

Электронный транспорт через набор локализованных состояний в формализме неравновесной диаграммной техники Келдыша

И. Д. Копчинский,* В. В. Шорохов†

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра физики полупроводников и криоэлектроники
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

(Поступила в редакцию 31.05.2023; подписана в печать 11.12.2023)

В настоящей работе неравновесная диаграммная техника Л. В. Келдыша применяется для подробного описания электронного транспорта через систему локализованных состояний. Особое внимание уделяется предсказательной способности теории, ради чего сокращается количество свободных параметров во вторично квантованном гамильтониане. Развиваемый формализм включает кулоновское взаимодействие и достаточно строго учитывает многоэлектронные эффекты и дискретность энергетических спектров таких структур, как наведённые квантовые точки, системы примесных атомов или зарядовых центров металлоорганических каркасных полимеров. Предлагаемый алгоритм расчёта электрических токов и чисел заполнения локализованных состояний реализуется программно и испытывается на модельной системе двух последовательных двухуровневых квантовых точек. Расчётные вольт-амперная характеристика и диаграмма токовой стабильности интуитивно объясняются с помощью наглядных энергетических диаграмм. Модель успешно воспроизводит типичные одноэлектронные эффекты: резонансное туннелирование, отрицательное дифференциальное сопротивление, инверсную заселённость многоуровневой системы, кулоновские корреляции и косвенное проявление эффекта памяти.

PACS: 72.10.Bg, 85.35.Gv, 11.10.Wx, 05.60.Gg

УДК: 538.915, 538.9, 53.09

Ключевые слова: одноэлектроника, вторичное квантование, неравновесная диаграммная техника Келдыша, функции Грина, матрица переноса, квантовое ограничение, резонансное туннелирование, отрицательное дифференциальное сопротивление, кулоновские корреляции.

ВВЕДЕНИЕ

По мере достижения фундаментального предела энергоэффективности и миниатюризации интегральных схем классической микроэлектроники всё актуальнее стоит задача развития альтернативных наноэлектронных вычислительных систем. Одним из перспективных направлений наноэлектроники и электроники нанострёмного масштаба является разработка одноэлектронных вычислительных и сенсорных элементов, в которых кодирование и обработка информации основывается на манипуляции единичными электрическими зарядами, спинами одиночных электронов или их сочетанием. Функционирование одноэлектронных устройств физически опирается на наличие существенных кулоновских корреляций между носителями заряда.

Практичность устройства требует, чтобы характерные энергии U кулоновского взаимодействия значительно (в 10 и более раз) превосходили энергетический масштаб тепловых флуктуаций $k_B T$ при комнатной температуре ($k_B T \simeq 26$ мэВ) либо, в крайнем случае, при температуре кипения жидкого азота ($k_B T \simeq 6.7$ мэВ). Это практически достижимо только в тех наноструктурах, где электроны вынужденно локализованы на достаточно близком расстоянии Δl друг

от друга, $\Delta l \ll e^2/(4\pi\epsilon_0 k_B T)$. Например, в наведённых квантовых точках [1, 2], в квантовых точках на основе графена [3], в системах одиночных примесных атомов [4–7] или зарядовых центров высокомолекулярных металлоорганических соединений [8, 9]. Так как характерный размер локализации Δl становится заметно меньше длины волны де Бройля электрона, в подобных структурах помимо кулоновских корреляций приходится считаться и с эффектом размерного квантования, неизбежно приводящим к дискретности энергетического спектра $\Delta\epsilon$. Типичные экспериментальные значения характеристик перспективных одноэлектронных систем приведены в таблице 1.

Итак, теоретическое описание явлений в названных системах должно адекватно учитывать сложное и разнообразное взаимовлияние кулоновских корреляций и дискретности энергетических спектров квантово ограниченных структур при вообще говоря произвольных соотношениях энергетических масштабов U , $\Delta\epsilon$ и $k_B T$. При этом первопринципные квантово-механические расчёты, например, методом функционала плотности, оказываются вычислительно слишком сложны, если обсуждаемые системы состоят более чем из 10^5 атомов, или если в протекание электрического тока вовлекается много возбуждённых квантовых состояний. Приходится прибегать к эффективным квантовым моделям, желательным применимым для различных соотношений U и $\Delta\epsilon$.

На уровне эффективной теории описание туннельного электронного транспорта через набор дискретных локализованных состояний с учётом кулонов-

* kopchinskii.id18@physics.msu.ru

† shorokhov@phys.msu.ru

Таблица 1. Типичные характеристики одноэлектронных систем

Система	Δl (нм)	$\Delta \epsilon$ (эВ)	U (эВ)	T_{\max} (К)
Мелкие уровни примесных атомов	5	0.005	0.01	1
Глубокие уровни примесных атомов	1	0.05	0.2	$77 \div 300$
Металлорганические молекулы	0.3	0.5	1	300

ских корреляций может быть последовательно развито [10, 11] средствами неравновесной диаграммной техники (НДТ), сформулированной ещё в 1964 г. Л. В. Келдышем [12, 13]. В рамках формализма НДТ строго учитывается существенная неравновесность протекания тока (вплоть до возникновения инверсной заселённости) и неизбежность паразитных виртуальных многочастичных процессов [14], свойственных квантово-механическим системам (в том числе т.н. «сотуннелирование»). Постановка задачи и основные этапы её решения методом НДТ обсуждаются в разделе 1.

В отличие от первопринципных расчётов [15], эффективные модели содержат многочисленные параметры, которые по умолчанию являются свободными и неизвестными. Если бы задачей исследования стояло моделирование результатов нескольких серий экспериментов, то обилие «подгоночных» параметров было бы даже преимуществом. Но озвученная стратегическая цель — разработка одноэлектронного вычислительного устройства — предъявляет повышенные требования к предсказательной способности модели. Следовательно, количество свободных параметров должно быть по возможности сокращено. Особое внимание параметризации модели уделяется в разделе 2.

Наконец, в разделе 3 предлагаемая процедура расчёта электрических токов и чисел заполнения испытывается на пробной системе, состоящей из двух последовательных двухуровневых квантовых точек, связанных туннельно с двумя транспортными электродами и электростатически с двумя электродами-затворами. Там же обсуждается перестройка энергетического спектра системы, расчётные вольт-амперная характеристика (ВАХ) и энергетическая диаграмма, воспроизводящие экспериментально значимые явления: резонансное туннелирование, отрицательное дифференциальное сопротивление и инверсную заселённость многоуровневой системы. Построенная диаграмма токовой стабильности демонстрирует влияние кулоновских корреляций и косвенное проявление эффекта памяти.

1. ПРИМЕНЕНИЕ НДТ

Рассмотрим наноэлектронную систему, состоящую из двух транспортных металлических электродов: левого L и правого R , между которыми произвольным образом расположены N локализованных электронных состояний любой природы с дискретными уровнями

энергии ϵ_i , $i = \overline{1, N}$ двукратно вырожденными по спину, (например, в составе квантовых точек). Будем считать, что электростатические потенциалы всех электродов заданы; электроны могут туннелировать между транспортными электродами и некоторыми локализованными состояниями, а также от одних локализованных состояний ϵ_i к другим ϵ_j . Кроме этого, поместим вблизи контакта несколько электродов-затворов, которые могут создавать дополнительное электрическое поле, так или иначе сдвигающее дискретные уровни энергии. Схематически частный случай рассматриваемой системы изображён на рис. 1, где туннельным барьерам соответствуют участки запрещённой зоны на энергетической диаграмме.

1.1. Гамильтониан

Для применения неравновесной диаграммной техники запишем гамильтониан в терминах вторичного квантования [16], вводя (безразмерные) фермионные операторы рождения и уничтожения электронов в картине Гейзенберга. Все уровни энергии будем отсчитывать от уровня Ферми заземлённой подложки.

$$\hat{H} = \sum_{\zeta \mathbf{k} \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^{\zeta} \hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\zeta \dagger} \hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\zeta} + \sum_{i \sigma} \epsilon_i \hat{a}_{i \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i \sigma} + \sum_{\zeta i \mathbf{k} \sigma} B_{i \mathbf{k}}^{\zeta} (\hat{a}_{i \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\zeta} + \hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\zeta \dagger} \hat{a}_{i \sigma}) + \sum_{ij \sigma} B_{ij} \hat{a}_{j \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i \sigma} + \sum_i U_{ii} \hat{n}_{i \uparrow} \hat{n}_{i \downarrow} + \sum_{i < j} U_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (1)$$

Первое слагаемое описывает невзаимодействующие транспортные электроды. В нём оператор $\hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\zeta \dagger}$ рождает электрон проводимости в электроде под номером $\zeta \in \{L, R\}$ с квазиволновым вектором \mathbf{k} , спином $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ и энергией $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\zeta} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu_{\zeta} - eV_{\zeta}$, где μ_{ζ} и V_{ζ} — химический и электростатический потенциалы электрода ζ соответственно. Величина e положительна и равна по модулю заряду электрона. Второе слагаемое описывает невзаимодействующие локализованные электронные состояния: оператор $\hat{a}_{i \sigma}^{\dagger}$ рождает локализованный в i -м состоянии электрон со спином σ и энергией $\epsilon_i = \bar{\epsilon}_i - e \sum_{\zeta} \alpha_{i \zeta} V_{\zeta} - e \sum_n \alpha_{in} V_n$, где $\bar{\epsilon}_i$ — исходные дискретные одночастичные уровни энергии локализованных состояний, а электростатические плечи

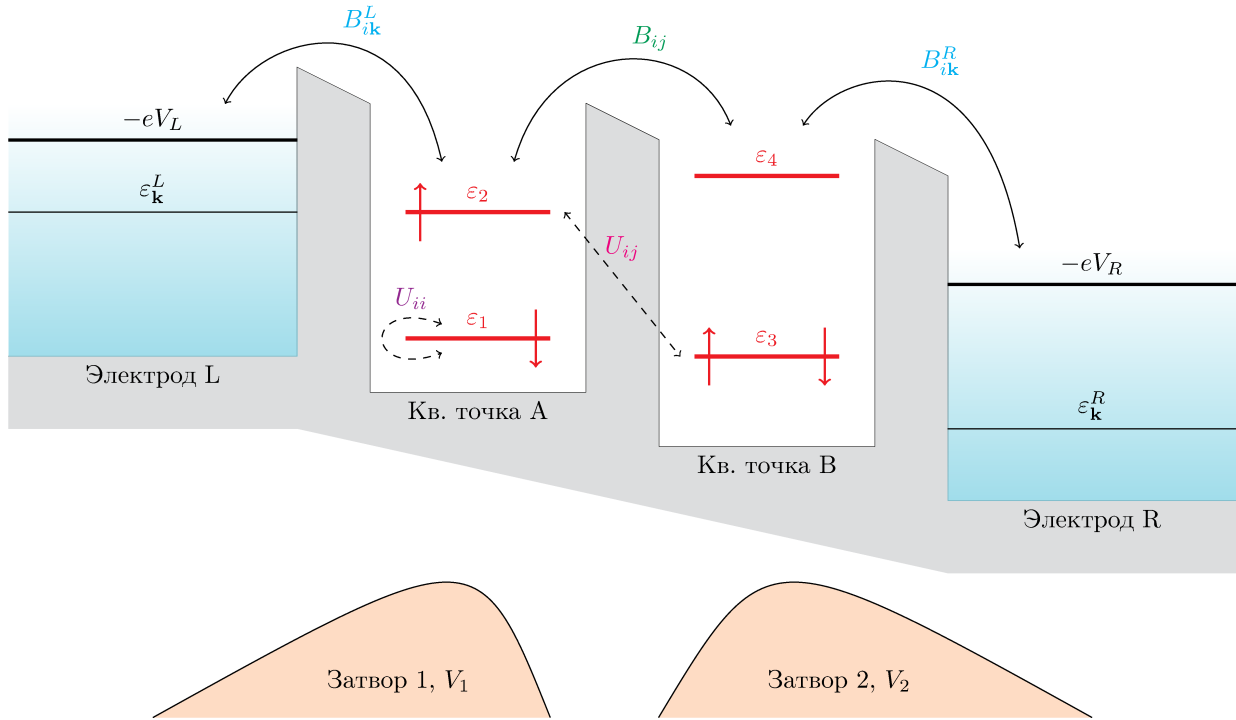


Рис. 1. Пример нанoeлектронной системы 2×2 с локализованными состояниями

[17] $\alpha_{i\zeta}$ и α_{in} задают, как статические поля транспортных электродов и затворов сдвигают дискретные уровни. Вообще говоря, электростатические плечи могут являться нелинейными функциями напряжений и зарядов в системе, но в эксперименте [18] ограничиваются приближением $\alpha_{i\zeta}, \alpha_{in} = const$. Поэтому в настоящей работе будем считать, что результирующий сдвиг уровней $\bar{\epsilon}_i$ линейно зависит от потенциалов V_ζ и V_n (n — номер затвора).

Взаимодействие в системе задаётся остальными слагаемыми в гамильтониане. Третье слагаемое отвечает за туннелирование электронов из транспортных электродов в локализованные состояния и обратно. Константы внешней туннельной связи B_{ik}^ζ , также известные как внешние туннельные матричные элементы или внешние туннельные амплитуды, имеют размерность энергии и несут смысл средних темпов туннельных процессов вида $\mathbf{k}\sigma \longleftrightarrow i\sigma$ (электрон проводимости с квазиволновым вектором \mathbf{k} туннелирует в состояние i , сохраняя свой спин σ , или обратно). Аналогично четвёртое слагаемое подключает внутреннее туннелирование — между отдельными локализованными состояниями с внутренними туннельными амплитудами B_{ij} . Отметим, что произвольную топологию набора локализованных состояний можно задать, запрещая прямое туннелирование между нужными узлами i и j . Для этого достаточно положить $B_{ij} = 0$.

Наконец, два последних слагаемых привносят в систему кулоновское взаимодействие по Андерсону [19] между локализованными электронами. В пятом сла-

гаемом записана энергия U_{ii} кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся в одном и том же i -м локализованном состоянии (на i -м «узле»), только с противоположными спинами. Выражение записано с использованием оператора $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}$ числа заполнения i -го дискретного состояния со спином σ . В шестом слагаемом задаются энергии U_{ij} отталкивания электронов, различающихся по энергии, поэтому в нём участвуют полные операторы чисел заполнения $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$. Так как в гамильтониан (1) не включены спин-зависимые взаимодействия либо внешнее магнитное поле, теория вынуждена сохранять спиновую симметрию $n_{i\uparrow} = n_{i\downarrow}$. В настоящей работе ограничимся этим немагнитным случаем.

Обсудим удобные особенности модели с гамильтонианом (1). Во-первых, гамильтониан с самого начала строится из фермионных операторов, на которые накладываются антикоммутиационные соотношения, поэтому любое решение уравнений движения будет строго подчиняться принципу запрета Паули. Во-вторых, раздельное введение отталкивания на узле (пятое слагаемое с U_{ii}) и между узлами (шестое слагаемое с U_{ij}) исключает самодействие электронов. На языке метода функционала плотности это равносильно тому, что обменное взаимодействие учтено точно, и нет нужды в поправках наподобие обменной энергии или «обменной дырки» [15, 20]. В-третьих, туннельное взаимодействие *квадратично* по лестничным операторам, поэтому его вклад в уравнения движения будет линейен, а значит чисто туннельная задача (при «выключенном» кулоновском взаимодействии) может быть вообще ре-

шена точно в рамках модели, что и будет использовано далее в разделе 1.1.3.

Как упоминалось во введении, предсказательная способность эффективной теории ослабляется от избытка свободных параметров. Туннельные амплитуды B_{ik}^ζ , B_{ij} и энергии кулоновского отталкивания U_{ii} , U_{ij} будут параметризованы геометрией системы в разделе 2, и количество свободных параметров значительно сократится.

1.2. Операторы токов

Помимо вышеупомянутых операторов чисел заполнения $\hat{n}_{i\sigma}$, через лестничные операторы нетрудно выразить и операторы токов.

Стандартно определим оператор электрического тока \hat{I}_ζ , втекающего в электрод ζ ,

$$\hat{I}_\zeta = -e \frac{d'}{dt} \hat{N}_\zeta, \quad \text{где} \quad \hat{N}_\zeta = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\zeta, \quad (2)$$

как скорость изменения числа электронов проводимости в данном электроде за счёт взаимодействия с локализованными состояниями. Подразумевается, что источник питания компенсирует избыток или недостаток заряда (полное изменение $\frac{d'}{dt} \hat{N}_\zeta \equiv 0$), но источник не включён в гамильтониан, так как нас интересует частичное изменение \hat{N}_ζ именно за счёт потока локализованных электронов. Производная по времени $\frac{d'}{dt}$, выражаемая через коммутатор согласно уравнению Гейзенберга, как раз учтёт только нужную нам часть изменения \hat{N}_ζ :

$$\begin{aligned} \hat{I}_\zeta &= -e \frac{d'}{dt} \hat{N}_\zeta = -e \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{N}_\zeta] = \\ &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{i\mathbf{k}\sigma} B_{i\mathbf{k}}^\zeta (\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} - \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\zeta) \end{aligned} \quad (3)$$

В последнем переходе в (3) нетрудно убедиться напрямую, подставив гамильтониан (1) и воспользовавшись антикоммутационными соотношениями между фермионными операторами и тождествами вида $\hat{a}^2 \equiv 0$.

Помимо экспериментально измеримого полного тока $I = \langle \hat{I}_L \rangle = -\langle \hat{I}_R \rangle$ можно искусственно определить операторы *частичных* токов, а именно:

- ток в электрод ζ из i -го состояния $\hat{I}_{i \rightarrow \zeta} = \frac{ie}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} B_{i\mathbf{k}}^\zeta (\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} - \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\zeta)$
- ток между двумя локализованными состояниями $\hat{I}_{i \rightarrow j} = \frac{ie}{\hbar} \sum_{\sigma} B_{ij} (\hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} - \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma})$

Хотя новые операторы и не соответствуют экспериментально измеримым величинам, они достаточно полезны и заслуживают рассмотрения. Например, полный ток очевидно складывается из частичных

$\hat{I}_\zeta = \sum_i \hat{I}_{i \rightarrow \zeta}$. Более того, расчёт частичных токов помогает интуитивно понять процессы в квантовой системе, что демонстрируется в разделе 3.

1.3. Туннельная подзадача

Приступим к выводу процедуры расчёта физических величин. Построение ВАХ заключается в том, чтобы найти $\langle \hat{I}_\zeta \rangle$ при фиксированных потенциалах транспортных электродов V_L , V_R и потенциалах затворов V_n . В картине Гейзенберга, в которой до сих пор рассматривалась задача, подразумевается усреднение эволюционирующего оператора $\hat{I}_\zeta(t)$ по начальному состоянию системы, причём движущей силой эволюции выступает полный гамильтониан \hat{H} . Применение диаграммной техники начинается с разбиения гамильтониана в картине Гейзенберга на невозмущённую часть и гамильтониан взаимодействия $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$. Единственным критерием разбиения служит требование, чтобы временная эволюция лестничных операторов под воздействием \hat{H}_0 была известна точно [16]. Знание точной эволюции позволяет перейти в картину взаимодействия и применить непосредственно диаграммную технику.

Решим задачу в два этапа: сначала рассмотрим туннельную подзадачу с «выключенным» кулоновским взаимодействием $U_{ii} = U_{ij} = 0$, в которой \hat{H}_0 состоит из двух первых слагаемых (1), а \hat{H}_I включает 3-е и 4-е слагаемые, отвечающие за квадратичное туннельное взаимодействие. Причина выделения туннельной подзадачи в том, что НДТ позволяет решить её *точно*, то есть учесть многочастичные процессы упругого туннелирования во всех порядках теории возмущений. На втором этапе будем возмущать точное решение туннельной подзадачи кулоновским взаимодействием, то есть в новом гамильтониане взаимодействия \hat{H}'_I будут участвовать 5-е и 6-е слагаемые (1).

В настоящей работе ограничимся рассмотрением *стационарной* конфигурации, в которой никакие физические величины (в том числе потенциалы электродов) не зависят от времени. Точное решение стационарной туннельной подзадачи известно, например, в [7, 21, 22], и приводит к следующим формулам для чисел заполнения и токов:

$$\begin{aligned} n_{i\sigma} &= \int_{-\infty}^{+\infty} g_{ii,\sigma}^<(\omega) \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi i}, \\ I_{i \rightarrow j} &= \frac{2e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Re B_{ij} g_{ji,\sigma}^<(\omega) d(\hbar\omega), \end{aligned} \quad (4)$$

$$I_{i \rightarrow \zeta} = \frac{e}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j\sigma} \Re g_{ij,\sigma}^R(\omega) \Sigma_{\zeta,ji,\sigma}^{0<}(\omega) + g_{ij,\sigma}^{<}(\omega) [\Sigma_{\zeta,ji,\sigma}^{0R}(\omega)]^\dagger d(\hbar\omega), \quad (5)$$

где участвуют компоненты туннельного вклада в собственную энергию — запаздывающую $\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{TR}(\omega)$ и спектральную $\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{T<}(\omega)$,

$$\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{TR}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{B_{i\mathbf{k}}^\zeta B_{j\mathbf{k}}^\zeta}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\zeta + i0},$$

$$\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{T<}(\omega) = \frac{2\pi i}{1 + e^{(\hbar\omega + eV_\zeta)/k_B T_\zeta}} \sum_{\mathbf{k}} B_{i\mathbf{k}}^\zeta B_{j\mathbf{k}}^\zeta \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\zeta), \quad (6)$$

а также Фурье-образы запаздывающей (g^R) и спектральной ($g^{<}$) полных функций Грина туннельной подзадачи:

$$g_{ij,\sigma}^R(\omega) = \left[(\hbar\omega - \varepsilon_i) \delta_{ji} - \Sigma_{L,ji,\sigma}^{TR}(\omega) - B_{ji} - \Sigma_{R,ji,\sigma}^{TR}(\omega) \right]^{-1}, \quad (7)$$

$$g_{ij,\sigma}^{<}(\omega) = \sum_{i'j'} g_{i'i',\sigma}^R(\omega) \left(\Sigma_{L,i'j',\sigma}^{T<}(\omega) + \Sigma_{R,i'j',\sigma}^{T<}(\omega) \right) \left[g_{j'j',\sigma}^R(\omega) \right]^\dagger, \quad (8)$$

где в формуле (7) присутствует операция обращения матрицы с индексами ji .

Суммы по квазиволновому вектору \mathbf{k} в формулах (6) вычисляются путём перехода к интегрированию с эффективной плотностью состояний $\nu_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}^\zeta)$ электронов проводимости в металлических электродах (размерность 1/эВ). В наиболее простом приближении туннельные амплитуды $B_{i\mathbf{k}}^\zeta$ полагают не зависящими от \mathbf{k} , и тогда суммы находятся аналитически:

$$\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{TR}(\omega) = -i\pi \nu_0(\hbar\omega) B_i^\zeta B_j^\zeta,$$

$$\Sigma_{\zeta,ij,\sigma}^{T<}(\omega) = \frac{2\pi i \nu_0(\hbar\omega) B_i^\zeta B_j^\zeta}{1 + e^{(\hbar\omega + eV_\zeta)/k_B T_\zeta}}. \quad (9)$$

Важно отметить, что каждая из туннельных амплитуд $B_{i\mathbf{k}}^\zeta$ содержит множитель $1/\sqrt{L}$, где L — длина терминальных участков транспортных электродов, в силу продольной нормировки их волновых функций. Этот

множитель при возведении в квадрат сокращает фактор L , входящий в нормировку плотности состояний $\nu_0(\varepsilon)$, благодаря чему предсказания модели не зависят от длины подводящих электродов.

1.4. Кулоновское отталкивание

Взяв за основу точное решение туннельной подзадачи, будем возмущать её функции Грина (7) и (8) кулоновским взаимодействием. С точки зрения кулоновского взаимодействия $g_{ij,\sigma}^R(\omega)$ и $g_{ij,\sigma}^{<}(\omega)$ становятся свободными (невозмущёнными) функциями Грина, а полные функции Грина будем обозначать $G_{ij,\sigma}^R(\omega)$ и $G_{ij,\sigma}^{<}(\omega)$. Отвечающие за кулоновское взаимодействие слагаемые в гамильтониане (1) содержат произведение четырёх лестничных операторов, и на языке диаграммной техники это означает появление вершин кратности четыре:

$$-\frac{i}{\hbar} U_{ij} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} \hat{a}_{j\sigma'}^\dagger \hat{a}_{j\sigma'} \longleftrightarrow \begin{array}{c} \nearrow i\sigma \quad \searrow j\sigma' \\ \text{---} U_{ij} \text{---} \\ \nwarrow i\sigma \quad \nearrow j\sigma' \end{array} \quad (10)$$

Стандартное разложение оператора эволюции в ряд теории возмущений на этот раз порождает топологически разнообразные кулоновские диаграммы, и не удаётся просуммировать их во всех порядках. В настоящей работе ограничимся кулоновскими вкладами первого порядка в собственную энергию,

$$-i\Sigma_{ij,\sigma}^{CR}(\{n\}) = U_{ii} \delta_{ij} + U_{ij} \delta_{j\sigma} = -iU_{ij} \left(n_{ij\sigma} - \frac{\delta_{ij}}{2} \right) - i\delta_{ij} \sum_{i' \neq i} U_{ii'} (n_{i'i} - 1), \quad (11)$$

$$\Sigma_{ij,\sigma}^{C<}(\omega) = \Sigma_{L,ij,\sigma}^{T<}(\omega) + \Sigma_{R,ij,\sigma}^{T<}(\omega), \quad (12)$$

где числа заполнения самосогласованно определяются полной спектральной функцией Грина:

$$n_{ij\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{ij,\sigma}^{<}(\omega) \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi i}. \quad (13)$$

Использование приближения (11) для запаздывающей собственной энергии позволяет просуммировать целиком несколько *порядков* ряда теории возмущений, так как приводит к самосогласованной системе уравнений Дайсона и Келдыша на полные функции Грина:

$$\begin{cases} G_{ij,\sigma}^R(\omega) = \left[(\hbar\omega - \varepsilon_i)\delta_{ji} - \Sigma_{L,ji,\sigma}^{TR}(\omega) - B_{ji} - \Sigma_{R,ji,\sigma}^{TR}(\omega) - \Sigma_{ji,\sigma}^{CR}(\{n\}) \right]^{-1}, \\ G_{ij,\sigma}^<(\omega) = \sum_{i'j'} G_{ii',\sigma}^R(\omega) \Sigma_{i'j',\sigma}^{C<}(\omega) \left[G_{jj',\sigma}^R(\omega) \right]^\dagger. \end{cases} \quad (14)$$

Система уравнений (14) является системой нелинейных (в силу обращения матрицы) интегральных уравнений, так как в уравнении Дайсона $\Sigma_{ji,\sigma}^{CR}(\{n\})$ зависит от набора всех чисел заполнения $\{n\}$, которые в свою очередь определены как функционалы неизвестных $G_{ij,\sigma}^<(\omega)$ согласно (13).

Предложим идею алгоритма поиска самосогласованного решения системы (14). Сначала её стоит переформулировать в виде системы алгебраических уравнений относительно искомого набора чисел заполнения $\{n\}$. Это можно сделать, дополнив (14) уравнением (13) и считая функции Грина не более чем вспомогательными конструкциями, однозначно определяемыми набором $\{n\}$ и параметрами гамильтониана. Подчёркивая параметрическую зависимость уравнений от совокупности $\{U\}$ всех U_{ij} , запишем в общем виде систему нелинейных алгебраических уравнений относительно набора чисел заполнения,

$$n_{ij} = \mathcal{F}_{ij}(\{n\}, \{U\}). \quad (15)$$

Совокупность уравнений (15) будем решать двумя семействами численных методов: итеративными и адиабатическими. Итеративные процедуры самосогласования стартуют из начального приближения (например, $n_{ij} = \mathcal{F}_{ij}(0, 0)$), не гарантируют сходимости, но вычислительно достаточно экономичны:

- простая итерация $(n_{ij})^{\text{next}} = (1 - \xi)(n_{ij})^{\text{prev}} + \xi \mathcal{F}_{ij}(\{n\}^{\text{prev}}, \{U\})$, где $\xi \ll 1$;
- итерация Ньютона–Рафсона $(n_{ij})^{\text{next}} = (n_{ij})^{\text{prev}} - \left[\frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial \{n\}} \Big|_{\text{prev}} \right]^{-1} \times \mathcal{F}_{ij}(\{n\}^{\text{prev}}, \{U\})$;
- глобально стабилизированная итерация Ньютона–Рафсона, попутно минимизирующая квадрат невязки $\|n_{ij} - \mathcal{F}_{ij}(\{n\}, \{U\})\|^2$, см. [23];
- более сложные итерации, реализованные, например, в библиотеке GSL [28].

При тех конфигурациях потенциалов электродов, когда итеративные процедуры самосогласования терпят неудачу — расходятся либо останавливаются в локальном минимуме невязки вдали от решения, — прибегнем к методу адиабатического включения взаимодействия, который является численной реализацией одноимённой процедуры в квантовой теории поля [16]. Математически его идея заключается в дифференцировании системы (15) по искусственно вводимому параметру $\lambda \in [0, 1]$ — степени «включённости» кулоновского

взаимодействия. Для этого формально сделаем всюду замену $U_{ij} \rightarrow \lambda U_{ij}$ и продифференцируем уравнение $n_{ij} = \mathcal{F}_{ij}(\{n\}, \{\lambda U\})$ по λ :

$$\begin{aligned} \frac{dn_{ij}}{d\lambda} &= \frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial \lambda} + \frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial \{n\}} \times \frac{d\{n\}}{d\lambda} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{dn_{ij}}{d\lambda} = \left[\hat{1} - \frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial \{n\}} \right]^{-1} \times \frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial \lambda}. \end{aligned} \quad (16)$$

Результат (16) можно трактовать, как систему обыкновенных (нелинейных) дифференциальных уравнений на функции $n_{ij} = n_{ij}(\lambda)$. Осталось дополнить её до задачи Коши начальным условием $n_{ij}(0) = \mathcal{F}_{ij}(0, 0)$. Далее задачу Коши по адиабатическому включению взаимодействия (доведению λ от 0 до 1) можно решать целым арсеналом численных методов, например, явным методом Рунге–Кутты 8-го порядка с адаптивным контролем шага [23], который не требует вычисления якобиана и без того громоздкой правой части (16).

За рамками настоящей работы остаётся строгое математическое исследование существования, единственности и устойчивости решения системы (14), эквивалентной системе (15) либо задачи Коши с уравнением (16). По физическим соображениям хоть одно решение существовать должно, так как при фиксации напряжений между электродами локализованные состояния в той или иной степени заполняются электронами. Однако имеются указания на то, что решений может быть несколько: при достаточно сильном кулоновском взаимодействии и разветвлённой системе дискретных электронных состояний (фактически, зарядовых ловушек) неизбежен гистерезис [26, 27]. В таких ситуациях перечисленные методы самосогласования могут сходиться к разным стационарным решениям даже при близких конфигурациях потенциалов электродов. В будущем этого можно избежать, отслеживая эволюцию системы в реальном времени, для чего в НДТ предусмотрено расширение стационарного уравнения Дайсона до нестационарного обобщённого квантово-кинетического уравнения [10].

2. ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ МОДЕЛИ

Ради повышения предсказательной способности модели сократим количество свободных параметров гамильтониана (1). Для этого рассмотрим простой вариант геометрической параметризации двух последовательных двухуровневых квантовых точек (система 2×2), моделирующих одномерную цепочку из двух при-

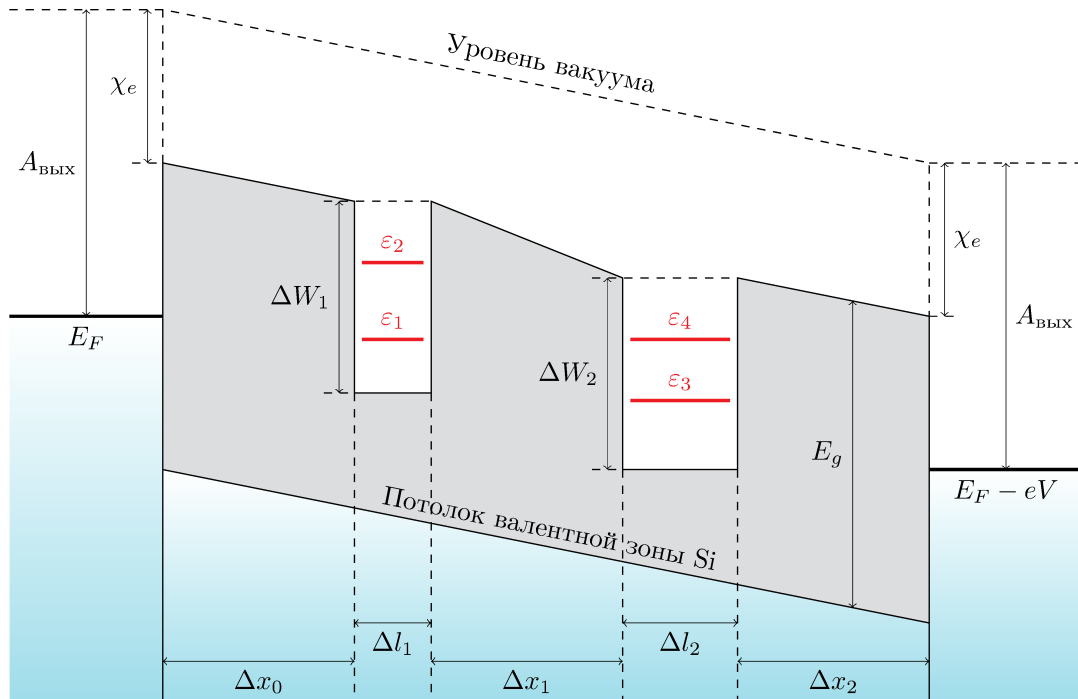


Рис. 2. Энергетическая диаграмма модельной системы 2×2

месных акцепторных атомов (например, мышьяка), которые имплантированы в кремниевую подложку между транспортными электродами [6]. Пренебрегая неоднородной поляризацией структур и электростатическим отражением, аппроксимируем потенциальный профиль туннельных барьеров кусочно-линейной функцией координаты x , как изображено на рис. 2 (масштаб не соблюден).

Уровень Ферми правого электрода сдвинут вниз по энергии на величину транспортного напряжения $eV = e(V_R - V_L)$, а высота барьеров электрод–точка диктуется разностью работы выхода электрона из металла ($A_{\text{вых}} \simeq 4.7$ эВ для золота) и сродством к электрону кремниевой подложки $\chi_e \simeq 4.1$ эВ. Эффективные глубины потенциальных ям примесных атомов, чей профиль для оценки выбран прямоугольным, составляют $\Delta W_1 = 30$ мэВ, $\Delta W_2 = 50$ мэВ. Характерный размер локализации электронов выберем на уровне $\Delta l_{1(2)} = 3$ нм. Для того, чтобы туннельные барьеры пропускали ток $I \sim 10$ нА, эффективные длины подбарьерных путей должны быть достаточно короткими: $\Delta x_{0(2)} = 1.2$ нм, $\Delta x_1 = 5$ нм. Установим характерную дискретность энергетических спектров $\epsilon_2 - \epsilon_1 = 10$ мэВ, $\epsilon_4 - \epsilon_3 = 15$ мэВ и типичный масштаб энергии кулоновского взаимодействия $U_0 = 10$ мэВ. Таким образом, модельную систему можно расположить между первой и второй строкой таблицы 1. Глубины потенциальных ям и расстояния между дискретными уровнями энергии специально заданы несимметричными, чтобы избежать возможного вы-

рождения вольт-амперных характеристик.

Теперь свяжем остальные свободные параметры гамильтониана с выбранной геометрией системы. Отношение энергий кулоновского отталкивания на узле и между узлами разумно оценить, как обратное отношение соответствующих расстояний $U_{ii}/U_{ij} = \Delta x_1/\Delta l \forall i, j$, и затем нормировать на величину U_0 . Для большей правдоподобности можно считать «мелкие» состояния под номерами 2 и 4 несколько менее локализованными, чем более компактные «глубокие» состояния 1 и 3. О степени локализации можно уверенно судить, только задавая волновые функции одночастичных электронных состояний.

Сложнее сделать хорошую оценку для туннельных амплитуд B_{ik}^{ζ}, B_{ij} . Предлагается поступить аналогично оценке кулоновских энергий: ввести один свободный нормировочный параметр B_0 (тоже с размерностью энергии), а отношения туннельных амплитуд друг к другу вычислять как отношения прозрачностей их потенциальных барьеров. В выбранной одномерной конфигурации прозрачности барьеров можно рассчитать точно с помощью метода матрицы переноса [24]. Благодаря кусочно-линейной аппроксимации потенциальных профилей метод матрицы переноса даёт аналитическую формулу для прозрачности, в которой участвуют спецфункции Эйри $\text{Ai}(\xi), \text{Bi}(\xi)$ [25].

Например, прозрачность барьера $\tau_{\rightarrow}(\epsilon_i)$ для электрона, туннелирующего слева направо (см. рис. 3), равна:

$$\tau_{\rightarrow}(\varepsilon_i) = \frac{4 |k_{iA} k_{iB}| / (\pi J)^2}{|W[Ai, \phi_{iA}^-](x_A) \cdot W[\phi_{iB}^+, Bi](x_B) + W[Bi, \phi_{iA}^-](x_A) \cdot W[Ai, \phi_{iB}^+](x_B)|^2}, \quad (17)$$

где волновые векторы электрона слева и справа от барьера суть $k_{iA} = \sqrt{2m(\varepsilon_i - E_A)}/\hbar$, $k_{iB} = \sqrt{2m(\varepsilon_i - E_B)}/\hbar$, фактор $J = (2a_1 m^* / \hbar^2)^{\frac{1}{3}}$ возникает вследствие замены переменной при решении уравнения Шрёдингера в линейном потенциале, эффективная масса $m^* \simeq 1.06 m$ для кремния, а вронскиан и волновые функции определены так:

$$W[Ai, \phi](x) = Ai(\xi) \phi'(x) \sqrt{\frac{m^*}{m}} - \sqrt{\frac{m}{m^*}} Ai'(\xi) \xi'(x) \phi(x), \quad (18)$$

$$\phi_{iA}^{\pm}(x) = e^{\pm i k_{iA}(x-x_A)}, \quad \phi_{iB}^{\pm}(x) = e^{\pm i k_{iB}(x-x_B)},$$

$$\xi(x) = J \cdot (x + \frac{a_0 - \varepsilon_i}{a_1}). \quad (19)$$

Если рассматривается барьер между электродом и одной из квантовых точек, то со стороны электрода квазиволновой вектор следует вычислять как $k = \sqrt{2m(\varepsilon - E_C)}/\hbar$, где E_C — дно зоны проводимости. Так как прозрачность барьера сильно зависит от энергии налетающей частицы, результирующая амплитуда $B_{ik}^{\zeta} = B_i^{\zeta}(\mathbf{k})$. При желании воспользоваться упрощёнными формулами (9) для туннельных вкладов в собственную энергию, можно грубо положить $B_i^{\zeta} \simeq B_i^{\zeta}(\mathbf{k}_F) = const$, то есть вычислить прозрачности для электронов проводимости на уровне Ферми.

направление, и, если оно не совпадает с предположенным, перевыбрать прозрачности. Такой рецепт выбора прозрачности почти всегда эквивалентен симметризуемой формуле $\tau_{result} = \max(\tau_{\rightarrow}, \tau_{\leftarrow})$.

Итак, параметры гамильтониана (1) можно свести к геометрии моделируемой системы. Конечно, экспериментальные геометрические размеры далеко не всегда известны с достаточной точностью. Тем не менее, для системы зарядовых центров в молекуле каркасного металлоорганического полимера их можно позаимствовать из её химического строения. В перспективе следует отказаться от грубого одномерного приближения и рассчитать гладкий трёхмерный потенциальный профиль исходя из электронной плотности в основном состоянии, получаемой с помощью теории Томаса-Ферми для твердотельных наноструктур или функционала плотности для металлоорганических систем. Кроме уточнения профилей барьеров, предварительные расчёты электронной плотности дадут дискретные одночастичные уровни энергии квантовых точек, соответствующие волновые функции, а значит, и более точные энергии кулоновского взаимодействия. Тогда в модели не останется «подгоночных» параметров, кроме, возможно, туннельного энергетического масштаба B_0 .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ 2 × 2

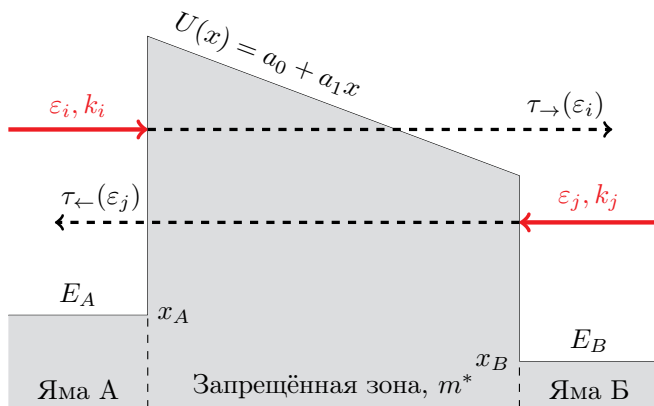


Рис. 3. Прозрачности кусочно-линейного потенциального барьера

Очевидно, существует две прозрачности для каждого барьера: слева направо $\tau_{\rightarrow}(\varepsilon_i)$ и справа налево $\tau_{\leftarrow}(\varepsilon_j)$. Эмпирически оказывается, что правильнее выбирать ту прозрачность, в направлении которой туннелируют электроны. Если, например, приложено положительное напряжение $V_R > V_L$, то в первом приближении стоит всюду выбрать прозрачности τ_{\rightarrow} . Далее, проведя расчёт частичных токов, можно проверить их

Описанная в разделах 1.1.3 и 1.1.4 процедура расчёта чисел заполнения, функций Грина, полного и частичных электрических токов по заданным потенциалам электродов была реализована программно в настоящей работе средствами языка программирования FORTRAN, параллелизма вычислений OpenMP [29] и библиотек численных методов FGSL [30] и LAPACK [31]. Рассмотрим некоторые результаты численного моделирования системы двух последовательных двухуровневых квантовых точек, параметризация которой обсуждается в разделе 2.

3.1. Гибридизация электронных состояний

В гамильтониане (1) заложены одночастичные уровни энергии ε_i невзаимодействующих локализованных состояний. Естественно ожидать, что в результате туннельного и кулоновского взаимодействия произойдёт принципиальная перестройка энергетического спектра системы. И неравновесная диаграммная техника предоставляет исчерпывающую информацию о том, в каких соотношениях исходные состояния гибридизуются при протекании электрического тока при на-

личии сил кулоновского отталкивания. Эту информацию можно извлечь в стационарном случае, анализируя спектральные плотности чисел заполнения.

Под числами заполнения мы по-прежнему понимаем средние значения квадратов одночастичных лестничных операторов. Их спектральная плотность с точностью до множителя даётся Фурье-образом функций Грина $G_{ii,\sigma}^<(\omega)$:

$$n_{j\sigma} = \langle \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{jj,\sigma}^<(\omega) \frac{d(\hbar\omega)}{2\pi i}, \quad j = \overline{1, N}. \quad (20)$$

Для невзаимодействующих состояний спектральная плотность имеет один бесконечно узкий пик и даётся дельта-функцией $g_{i\sigma}^{0<}(\omega) = 2\pi i n_{i\sigma}^0 \delta(\hbar\omega - \varepsilon_i)$, однако любое взаимодействие её видоизменяет: пик приобретает конечную ширину, меняет форму и площадь, может расщепляться на несколько пиков.

Рассмотрим подробно одну показательную конфигурацию наносистемы 2×2 . Если не оговорено иное, далее всюду фиксированы следующие значения потенциалов электродов: $V_L = 0$ мВ, $V_R = 25$ мВ, $V_1 = 593$ мВ, $V_2 = 567.4$ мВ. Такая точность задания потенциалов необходима, чтобы попасть в вершину узкого резонансного пика на ВАХ, который обсуждается ниже.

Самосогласованное решение уравнений (14) для этой конфигурации даёт спектральные плотности чисел заполнения, изображённые на рис. 4.

Анализ суммарной спектральной электронной плотности позволяет выделить 4 новых «перенормированных» многочастичных уровня энергии $\tilde{\varepsilon}_i$ всей системы как целого. Положения $\tilde{\varepsilon}_i$ можно определить по координатам центров пиков, а новые числа заполнения $\tilde{n}_{i\sigma}$ — как площади пиков, (разграничив пики по точке минимума спектральной плотности либо по аппроксимации суммой лоренциан). Далее, интегрируя исходные спектры от пика к пику, можно вычислить индивидуальные вклады первоначальных чисел заполнения $n_{j\sigma}$ в каждое из перенормированных $\tilde{n}_{i\sigma}$, и рассчитать тем самым аналоги *коэффициентов гибридизации*. Продолжая аналогию с квантовой химией, удобно изобразить их в виде координационных линий пропорциональной толщины на энергетической диаграмме, рис. 5.

Схема гибридизации 5 отражает перестройку спектра модельной системы 2×2 и демонстрирует, что в выбранной конфигурации одночастичные уровни ε_2 и ε_3 почти «единолично» образуют перенормированные $\tilde{\varepsilon}_4$ и $\tilde{\varepsilon}_1$ соответственно. При этом очевиден кулоновский сдвиг нового $\tilde{\varepsilon}_4$ относительно исходного ε_2 , и кулоновский сдвиг нового $\tilde{\varepsilon}_1$ относительно исходного ε_3 . Одночастичные уровни ε_1 и ε_4 активно гибридизуются друг с другом, порождая пару перенормированных состояний $\tilde{\varepsilon}_2$ и $\tilde{\varepsilon}_3$, которая аналогично сдвинута вверх на величину порядка энергии кулоновского отталкивания.

3.2. Инверсная заселённость

На координационной диаграмме 5 в прямоугольных рамках выписаны перенормированные числа заполнения \tilde{n}_i . Налицо радикально неравновесная картина: состояния $\tilde{\varepsilon}_4$, $\tilde{\varepsilon}_3$ и $\tilde{\varepsilon}_2$ заселены инверсно $\tilde{n}_4 > \tilde{n}_3 > \tilde{n}_2$. Заселённость состояния $\tilde{\varepsilon}_1$ обоими электронами объясняется тем, что уровень $\tilde{\varepsilon}_1$ попадает ниже окна Ферми (см. ниже рис. 6 слева).

Если в гамильтониан (1) добавить слабое электрон-фотонное взаимодействие, то можно рассчитывать на генерацию квантов излучения с энергиями: $\tilde{\varepsilon}_4 - \tilde{\varepsilon}_2 = 11$ мэВ, $\tilde{\varepsilon}_4 - \tilde{\varepsilon}_3 = 10$ мэВ, $\tilde{\varepsilon}_3 - \tilde{\varepsilon}_2 = 0.9$ мэВ, которые соответствуют длинам волн $\lambda_{42} = 0.12$ мм, $\lambda_{43} = 0.13$ мм, $\lambda_{32} = 1.4$ мм и могут быть интересны в радиофизических приложениях. Полученное знание численных значений заселённостей и отстроек перенормированных уровней друг от друга необходимо для оценки интенсивностей генерации.

3.3. Резонансное туннелирование

Столь тесная гибридизация исходных уровней ε_1 и ε_4 приводит к тому, что через пару перенормированных электронных состояний $\tilde{\varepsilon}_2$ и $\tilde{\varepsilon}_3$ открывается широкий сквозной канал для резонансного протекания туннельного тока $I = 26.9$ нА, в то время как фоновый ток вдали от резонанса не превышает нескольких нА. Этот интуитивный вывод подкрепляется расчётом *частичных токов* (операторы $\hat{I}_{i \rightarrow \zeta}$, $\hat{I}_{i \rightarrow j}$ в разделе 1.1.2), которые изображены жёлтыми стрелками на полной энергетической диаграмме, рис. 6 слева. На ВАХ справа отмечена рабочая точка «А» в вершине обсуждаемого резонансно-туннельного пика.

Прочие пики на ВАХ рис. 6 объясняются аналогично: та или иная пара одночастичных электронных состояний гибридизуется и формирует резонансный канал проводимости сквозь две последовательные квантовые точки. Причём на положения резонансов влияет энергия кулоновского отталкивания, нелинейно сдвигающая исходные уровни энергии.

Дальний от начала координат склон каждого пика является участком отрицательного дифференциального сопротивления, типичного для резонансно-туннельных структур. На графике ВАХ эти участки имеют более вертикальный наклон, чем противоположные склоны, так как пики несимметричны. Асимметрия пиков может объясняться сильной зависимостью туннельных амплитуд от высот энергетических барьеров, которые меняются при сканировании транспортного напряжения.

3.4. Кулоновские корреляции и эффект памяти

Оставим зафиксированным транспортное напряжение $V = 25$ мВ в рабочей точке «А» (рис. 6) и начнём

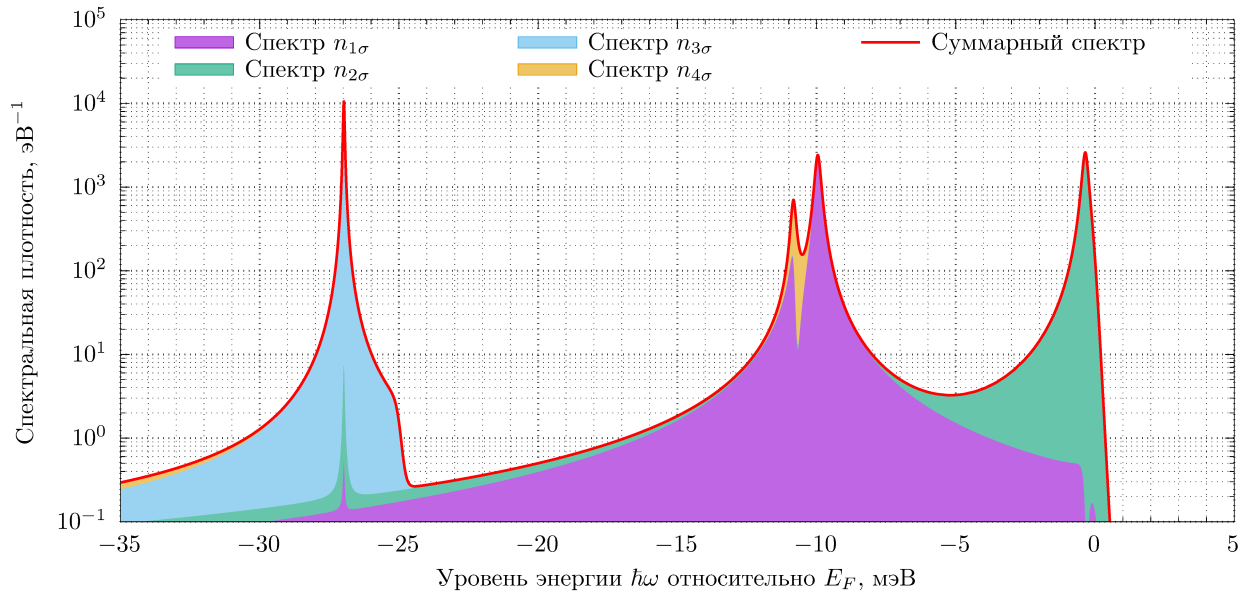


Рис. 4. Спектральные плотности чисел заполнения модельной наносистемы 2×2 при $V_L = 0$ мВ, $V_R = 25$ мВ, $V_1 = 593$ мВ, $V_2 = 567.4$ мВ

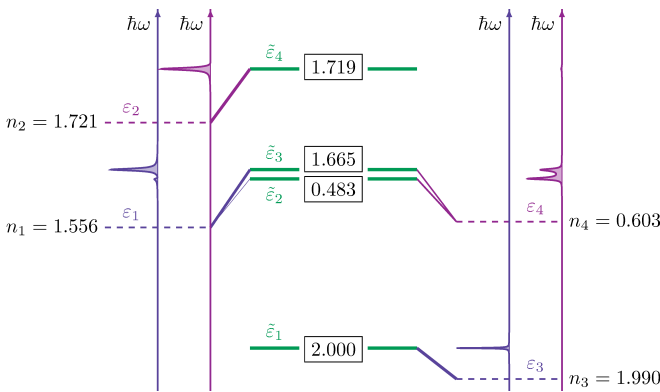


Рис. 5. Координационная диаграмма модельной наносистемы 2×2 при $V_L = 0$ мВ, $V_R = 25$ мВ, $V_1 = 593$ мВ, $V_2 = 567.4$ мВ

сканировать потенциалы обоих затворов V_1 и V_2 . В нашем приближении они будут линейно сдвигать каждую квантовую точку вверх либо вниз на энергетической диаграмме. Рассчитаем туннельный ток и изображим его в виде тепловой карты — диаграммы токовой стабильности, рис. 7.

Области протекания туннельного тока имеют форму «гребней», из которых вырисовываются контуры многоугольника с внутренними углами около 120° . Подобная гексагональная форма, опоясывающая центральный островок стабильности, напоминает типичные диаграммы стабильности нанoeлектронных систем, управляемых двумя затворами [1].

Возникновение крупномасштабных изгибов резонансно-туннельных «гребней» возможно только благодаря учёту кулоновского взаимодействия. В

гипотетическом случае $U_{ij} = 0$ изгибы пропадают, и полосы становятся прямолинейными, рис. 8.

Присутствие некоторой «изрезанности» резонансно-туннельных полос на диаграмме 7 иллюстрирует упомянутый в конце раздела 3 недостаток стационарной процедуры самосогласования. Если в областях «зазубренности» система может проявлять эффект памяти и иметь несколько устойчивых стационарных состояний, то алгоритм самосогласования может там непредсказуемо сходиться к любому из них, (в вызываемых подпрограммах библиотеки GSL используется генератор псевдослучайных чисел). Устранить данный недостаток можно, задавая начальное состояние системы и отслеживая её эволюцию как переходный во времени квантовый процесс, например, с помощью нестационарного расширения НДТ Келдыша [10].

Примечательно, что на диаграмме стабильности гипотетической системы с «выключенным» кулоновским взаимодействием (рис. 8) артефакты расчёта отсутствуют. При этом из формул (7) и (8) конструктивно следует, что в чисто туннельной системе без кулоновского взаимодействия гистерезис ВАХ невозможен. Значит, подтверждается предположение о том, что «изрезанность» диаграммы стабильности 7 есть проявление физически значимого эффекта памяти [26, 27], который можно корректно воспроизвести моделируя динамику системы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе была предложена, программно реализована и протестирована процедура самосогласованного решения стационарных уравнений Дай-

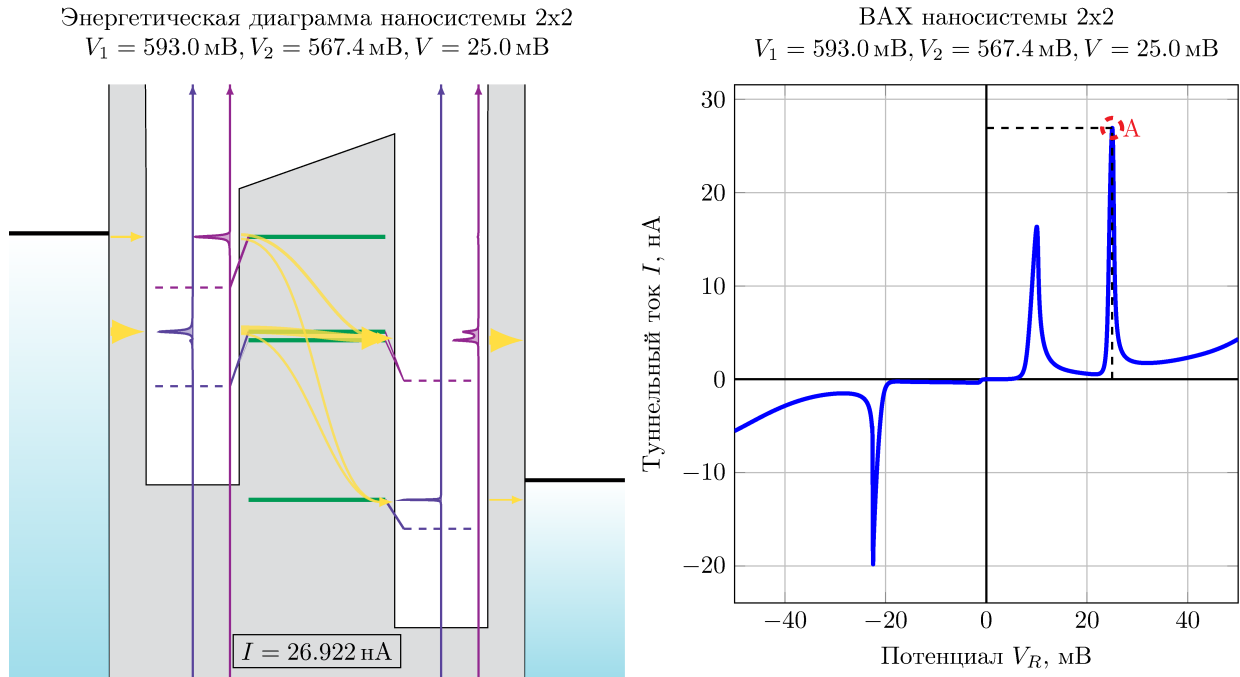


Рис. 6. Полная энергетическая диаграмма и ВАХ при резонансном туннелировании

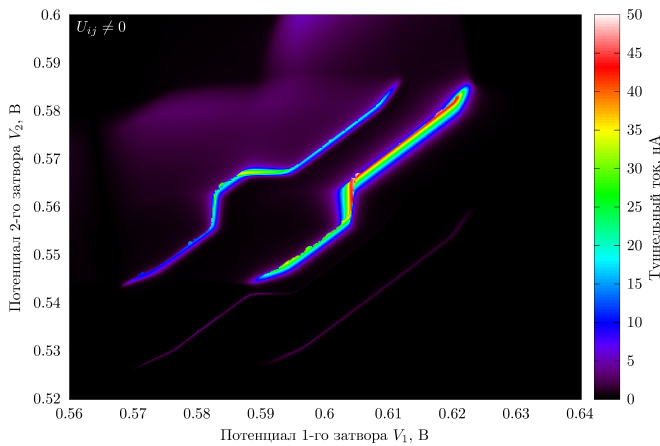


Рис. 7. Диаграмма стабильности модельной наносистемы 2×2 с кулоновскими корреляциями при $V = 25$ мВ

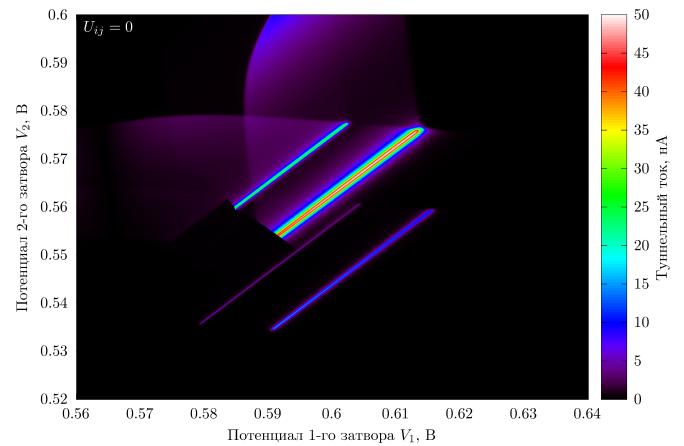


Рис. 8. Диаграмма стабильности гипотетической системы без кулоновских корреляций при $V = 25$ мВ

сона и Келдыша для нанoeлектронной системы с кулоновскими корреляциями и произвольным соотношением энергетических масштабов туннельных амплитуд, дискретности энергетических спектров $\Delta\epsilon$ и тепловых флуктуаций $k_B T$. Эффективный гамильтониан, изначально содержащий множество свободных параметров, был параметризован геометрией модельной системы двух последовательных двухуровневых квантовых точек, что позволило сократить теоретическую неопределённость фактически до трёх энергетических параметров: U_0 , $\Delta\epsilon$ и масштаба туннельного взаимодействия B_0 .

На примере пробной наносистемы 2×2 была проде-

монстрирована способность неравновесной диаграммной техники дать исчерпывающее представление о перестройке энергетического спектра системы и провести параллели с гибридизацией орбиталей в квантовой химии; недаром квантовые точки называют «искусственными атомами». Построение перенормированного спектра с одной стороны и вычисление частичных туннельных токов с другой подкрепили интуитивные представления о механизме резонансного туннелирования электронов через квантовую систему с кулоновскими корреляциями. Определение чисел заполнения гибридованных состояний выявило инверсию их заселённости, моделирование которой может быть полезно в радио-

физических или оптических приложениях. Сравнение расчётных диаграмм токовой стабильности для системы с кулоновским взаимодействием и без него подтвердило способность модели учитывать кулоновские корреляции для заданного соотношения энергетических параметров, а также дало указание на косвенное проявление эффекта памяти и на необходимость расширения модели с помощью, например, нестационарного варианта НДТ.

Помимо реализации последнего, имеются и другие перспективы исследования. Можно осуществить предварительный расчёт пространственной электронной плотности невзаимодействующей системы в основном состоянии с целью уточнения потенциального профиля туннельных барьеров, одночастичных волновых функций и уровней энергии локализованных состояний. Чтобы уточнение поведения туннельных амплитуд не было напрасным, следует отказаться от довольно грубого перехода $B_{ik}^{\zeta} \simeq B_i^{\zeta}(\mathbf{k}_F)$ и вернуться к последовательному вычислению электронных сумм, как предписывают формулы (6). Также стоит учесть кулоновские вклады второго порядка в собственной энергии (11), чтобы проверить, при каких соотношениях энергетических масштабов корректно текущее приближение, и расширить область его применимости.

Программную реализацию имеет смысл масштабировать до моделирования распределённых квантовых систем, в которых нет необходимости учитывать взаимодействие «всех со всеми», как это сделано в настоящей работе. Увеличение количества энергетических уровней в квантовых точках, а также количества самих квантовых точек возможно путём добавления кванто-

вых состояний в гамильтониан (1) и задания их желаемой топологии (выбор ненулевых туннельных амплитуд). Фактическая сложность расчётов для полностью связанного кластера из N состояний ведёт себя подобно $\mathcal{O}(N^6)$ (обращение матрицы Якоби со стороной N^2), хотя эта оценка и не учитывает «невный перенос сложности» в сходимость и устойчивость процедуры самосогласования. Можно предположить, что именно усложнение поиска самосогласованного решения ограничит масштабируемость данного подхода, иначе появился бы способ моделирования квантовой системы с полиномиальной сложностью.

Помимо ограниченного масштабирования моделируемой системы, гамильтониан (1) можно надстраивать, добавляя новые взаимодействия: электрон-фононное, электрон-фотонное, спин-спиновое и прочие магнитные эффекты, что вкупе с нестационарным расширением открывает возможность качественного моделирования динамики экспериментальных систем нескольких кубитов.

Благодарности

Авторы выражают благодарность профессору В. Н. Манцевичу за продуктивное обсуждение работы и профессору А. И. Лебедеву за ценные советы.

Работа выполнена при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

- [1] Zwanenburg F.A., Dzurak A.S., Morello A. et al. // *Rev. of Modern Phys.* **85**, N 3. 961. (2013).
- [2] Chatterjee A., Stevenson P., De Franceschi S et al. // *Nature Rev. Phys.* **3**. 157. (2021).
- [3] Banszerus L., Möller S., Icking E. et al. // *Nano Lett.* **20**, N 3. 2005. (2020).
- [4] Дагесян С.А., Шорохов В.В., Преснов Д.Е. и др. // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 5. 32 (2017).
- [5] Dagesyan S.A., Shorokhov V.V., Presnov D.E. et al. // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **72**, N 5. 474 (2017).
- [6] Shorokhov V.V., Presnov D.E., Amitonov S.V. et al. // *Nanoscale.* **9**. 613. (2017).
- [7] Mantsevich V.N., Maslova N.S. // *Solid State Comm.* **150**, N 41. 2072. (2010).
- [8] Панкратов С.А., Паршинцев А.А., Преснов Д.Е., Шорохов В.В. // *Известия РАН. Серия физ.* **87**, № 1. 71. (2023).
- [9] Pankratov S.A., Parshintsev A.A., Presnov D.E., Shorokhov V.V. // *Bulletin of RAS: Phys.* **87**, № 1. 71. (2023).
- [10] Арсеев П.И. // *Успехи физ. наук.* **185**, № 12. С. 1271. (2015).
- [11] Tanamoto T., Ueda M. // *Phys. Rev. B.* **57**, N 23. 57. (1998).
- [12] Келдыш Л.В. // *Журнал эксп. и теор. физ.* **47**, № 4. 1515. (1964).
- [13] Keldysh L.V. // *Soviet Physics JETP.* **20**, N 4. 1018. (1965).
- [14] Maslova N.S., Mantsevich V.N., Luchkin V.N. et al. // *Nature Sci. Reports.* **11**, N 17676. 1. (2021).
- [15] Parr R.G., Yang W. // *Density-functional Theory of Atoms and Molecules.* Oxford Univ. Press. 1989.
- [16] Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. // *Введение в теорию квантованных полей.* М. 1984.
- [17] Dobrynin D.M., Shorokhov V.V. // *J. Appl. Phys.* **128**, N 034301. (2020).
- [18] Mukhopadhyay U., Dehollain J.P., Reichl C. // *Appl. Phys. Lett.* **112**, N 18. 183505. (2018).
- [19] Anderson P.W. // *Phys. Rev.* **124**, N 1. 41. (1961).
- [20] Slater J.C. // *Phys. Rev.* **81**, N 3. 385. (1951).
- [21] Haug H., Jauho A.-P. // *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors.* Springer. 2008.
- [22] Maslova N.S., Arseev P.I., Mantsevich V.N. // *Nature Sci. Reports.* **11**, N 9336. 1. (2021).
- [23] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. // *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing.* 3rd Edition. Cambridge Univ. Press. 2007.
- [24] Burstein E., Lundqvist S. // *Tunneling Phenomena in*

- Solids. Plenum Press New York. 1969.
- [25] *Vallée O., Soares M.* // Airy Functions and Applications to Physics. Imperial College Press. 2004.
- [26] *Залунин В.О., Крупенин В.А., Васенко С.А., Зорин А.Б.* // Письма в ЖЭТФ. **91**, №. 8. 436. (2010).
- [27] *Zalunin V.O., Krupenin V.A., Vasenko S.A., Zorin A.B.* // JETP Letters. **91**, N 8. 402. (2010).
- [28] <https://www.gnu.org/software/gsl/>
- [29] <https://www.openmp.org/>
- [30] <https://github.com/reinh-bader/fgsl/>
- [31] <https://www.netlib.org/lapack/index.html>

Electronic transport via localized states in Keldysh non-equilibrium diagram technique

I. D. Kopchinskii^{1a}, V. V. Shorokhov^{1b}

*Department of Physics of Semiconductors and Cryoelectronics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^akopchinskii.id18@physics.msu.ru, ^bshorokhov@phys.msu.ru

Keldysh non-equilibrium diagram technique is used for a detailed description of electronic transport through a system of localized states. Particular attention is paid to the predictive ability of the theory, for which the number of free parameters in the second-quantized Hamiltonian is reduced. The employed formalism accounts for Coulomb interaction and rigorously treats multi-electron effects and the discreteness of the energy spectra of such structures as induced quantum dots, systems of impurity atoms, or charge centers of metal-organic framework polymers. The proposed algorithm for calculating electric currents and occupation numbers of localized states is implemented in software and tested on a model system with two consecutive two-level quantum dots. The calculated volt-ampere characteristic and current stability diagram are intuitively explained using illustrative energy diagrams. The model successfully reproduces typical single-electron effects: resonant tunneling, negative differential resistance, population inversion in a multilevel system, Coulomb correlations and an indirect manifestation of the memory effect.

PACS: 72.10.Bg, 85.35.Gv, 11.10.Wx, 05.60.Gg

Keywords: single-electronics, second quantization, Keldysh non-equilibrium diagram technique, Green functions, transfer matrix, quantum confinement, resonant tunneling, negative differential resistance, population inversion, Coulomb correlations.

Received 31 May 2023.

Сведения об авторах

1. Копчинский Илья Дмитриевич — студент магистратуры; e-mail: kopchinskii.id18@physics.msu.ru.
2. Шорохов Владислав Владимирович — доцент; e-mail: shorokhov@phys.msu.ru.