beta})^{-1} = \mathbf{B}_1 + i\mathbf{B}_2, \quad (\text{Д.1})$$

где $\mathbf{B}_{1,2}$ также эрмитовы и непосредственно связаны с $\mathbf{A}_{1,2}^{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_1 &= \mathbf{A}_1^{-1} - \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1} + \dots = \mathbf{A}_1^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1})^{-1}, \\ \mathbf{B}_2 &= -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1} + \mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1} - \dots = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{A}_1^{-1})^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{Д.2})$$

Ключевая особенность матрицы \mathbf{B}_2 состоит в том, что она неположительно определенная, то есть для любого вектора $\mathbf{a} \in \mathbb{C}^N$ будет выполнено:

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{a} = - \sum_{\substack{\sigma=1 \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M \mathbf{a}^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \mathbf{u}_\sigma^\dagger \mathbf{C} \mathbf{a} = - \sum_{\substack{\sigma=1 \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M |\mathbf{a}^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma|^2 \leq 0, \quad (\text{Д.3})$$

где эрмитова матрица \mathbf{C} имеет вид:

$$\mathbf{C} = c_1 \mathbf{A}_1^{-1} + c_2 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} + c_3 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1} + \dots \quad (\text{Д.4})$$

с следующими коэффициентами c_n :

$$c_n = (-1)^{n-1} \frac{(2n-3)!!}{(2n-2)!!}. \quad (\text{Д.5})$$

Используя матрицы $\mathbf{B}_{1,2}$, можно переписать выражение (2.88):

$$\begin{aligned} P_1^{\alpha\beta} &= 4 |\det \mathbf{A}^{\alpha\beta}|^2 \times \left\{ [2 - \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta] \cdot [\mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\alpha] + \right. \\ &\quad \left. + 2 \operatorname{Re} [\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta (i + \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta)] - \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\alpha [1 + (\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta)^2] - \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta |\mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Д.6})$$

В соответствии с (Д.3) матрица $-\mathbf{B}_2$ неотрицательно определена и удовлетворяет неравенству Коши-Буняковского-Шварца:

$$\mathbf{a}^\dagger (-\mathbf{B}_2) \mathbf{a} \mathbf{b}^\dagger (-\mathbf{B}_2) \mathbf{b} - \mathbf{a}^\dagger (-\mathbf{B}_2) \mathbf{b} \mathbf{b}^\dagger (-\mathbf{B}_2) \mathbf{a} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{a} \mathbf{b}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{b} - \mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{b} \mathbf{b}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{a} \geq 0 \quad (\text{Д.7})$$

для любых векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$. В самом деле, если $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{a} = 0$, то из (Д.3) следует, что $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma = 0$ для любого $\sigma \neq \alpha, \beta$. Следовательно, для любого $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$ будет выполнено сле-

дующее $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{b} = - \sum_{\substack{\sigma=1 \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M \mathbf{a}^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \mathbf{u}_\sigma^\dagger \mathbf{C} \mathbf{b} = 0$. В этом случае неравенство (Д.7) перейдет в равен-

ство, но останется справедливым. Если же $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{a} < 0$, то нетрудно применить стандартное доказательство и показать справедливость неравенства (Д.7). Таким образом, для матрицы $-\mathbf{B}_2$ выполнено неравенство Коши-Буняковского-Шварца, даже если она не будет строго положительно определенной.

Подставляя $\mathbf{a} = \mathbf{u}_\alpha$ и $\mathbf{b} = \mathbf{u}_\beta$ в (Д.7), нетрудно убедиться, что первое слагаемое в фигурных скобках в выражении (Д.6) неотрицательно. Оставшиеся слагаемые могут быть переписаны с использованием матрица \mathbf{C} :

$$\begin{aligned}
& 2 \operatorname{Re} \left[\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta (i + \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta) \right] - \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\alpha \left[1 + (\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta)^2 \right] - \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_\beta \left| \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta \right|^2 = \\
& = \sum_{\substack{\sigma=1 \\ \sigma \neq \alpha, \beta}}^M \left\{ \left[\operatorname{Im} \left(\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta e^{-i\phi_{\alpha\sigma}} \right) - \left| \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \right| \right]^2 + \right. \\
& \left. + \left[\operatorname{Re} \left(\mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta e^{-i\phi_{\alpha\sigma}} \right) - \mathbf{u}_\beta^\dagger \mathbf{B}_1 \mathbf{u}_\beta \left| \mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma \right| \right]^2 \right\} \geq 0,
\end{aligned} \tag{Д.8}$$

где $\phi_{\alpha\sigma} = \arg(\mathbf{u}_\alpha^\dagger \mathbf{C} \mathbf{u}_\sigma)$. Таким образом, получается, что $P_1^{\alpha\beta}$ есть неотрицательная величина, если неэрмитовость матрицы $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$ имеет вид (2.82), то есть происходит из-за наличия более чем двух контактов.

Приложение Е: Расширенная модель квантового интерференционного ключа

Е.1. За пределами приближения широкой зоны

Все вычисления транспортных свойств в тексте диссертации проводились в приближении широкой зоны (wide-band limit) в электродах, то есть с постоянной плотностью состояний и интегралами перескока не зависящими от энергии. Это приводит к наличию только мнимой составляющей контактной собственно-энергетической части. Это приближение часто используется в различных аналитических вычислениях, так как позволяет существенно упростить их. Приближение широкой зоны призвано давать лишь качественную картину явления, не претендуя на количественную точность. Однако, в некоторых случаях оно может давать хорошее согласие с *ab initio* расчетами. Например, это приближение может быть адекватным в случае золотых контактов с шириной зоны проводимости порядка 8 эВ и уровнем Ферми, расположенным практически в ее центре, в то время как типичные значения силы связи с электродами (ширины резонансов) имеют величину существенно меньшую 1 эВ.

Тем не менее, следует оценить влияние наличия зависимости от энергии контактных собственно-энергетических частей на транспортные свойства предложенных квантовых интерференционных ключей на основе дирадикалов. Рассмотрим контакты в виде одномерных полубесконечных цепочек с одинаковыми узельными энергиями локализо-

ванных атомных состояний, взятыми за начало отсчета, и туннельными матричными элементами между ближайшими соседями, взятыми за единицу энергии. Таким образом, собственно-энергетические части рассмотренных моделей дирадикалов в узельном базисе будут иметь вид:

$$\Sigma_L(E) = \begin{pmatrix} \delta(E) - i\Gamma(E) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_R(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta(E) - i\Gamma(E) \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

для молекулы триметиленметана и

$$\Sigma_L(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta(E) - i\Gamma(E) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{E.2})$$

$$\Sigma_R(E) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta(E) - i\Gamma(E) & 0 \end{pmatrix}$$

для молекулы дивинилциклобутана. Здесь функции $\delta(E)$ и $\Gamma(E)$ задаются соотношениями:

$$\delta(E) = \frac{EJ^2}{2}, \quad \Gamma(E) = \frac{J^2}{2} \sqrt{4 - E^2} \quad (\text{E.3})$$

с туннельным матричным элементом J между соответствующими атомами молекул и крайними узлами полубесконечных контактов. На рис. E.1 показана эволюция профиля коэффициента прохождения при изменении энергии ε_1 для различных положений всего спектра молекулы относительно середины зоны контакта (где в точности работает приближение широкой зоны). Сдвиг общей картины к краю зоны ($\varepsilon_0 = -1.5$) отрицательно

сказывается на переключении связного дирадикала (триметиленметана). В то же время, переключение несвязного дирадикала (дивинилциклобутadiен) практически не меняется при приближении к краю зоны. То есть в последнем случае зависимость собственно-энергетической части от энергии практически не влияет на свойства квантового интерференционного транзистора.

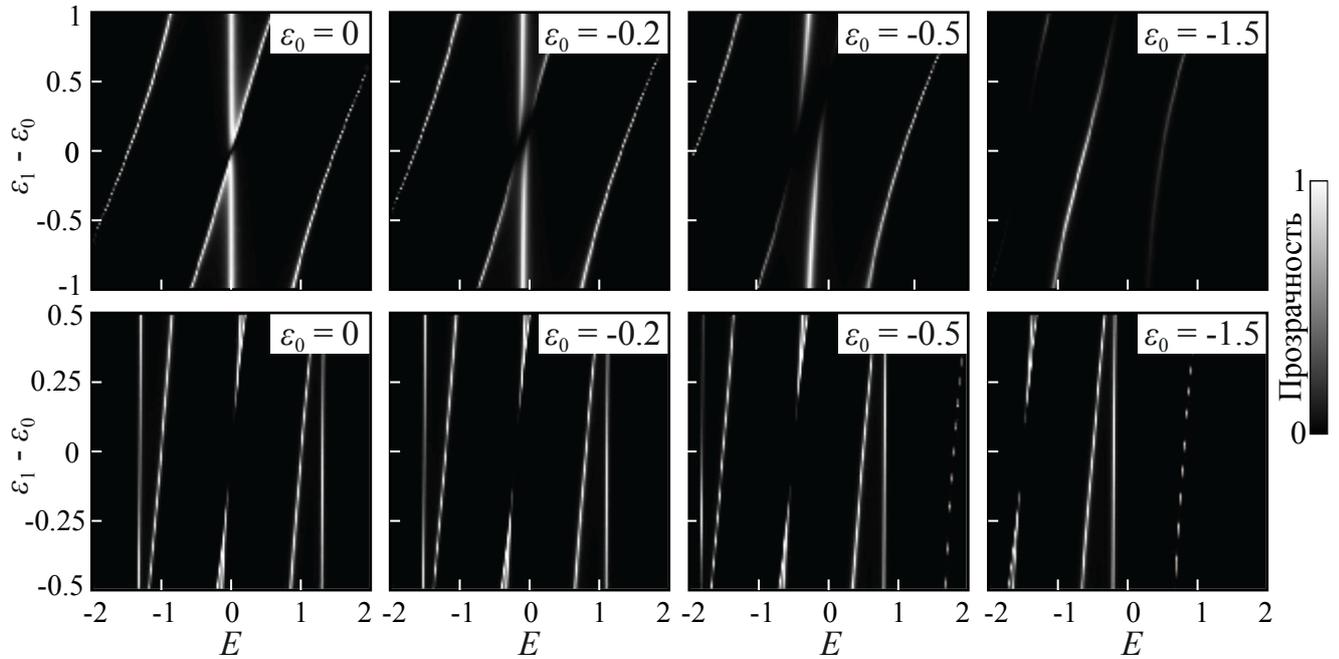


Рис. E.1. Эволюция спектра пропускания квантового интерференционного транзистора на основе молекулы триметиленметана (верхний ряд) и молекулы дивинилциклобутadiена (нижний ряд) при изменении узельных энергий ε_1 . Параметры выбраны следующим образом: $\tau_1=0.75$, $\tau=1$ и $J=0.2$ для триметиленметана и $\tau=1$ и $J=0.2$ для дивинилциклобутadiена.

E.2. Электростатическое влияние потенциала в токоведущих контактах

Рассмотрим электростатическое влияние потенциала в опорных контактах, на энергию электрона в узлах молекулы как пример неоднородности, которая нарушает зеркальную симметрию изначально симметричной системы. Предположим, что напряжение, приложенное к электродам, влияет только на энергию в узле, туннельно связанном с этим электродом. Так, для молекулы триметиленметана энергия состояния, локализованного на 1-ом атоме (см. Рис. 3.6б), будет $\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + \alpha_L V_L$ и энергия состояния, лока-

лизованного на 4-ом атоме: $\varepsilon_4 = \varepsilon_0 + \alpha_R V_R \neq \varepsilon_1$. Для дивинилциклобутана имеем (индекс соответствует номеру атома в схеме из Рис. 3.8б): $\varepsilon_7 = \varepsilon_0 + \alpha_L V_L$ и $\varepsilon_8 = \varepsilon_0 + \alpha_R V_R \neq \varepsilon_7$. На рис. Е.2 показаны графики тока в зависимости от энергии управляемых затвором атомных орбиталей (узлов) при различных значениях параметра $\alpha_L = \alpha_R = \alpha_c$ для квантовых ключей на основе несвязных и связанных дирадикалов.

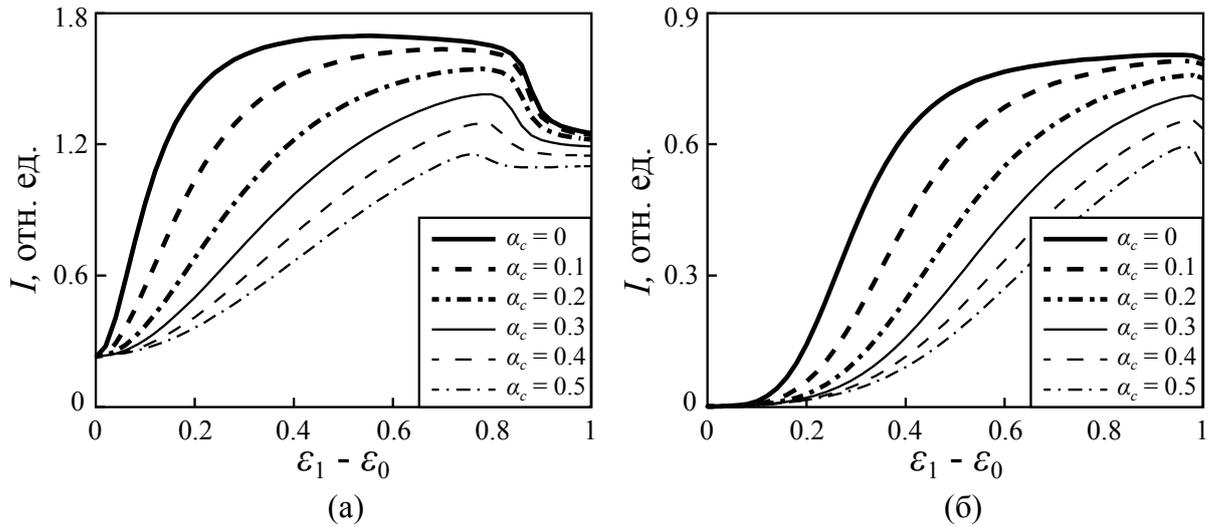


Рис. Е.2. Графики тока в зависимости от энергии управляемых затвором атомных орбиталей (узлов) при различных значениях параметра $\alpha_L = \alpha_R = \alpha_c$ для квантовых ключей на основе связанных (а) и несвязных (б) дирадикалов. Напряжение приложено симметричным образом: $eV_L = -eV_0/2$ и $eV_R = eV_0/2$, где $eV_0 = 1$. Электроды моделируются в виду полубесконечных цепочек с центром зоны, совпадающим с ε_0 . Уровень Ферми несмещенных контактов также совпадает с центром зоны и температура принята равной нулю. Параметры выбраны следующим образом: $\tau_1 = 0.75$, $\tau = 1$ и $J = 0.2$ для триметиленметана (а) и $\tau = 1$ и $J = 0.2$ для дивинилциклобутана (б). Все энергетические величины измеряются в единицах интеграла перескока в электродах.

Из рис. Е.2 видно, что электростатическое влияние токоведущих контактов уменьшает ток в открытом состоянии. Это легко понять, так как такое возмущение, нарушающее зеркальную симметрию системы, не позволяет ей достичь PT -симметричного режима с единичными максимумами коэффициента прохождения, что,

соответственно, приводит к уменьшению тока. Для реалистичных значений коэффициентов электростатического влияния токоведущих контактов (меньше, чем для управляющего затвора, для которого выбрано $\alpha = 0.5$) подобное уменьшение тока не существенно. Несвязные дирадикал показывает большую стабильность относительно неоднородности такого рода. Также следует отметить, что отношение I_{on}/I_{off} также существенно не ухудшается, особенно для несвязного дирадикала. Снижение тока для больших значений $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ объясняется уходом резонансов из области интегрирования, определяемой функциями заполнения при нулевой температуре.

Е.3. Сильная туннельная связь с электродами

При условии слабой туннельной связи с контактами ($\Gamma = 1$ мэВ), электрон-электронное отталкивание может привести к возникновению кулоновской блокады. Этот эффект препятствует протеканию тока для малых напряжений, что приводит к полному разрушению переключающих свойств квантовых транзисторов. Кулоновское отталкивание может быть точно описано в рамках *ab initio* моделирования с учетом контактных емкостей и многочастичных корреляций. Однако, совершенно точно можно сказать, что эффект блокады становится менее существенным при уменьшении контактного сопротивления, то есть при увеличении туннельной связи с берегами. Таким образом, можно увеличить Γ для уменьшения влияния межэлектронного отталкивания. С другой стороны, большие значения Γ увеличивают вклад удаленных по энергии резонансов (которые всегда присутствуют в реальных молекулах) в ток через систему. Поэтому оказывается необходимым увеличивать напряжение для сохранения переключающих свойств прибора. На рис. Е.3 показаны передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора, вычисленные в приближении широкой зоны для существенно большей связи с контактами $\Gamma = 0.1$ эВ и $\Gamma = 0.2$ эВ при повышенном напряжении питания: $V_0 = 0.2$ В. Видно, что несвязный дирадикал опять демонстрирует лучшие характеристики (с большим коэффициентом усиления).

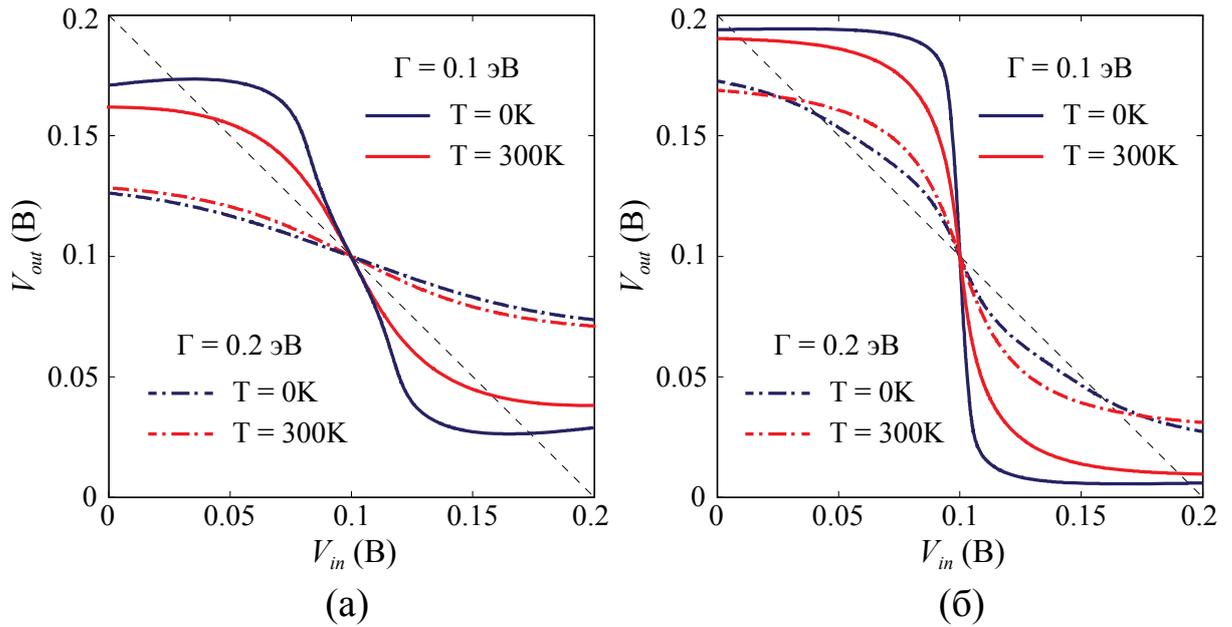


Рис. Е.3. Передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора на основе молекул триметиленметана (а) и дивинилциклобутана (б), рассчитанные для разной температуры и величины туннельной связи с берегами. Параметры структур такие же, как и при расчетах в основном тексте диссертации. Для сравнения приведена прямая с коэффициентом наклона -1 (черная пунктирная линия).