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»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»

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

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Ковалев Вадим Михайлович,
заведующий лабораторией теоретической физики Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

доктор физико-математических наук, профессор
Тиходеев Сергей Григорьевич,
профессор кафедры общей физики и физики конденсированного состояния физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Защита состоится 14 октября 2019 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 002.023.03 при Физическом институте им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 119991, ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФИАН (www.lebedev.ru).

Автореферат разослан «___»__________2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 002.023.03,
доктор физико-математических наук А. С. Золотько.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. В настоящее время прогресс в развитии науки и техники, опирающийся на широкое использование информационных технологий, в значительной степени определяется успехами в создании элементов электроники с нанометровыми размерами (наноэлектроники), физические процессы в которых имеют принципиально квантомеханическую природу. При этом практически любая наноструктура, используемая в наноэлектронике, представляет собой, по сути, открытую квантовую систему (ОКС), которая может обмениваться с окружением, как частицами, так и энергией. Поэтому вопросы теоретического описания квантовых систем с учетом их взаимодействия с окружающей средой относятся к числу важных и перспективных направлений исследований. Более того, задача моделирования ОКС выходит за пределы физики твердого тела и повсеместно встречается при построении моделей в молекулярной биологии и квантовой химии.

Важной особенностью наноразмерных структур, служит, прежде всего, наличие принципиально отличных от объемных материалов физических свойств и связанных с ними эффектов и явлений, существенно влияющих, а порой и 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 окружение, наличие которого может приводить к качественным изменениям ее свойств, поэтому крайне важно научиться понимать, описывать, а также использовать эти эффекты для разработки принципиально новых приборов и элементов наноэлектроники.

Нетривиальные свойства ОКС поддаются теоретическому описанию, в том числе с привлечением неэрмитовых операторов [1], что существенно расширяет класс рассматриваемых явлений и различных особенностей в их свойствах. Специальный класс ОКС образуют PT-симметричные (здесь P обозначает операцию пространственной инверсии, а T – операцию обращения времени) квантовые системы, неэрмитов гамильтониан которых может обладать действительными собственными значениями [2]. В качестве принципиального отличия неэрмитовых операторов от эрмитовых следует выделить наличие у них особых точек (ОТ) в пространстве параметров системы, в которых происходит слияние собственных значений и собственных векторов. Наиболее наглядно ОТ проявляются в PT-симметричных неэрмитовых операторах, где они 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 квантовомеханической туннельной прозрачностью системы. При этом максимумы прозрачности связаны с резонансами, а минимумы с – антирезонансами квантовой системы. Таким образом, исследование резонансных свойств ОКС с учетом наличия ОТ представляется перспективной и актуальной задачей.

Цель диссертационной 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 вентилей, работающих на основе эффекта коллапса резонансов.
4. Исследование особенностей динамических свойств квантовой системы в окрестности точки коллапса резонансов.

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.

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 невырожденное 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 международной дорожной карте развития электроники (ITRS), одним из путей решения возникающих проблем служит поиск альтернативы современной элементной базы (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 наноэлектроники на основе молекулярных проводников. Также развитый 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.

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.

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 журналах, входящих в международные реферативные базы данных WoS и Scopus, а также 10 тезисов докладов на российских и международных конференциях.

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

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.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** отражена актуальность темы, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, приведены научная новизна, теоретическая и практическая значимость и представлены положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** проведен обзор литературы по теме диссертации. В **разделе 1.1** приводится определение и описание основных свойств открытых квантовых систем и явления резонансного рассеяния. Рассматривается феномен образования ассиметричного профиля сечения рассеяния – резонанса Фано и появление связанных состояний в непрерывном спектре. В **разделе 1.2** приводятся примеры описания открытых квантовых и оптических систем с применением неэрмитовых гамильтонианов, с особыми точками в спектре. Рассматриваются также примеры качественных изменений системы в особой точке. **Раздел 1.3** посвящен перспективным направлениям использования свойств особых точек в открытых квантовых системах.

Вторая глава посвящена построению нового метода описания 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.

В **разделе 2.1** проводится подробное описание расчета транспортных свойств квантового проводника (туннельного коэффициента прохождения) методами функций Грина. Даже без учета процессов неупругого рассеяния туннельная прозрачность имеет сложную энергетическую зависимость в силу интерференционной природы квантового транспорта. В данном разделе показано, что, тем не менее, для произвольной эрмитовой системы туннельный коэффициент прохождения может быть записан в виде, позволяющем точно определять энергии, соответствующие его максимальным и минимальным значениям.

В **подразделе 2.1.1** рассматривается N уровневая квантовая система, подключенная к двум контактам, которые обозначены как левый (L) и правый (R). Гамильтониан всей системы с учетом контактов может быть записан как

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_L^{\text{int}} + \hat{H}_R^{\text{int}}, \tag{1}$$

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). Гамильтониан изолированной структуры может быть записан в виде:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{i,j=1;i<j}^{N} \left(\tau_{ij} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + h.c. \right). \tag{2}$$

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:

$$\hat{H}_{L(R)} = \sum_p \varepsilon_p^{L(R)} \hat{a}_{L(R),p}^\dagger \hat{a}_{L(R),p}, \tag{3}$$

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. Наконец гамильтониан туннельного взаимодействия структуры с берегами в выбранных базисах имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{L(R)}^{\text{int}} = \sum_{i=1}^{N} \sum_p \left(\gamma_{p,i}^{L(R)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{L(R),p} + h.c. \right). \tag{4}$$

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

Согласно стандартным методам вычисления стационарного тока в системе, можно получить следующее выражение:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) \cdot \left[f_L(E) - f_R(E) \right] dE, \tag{5}$$

где $f_{L(R)}(E)$ – функция распределения Ферми-Дирака в левом (правом) электроде и $T(E)$ – коэффициент прохождения (туннельная прозрачность) квантовой системы:

$$T(E) = 4\,\text{Tr}\left[\mathbf{\Gamma}^L(E) \mathbf{G}^r(E) \mathbf{\Gamma}^R(E) \mathbf{G}^a(E) \right]. \tag{6}$$

Опережающая функция Грина (ФГ) легко соотносится с запаздывающей: $\mathbf{G}^a = \left(\mathbf{G}^r\right)^\dagger$, которую, в свою очередь, нетрудно вычислить:

$$\mathbf{G}^r(E) = \left[E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff}(E) \right]^{-1}, \tag{7}$$

где $\mathbf{I}$ – единичная матрица размера $N \times N$ и $\mathbf{H}_{eff}$ – эффективный гамильтониан Фешбаха [3], записанный в узельном представлении в матричной форме:

$$\mathbf{H}_{eff}\left(E\right)=\mathbf{H}_0+\boldsymbol{\delta}^L\left(E\right)+\boldsymbol{\delta}^R\left(E\right)-i\boldsymbol{\Gamma}^L\left(E\right)-i\boldsymbol{\Gamma}^R\left(E\right). \tag{8}$$

Здесь $\boldsymbol{\delta}^{L(R)}$ и $\boldsymbol{\Gamma}^{L(R)}$ есть соответственно действительная и мнимая компоненты собственно-энергетической части контактов.

Величины $\boldsymbol{\Gamma}^{L(R)}$ могут быть записаны в факторизованном виде [4]:

$$\boldsymbol{\Gamma}^{L(R)}=\mathbf{u}_{L(R)}\mathbf{u}_{L(R)}^{\dagger}, \tag{9}$$

где

$$\mathbf{u}_{L(R)}^{\dagger}=\sqrt{\pi\rho_{L(R)}}\begin{pmatrix}\gamma_1^{L(R)} & \ldots & \gamma_N^{L(R)}\end{pmatrix}. \tag{10}$$

Для компактности последующих выкладок введем следующее обозначение:

$$\mathbf{A}=E\mathbf{I}-\mathbf{H}_0-\boldsymbol{\delta}^L-\boldsymbol{\delta}^R. \tag{11}$$

Матрица $\mathbf{A}$ эрмитова в силу эрмитовости гамильтониана $\mathbf{H}_0$ и величин $\boldsymbol{\delta}^{L(R)}$. Этот факт служит необходимым условием справедливости всех следующих выкладок в данной главе. Используя факторизацию (9) и выражение для запаздывающей ФГ (7), можно переписать соотношение (6) в виде:

$$T=\frac{4\left|\det\mathbf{A}\right|^2\left|\mathbf{u}_R^{\dagger}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}_L\right|^2}{\left|\det\left(\mathbf{A}+i\mathbf{u}_L\mathbf{u}_L^{\dagger}+i\mathbf{u}_R\mathbf{u}_R^{\dagger}\right)\right|^2}. \tag{12}$$

Нетрудно, видеть, что в знаменателе формулы (12) стоит характеристический определитель эффективного гамильтониана системы. Числитель этого выражения можно представить как квадрат модуля некоторой, в общем случае, зависящей от энергии величины:

$$P=2\mathbf{u}_R^{\dagger}\,\mathrm{adj}\left(\mathbf{A}\right)\mathbf{u}_L, \tag{13}$$

которая определена с точностью до фазового множителя. Здесь $\mathrm{adj}\left(\mathbf{A}\right)$ – присоединенная матрица матрицы $\mathbf{A}$. Выделяя в знаменателе (12) слагаемое $4\left|\det\mathbf{A}\right|^2\left|\mathbf{u}_R^{\dagger}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}_L\right|^2=\left|P\right|^2$, можно получить, что

$$\left|\det\left(\mathbf{A}+i\mathbf{u}_L\mathbf{u}_L^{\dagger}+i\mathbf{u}_R\mathbf{u}_R^{\dagger}\right)\right|^2=\left|P\right|^2+\left|Q\right|^2, \tag{14}$$

где

$$Q=\det\left(\mathbf{A}-i\mathbf{u}_L\mathbf{u}_L^{\dagger}+i\mathbf{u}_R\mathbf{u}_R^{\dagger}\right). \tag{15}$$

Таким образом, туннельная прозрачность произвольной двухтерминальной квантовой системы может быть записана в виде

$$T=\frac{\left|P\right|^2}{\left|P\right|^2+\left|Q\right|^2}, \tag{16}$$

где Q представляет собой характеристический определитель вспомогательного гамильтониана $\mathbf{H}_{aux}$:

$$\mathbf{H}_{aux}=\mathbf{H}_0+\boldsymbol{\delta}^L+\boldsymbol{\delta}^R+i\boldsymbol{\Gamma}^L-i\boldsymbol{\Gamma}^R. \tag{17}$$

Форма записи (16) для коэффициента прохождения позволяет определять точное положение единичных резонансов и нулевых антирезонансов как действительные корни функций Q и P соответственно. Для линейной квантовой системы различие между эффективным гамильтонианом и вспомогательным можно наглядно представить в виде различных граничных условий (см. Рис. 1).

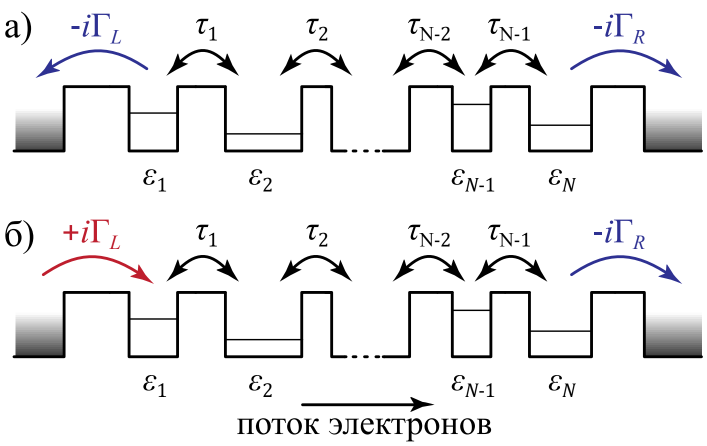


Рис. 1 Общий вид произвольной линейной структуры на примере резонансно-туннельной гетероструктуры. Наглядное изображение граничных условий для эффективного (а) и вспомогательного (б) гамильтониана.

В **подразделе 2.1.2** рассмотрен случай линейной системы. Для симметричной системы 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, то есть вспомогательный гамильтониан становится PT-симметричным. PT-симметричные операторы обладают действительными собственными значениями, которые могут попарно сливаться, переходя в пары комплексно-сопряженных, при непрерывном изменении одного или нескольких параметров системы. Это называется спонтанным нарушением PT-симметрии и происходит в особой точке (ОТ) оператора. Поскольку собственные значения вспомогательного гамильтониана есть нули функции Q, то они соответствуют точным положениям единичных максимумов туннельной прозрачности, и феномен спонтанного нарушения PT-симметрии вспомогательного гамильтониана в точности соответствует явлению слияния (коллапса) резонансов.

Подраздел 2.1.3. посвящен обобщению формализма на случай произвольной двухконтактной системы. Особенностью таких сложных, в общем случае – многосвязных, систем служит тот факт, что в них может наблюдаться коллапс антирезонансов. В разделе в качестве примера, в частности, рассмотрена структура, состоящая из двух одинаковых линейных цепочек по N узлов в каждой, которые взаимодействуют друг с другом только через туннельные матричные элементы τ между крайними узлами (см. Рис. 2 а). 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 [5].

Если рассматриваемые цепочки симметричны ($\tau_i = \tau_{N-i}$) и имеют одинаковые энергии локализованных состояний на узлах ($\varepsilon_i = \varepsilon_0$ для всех i), то выражение для функции P этой системы будет:

$$P = 2\sqrt{\Gamma_L \Gamma_R}\tau_1 \cdot \ldots \cdot \tau_{N-1} \det\left(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_{zero}\right), \tag{18}$$

где $\mathbf{H}_{zero}$ – *PT*-симметричный гамильтониан. 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 $\mathbf{H}_{zero}$. В самой точке коллапса антирезонансов, выражение для прозрачности будет иметь вид:

$$T(E) = \frac{\left(E - \varepsilon_0\right)^{2N}}{\left(E - \varepsilon_0\right)^{2N} + \tilde{\Gamma}^{2N}}. \tag{19}$$

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

Для иллюстрации в разделе приведены примеры расчета для структур, состоящих из двух цепочек по $N = 2$ и $N = 3$ узла в каждой. Берега в обоих случаях считаются полубесконечными цепочками с межузельным интегралом перескока J, который принят за единицу энергии. На Рис. 2 б 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 в 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 $\varepsilon_0 = 0$. Для рассмотренных примеров нетрудно получить условия коллапса резонансов: $|\tau| = 1$ для двухузельных цепочек (Рис. 2 б) и $|\tau| = \sqrt{2}$ для трехузельных (Рис. 2 в). На Рис. 2 г изображены спектры пропускания структуры из двух трехузельных цепочек для значений $|\tau|$, соответствующих слиянию антирезонансов ($|\tau| = \sqrt{2}$), коллапсу двух пар резонансов ($|\tau| = 1$) и 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 в).

В **разделе 2.2** исследуется распределение электронной плотности в резонансных максимумах и влияние на него эффекта коллапса резонансов. Поскольку, коллапс резонансов – это парный процесс, то при слиянии четного числа резонансов, полученный резонанс будет по амплитуде меньше единицы. Если же число сливающихся резонансов нечетное, то один резонанс останется без пары, что приведет к сохранению прозрачности в резонансе на уровне единицы. Более того, в **подразделе 2.2.1** показано в общем виде, что при коллапсе четного числа резонансов происходит спонтанное нарушение симметрии распределения электронной плотности в исходно симметричной структуре. При слиянии же нечетного числа резонансов симметрия распределения электронной плотности не нарушается. В самой ОТ вспомогательного гамильтониана, где происходит N-кратное вырождение его действительного собственного значения коэффициент прохождения, принимает существенно не Брейт-Вигнеровский вид:

$$T_{\text{N Res. Coal.}}(E) = \frac{\tilde{\Gamma}^{2N}}{(E-\varepsilon_0)^{2N} + \tilde{\Gamma}^{2N}}, \tag{20}$$

где $\tilde{\Gamma}$ – эффективная ширина полученного резонанса.

В **подразделе 2.2.2** рассмотрен пример расчета туннельной прозрачности и распределения электронной плотности в $N=2$ и $N=3$ ямных гетероструктурах. На Рис. 3 показаны положения максимумов прозрачности при изменении ширины центрального барьера по отношению к ширинам крайних (l/w), а также профили распределения электронной волновой функции. Высота барьеров $V=0.3$ эВ, эффективная масса $m^*=0.067m_0$, толщины крайних барьеров $w=2$ нм и ширины ям $a=3.0485$ нм (обеспечивает положение уровней квазилокализованных состояний на половине высоты барьера). При слиянии резонансов симметрия не нарушается и прозрачность имеет единичную величину для нечетного $N=3$ (Рис. 3 б), в то время как для четного $N=2$ (Рис. 3 а) максимум пропускания имеет величину меньше единицы и симметрия волновой функции нарушена.

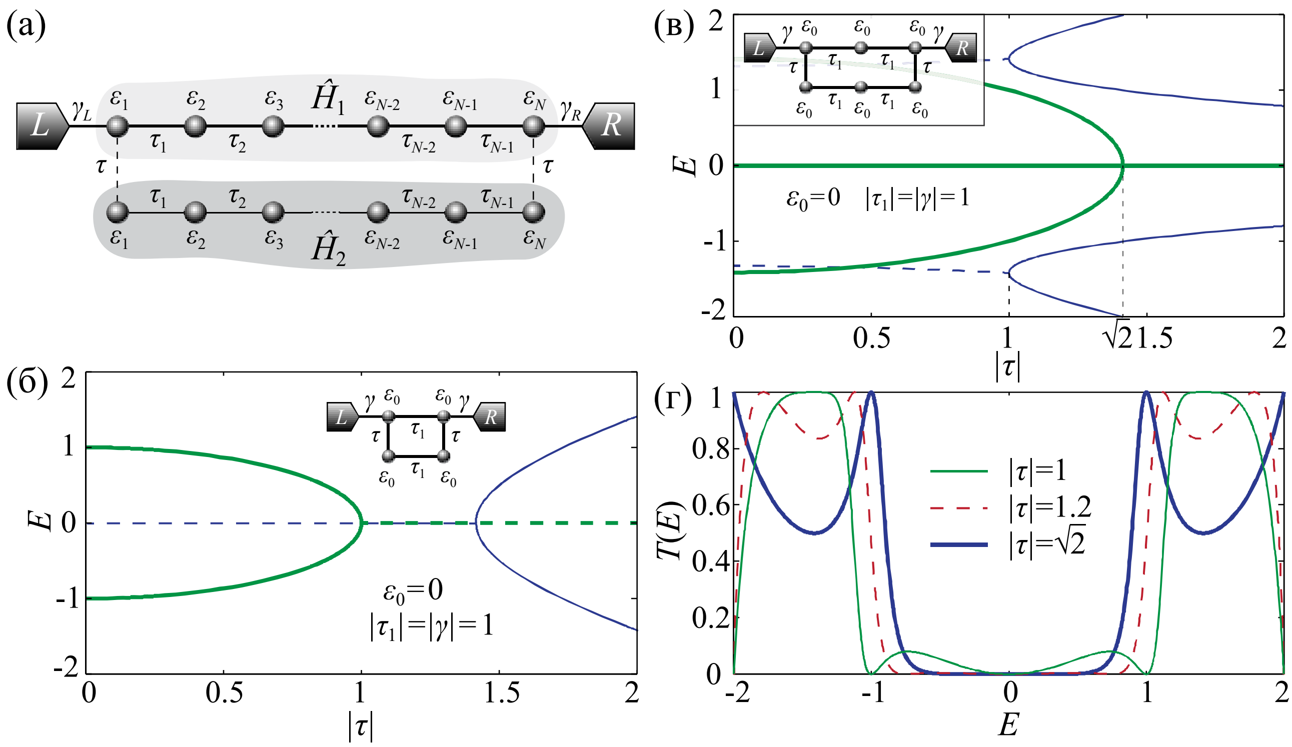


Рис. 2 Слияние антирезонансов. Общий вид структуры (а). Положение действительных нулей функции P (жирная зеленая линия) и функции Q (тонкая синяя линия) для структур, состоящих из двух (б) и трех (в) узлов (показаны на вставках). Сплошные линии соответствуют действительным корням, а пунктирные – действительным частям комплексных корней. Прозрачность в режиме слияния антирезонансов (жирная синяя линия), коллапса резонансов (тонкая зеленая линия) и в промежуточном положении (красная пунктирная линия). Все энергетические величины измерены в единицах J.

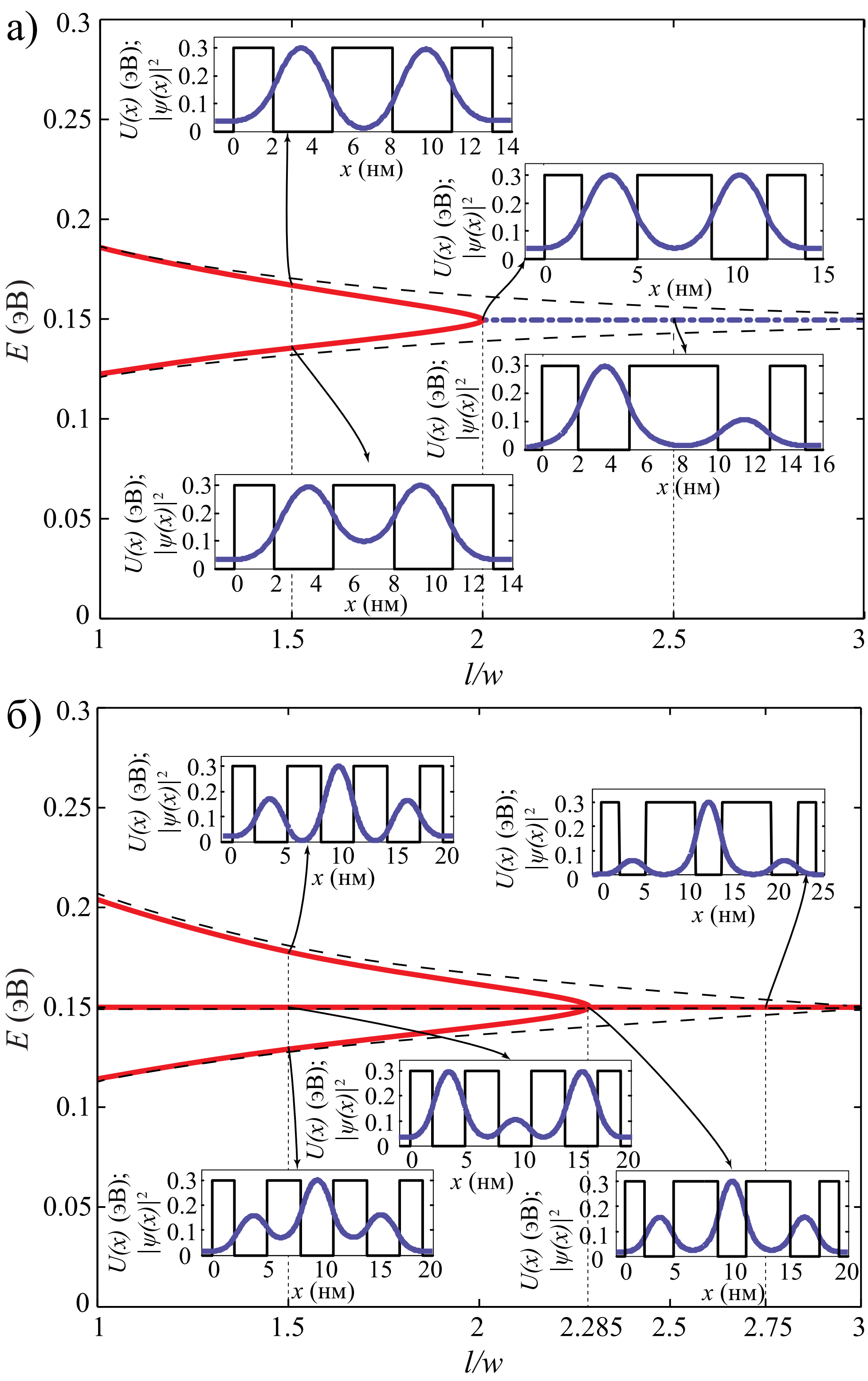


Рис. 3 Положения максимумов пропускания и действительных частей матрицы рассеяния при изменении соотношения между ширинами центрального и крайних барьеров l/w для $N=2$ (а) и $N=3$ (б) ямных структур. Сплошные линии – единичные резонансы, штрих-пунктирные – неединичные и пунктирные – действительные части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

В **разделе 2.3** показано (**подраздел 2.3.1**), что, используя общее соотношение (16), оказывается возможным описать в едином формализме не только резонансы и антирезонансы, но и связанные состояния в непрерывном спектре (ССНС), которые представляют собой полностью локализованные состояния с энергиями, лежащими в области непрерывного спектра [6]. Частицы не покидают такие состояния, то есть имеют на них бесконечное время жизни. Следовательно, такие состояния соответствуют действительным собственным значениям эффективного гамильтониана, лежащим в области непрерывного спектра электродов. Пусть эффективный гамильтониан системы имеет действительное собственное значение E_0, то есть

$$\det\left(E\mathbf{I}-\mathbf{H}_{eff}\right)\propto\left(E-E_0\right). \tag{21}$$

В соответствии с общим соотношением (16), получаем:

$$\left|P(E)\right|^2+\left|Q(E)\right|^2=\left|\det\left(E\mathbf{I}-\mathbf{H}_{eff}\right)\right|^2\propto\left(E-E_0\right)^2. \tag{22}$$

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

$$P(E),Q(E)\propto\left(E-E_0\right). \tag{23}$$

Отсюда можно сделать вывод, что в системе присутствует ССНС тогда и только тогда, когда функции P и Q имеют общий действительный корень. Таким образом, можно сформулировать следующую классификацию:

- 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 $\min\left(m_Q,m_P\right)$ 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, 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. В **подразделе 2.3.2** приведены примеры формирования ССНС в модельных структурах (toy models), иллюстрирующие различные ситуации, приведенные выше.

В **разделе 2.4** приводится обобщение развитого формализма на случай квантовой системы, подключенной к нескольким электродам. При этом вероятность туннелирования из α-го контакта в β-ый оказывается равной

$$T_{\alpha\beta} = \frac{\left|P_0^{\alpha\beta}\right|^2}{\left|P_0^{\alpha\beta}\right|^2 + \left|Q^{\alpha\beta}\right|^2 + P_1^{\alpha\beta}}. \quad (24)$$

Принципиальное отличие этого выражения от случая двухконтактной системы состоит в наличии неотрицательного слагаемого $P_1^{\alpha\beta}$ в знаменателе, которое возникает в силу ухода частиц в другие электроды и приводит к снижению коэффициентов туннелирования.

Третья глава посвящена исследованию возможности управления транспортными свойствами квантовых проводников за счет изменения тех или иных параметров системы. Стационарный когерентный ток через двухконтактный квантовый проводник определяется наличием и величиной резонансных максимумов прозрачности $T(E)$ в области энергий, где разность $f_L(E) - f_R(E)$ существенно отлична от нуля. Следовательно, управлять током можно за счет сдвига резонансов из этой области (см. Рис. 4 а). Именно такой способ управления проводимостью квантовой системы в основном и используется в существующих прототипах и моделях молекулярных транзисторов [7]. Однако существует и другой подход – управлять величиной резонансов $T(E)$ за счет интерференционных эффектов [8] (см. Рис. 4 б). В **разделе 3.1** рассматриваются различные варианты управления током через квантовую систему, основанные как на сдвиге (по энергии) резонансных особенностей туннельной прозрачности – **подраздел 3.1.1**, так и на основе эффектов квантовой интерференции (конструктивной и деструктивной) – **подраздел 3.1.2**. Эффективность переключения за счет сдвига резонансов можно наглядно оценить, например, крутизной в логарифмическом масштабе $S^{-1} = \left|\partial I/\partial V_g\right| \cdot I^{-1}$, которая оказывается заведомо ограниченной: $S^{-1} < e/kT \cdot 1/e \cdot \left|\partial E_0/\partial V_g\right|$ и в идеальном случае не превышает стандартный предел подпорогового размаха полевого транзистора. Управление током за счет сдвига антирезонансов оказывается еще менее эффективным. В то же время, при переключении тока за счет интерференционного изменения высоты резонанса, логарифмическая крутизна оказывается обратно пропорциональной высоте резонанса и может быть сделана сколь угодно большой.

В **разделе 3.2** обсуждаются особенности туннелирования через квантовые системы с вырожденными уровнями и возможность интерференционного управления током в такой системе. В **подразделе 3.2.1** рассмотрена модель квантовой системы с вырожденными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$, с энергией ε. Пусть эта система подключена к двум одинаковым контактам симметричным образом так, что операция отражения σ_{LR}, отображающая контакты друг в друга, будет также и операцией симметрии самой системы. Выберем в качестве базиса в $\mathcal{H}_{12} = \mathrm{span}(|1\rangle, |2\rangle)$ 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 сохранят свою симметрию при наличии снимающего вырождение возмущения, инвариантного относительно σ_{LR}. Туннельные матричные элементы взаимодействия симметричного состояния $|s\rangle$ с левым и правым контактом будут одинаковы, а для антисимметричного состояния $|a\rangle$ будут иметь разный знак, но одинаковую абсолютную величину (Рис. 5), то есть их можно записать в виде:

$$\mathbf{u}_L = \sqrt{\Gamma}\begin{pmatrix}\gamma_s \\ \gamma_a\end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_R = \sqrt{\Gamma}\begin{pmatrix}\gamma_s \\ -\gamma_a\end{pmatrix}. \tag{25}$$

Здесь Γ определяет величину туннельной связи с контактами, а безразмерные параметры $0 \le \gamma_{s,a} \le 1$ описывают относительную величину связи с контактами симметричного и антисимметричного состояний.

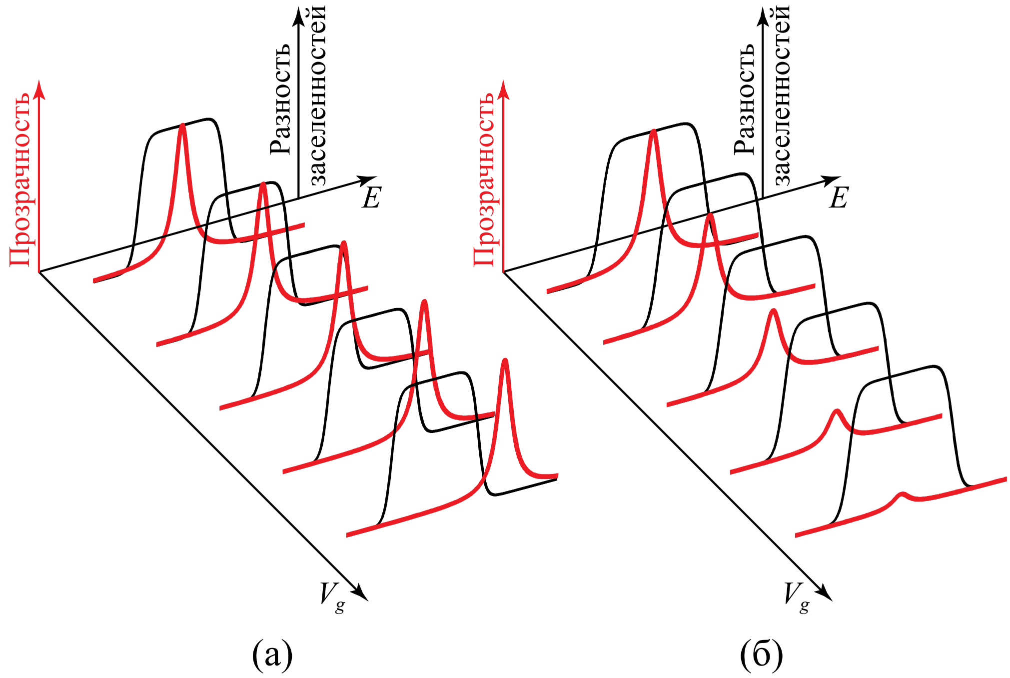


Рис. 4 Схематичная иллюстрация двух способов управления током: сдвиг резонансов (а) и изменение их высоты (б). Черной линией показана разность функций заполнения в контактах, а красной – коэффициент прохождения.

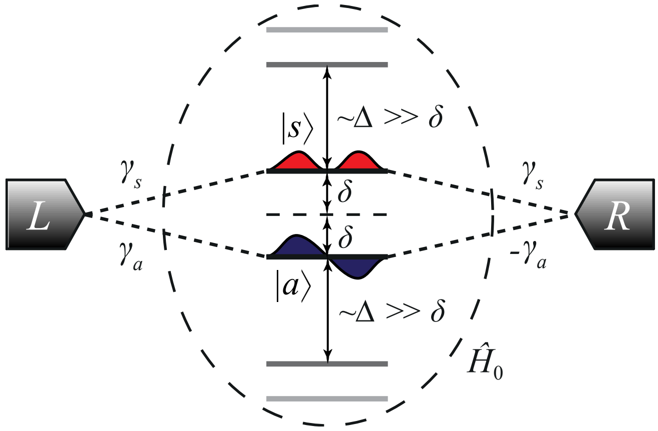


Рис. 5 Схема микроскопической модели квантовой системы с вырожденными симметричным $|s\rangle$ и антисимметричным $|a\rangle$ состояниями, взаимодействующими туннельным образом с контактами.

В **подразделе 3.2.2** исследуется коэффициент прохождения такой системы при управляемом снятии вырождения. Предположим, что воздействие потенциала затвора вносит возмущение в квантовую систему, снимающее вырождение, но не нарушающее зеркальную симметрию системы. Такое возмущение приводит к расстройке энергий симметричного и антисимметричного состояний: $\varepsilon_{s,a}(\delta)=\varepsilon+k_{s,a}\delta$, где δ характеризует величину расстройки, а безразмерные $-1\le k_{s,a}\le 1$ показывают восприимчивость к возмущению. Опустим влияние затвора на Γ и $\gamma_{s,a}$, так как учет этого не повлияет на качественную картину явления, а также вкладом от других состояний квантовой системы, удаленных по шкале энергии на величину порядка $\Delta\gg\delta$ от исследуемой пары вырожденных уровней (Рис. 5) и рассчитаем коэффициент прохождения в виде (16) с

$$\begin{aligned} P(E) &= 2\Gamma\left[\left(k_a\gamma_s^2-k_s\gamma_a^2\right)\delta-\left(\gamma_s^2-\gamma_a^2\right)(E-\varepsilon)\right], \\ Q(E) &= \left[E-\varepsilon-\frac{1}{2}\delta\left(k_a+k_s\right)\right]^2+4\gamma_s^2\gamma_a^2\Gamma^2-\delta^2\frac{\left(k_a-k_s\right)^2}{4}. \end{aligned} \tag{26}$$

Отсюда следует, что для достаточно большой величины δ прозрачность имеет два единичных максимума (два действительных корня Q) при энергиях $E=\varepsilon+\frac{1}{2}\delta\left(k_s+k_a\right)\pm\sqrt{\frac{1}{4}\delta^2\left(k_s-k_a\right)^2-4\gamma_s^2\gamma_a^2\Gamma^2}$. Уменьшение δ приводит к коллапсу резонансов при $\delta=4\gamma_s\gamma_a\Gamma\left|k_a-k_s\right|^{-1}$ и последующему уменьшению амплитуды резонансного пика прозрачности. Кроме того, здесь присутствует и антирезонанс (действительный корень P) при энергии $E=\varepsilon+\delta\left(k_a\gamma_s^2-k_s\gamma_a^2\right)/\left(\gamma_s^2-\gamma_a^2\right)$, дополнительно способствующий снижению прозрачности при уменьшении δ . Наименьший коэффициент прохождения соответствует вырожденному случаю $\delta=0$. При этом он будет иметь антирезонанс при $E=\varepsilon$ и два максимума при $E=\varepsilon\pm2\gamma_s\gamma_a\Gamma$, высота которых будет определяться соотношением между γ_s и γ_a :

$$T_{peak}=\left(\frac{\gamma_s^2-\gamma_a^2}{\gamma_s^2+\gamma_a^2}\right)^2. \tag{27}$$

Из (27) видно, что при $\gamma_s/\gamma_a\to1$ система становится полностью непрозрачной в вырожденном случае. На практике, конечно же, это невозможно в силу наличия вклада в туннельную прозрачность от других энергетических уровней квантовой системы. Логарифмическая крутизна такой модели квантового интерференционного транзистора теоретически неограничена в пределе $\gamma_s/\gamma_a\to1$. Рис. 6 иллюстрирует эволюцию коэффициента прохождения при изменении δ . Описанное явление может служить основой работы квантового интерференционного транзистора, чьи основные характеристики оценены в **подразделе 3.2.3**.

В **подразделе 3.2.4** рассмотрены примеры реальных квантовых систем (молекул), которые потенциально могут выступать основой для реализации описанной модели транзистора. К таким молекулам, например, можно отнести органические соединения с дважды вырожденными молекулярными орбиталями – дирадикалы. Они могут быть проклассифицированы на два типа: несвязные (disjoint) и связные (non-disjoint) в зависимости от того имеют ли их вырожденные орбитали общие атомы. Несвязные дирадикалы кажутся более подходящими для создания квантового интерференционного транзистора, так как подключение контактов к атомам, входящим в разные орбитали ведет к тому, что симметричная и антисимметричная комбинация этих орбиталей будет взаимодействовать с контактами одинаково, то есть γ_s и γ_a будут одинаковы. Как было показано выше, это приводит к существенному улучшению характеристик прибора в силу полного (без учета других орбиталей) отсутствия тока в закрытом состоянии. В качестве примеров связного и несвязного дирадикалов в работе рассмотрены молекулы триметиленметана и дивинилциклобутадиена соответственно (Рис. 7).

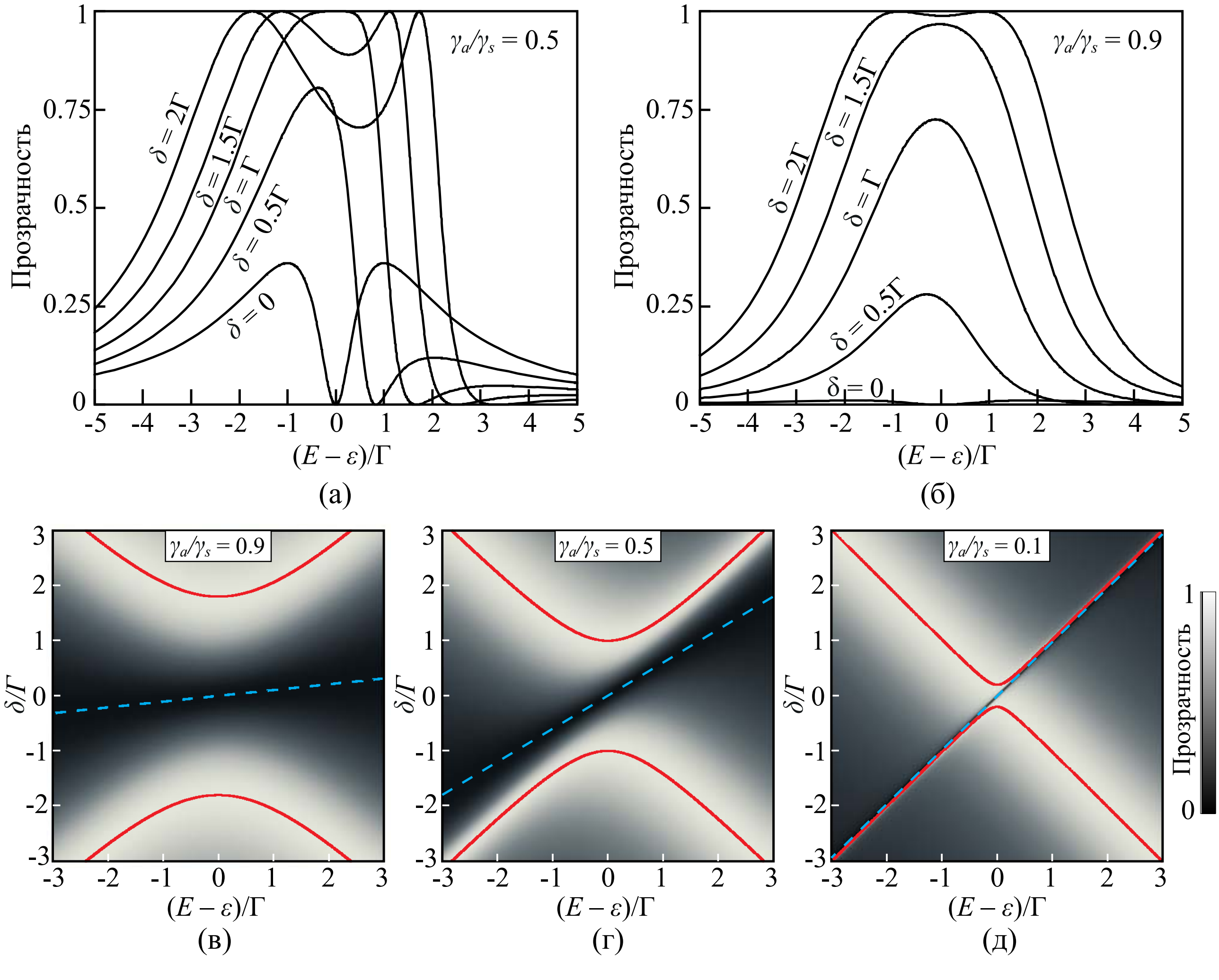
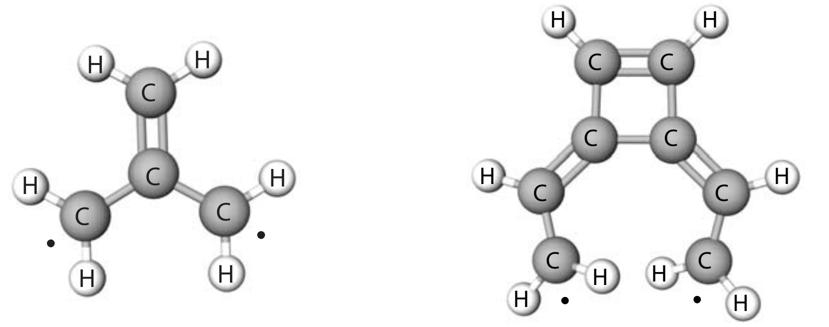


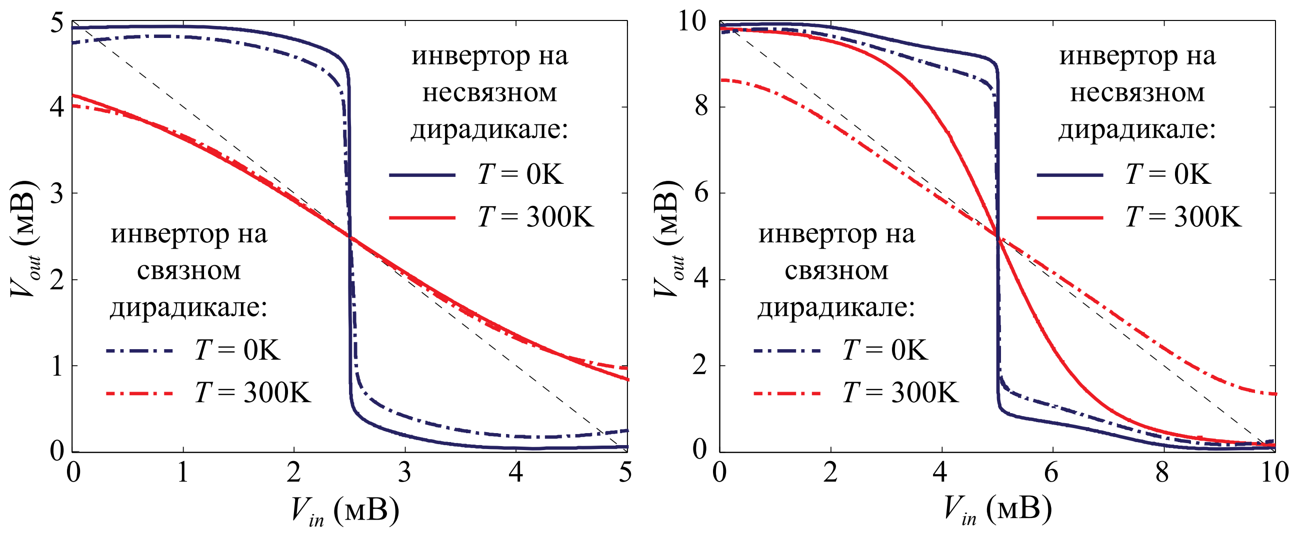
Рис. 6 Эволюция спектра коэффициента прохождения при изменении δ ($\gamma_s = 1$ и $k_s = -k_a = 1$). Профили прозрачности для некоторых значений параметра δ и $\gamma_a = 0.5$ (а) и $\gamma_a = 0.9$ (б). Графики, демонстрирующие непрерывное изменение коэффициента прохождения для $\gamma_a = 0.9$ (в), $\gamma_a = 0.5$ (г) и $\gamma_a = 0.1$ (д). Красные сплошные линии показывают положение единичных резонансов и пунктирные голубые – положение нулей прозрачности.



(а) (б)

Рис. 7 Структурная модель дирадикальной конфигурации молекулы триметиленметана (а) и дивинилциклобутадиена (б).

На основе предложенной модели квантового интерференционного транзистора может быть построен простейший логический вентиль – инвертор, свойства которого рассматриваются в **разделе 3.3**. В **подразделе 3.3.1** показано, что ключевой особенностью такого прибора служит возможность работы при крайне низком напряжении питания даже при комнатной температуре. Минимальное необходимое напряжение питания, обеспечивающее коэффициент усиления инвертора равный единице, оказывается $V_0^{crit} \sim |\gamma_a - \gamma_s|$ при $\gamma_s/\gamma_a \sim 1$ и, соответственно, в пределе $\gamma_s/\gamma_a \to 1$ стремится к нулю. В **подразделе 3.3.2** в рамках приближения Хюккеля посчитаны передаточные характеристики инверторов на основе связного и несвязного дирадикалов (Рис. 8). Для конкретных выбранных значений параметров (интегралы перескока типичные для углеродных соединений [9]) инвертор на основе дивинилциклобутадиена будет корректно функционировать при комнатной температуре при напряжении питания $V_0 = 10$ мВ.



(а) (б)

Рис. 8 Передаточные характеристики квантового интерференционного инвертора на основе связных 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).

Раздел 3.4 посвящен обсуждению ограничений характеристик приборов с учетом особенностей реальных систем. Так, в реальных молекулярных структурах существенным ограничением снижения напряжения питания могут быть шумы, обсуждаемые в **подразделе 3.4.1**, и необходимость улучшения туннельной связи с контактами для подавления кулоновских корреляционных эффектов (например, кулоновской блокады), которая приводит к уширению резонансов и снижению контрастности переключения тока, обсуждаемая в **подразделе 3.4.2**.

Четвертая 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.

В **разделе 4.1** в формализме неравновесных функций Грина рассмотрены общие свойства высокочастотного линейного отклика тока через квантовый проводник. В частности, показано, что переменный сигнал, приложенный к электродам, приводит к двум различным типам возмущений. Первый происходит из-за периодического изменения энергий частиц в электродах, а второй – в силу влияния электрического поля, создаваемого электродами с переменным потенциалом, на саму квантовую систему. Каждое возмущение приводит к возникновению токов как непосредственно между квантовой системой и электродами, так и внутри квантовой системы (токи поляризации). 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). 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 возмущением в электродах.
4. Ток носителей во внешней цепи, наведенный током внутри квантовой системы, который был создан влиянием поля в электродах на 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 гетероструктур. Остальные вклады, в основном, учитываются лишь в точных численных расчетах или в рамках различных приближений. В настоящей работе основное внимание уделено первому типу вклада в линейный отклик.

Первый типа вклада в линейный отклик тока (согласно приведенной выше классификации) можно записать в приближении широкой зоны в следующе виде:

$$i_\alpha(\omega)=\sum_{\beta=1}^{M}G_{\alpha\beta}(\omega)v_\beta\,, \tag{28}$$

где $\alpha,\beta\in\{1,\ldots,M\}$ – номера электродов и $G_{\alpha\beta}$ – тензор проводимости:

$$G_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{e^2}{h}\int dE\,\frac{f_\beta(E)-f_\beta(E+\hbar\omega)}{\hbar\omega}\times T_{\alpha\beta}(E,\omega) \tag{29}$$

с

$$T_{\alpha\beta}(E,\omega)=4\,\mathrm{Tr}\Big[\mathbf{G}_0^r(E+\hbar\omega)\boldsymbol{\Gamma}_{\beta,0}\mathbf{G}_0^a(E)\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha,0}\Big]-2i\delta_{\alpha\beta}\,\mathrm{Tr}\Big[\big(\mathbf{G}_0^r(E+\hbar\omega)-\mathbf{G}_0^a(E)\big)\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha,0}\Big]. \tag{30}$$

Нетрудно убедиться, что величина $T_{\alpha\beta}(E,\omega)$ при $\alpha\neq\beta$ переходит в пределе нулевой частоты в статический коэффициент прохождения и выражение (29) превращается в стандартную формулу Бюттикера и поэтому может трактоваться как обобщенный коэффициент прохождения для конечной частоты.

В **разделе 4.2** рассмотрены два предельных случая общих соотношений: симметричная система с двумя контактами (**подраздел 4.2.1**) и произвольная система с одним контактом – обрыв цепи (**подраздел 4.2.2**). В случае симметричной квантовой системы, подключенной симметричным образом к двум электродам, 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:

$$\mathbf{H}_0=\mathrm{diag}\left(\varepsilon_1^s,\ldots,\varepsilon_{n_s}^s,\varepsilon_1^a,\ldots,\varepsilon_{n_a}^s\right), \tag{31}$$

где $\varepsilon_i^{(a)s}$ – энергия i-го (анти)симметричного состояния и $n_{(a)s}$ – их количество. Вектора $\mathbf{u}_L$ и $\mathbf{u}_R$ в этом базисе имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_L&=\sqrt{\pi\rho}\left(\gamma_1^s,\ldots,\gamma_{n_s}^s,\gamma_1^a,\ldots,\gamma_{n_a}^a\right)^\top,\\ \mathbf{u}_R&=\sqrt{\pi\rho}\left(\gamma_1^s,\ldots,\gamma_{n_s}^s,-\gamma_1^a,\ldots,-\gamma_{n_a}^a\right)^\top.\end{aligned} \tag{32}$$

Здесь ρ – плотность состояний в контактах, которая в приближении широкой зоны считается постоянной. Соотношения (32) учитывают тот факт, что симметричные состояния связаны с левым и правым контактами матричными элементами одного знака, а антисимметричные – разного знака.

Коэффициент между усредненным током $i(\omega)=1/2\big[i_L(\omega)-i_R(\omega)\big]$ и амплитудой приложенной переменной разности потенциалов имеет смысл проводимости и может быть записан в виде (29) со следующей действительной и мнимой частью обобщенного коэффициента прохождения:

$$\begin{aligned}T_{\mathrm{Re}}^{symm}(E,\omega)=\frac{1}{2}\Bigg(&\frac{4\big[F_a(E+\hbar\omega)-F_s(E)\big]^2}{4\big[F_a(E+\hbar\omega)-F_s(E)\big]^2+\big[1+4F_s(E)F_a(E+\hbar\omega)\big]^2}+\\ &+\frac{4\big[F_s(E+\hbar\omega)-F_a(E)\big]^2}{4\big[F_s(E+\hbar\omega)-F_a(E)\big]^2+\big[1+4F_a(E)F_s(E+\hbar\omega)\big]^2}\Bigg),\end{aligned} \tag{33}$$

$$T_{\mathrm{Im}}^{symm}(E,\omega)=\frac{\left[F_a(E+\hbar\omega)-F_s(E)\right]\times\left[1+4F_s(E)F_a(E+\hbar\omega)\right]}{\left[1+4F_s^2(E)\right]\times\left[1+4F_a^2(E+\hbar\omega)\right]}+$$
$$+\frac{\left[F_s(E+\hbar\omega)-F_a(E)\right]\times\left[1+4F_a(E)F_s(E+\hbar\omega)\right]}{\left[1+4F_a^2(E)\right]\times\left[1+4F_s^2(E+\hbar\omega)\right]}, \tag{34}$$

где

$$F_{s,a}(E)=\sum_{i=1}^{n_{s,a}}\frac{\pi\rho\left|\gamma_i^{s,a}\right|^2}{E-\varepsilon_i^{s,a}}. \tag{35}$$

В **разделе 4.3** строится статическая аналогия для полученных выражений обобщенного коэффициента прохождения как для симметричной системы с двумя контактами (**подраздел 4.3.1**), так и для ситуации обрыва цепи (**подраздел 4.3.2**). В самом деле, для симметричного двухтерминального квантового проводника из (33) видно, что действительная часть обобщенного коэффициента прохождения состоит из двух слагаемых, каждое из которых имеет вид (16), соответствующий стационарной туннельной прозрачности некоторой системы. Можно показать, что первое слагаемое соответствует исходной квантовой системе, в которой энергии всех антисимметричных состояний сдвинуты на $-\hbar\omega$, а второе слагаемое – квантовой системе, в которой энергии всех симметричных состояний сдвинуты на $-\hbar\omega$. Таким образом, исследуя статический коэффициент прохождения, можно сделать вывод и о свойствах системы в переменном поле.

В **разделе 4.4** в качестве примера рассмотрена двухузельная квантовая система с гамильтонианом

$$\mathbf{H}_0=\begin{pmatrix}\varepsilon_0 & \tau\\ \tau & \varepsilon_0\end{pmatrix}. \tag{36}$$

У такой системы есть два собственных состояния: $|1\rangle=1/\sqrt{2}\,(1,1)^\top$ и $|2\rangle=1/\sqrt{2}\,(1,-1)^\top$ с энергиями $\varepsilon_1=\varepsilon_0+\tau$ и $\varepsilon_2=\varepsilon_0-\tau$ соответственно. Эта система может быть подключена к электродам в двух различных конфигурациях (Рис. 9), линейный отклик и статическая аналогия в которых проанализированы в **подразделе 4.4.1** и **подразделе 4.4.2**. Поскольку оба собственных состояния будут симметричными в случае подключения контактов в конфигурации как на Рис. 9 б, то действительная часть обобщенного коэффициента прохождения в этом случае представляет собой просто сумму статической прозрачности расчитанной при энергиях E и $E+\hbar\omega$. В то же время в линейной конфигурации (Рис. 9 а) состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ обладают разной симметрией и обобщенный коэффициент прохождения имеет дополнительные интерференционные эффекты, наведенные переменным полем.

На Рис. 10 показана действительная и мнимая части обобщенного коэффициента прохождения линейной конфигурации двухузельной структуры для $\Gamma=0.2\tau$. При $\hbar\omega=2\tau\pm2\Gamma$ происходит слияние резонансов $T_{\mathrm{Re}}(E,\omega)$ на энергии $E=\varepsilon_0-\tau\mp\Gamma$. Это приводит к провалу в спектре проводимости (Рис. 10 г при $E_F=\varepsilon_0$) для частоты $\hbar\omega=2\tau$. В силу описанной аналогии со статической задачей подобное поведение линейного отклика двухузельной системы эквивалентно случаю транспорта через вырожденные состояния разной четности. Вырождение происходит между одним квазиэнергетическим состоянием, возникающим под действием переменного поля, и другим собственным состоянием системы.

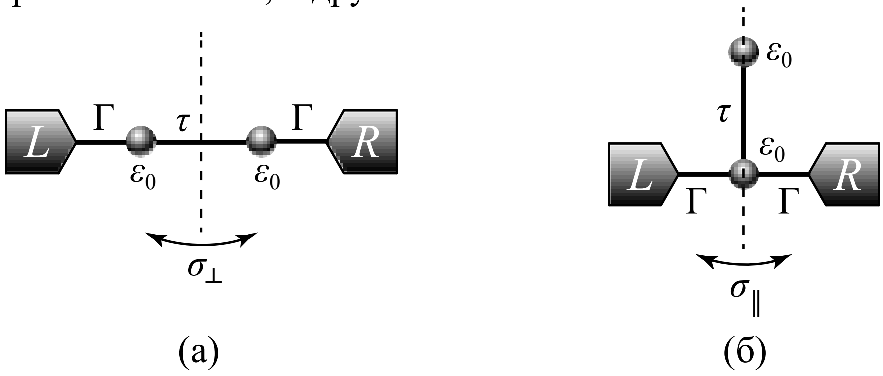


Рис. 9 Два неэквивалентных способа подключения контактов к двухузельной системе: (а) линейная конфигурация и (б) конфигурация с нетривиальной топологией – с наличием бокового дефекта (отростка).

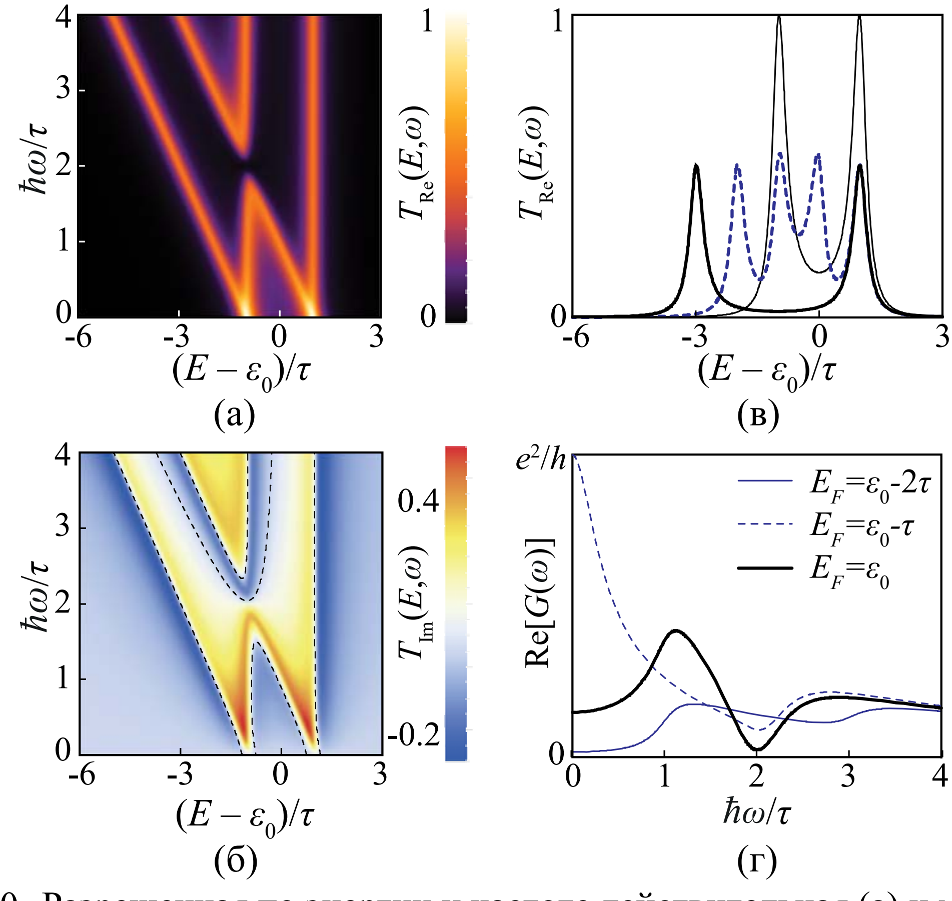


Рис. 10 Разрешенная по энергии и частоте действительная (а) и мнимая (б) части обобщенного коэффициента прохождения двухузельной системы в линейной конфигурации. Черная штриховая линия есть нулевая линия уровня $T_{\mathrm{Im}}(E,\omega)$. Графики зависимости $T_{\mathrm{Re}}(E,\omega)$ от энергии (в) 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 нулевой температуре и различных энергиях Ферми (г).

В **подразделе 4.4.3** обсуждается возможность наблюдения описанных эффектов с учетом поляризационного вклада в отклик. Действительно, подобную наглядную статическую аналогию и, соответственно, нетривиальные особенности имеет только одна компонента линейного оклика, в то время как поляризационные вклады имеют ярко выраженный резонансный максимум. Таким образом, нетривиальный эффект деструктивной квантовой интерференции, наведенной внешним переменным полем, может наблюдаться в случае, когда остальные вклады в линейный отклик малы, например, когда мала величина электрического поля непосредственно внутри системы. Такая ситуация типична для молекулярных проводников, для которых основное падение напряжения происходит на контактах с электродами. В таких системах потенциально могут быть наблюдаемы описанные динамические эффекты.

В **заключении** приведены 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 коллапса 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 дивинилциклобутадиена 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.

Список литературы

1. Moiseyev N. Non-Hermitian quantum mechanics. Cambridge University Press, 2011.
2. Bender C.M., Boettcher S. Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT-Symmetry // Physical Review Letters. — 1998. — Т. 80, № 24. — С. 5243.
3. Feshbach H. Unified theory of nuclear reactions // Annals of Physics (N. Y). — 1958. — Т. 5, № 4. — С. 357–390.
4. Sokolov V. V, Zelevinsky V.G. Collective dynamics of unstable quantum states // Annals of Physics (N. Y). — 1992. — Т. 216, № 2. — С. 323–350.
5. Smith M.B. Organic Chemistry: An Acid-Base Approach. Taylor & Francis, — 2011.
6. Hsu C.W. и др. Bound states in the continuum // Natare Review Materials — 2016. — Т. 1, № 9. — С. 16048.
7. Richter S., Mentovich E., Elnathan R. Realization of Molecular-Based Transistors // Advanced Materials — 2018. — Т. 30, № 41. — С. 1706941.
8. Li Y. и др. Interference-based molecular transistors // Scientific Reports — 2016. — Т. 6, № 1. — С. 33686.
9. Heeger A.J. и др. Solitons in conducting polymers // Review of Modern Physics – – 1988. – Т. 60, № 3. — С. 781–850.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В изданиях, входящих в международные реферативные базы WoS и Scopus:

1. Горбацевич А.А., Шубин Н.М. Нарушение PT-симметрии в резонансно-туннельных гетероструктурах // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 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 // Annals of Physics (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 // Physical Review B. — 2017. – – Т. 96, № 20. — С. 205441.
4. Горбацевич А.А., Шубин Н.М. Квантовые логические вентили // Успехи физических наук. — 2018. — Т. 188, № 11. — С. 1209–1225.
5. Gorbatsevich A.A., Krasnikov G.Y., Shubin N.M. PT-symmetric interference transistor // Scientific Reports — 2018. — Т. 8, № 1. — С. 15780.

В сборниках трудов конференций:

1. Шубин Н.М. Проявление нарушения PT-симметрии в полупроводниковых резонансно-туннельных структурах // Микроэлектроника и информатика-2016. 23-я Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов: Тезисы докладов. — М.: МИЭТ. — 2016. — С. 24.
2. Gorbatsevich A. and Shubin N. Coalescence of resonances and symmetry breaking in resonant tunneling heterostructures // 19th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices (ICSNN 2016): Abstract book. — Hong Kong: City University of Hong Kong. — 2016. — P. 25.
3. Gorbatsevich A.A. and Shubin N.M. Collapse of resonances as a manifestation of *PT*-symmetry breaking in resonant tunneling heterostructures // International Conference on “Micro- and Nano-Electronics 2016”: Book of Abstracts. — Moscow, Zvenigorod. — 2016. — P. 145.
4. Шубин Н.М. Особая точка высокого порядка как физическая основа принципа работы сенсора // Микроэлектроника и информатика-2017. 24-я Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов: Тезисы докладов. — М.: МИЭТ. — 2017. — С. 16.
5. Шубин Н.М. и Горбацевич А.А. Особые точки в волноводах и квантовых проводниках и слияние резонансов Фано // XIII Российская конференция по физике полупроводников: Тезисы докладов. — Екатеринбург.: Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН. — 2017. — С. 381.
6. Горбацевич А.А. и Шубин Н.М. Межэлектронные взаимодействия в многотерминальных квантовых проводниках // XVI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления»: Тезисы. — Троицк: Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН. — 2018. — С. 29.
7. Gorbatsevich A.A, Krasnikov G.Ya. and Shubin N.M. PT-symmetric quantum switch operating near exceptional point // 20th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices (ICSNN 2018): Abstract book. — Madrid: CSIC. — 2018. — P. PTH41.
8. Gorbatsevich A.A, Krasnikov G.Ya. and Shubin N.M. Quantum interference molecular inverter // International Conference on “Micro- and Nano-Electronics 2018”: Book of Abstracts. — Moscow, Zvenigorod. — 2018. — P. 56.
9. Шубин Н.М. и Горбацевич А.А. Интерференционные явления в электромагнитном отклике квантовой системы с особыми точками. // Электромагнитное поле и материалы (фундаментальные физические исследования). XXVI Международная конференция: Материалы. — М.: МЭИ. — 2018. — С. 116.
10. Шубин Н.М. Высокочастотная проводимость симметричной квантовой системы как аналогия статической туннельной прозрачности // Микроэлектроника и информатика-2019. 26-я Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов: Тезисы докладов. — М.: МИЭТ. — 2019. — С. 13.