

УДК 621.382

**И. И. Абрамов**, д-р физ.-мат. наук, проф.,  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники, Минск,  
Республика Беларусь,  
e-mail: nanodev@bsuir.edu.by

## Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники.

### VII. Структуры на квантовых проволоках

*В данной части работы проанализированы модели квантовых проволок и приборных структур на их основе. Оценены перспективы развития рассматриваемой области наноэлектроники.*

**Ключевые слова:** квантовые проволоки, квантовая интерференция, приборные структуры.

#### Введение

Приборные структуры на квантовых проволоках в своем большинстве\* относятся к более широкому типу *приборов на эффектах квантовой интерференции*. Наряду с длиной волны де Бройля  $\lambda_B$  наиболее важным параметром для данного типа приборов является длина фазовой когерентности  $\lambda_\phi$  [1]. В случае, когда размеры структуры соизмеримы с  $\lambda_\phi$ , волновые функции носителей заряда, например электронов, могут интерферировать, распространяясь по различным путям, в местах схождения этих путей, вызывая тем самым различного рода флуктуации, а именно: проводимости (кондактанса), других кинетических коэффициентов, тока и напряжения (нарушение закона Ома), что используется в практических приложениях. Здесь прослеживается аналогия с разнообразными интерференционными оптическими приборами и приборами СВЧ электроники. Поэтому в настоящее время предложено много приборных структур твердотельной электроники, включая наноэлектронику, базирующихся на эффектах квантовой интерференции и являющихся фактически

\* Возможны приборы, включающие квантовые проволоки, в которых важны не обязательно эффекты квантовой интерференции, а например, одноэлектронное туннелирование, но это уже, как правило, комбинированные (гибридные) приборы.

твердотельными аналогами указанных выше типов приборов (см. обзоры [2–7]).

В 1959 г. Ааронов и Бом [8] теоретически показали, что в двухсвязанной системе (типа "кольца", "рамки"), когда электронный пучок (волновой пакет) расщепляется на два альтернативных пучка (волновых пакета), их интерференция наблюдается в месте схождения пучков (волновых пакетов). Управление этой интерференцией в месте схождения допустимо с помощью векторного потенциала электромагнитного поля, в частности, с приложением как магнитного (магнитный эффект Ааронова—Бома), так и электрического (электростатический эффект Ааронова—Бома) полей. Поскольку длина фазовой когерентности  $\lambda_\phi$  возрастает с уменьшением температуры, то первые экспериментальные подтверждения эффекта были проведены при низких температурах вследствие более простой технологической реализации исследуемых образцов [2, 3]. В этом случае легче достигается баллистический (бесстолкновительный) режим переноса в половинках кольца (рамки), составляющих альтернативные пути движения разделенных пучков (волновых пакетов), так как процессы столкновения могут приводить к сбою фазы электронных волн, т. е. потере фазовой когерентности. Важно заметить, что Ю. В. Шарвином с сыном было экспериментально показано [9], что фазовая когерентность может не разрушаться вследствие процессов упругого рассеяния, что подтверждает упрощенную теорию работы [10]. В то же время разупорядочение (хаотизация) фазы вследствие неупругого рассеяния и различные тепловые эффекты могут приводить к разрушению требуемой когерентности пучков. Таким образом, исследования доказали *принципиальную важность при рассмотрении интерференционных эффектов учета влияния процессов рассеяния*.

Первые реализации колец и рамок Ааронова—Бома на тонких металлических проволоках с подведенными к ним контактами [2, 3] фактически являлись первыми приборными структурами на эффектах квантовой интерференции твердотельной электроники. В дальнейшем появилось огромное число предложений таких приборов, как правило, на основе разнообразных реализаций волноводов\*\* (носителей заряда) в твердом теле (см. первые обзоры [4–7, 11, 12]). Здесь мы будем применять ха-

\*\* Иногда к ним также добавляются резонаторы, интерферометры, точечные контакты.

ракторный, вообще говоря, для СВЧ электроники термин — "волновод", используемый традиционно в рассматриваемой области в зарубежной литературе (английский термин — "waveguide"). Это сделано для того, чтобы не было путаницы с более специфическим термином "квантовые проволоки"\*, для которых принципиально важно пространственное квантование (дополнительный к квантовой интерференции в приборной структуре квантово-механический эффект) в поперечном сечении проволоки (волновода). Поэтому такие структуры, по существу, являются гибридными.

Приборные структуры на квантовой интерференции включают волноводы, построенные на 3D-, 2D-, 1D-объектах, самой разнообразной формы, а именно: кольца; рамки; зигзаги; уголки: пересечения типа "крест", Y-образные, T-образные; иные сочетания волноводов (параллельные, хаотические и др.); расширения; микросужения; точечные контакты и др. Материалы, используемые при создании приборов, могут быть также различными: металлы, полупроводники, диэлектрики. Весьма интересно и перспективно применение нанотрубок (углеродных, кремниевых и др.), молекул, атомных цепочек. Форма и размеры волноводов могут управляться также достаточно разными способами, например, с помощью затворов, влияющих на электронный 2D-газ или квантовую яму. Бесспорно важным является и влияние температуры окружающей среды. Интересно заметить, что резонансно-туннельные структуры, рассмотренные ранее [13], могут интерпретироваться в качестве интерференционных приборов, так как в режиме резонансного, а не последовательного, туннелирования принципиально важна интерференция многократно отраженных волн в квантовой яме (ямах), правда, в поперечном направлении. Естественно, рассмотреть все это огромное многообразие структур практически невозможно. Поэтому здесь остановимся на наиболее важных вопросах физики и моделирования рассматриваемого типа приборов и в особенности (согласно анализу [1]) — основанных на квантовых проволоках. Кроме того, один из наиболее существенных недостатков интерференционных приборов — многомодовость обычных волноводов [4], в результате чего получается большой разброс длин волн носителей заряда, а следовательно, это может приводить\*\* к ослаблению ("размазыванию") интерференционных эффектов. Один из наиболее эффективных путей устранения такого ослабления — использование именно квантовых проволок в качестве волноводов. Бесспорно важным является и то, что в настоящее время теоретически

\* В литературе иногда встречаются вместо "провода" следующие слова: "провод", "нить", "шнур". Более удачным в рассматриваемом случае было бы строгое и, к сожалению, более громоздкое словосочетание: "волноводы на квантовых проволоках".

\*\* Для случаев, когда наблюдаются случайные фазы для различных мод [4].

показано, что на основе квантовых проволок может быть в принципе создан "полный набор элементов, функционально аналогичных обычным элементам микроэлектроники" [14].

## Результаты теории неупорядоченных систем

Появлению квантовых проволок предшествовали интенсивные исследования в области мезоскопической физики, в частности, по интерференционным эффектам в неупорядоченных системах. Было установлено, что ряд явлений, правил и свойств, в частности, поправки к проводимости в режиме слабой локализации, флуктуации кондактанса в проводниках, эффекты Ааронова—Бома, неаддитивность последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей и некоторые другие могут быть объяснены квантовой интерференцией. Хорошие обзоры по данным вопросам приведены в статьях [15, 16], монографиях [17, 18] и учебном пособии [19]. Поэтому здесь лишь кратко остановимся на ключевых результатах, так как они все же важны для дальнейшего изложения и понимания материала.

Так, принципиально важным для объяснения поведения мезоскопических систем является использование квантово-механических законов и положений (в этом плане они схожи с микроскопическими системами), что связано с проявлением влияния дискретности спектра носителей заряда, а также эффектов их квантовой интерференции, что начинает существенно сказываться на самых различных характеристиках данных систем. Именно эти два фактора и "роднят" теории неупорядоченных систем и квантовых проволок.

Одним из наиболее существенных первых результатов в направлении исследования неупорядоченных систем была теория локализации Андерсона [20] и ее последующее развитие [15—18]. Оказывается, что при достаточно сильном беспорядке происходит локализация состояний. В целом, энергетический спектр неупорядоченной конденсированной системы более разнообразный, чем в упорядоченной. В результате было показано, что, например, одномерные\*\*\* и двумерные\*\*\* металлические системы не являются в поведенческом смысле истинными металлами. Более того, в трехмерных системах возможен переход металл—диэлектрик (переход Андерсона).

Дальнейшим существенным шагом была разработка скейлинговой теории локализации [18] в зависимости от размерности образца  $d$ . При этом выделяют режимы слабой, когда квантовые поправки к проводимости малы, и сильной локализации. В целом, в настоящее время считается, что при достаточно

\*\*\* Здесь под размерностью часто подразумевают число пространственных координат в соответствующей модели системы (более детально вопрос рассмотрен в [18]). Не следует ее отождествлять с размерностью в обычном квантово-механическом смысле [1]. Поэтому в литературе в рассматриваемом случае добавляется приставка "квази 1D-система". Этим также подчеркивается, что реальные системы не являются чисто одномерными [21].

сильном беспорядке все или почти все состояния — локализованные [18]. При промежуточной степени беспорядка (для  $d > 2$ ) могут возникать как локализованные, так и делокализованные состояния в заштрихованной зоне [18].

В результате этого существенно может изменяться картина кинетических явлений. В режиме локализации состояний возможны следующие процессы термоактивированной проводимости [18]:

- активация на край подвижности;
- активация в соседнее локализованное состояние;
- прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка.

Наряду с прыжковой (надбарьерной) проводимостью возможны также последовательное (нерезонансное) и резонансное туннелирование [17]. Принципиально важным для описания транспортных свойств становится учет различных взаимодействий, а именно: электрон-фононных, электрон-электронного и др. Интересно заметить, что фононы могут как разрушать локализацию, так и усиливать ее [17].

Вычисляемыми параметрами для неупорядоченных систем являются: плотность состояний, проводимость (кондактанс), другие кинетические коэффициенты, диэлектрическая проницаемость, средний коэффициент прохождения, радиус локализации волновой функции и др. Модели, как правило, строятся в одночастичном приближении в рамках формализмов волновых функций или функций Грина в сочетании с различного рода приближениями. Для описания беспорядка вводятся разнообразные зависимости потенциала в неупорядоченной системе [15–17]. Существенную роль при этом могут оказывать корреляционные эффекты.

Наиболее полной в настоящее время считается теория проводимости для одномерных неупорядоченных систем [15–17]. При построении моделей используются: одночастичное приближение, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод корреляционных функций ток–ток (метод Кубо), метод сильной связи, функции Грина (диаграммные техники), метод Монте-Карло, метод ренормгруппы и др. При этом могут применяться различные приближения теории возмущений.

Особенно важным для развития мезоскопической физики при изучении транспортных свойств являлось создание двух формализмов для описания проводимости (кондактанса) на основе формулы линейного отклика Кубо [22] (формализм Кубо, формализм Кубо—Гринвуда, 1957—1958 гг.)\* и формулы Ландауэра [23, 24] (формализм Ландауэра, формализм Ландауэра—Буттикера)\*. Разработка этих формализмов происходила практически параллельно (одновременно) с началом развития мезоскопической физики, в частности, теорией локализации Андерсона, эффектами Ааронова—Бома. В целом, они

\* В литературе встречаются именно такие названия формализмов.

могут приводить к эквивалентным результатам (см. далее).

В формализме линейного отклика Кубо (*R. Kubo*) получено несколько формул для проводимости и ее составляющих через корреляционную функцию [22]. В квантово-механическом случае исходным при их выводе является уравнение Лиувилля—фон Неймана для матрицы плотности. Далее используется линейное приближение и получаются выражения для тензора электропроводности, т. е. функции линейного отклика ток — внешнее электрическое поле через корреляционную функцию ток—ток. Были также выведены формулы для симметричной и антисимметричной частей статической электропроводности. В случае плоскополяризованного излучения получено выражение для электропроводности, соответствующее известной теореме Найквиста [22]. Заметим, что выведенная Кубо формула (формулы) представляет, как пишет сам автор, "наиболее общую форму соотношения Эйнштейна, связывающего электропроводность или подвижность с коэффициентом диффузии" [22].

В целом, с помощью формализма Кубо получен ряд важных результатов при изучении кинетических свойств неупорядоченных систем в различных случаях (см., например, [17, 18]). При вычислении корреляционных функций с помощью теории возмущений можно использовать известные методы теории многих тел, в частности, методы расщепления уравнений для функций Грина, диаграммные техники и др. Преимущество этих методов — возможность учета коллективных эффектов. Однако расчет проводимости с помощью теории возмущений в формализме Кубо довольно сложен, так как в некоторых случаях необходимо частичное суммирование бесконечного ряда [25].

Рассмотрение движения невзаимодействующих электронов проводимости металла в допущении о беспорядочности распределения центров рассеяния в кристалле приводит к удобной формуле Гринвуда (*D. A. Greenwood*) для электропроводности [22], которая достаточно часто используется в рамках описываемого формализма в качестве исходной (см., например, [17, 18]).

Остановимся на одном недостатке, характерном для формул, получаемых в рамках рассматриваемого формализма. Так, формула Кубо, строго говоря, применима для бесконечных систем с непрерывным спектром [18]. В то же время важное влияние на интерференционные явления, наряду с процессами неупругого рассеяния часто оказывает окружение\*\* (резервуар), которое может приводить к разрушению когерентности волн носителей заряда, т. е. к дефазировке. Для конечных систем с дискретным спектром для учета слабого взаимодействия с резервуаром необходимо вводить уширение уровней, что приводит к необходимости модификаций в

\*\* К нему могут быть отнесены и контакты.

формулах [18]. Таким образом, в формализме Кубо—Гринвуда дополнительно вводится параметр, характеризующий уширение уровней спектра системы вследствие взаимодействия с резервуаром, т. е. взаимодействие учитывается в определенной степени неявно. Часто это бывает неудобно.

Отмеченного недостатка лишен формализм Ландауэра (*R. Landauer*) [23, 24, 26], дополненный Буттикером (*M. Buttiker*) [27—29] и коллегами (см., например, [18]) (формализм Ландауэра—Буттикера).

Формализм Ландауэра первоначально был предложен для случая вычисления кондактанса систем с одним каналом с двумя подходящими контактами (одноканальная двухтерминальная формулировка). Однако, так как рассматриваться может мезоскопическая система, то кондактанс такой системы часто обладает необычными свойствами по сравнению с обычными резисторами.

В 1957 г. Ландауэр рассмотрел в одномерном случае потенциальный (рассеивающий\*) барьер, подсоединенный идеальными одномерными проводниками с двумя резервуарами (контактами), характеризующимися фиксированными значениями химических потенциалов  $\mu_1$  и  $\mu_2$ , причем  $\mu_1 - \mu_2 = qV$ , где  $q$  — заряд электрона, а  $V$  — прикладываемое напряжение. Если  $T$  — коэффициент прохождения, а  $R$  — коэффициент отражения барьера, то кондактанс барьера (с учетом спина) определяется формулой [23, 24]

$$G = \frac{q^2 T}{\pi \hbar R}, \quad (1)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ . В то же время кондактанс системы (барьер, проводники и контакты), т. е. измеряемый между двумя контактами, отличается и равен

$$G_c = \frac{q^2}{\pi \hbar} T. \quad (2)$$

Замечу, что формулы (1) и (2) вызвали многочисленные дискуссии в литературе ("какая из них правильная?"), пока не было достигнуто понимание того, что "они описывают разные физические величины" [18]. Следовательно, формула Кубо может дать значение кондактанса  $G$  и, строго говоря\*\*, для нас не подходит. Эти результаты фактически подтвердили принципиальную важность рассмотрения системы в целом, а не отдельных ее составляющих. Важно также отметить, что под "барьером" может пониматься любой объект, например, рассеивающий центр, отрезок линейной цепочки и т. п., что и делает удобным применение формализма Ландауэра к мезоскопическим (одномерным) системам с двумя контактами.

Дальнейшими важными шагами в развитии формализма Ландауэра являлись его обобщения на мно-

гоканальный и многотерминальный случаи, которые необходимы для рассмотрения систем на квантовых проволоках с многими контактами, т. е. приборных структур, более сложных по сравнению с резистором, диодом и т. п., а также в случае конечных температур.

Вследствие дискретности спектра в квантовой проволоке в общем случае имеем  $N$  проводящих каналов, а следовательно, необходимо рассматривать многоканальный вариант. Обобщение формализма Ландауэра на этот случай было проведено с использованием матрицы рассеяния в работах [30, 31] при нулевых температурах, а также с применением других подходов\*\*\* в статьях [32—34]. При конечных температурах для двухтерминального (двух контактов) случая выражение для кондактанса (с учетом спина) было получено Имри [18]:

$$G_c = \frac{q^2}{\pi \hbar} \int dE \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_i T_i(E), \quad (3)$$

где  $E$  — энергия;  $f$  — функция распределения;  $T_i$  — коэффициент прохождения для  $i$ -го канала.

Важнейшими результатами применения формализма Ландауэра является установленная возможность неаддитивности последовательных сопротивлений и параллельных проводимостей мезоскопических систем (см., например, [18]).

Наиболее существенное обобщение было проведено Буттикером для четырехтерминального (четыре контакта) случая\*\*\*\* в статье [27]. При этом в образце (структуре) допускались процессы упругого рассеяния. Все процессы неупругого рассеяния происходят только в резервуарах (контактах). Процессы упругого рассеяния образца описывались с помощью коэффициентов прохождения носителей  $T_{ij}$  из  $j$ -го контакта в  $i$ -й и соответствующих коэффициентов отражения  $R_{ij}$ . В результате, кроме проводимости было получено полезное в мезоскопической физике выражение для тока  $i$ -го контакта (без учета спина), а именно [27]:

$$I_i = \frac{q}{2\pi \hbar} \left[ (1 - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j \right], \quad (4)$$

где  $\mu_j$  — химический потенциал  $j$ -го резервуара (контакта). Соотношение (4) справедливо и для более общего  $n$ -терминального случая. В многоканальном случае выражение (4) модифицируется путем замены 1 на  $N_i$ , где  $N_i$  — число каналов для  $i$ -го терминала (контакта) [29]. Отметим, что получаемые кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношениям симметрии онсагеровского типа (теорема взаимности) [18, 27, 29]. Это свойство является важ-

\* Иногда в зарубежной литературе рассматриваемый формализм образно называется "рассеивающий подход" ("scattering approach").

\*\* Необходимы отмеченные ранее модификации.

\*\*\* Интересно заметить, что при обобщении может использоваться теория линейного отклика Кубо (см., например, [33, 34]).

\*\*\*\* Именно поэтому в литературе рассматриваемый формализм часто называется формализмом Ландауэра—Буттикера.

ным физическим преимуществом многотерминальной формулировки Буттикера по сравнению с другими соотношениями для контактанса в подобных случаях [18].

Оригинальный и простой способ учета влияния процессов неупругого рассеяния непосредственно в образце был также предложен Буттикером [28]. В этом случае задача учета влияния неупругого центра рассеяния заменяется эквивалентной задачей путем подключения к образцу дополнительного резервуара (контакта) с двумя каналами, дающими в сумме нулевой ток. В результате может быть использована многотерминальная формулировка, описанная выше, и для этого практически важного случая, т. е. решаться гораздо более простая стационарная задача для процессов упругого рассеяния. Следует заметить, что данный способ с успехом применялся для построения упрощенной модели двухбарьерной резонансно-туннельной структуры в рамках описанного формализма [35].

В целом, *формализм Ландауэра—Буттикера является едва ли ни главным при построении модели приборных структур на квантовых проволоках*. В связи с этим не следует забывать о предположениях, лежащих в его основе, а именно:

- контакты находятся в термодинамическом равновесии;
- процессы неупругого рассеяния происходят только в контактах;
- в самой структуре без контактов могут иметь место только упругие процессы рассеяния;
- контактанс вычисляется исходя из коэффициентов прохождения и отражения.

Их следствием является то, что *этот формализм, строго говоря, применим для анализа внешних, а не внутренних характеристик структур, которые близки к состоянию равновесия*. К сожалению, об этом часто забывают.

### Квантовые проволоки

В своей пионерской работе Сакаки (*H. Sakaki*) [36] теоретически показал, что в "ультратонкой полупроводниковой проволоке" ("*ultrafine semiconductor wire*") с размерами в поперечном прямоугольном сечении, сравнимыми с длиной волны де Бройля электронов в каждом из измерений, возможно существенное снижение упругого рассеяния. В результате такая одномерная (1D) система может обладать сильно возросшей подвижностью электронов. Это было показано с помощью оценки подвижности, ограничиваемой рассеянием на удаленной ионизированной примеси, которое доминирует над другими процессами рассеяния при низких температурах, как считал автор [36]. Впоследствии такие структуры были названы "квантовыми проволоками" ("*quantum wires*"). Как предполагал Сакаки, данное свойство таких проволок может найти широкое применение в различных электронных приборах [36]. Экспери-

ментальная реализация квантовых проволок не заставила себя долго ждать [37].

Подвижность является важнейшим электрофизическим параметром не только объемных материалов, но и таких искусственных систем, какими являются квантовые проволоки. Поэтому после работ Сакаки были начаты интенсивные исследования в этом направлении. Так, в статье [38] было показано, что ситуация оказывается не столь простой, поскольку необходимо учитывать другие механизмы рассеяния, в частности, на ионизированной примеси в самой квантовой проволоке и на акустических фононах. Подвижность в этих случаях может ограничиваться, а следовательно, вклад этих механизмов рассеяния не должен игнорироваться при анализе. В целом, было показано, что подвижность в квантовых проволоках на GaAs может не увеличиваться по сравнению с 3D-системами [39]. Дополнительное отрицательное в этом же плане влияние может оказывать рассеяние на полярных оптических фононах [39—41], а также температура окружающей среды [39, 41].

Необходимо заметить, что применение приближения времени релаксации проблематично для учета процессов неупругого рассеяния, таких как рассеяние на полярных оптических фононах, что отмечали сами авторы статьи [39]. Для более детальных по сравнению с [38] расчетов для вычисления волновых функций использовались приближения эффективной массы, а также бесконечно глубокой потенциальной ямы в поперечном сечении прямоугольной квантовой проволоки [39]. При этом подвижность электронов при малых полях в приближении времени релаксации вычислялась численно в квантово-размерном пределе\* на основе полученных упрощенных аналитических выражений. Существенное влияние на времена релаксации момента импульса для различных механизмов рассеяния может оказывать и учет экранирования в квантовых проволоках [42, 43].

Различное влияние на рассеяние в квантовых проволоках, как было установлено, оказывают и другие факторы и процессы, а именно: границы раздела материалов; шероховатости поверхности проволоки; непараболичность зон; кристаллографическая ориентация; межподзонные и внутривидовые переходы; геометрическая форма сечения проволоки; электрон-электронные и даже трехчастичные процессы; неравновесные ("горячие") фононы; спин электронов и др. В целом, зависимость полной скорости рассеяния от энергии обычно характеризуется острыми пиками, что в значительной степени является следствием резонансной структуры плотности состояний в квантовых проволоках [44]. Под влиянием множества реальных факторов и процессов может происходить скорее уменьшение подвижности, чем

\* В литературе на русском языке встречается термин "электрический квантовый предел".

ее увеличение, что отмечалось, например, в [45] при учете некоторых механизмов рассеяния.

Не менее важным при изучении транспортных свойств может быть также учет изменения эффективных масс в квантовых проволоках (см., например, [46] и далее), так как традиционно при анализе приборов на их основе используется метод эффективной массы.

Одним из главных недостатков ряда моделей квантовых проволок (и приборных структур на их основе) является неучет (или ограниченный учет) различных механизмов рассеяния в них. Многие модели разработаны лишь для баллистического режима транспорта\*, хотя необходимо напомнить, что в первой работе Сакаки (см. ранее) по квантовым проволокам была показана принципиальная необходимость учета рассеяния в таких структурах. Весьма продуктивно для рассматриваемых целей в настоящее время используются методы Монте-Карло.

Модели, основанные на полуклассических методах Монте-Карло, как правило, предназначены для расчета дрейфовой скорости в стационарном и нестационарном случаях, средних значений кинетической энергии электронов. В стационарном случае может использоваться не многочастичный, а одночастичный метод Монте-Карло. Обычно моделируются квантовые проволоки на GaAs.

Дрейфовая скорость в квантовой проволоке на GaAs исследовалась в работе [47] в электрическом квантовом пределе (электроны занимают нижнюю подзону) в приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы при температурах 30 К и 300 К. Учитывалось только рассеяние на полярных оптических фононах. Показано, что подвижность для 1D-системы может быть выше, чем для 3D-случая.

Дрейфовая скорость, средняя энергия и коэффициент диффузии в квантовой проволоке на GaAs квадратного поперечного сечения анализировались в работе [48] при температурах 30, 77 и 120 К. При моделировании учитывалось рассеяние на акустических и продольных оптических фононах.

Процессы установления стационарного состояния в квантовых проволоках квадратного поперечного сечения на GaAs при приложении электрического поля исследовались в работе [49] при температурах: 4,2; 77; 300 К. Использовался многочастичный метод Монте-Карло для расчета дрейфовой скорости и средней энергии. Учитывался только один уровень и рассеяние на полярных оптических фононах.

Квантовая проволока квадратного сечения на GaAs в электрическом квантовом пределе в приближении бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы исследовалась в [50, 51]. Анализиро-

\* Такой режим работы, как правило, реализуется в коротких структурах и/или при низких температурах, что нередко и имеет место на практике. Кроме того, рассмотрение этого режима полезно для оценки потенциальных (предельных) характеристик структур.

вались дрейфовая скорость и средняя энергия. В модели учитывались механизмы рассеяния на полярных оптических фононах, на ионах примеси и неоднородностях поверхности. Для моделирования стационарных процессов использовался одночастичный метод Монте-Карло [50, 51]. Показано, что при больших полях основное влияние на дрейфовую скорость оказывает рассеяние на полярных оптических фононах и неоднородностях поверхности. Для моделирования нестационарных процессов применялся многочастичный метод Монте-Карло [50, 51]. Установлено, что примесное рассеяние и рассеяние на шероховатостях могут оказывать значительное влияние на переходные процессы в квантовых проволоках. В монографии [51] с использованием разработанного алгоритма исследовались также квантовые проволоки на Si.

Очень часто расчет параметров, характеризующих транспорт в квантовых проволоках, проводится в предположении электрического квантового предела. Однако исследования показывают, что в ряде случаев может быть важно межподзонное рассеяние.

Модель, описывающая многоподзонный перенос в квантовых проволоках, была предложена в работе [52]. В ней использовался одночастичный метод Монте-Карло, включалось рассеяние на полярных оптических и акустических фононах, привлекалось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. С помощью модели рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения квантовой проволоки на основе GaAs—Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-структуры при температуре 300 и 77 К; анализировалось влияние изменения ограничивающего потенциала. В целях экономии памяти ЭВМ рассматривался не большой энергетический интервал. Отмечается сложность: большие пики в интенсивностях рассеяния могут приводить к артефактам (не физическим результатам) для функции распределения. Установлено, что подвижность может быть в два раза больше, чем в объеме при температуре 300 К.

Осцилляции фотопроводимости и отрицательная проводимость в прямоугольных квантовых проволоках на GaAs, погруженных в AIs, исследовались в работе [53] с помощью одночастичного и многочастичного методов Монте-Карло. Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой. В модели учитывалась многоподзонная структура и рассеяние на продольных оптических фононах и локализованных поверхностных оптических фононах. В стационарном режиме при моделировании по одночастичному методу Монте-Карло оценивалось влияние рекомбинации электронов. В работе также анализировалась дрейфовая скорость и средняя энергия. Исследования проведены для температур 10; 77 и 300 К.

Стационарные и переходные процессы в квантовой проволоке на GaAs квадратного сечения моделировались при температуре 77 и 300 К в работе [54] с помощью многочастичного метода Монте-Карло.

Потенциальная яма предполагалась бесконечно глубокой. Учитывалось анизотропия эффективной массы, а также рассеяние на полярных оптических фононах и междолинное рассеяние. Анализировались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения. В работе было получено удовлетворительное согласие результатов с таковыми для упрощенной полуклассической модели, основанной на уравнениях сохранения момента и энергии в приближении времени релаксации.

Исследования магнетотранспорта в квантовой проволоке на GaAs при 77 и 300 К проведены с помощью метода Монте-Карло в работе [55]. Влияние магнитного поля учитывалось путем использования закона дисперсии, плотности состояний и интенсивностей рассеяния, определяемых численно, исходя из первых принципов. В модель включалось рассеяние на оптических, акустических и поверхностных оптических фононах. Рассчитывались дрейфовая скорость, средняя энергия и функция распределения электронов по скоростям. Показано, что магнитное поле может увеличивать дрейфовую скорость.

Важный для квантовых методов Монте-Карло анализ был проведен в обзоре [56]. В нем было показано, что формализм функций Вигнера более удобен по сравнению с формализмами матриц плотности, функций Грина, интегралов по траекториям, в частности, при построении моделей квантового переноса в полупроводниках на основе метода Монте-Карло ввиду аналогии с полуклассическим подходом. Отмечено, по каким причинам метод кинетического уравнения Больцмана (КУБ) оказывается часто достаточно адекватным вне своих формальных пределов применимости. Для этого в традиционно используемом приближении эффективной массы получен вид уравнения Лиувилля—фон Неймана, подобный КУБ. Из него также выведены интегральные уравнения, удобные для применения методов Монте-Карло, аналогичные полуклассическим.

К сожалению, непосредственно использование уравнения Лиувилля—фон Неймана для моделирования структур практически невозможно [1]. В связи с этим в работе [57] в рамках формализма функций Вигнера были получены два более простых кинетических уравнения Левинсона и Баркера—Ферри, обобщенные для электрон-фононных систем в квантовых проволоках. Основными приближениями являются слабое взаимодействие, равновесие фононов, а также приближение случайных фаз. Выведены удобные в применении интегральные формы уравнений. В качестве примера моделировались переходные процессы в квантовой проволоке на GaAs квадратного сечения при нулевом электрическом поле и очень низких температурах. Учитывалось рассеяние на полярных оптических фононах. При расчете применялся обращенный во времени метод Монте-Карло. Были проанализированы эволюция во времени функции Вигнера, электронной плотно-

сти и средней энергии. К сожалению, несмотря на введенные упрощения, временные затраты ЭВМ растут экспоненциально с увеличением времени эволюции. Поэтому доступны для моделирования времена в несколько сотен фемтосекунд. Для рассмотрения больших времен эволюции необходима разработка специальных ускоряющих процедур и использование новых возможностей вычислительной техники.

И в то же время учет дополнительных квантовых эффектов при моделировании целесообразен. Так, в работе [58] исследовался электронный транспорт в квантовых проволоках прямоугольного сечения на GaAs при больших электрических полях и температуре  $T = 300$  К. С помощью кинетического уравнения Баркера—Ферри для одночастичной функции распределения учтены квантовый внутрисоударительный полевой эффект, а также межподзонное рассеяние на продольных оптических фононах. Потенциальный барьер на границах квантовых проволок предполагался бесконечным. Для решения уравнения использовался метод Монте-Карло. Было показано, что дрейфовая скорость электронов значительно уменьшается при средних электрических полях вследствие указанного квантового эффекта как для тонких ( $7 \times 10$  нм), так и для толстых ( $30 \times 30$  нм) проволок. Для этого проводилось сравнение с полуклассической моделью на основе КУБ. Эти данные, с одной стороны, подчеркивают важность учета квантово-механических коррекций при моделировании квантовых проволок, а с другой — возможный рациональный и более или менее эффективный путь применения методов Монте-Карло.

Кроме того, следует заметить, что при учете рассеяния только на потенциальном профиле, задаваемом приближенно, кинетическое уравнение для функции Вигнера может быть решено для резисторов на квантовых проволоках с помощью метода Монте-Карло, аналогичного описанному в [59], за приемлемое время на ПЭВМ [60, 61].

*Один из существенных недостатков методов Монте-Карло при моделировании квантовых проволок заключается в том, что флуктуации физических величин в них могут быть большими, а следовательно, для получения физически разумных результатов требуются существенные затраты вычислительных ресурсов ЭВМ.*

Альтернативным в рамках полуклассического подхода является использование КУБ. Так, в работе [62] была разработана дискретная модель на основе КУБ для достаточно длинной квантовой проволоки на GaAs в условиях вырождения. При этом учитывалось рассеяние на примеси и оптических фононах, межподзонное рассеяние. Применялось приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы. В работе анализировалась функция распределения, дрейфовая скорость и средняя энергия при низких температурах.

И в то же время в работе [63] с использованием метода Монте-Карло было установлено, что линейная аппроксимация КУБ может приводить к ошибочным для квантовых проволок результатам.

Анализ показывает, что многое в получаемых результатах зависит не только от того, какие приближения используются, например число включенных в рассмотрение подзон, но и от того, какие механизмы рассеяния учитываются, а также от адекватности моделей для интенсивностей рассеяния. Бесспорно важной информацией является энергетический спектр носителей заряда в квантовых проволоках. Строго говоря, здесь необходимо дополнительно самосогласованно решать уравнения Шредингера и Пуассона. Кроме того, многое зависит и от граничных условий. С учетом существенных затрат вычислительных ресурсов ЭВМ чрезвычайно актуальной становится задача разработки различных ускоряющих процедур в рамках методов Монте-Карло.

В случае, когда размеры структуры соизмеримы с длиной фазовой когерентности  $\lambda_\phi$ , особенно при низких температурах, использование полуклассических моделей становится неоправданным, и необходимо применять модели квантово-механических формализмов. В данных случаях, однако, временные затраты могут становиться просто гигантскими даже при использовании программ, реализующих параллельные алгоритмы вычислений и предназначенных для суперЭВМ. Так, при расчете одной точки вольт-амперной характеристики (ВАХ) простейших мезоскопических структур с учетом рассеяния только на полярных оптических фононах с применением метода Монте-Карло в рамках формализма функций Вигнера требуется около 30 ч на 100 CPU — Cray T3E вычислительной системе [64].

В целом, для адекватного моделирования электрофизических характеристик квантовых проволок необходимо учитывать целый комплекс факторов и процессов из отмеченных ранее. Так, в работе [65] изучалась электронная подвижность в малых электрических полях протяженных цилиндрических кремниевых квантовых проволок диаметром от 3 до 14 нм, окруженных диэлектриком толщиной 1 нм и металлическим затвором, при  $T = 300$  К в рамках формализма Кубо—Гринвуда и самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона. Учитывались кулоновское, внутридолинное на акустических фононах, междолинное (6 типов) и на шероховатостях поверхности механизмы рассеяния, а также непараболичность зоны. Показано, что результаты могут противоречить полученным ранее в электрическом квантовом пределе, в частности, при учете экранирования.

В связи с изложенным разработка моделей различных параметров (подвижности, эффективной массы, времен релаксации, скоростей рассеяния, диэлектрической проницаемости, плотности состояний и др.) квантовых проволок представляется чрезвычайно актуальной. Тут еще многое предстоит сделать.

Перейдем к рассмотрению упрощенных моделей квантовых проволок, которые непосредственно использовались для расчета кондактанса, ВАХ. Для этих целей при вычислении кондактанса или удельного сопротивления, как правило, применяются описанные ранее формализмы Кубо—Гринвуда и/или Ландауэра—Буттикера. Так как основной задачей становится расчет коэффициентов прохождения и отражения системы, то использоваться могут отмеченные ранее квантово-механические формализмы [1]: волновых функций; матриц плотности; функций распределения Вигнера; функций Грина; фейнмановских интегралов по траекториям.

Простые расчетные формулы для проводимости и удельного сопротивления квантовых проволок с прямоугольным сечением были получены в работе [66]. При рассмотрении учитывалось рассеяние на акустических фононах и точечных дефектах.

Плотность состояний проводимости одномерных каналов в кремниевых инверсионных слоях исследовались в работе [67]. При расчете проводимости на основе формулы Кубо учитывалось пространственное квантование, межподзонное рассеяние, рассеяние на заряженной примеси, экранирование, уширение уровней и влияние температуры (не более 10 К). Использовалась теория возмущений и формализм функций Грина. Квантовая яма рассматривалась прямоугольной или параболической. Сравнение с экспериментальными данными для полевых транзисторов с решеточным затвором с 250 одномерными каналами в инверсионном слое [68] показало хорошее качественное согласование.

Упрощенная модель кондактанса "двумерного резистора" на квантовой проволоке была представлена в статье [69]. Транспорт электронов предполагался баллистическим с прерывающимися его процессами упругого рассеяния на случайно расположенных примесях в многомодовом режиме (30 мод). Для каждой из мод предполагался параболический закон дисперсии. Использовался формализм Ландауэра (при температуре  $T = 0$  К), а при вычислении коэффициентов прохождения применялся метод матрицы рассеяния [31]. Было проведено сравнение результатов моделирования резистора на основе квантово-механической модели и полуклассической модели, соответствующей закону Ома. В статье также дана оценка кондактанса для случая двух параллельно расположенных резисторов (электростатический эффект Ааронова—Бома). В последующей более подробной статье авторов [70] было проведено моделирование при учете от 10 до 40 мод. При вычислении матриц рассеяния для каждого из центров использовалось борновское приближение в рамках формализма волновых функций [70]. Было осуществлено сопоставление с результатами, полученными ранее для неупорядоченных систем, в частности, в режимах слабой и сильной локализации, исследованы флуктуации кондактанса. В целом, подтверждено согласие со скейлинговой теорией локализации [70].

Кондактанс и его различные составляющие в стационарном случае (в рамках теории линейного отклика в борновском приближении) квантовых проволок был рассмотрен в работе [71]. Поперечное квантование учитывалось с помощью аппроксимаций, соответствующих для прямоугольной и параболической квантовой ямы, а в вертикальном направлении — для треугольной ямы. Рассматривались процессы рассеяния на примесях и электрон-электронные взаимодействия в присутствии примесей. Применялся метод эффективной массы для описания транспорта вдоль проволоки.

Метод согласования мод [69, 70] для волновых функций при решении уравнения Шредингера использовался в работе [72] для детального исследования влияния одного рассеивающего центра в квантовой проволоке бесконечной длины. Рассеяние предполагалось упругим. Анализировались два случая: потенциал рассеивающего центра (притягивающего или отталкивающего) аппроксимируется  $\delta$ -функцией или прямоугольной формой. Для дефекта конечного размера использовался метод матриц переноса (трансферных матриц). Кондактанс рассчитывался с применением формализма Ландауэра—Буттикера (с учетом от 6 до 100 мод).

Квантовые проволоки (цепочки) с дефектами и шероховатостями и контактами (резервуарами) анализировались в работе [73] с помощью метода матриц переноса. В уравнении Шредингера использовался гамильтониан Андерсона, а кондактанс вычислялся в рамках формализма Ландауэра.

Ситуация может сильно меняться в случае учета влияния магнитного поля [5]. Так, в работе [74] были исследованы флуктуации кондактанса фактически для "двумерного резистора" на основе квантовой проволоки в данном случае. Потенциал рассеивающего центра аппроксимировался  $\delta$ -функцией. Для анализа использовался метод матрицы рассеяния и формализм Ландауэра—Буттикера. При расчете кондактанса квантовых проволок при вычислении коэффициентов прохождения могут применяться и функции Грина [75].

В статье [76] с помощью методов согласования мод и матрицы рассеяния [69, 70] рассчитывался кондактанс квантовой проволоки с учетом рассеяния на шероховатостях. При моделировании рассматривалась бесконечная полоска, содержащая конечную область рассеяния со случайными флуктуациями ширины проволоки. Метод матрицы рассеяния использовался вследствие его численной устойчивости, так как метод матриц переноса может быть неприменим при длинах области рассеяния протяженностью, большей по сравнению с длиной волны де Бройля [76]. Расчет кондактанса осуществлялся с помощью формулы Ландауэра для многоканального случая. При этом учитывалось 50 мод. Анализ показал, что флуктуации кондактанса происходят не вследствие "классического рассеяния" от шероховатостей границ, а в результате модуляции

фазы волн из-за многократных их отражений в проволоке.

Метод согласования мод с успехом использовался для иллюстрации важности трехмерности контактов (резервуаров) к квантовым проволокам на основе GaAs при расчете кондактанса [77].

Интересный вывод получен в работе [78], в которой было показано, что в ряде случаев использование метода согласования мод в рамках формализма волновых функций приводит к полностью идентичным соотношениям для расчета кондактанса квантовых проволок, получаемым с применением формализма функций Грина.

В работе [79] была предложена двухзонная аппроксимация решения уравнения Шредингера для описания рассеяния в электронном квази1D-волноводе. Моделирование было проведено для различных случаев, включая одномерный волновод с донорной примесью и связанный с резонатором. Для расчета кондактанса применялась формула Ландауэра.

Существенное влияние на ВАХ резистора на квантовой проволоке оказывает температура окружающей среды. Использование даже простых моделей, основанных на теории линейного отклика в бесстолкновительном приближении и формуле Ландауэра—Буттикера, позволяет показать, что возможно не только "размытие" (лестницы кондактанса) ВАХ, но и появление на них области насыщения при больших напряжениях (см., например, [80, 81]).

Для исследования кондактанса квантовых проволок (одномерных решеток) с одной примесью или квантовой точкой (резонансно-туннельная структура) при конечных температурах может применяться упрощенный метод функционала ренормгруппы [82].

Использование формализма Келдыша [83] в модели неоднородной жидкости Томанаги—Латтинджера (*Tomonaga—Luttinger*) позволило провести упрощенный анализ влияния единичной примеси, температуры, длины и смещений на кондактанс, ВАХ и характеристики шумов квантовой проволоки с двумя контактами [84].

Квантовый и классический методы молекулярной динамики применялись для исследования структуры и энергетических свойств четырех различных видов кремниевых квантовых проволок [85]. Проводимость вычислялась с помощью приближения гамильтониана переноса для проволок с длиной от 4 до 9 нм.

Кремниевая квантовая проволока с поверхностными шероховатостями и с двумя полубесконечными квантовыми проволоками в качестве электродов анализировалась в работе [86]. Для этого использовались метод сильной связи ( $sp^3$ -модель) и формализма Кубо—Гринвуда и Ландауэра—Буттикера. Кондактанс в рамках последнего формализма определялся с помощью рекурсивного вычисления функций Грина. В работе изучались плотность состоя-

ний, средняя длина свободного пробега, подвижность и кондактанс.

В целом, при построении упрощенных моделей кондактанса квантовых проволок и резисторов на их основе часто используются формализм волновых функций, метод матрицы рассеяния, метод матриц переноса, метод согласования мод, функции Грина, модель жидкости Латтинджера, формализм Ландауэра—Буттикера и Кубо—Гринвуда.

Проведенный анализ показывает, что даже для простейших структур на квантовых проволоках требуется одновременный учет широкого спектра факторов и процессов. Достичь этого в рамках описанных ранее упрощенных моделей в общем случае не удастся. Необходимо разработка более сложных численных моделей. Неплохие обзоры таких моделей приведены, например, в [87—89].

Важным следующим шагом в развитии формализма Ландауэра—Буттикера была разработка приближенного метода Датты (*S. Datta*) с соавторами [5, 90—92], который рассматривался при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Существенным моментом метода для мезоскопических систем является обобщение многотерминальной формулы Буттикера для тока типа (4) на случай непрерывного распределения зондов напряжения (терминалов) в виде [92]:

$$I(\mathbf{r}) = \frac{q^2}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r}' T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\mu(\mathbf{r}') - \mu(\mathbf{r})], \quad (5)$$

где  $I(\mathbf{r})$  — ток;  $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  — описывает вероятность (плотность вероятности прохождения) того, что электрон, испытав разрушающее фазу рассеяние в точке  $\mathbf{r}'$ , последующее подобное рассеяние претерпевает в точке  $\mathbf{r}$ ;  $\mu(\mathbf{r})$  — электрохимический потенциал в точке  $\mathbf{r}$ . Соотношение (5) было выведено из достаточно общего квантового кинетического уравнения в рамках формализма Келдыша—Каданова—Бейма [13] с применением ряда приближений. Это позволило также получить уравнения для вычисления функции  $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  и упрощенное квантовое кинетическое уравнение для электрохимического потенциала  $\mu(\mathbf{r})$  в интегральной форме. Очень важным преимуществом метода по сравнению с рассмотренными ранее моделями в рамках формализма Ландауэра—Буттикера и Кубо—Гринвуда является возможность вычисления внутренних характеристик — плотности электронов и плотности тока в структуре. Электростатический потенциал находится в результате решения линеаризованного уравнения Пуассона. Эти характеристики, как известно, имеют принципиальное значение для анализа физических процессов непосредственно в структурах. Важным достоинством метода является также возможность включения в рассмотрение различных диссипативных процессов. Наиболее существенный недостаток — большое число независимых переменных даже в стационарном случае, а именно:  $\mathbf{r}$ ,  $k$  (волновой вектор),  $E$ .

Поэтому для его реализации на практике в исходном квантовом кинетическом уравнении необходимо использовать много дополнительных аппроксимаций и условий. В результате, моделирование структур возможно в режиме линейного отклика при малых прикладываемых смещениях, низких температурах, только для электронов зоны проводимости, для простой модели процессов рассеяния и др. [92]. Об этом, к сожалению, часто забывают другие авторы, применяющие этот метод. Серьезным его недостатком является и нарушение консервативности плотности тока на границе "прибор—контакт".

С использованием описанного метода было проведено численное моделирование ряда простых структур [92]: проволоки с туннельным барьером в ее середине в одномодовом режиме; квантовых проволок с контактами в одно- и многомодовом режиме; сужений различной формы и др. Для построения дискретной модели использовался метод сильной связи для преобразования гамильтониана и получения соответствующего уравнения Дайсона в матричной форме для функции Грина. Подробно метод ее нахождения описан в [92]. После этого может быть вычислена функция  $T_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  и решено уравнение для электрохимического потенциала в структуре  $\mu(\mathbf{r})$ , что представляет собой чрезвычайно сложную задачу [92]. Затем находятся плотность тока, токи терминалов и электростатический потенциал [92]. Отмечу, что несмотря на сложность дискретной модели расчеты были проведены за приемлемое время на рабочей станции Sun 4.

Заметим, что в литературе по рассматриваемым задачам описанный метод (или его модификации) часто просто называется методом или формализмом неравновесных функций Грина. К сожалению, при этом иногда не дается никаких комментариев, за исключением ссылок на работы Датты.

Достаточно часто при численном моделировании различных свойств квантовых проволок используется и формализм волновых функций [87—89] (см. также далее).

Требование учета большого числа деталей привело к тому, что для моделирования квантовых проволок (и простейших структур на их основе) стали интенсивно использоваться и модифицироваться методы расчета зонных структур твердых тел и свойств химических соединений (см., например [93—95]), т. е. применяемые ранее для определения характеристик материалов. Это является, пожалуй, одной из главных особенностей численного моделирования квантовых проволок. Отличный обзор таких методов и моделей приведен в работе [88].

В рассматриваемом случае при анализе ряда структур на квантовых проволоках (например, на основе отдельных атомов, молекул, атомных и молекулярных цепочек) метод эффективной массы может быть уже недостаточен и необходимо более детально явно учитывать электронную структуру системы (и не только собственно квантовой проволоки!).

Так как моделирование транспорта даже в квантовых проволоках (тем более в приборах на их основе), исходя из первых принципов, без согласующих параметров и с учетом всех деталей атомной конфигурации требует огромных затрат вычислительных ресурсов даже высокопроизводительных систем, то традиционно используются более простые подходы и методы. К ним могут быть отнесены [87, 88]:

- метод сильной связи (см. например, приближенный метод Датты с соавторами) и его различные разновидности\*;
- методы теории функционала плотности;
- метод матриц переноса;
- методы формализма функций Грина;
- метод молекулярной динамики.

Рассмотрим эти методы. Использование эмпирических методов при расчете матричных элементов в методе сильной связи требует, к сожалению, большого числа параметров (от 15 до 29) [88]. В то же время от их знания во многом зависят результаты моделирования. Хотя и имеются неплохие наработки в этом направлении [88], однако многое еще предстоит сделать. Попытаться решить эту проблему можно с использованием полуэмпирических и *ab initio* методов. Но и здесь возникают непростые вопросы, в частности, касающиеся различных приближений. Поэтому в настоящее время применение методов из первых принципов, несмотря на их перспективность, целесообразно в материаловедении, а эмпирических или полуэмпирических методов — для моделирования приборов [88]. Определенные успехи при расчете матричных элементов в методе сильной связи достигнуты с помощью методов теории функционала плотности (см., например, [97]) с различного рода аппроксимациями [88]. Это позволяет моделировать структуры с несколькими тысячами атомов, а следовательно, в принципе применимых к простейшим приборным структурам на квантовых проволоках.

В целом же, вычисление транспортных свойств на основе теории функционала плотности (или метода Хартри—Фока) должно проводиться очень тщательно, так как рассогласование теории и эксперимента по абсолютной величине тока может быть значительным, по меньшей мере, в 5—10 раз [88].

Возможные причины этого для моделей теории функционала плотности для двухэлектродных структур, включающих молекулы, выделены в работе [98], а именно:

- применяемые модели недостаточно уточнены;
- паразитные эффекты в экспериментах недооцениваются;

\* Метод сильной связи и возможные пути его дальнейшего развития для моделирования двухтерминальных приборов, в которых имеются наноструктуры и в которых протекает ток, рассмотрены в обзоре [96].

- не совсем ясна физика границ раздела молекула—контакт, и она очень не проста ввиду сложности атомной структуры этих границ;
- несовпадение в общем случае уровней энергии, используемых в моделях, с реальными уровнями энергии системы;
- применение различных обменно-корреляционных функционалов, которые приводят к вариациям тока более чем на порядок по величине.

Ясно, что многие из отмеченных причин могут быть важны и при моделировании других приборных структур (см. далее).

Достаточно экономичные модели в рамках формализма волновых функций могут быть построены с использованием метода сильной связи и метода матриц переноса. Однако увеличивающееся число матричных перемножений приводит к понижению точности расчета, что ограничивает сложность моделируемых структур [88].

При использовании формализма функций Грина в сочетании с методом сильной связи и эмпирическими методами или методами теории функционала плотности, к сожалению, часто требуется обращение матриц очень больших размеров. Такой случай был нами уже рассмотрен при анализе моделей резонансно-туннельных структур [13]. Это, естественно, приводит к существенным затратам вычислительных ресурсов ЭВМ. Возможно также и нарушение консервативности плотности тока. Внимание необходимо и при согласовании функций Грина на внутренних границах. Тем не менее, такие модели применялись для исследования проводимости и расчета тока для отдельных молекул, атомов, углеродных нанотрубок, атомных цепочек, кремниевых нанопроволок и др. [87, 88]. Важным преимуществом формализма неравновесных функций Грина является возможность учета различных механизмов рассеяния, включая неупругие, и многочастичных (электрон-электронных) взаимодействий, по крайней мере, при вычислении тока в принципе (см. ранее и [88]). При этом часто используются формулы для тока, которые могут интерпретироваться как обобщения применяемых в формализме Ландауэра—Буттикера (см. (5), а также [88]). Возможно также моделирование совместного электрон-фононного переноса, например, в переходах из одного, двух атомов между различными полубесконечными 1D-контактами [99]. Генерация теплоты и ее перенос могут быть важны, так как иногда приводят к разрушению структур.

Остановимся на ряде интересных результатов, полученных недавно в стационарном случае.

С применением теории функционала плотности показано [100], что реконструкция поверхности тонких кремниевых квантовых проволок приводит к появлению поверхностных состояний, которые могут усиливать проводимость. В результате такие проволоки обладают металлическими или полуметаллическими свойствами, а следовательно, их легирова-

ние не требуется для получения хорошо проводящих Si-проволок.

Интересные результаты были получены и в работе [101] при расчете средней длины свободного пробега и сопротивления длинных кремниевых квантовых проволок в результате сравнения формализмов Кубо—Гринвуда и Ландауэра—Буттикера. В рамках последнего использовалось рекурсивное вычисление функций Грина. Оказалось, что два формализма приводят к качественно согласующимся результатам\* и имеют преимущества и недостатки, однако в процессе применения формализма Кубо—Гринвуда проблемы возникают чаще. Атомная и электронная структура проволок определялись на основе теории функционала плотности с помощью комплекса программ SIESTA. Это позволяло вычислить составляющие гамильтониана, необходимые в расчетах. При моделировании учитывался беспорядок в объеме и на поверхности.

Формализм неравновесных функций Грина и самосогласованное приближение Хартри—Фока использовались в работе [102] для исследования влияния примесного центра и взаимодействия электронов с и без учета спина электронов на проводимость квантовой проволоки с полубесконечными контактами в зависимости от длины, температуры и силы взаимодействия.

Электронная структура, фоновые моды и частоты, электрон-фононная связь и неупругие свойства транспорта в цепочке атомов (от 3 до 7) золота между полубесконечными контактами и молекул углеводорода между двумя золотыми контактами исследовались в работе [103]. Для этого было проведено расширение возможностей комплексов программ SIESTA и TRANSIESTA, основанных на теории функционала плотности. Кондактанс, ВАХ и плотность мощности с учетом неупругих процессов рассчитывались на основе формализма неравновесных функций Грина. При этом использовано рекурсивное вычисление функций Грина. Электрон-фононное взаимодействие учитывалось в рамках самосогласованного приближения Борна и более простого разложения, требующего существенно меньших вычислительных ресурсов ЭВМ. Использован формализм Ландауэра—Буттикера. Рассмотренный подход применим при малых смещениях. Было получено неплохое согласование с некоторыми экспериментальными данными.

В работе [104] исследовано влияние направления роста и шероховатостей поверхности на электронный транспорт в кремниевых квантовых проволоках малого диаметра (0,46—1,56 нм) с длиной до 390 нм. Теория функционала плотности использо-

\* Интересно заметить, что в обзоре [96] было показано, что в рамках метода сильной связи может быть получено пять эквивалентных с математической и с физической точек зрения формул для тока и кондактанса (в пределе нулевых смещений и температур) для двухтерминальных приборов, включающих наноструктуры.

валась для задания атомной структуры проволок, в частности, применялся комплекс программ VASP. Для описания транспорта использовалась  $sp^3d^6s^*$ -модель сильной связи в сочетании с формализмом неравновесных функций Грина. Электростатический потенциал предполагался изменяющимся линейно. Формализм Ландауэра—Буттикера применялся при вычислении тока и кондактанса. Показано, что указанные факторы могут существенно влиять на ВАХ проволок с полубесконечными контактами стока и истока, в частности, приводить к существенному падению тока с ростом смещений для некоторых ориентаций.

Структурные и электронные свойства гидрогенизированных кремниевых квантовых проволок с ориентацией роста  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$  диаметром от 0,7 до 3,2 нм исследовались с использованием многоступенчатого метода [105]: оптимизация геометрии проводилась с применением полуэмпирического метода, а зонная структура вычислялась с помощью теории функционала плотности. Показано, что изменение поверхностной структуры за счет заместителей, а следовательно, и зонной структуры, может быть существенным, и зависеть от ориентации проволоки. Кондактанс и ВАХ рассчитывались с использованием метода неравновесных функций Грина в рамках формализма Ландауэра—Буттикера для квантовых проволок диаметром около 0,8 нм и длиной  $\sim 1$  нм между двумя контактами из Li и Si. В первом случае (контакты из Li) обнаружена отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП) на ВАХ. Выбор Li связан с относительно малым временем вычисления, так как контакты из Au и Pt требуют при расчетах очень больших времен. Во втором случае (контакты из Si) устанавливаются собственно электрические свойства кремниевой квантовой проволоки. В целом, проводимость чувствительна к химически поглощаемым проволокой веществам, что может быть полезным для создания различных датчиков.

Приближение локальной спиновой плотности в неколлинеарном случае использовалось для исследования обменно-корреляционных эффектов с учетом спин-орбитального взаимодействия в квантовой проволоке на GaAs/AlGaAs-гетероструктуре [106]. Потенциал предполагался параболическим в поперечном сечении проволоки в сочетании с приближением эффективной массы. Анализировались специфика зонной структуры и кондактанс с учетом влияния магнитного поля при  $T = 0$  К. Показано, что учитываемые эффекты и взаимодействия могут приводить к "аномальным плато" в кондактансе. Результаты, прежде всего, важны для спинтроники.

Влияние модулируемого во времени рассеивающего потенциала в конечной области квантовой проволоки исследовалось в работе [107]. Анализ переходных процессов проводился в рамках формализма волновых функций. Нестационарное уравнение Шредингера с использованием преобразования Фурье сво-

дилось к интегральному уравнению типа Липпмана—Швингера, которое далее решается численно. Форма потенциала в поперечном сечении предполагалась параболической. В работе рассчитывался кондактанс в стационарном случае, а также токи и плотность вероятностей в нестационарном случае при учете влияния магнитного поля. В предыдущей работе авторов [108] исследовалось распространение волнового пакета в квантовой проволоке с антиоточкой или параллельными двумя квантовыми точками при воздействии однородного магнитного поля. При вычислении кондактанса использовался формализм Ландауэра—Буттикера. В работе показано важное влияние силы Лоренца на физические процессы в структурах.

При анализе переходных процессов используются также методы сильной связи, теории функционала плотности и молекулярной динамики [88].

Так, метод молекулярной динамики в сочетании с методом теории функционала плотности использовались в работе [109] для моделирования точечного контакта на Na при конечной температуре  $T = 190$  К. Исследовались процесс растяжения металлической проволоки (вплоть до разрушения), а также плотности состояний и кондактанс для определенных конфигураций контакта. Кондактанс вычислялся в рамках формализма Кубо—Гринвуда. Обнаружено, что спектральные характеристики и кондактанс испытывают динамические тепловые флуктуации в субпикосекундном диапазоне благодаря перегруппировке атомов металла. Это может существенно модифицировать транспортные свойства таких проволок. Данные результаты подчеркивают важность анализа переходных процессов даже в квантовых проволоках и простейших структурах на их основе.

В методе молекулярной динамики при вычислении сил применяется и формализм функций Грина [87, 88]. В сочетании с методом сильной связи может рассматриваться уравнение движения для оператора эволюции в представлении взаимодействия с дальнейшим вычислением тока по формуле, аналогичной используемой в формализме Ландауэра—Буттикера [110]. Перспективным является и применение методов Монте-Карло (см. ранее).

*Таким образом, хотя немало достижений в развитии рассмотренных методов, еще многое предстоит сделать при согласовании моделей с экспериментом. Большое поле деятельности и по повышению экономичности моделей.*

Среди других интересных моделей квантовых проволок (и простейших структур на их основе) отметим следующие.

В работе [111] была получена система упрощенных квантовых гидродинамических уравнений в стационарном случае для замкнутой квантовой проволоки с одним локализованным упругим рассеивающим центром с потенциалом в виде  $\delta$ -функции. Уравнение Пуассона аппроксимировалось в режиме линейного отклика и малых температур.

Обращает на себя внимание тот факт, что если на начальном этапе применялись квазиодномерные модели, то впоследствии все чаще стали использоваться двумерные и даже трехмерные (по пространству) модели, особенно для атомных цепочек и молекул [89]. Это свидетельствует о том, что традиционное обоснование путем "разбиения" трехмерного уравнения Шредингера на два уравнения (двумерное в поперечном сечении, а одномерное в направлении транспорта) все меньше и меньше начинало удовлетворять исследователей, так как приводит к потере важных деталей, а как следствие, к возможному плохому количественному согласованию моделей с экспериментальными данными. *Принципиально важным здесь может становиться интерфейс между квантовой проволокой и макроскопическим контактом, а поэтому модель, вообще говоря, должна быть трехмерной.* Важность такого интерфейса была продемонстрирована в ряде работ (см., например, [112] для атомных цепочек расчет ВАХ с применением метода теории функционала плотности). Необходимым может быть и учет туннелирования на границе между квантовой проволокой и контактами [113].

*Окончание см. в следующем номере*

#### Список литературы

1. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники. IV. Квантово-механические формализмы // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 2. С. 24—32.
2. **Washburn S., Webb R. A.** Aharonov—Bohm effect in normal metal. Quantum coherence and transport // *Advances in Physics*. 1986. V. 35. N 4. P. 375—422.
3. **Webb R. A., Washburn S.** Quantum interference fluctuations in disordered metals // *Physics Today*. 1988. V. 41. N 12. P. 46—53.
4. **Datta S.** Quantum devices // *Superlattices and Microstructures*. 1989. V. 6. N 1. P. 83—93.
5. **Nanostructure.** Physics and Fabrication: Proc. of the International Symposium. College Station, Texas, 13—15 March, 1989 / Ed. by M. A. Reed, W. P. Kirk. San Diego: Academic Press. 1989. 517 p.
6. **Capasso F., Datta S.** Quantum electron devices // *Physics Today*. 1990. Feb. P. 74—82.
7. **Лускинович П. Н.** Метод синтеза квантовых интегральных элементов и схем // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 3. С. 8—11.
8. **Aharonov Y., Bohm D.** Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory // *Phys. Rev. (Sec. Ser.)*. 1959. V. 115. N 3. P. 485—491.
9. **Шарвин Д. Ю., Шарвин Ю. В.** Квантование магнитного потока в цилиндрической пленке из нормального металла // *Письма в ЖЭТФ*. 1981. Т. 34. Вып. 5. С. 285—288.
10. **Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Спивак Б. З.** Эффект Ааронова—Бома в неупорядоченных проводниках // *Письма в ЖЭТФ*. 1981. Т. 33. Вып. 2. С. 101—103.
11. **Thornton T. J.** Mesoscopic devices // *Rep. Prog. Phys.* 1994. V. 57. P. 311—364.
12. **Петрашов В. Т.** Квантовый электронный транспорт в металлических наноструктурах // *Микроэлектроника*. 1994. Т. 23. Вып. 5. С. 3—16.
13. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и наноэлектроники.

ки. В. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. 2007. № 3. С. 57—70.

14. **Обухов И. А.** Приборы на основе квантовых проводов: перспективы и проблемы // Материалы 6-й Международной Крымской микроволновой конференции, КрыМи-Ко'96, 1996, Севастополь, Крым, Украина. С. 55—64.

15. **Erdős P., Herndon R. C.** Theories of electrons in one-dimensional disordered systems // *Advances in Physics*. 1982. V. 31. N 2. P. 65—163.

16. **Tartakovski A. V.** Theory of mesoscopic transport in disordered wires // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 52. N 4. P. 2704—2722.

17. **Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А.** Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982. 360 с.

18. **Имри Й.** Введение в мезоскопическую физику. М.: Физматлит, 2004. 304 с.

19. **Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А.** Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.

20. **Anderson P. W.** Absence of diffusion in certain random lattices // *Phys. Rev.* 1958. V. 109. N 5. P. 1492—1505.

21. **Абрикосов А. А., Рыжкин И. А.** Электрические свойства одномерных металлов // *ЖЭТФ*. 1976. Т. 71. Вып. 9. С. 1204—1224.

22. **Вопросы квантовой теории необратимых процессов.** Сб. статей, пер. с англ. / Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М.: Изд. иностр. литературы, 1961. 365 с.

23. **Landauer R.** Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1957. V. 1. July. P. 223—231.

24. **Landauer R.** Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices // *Philos. Mag.* 1970. V. 21. N 172. P. 863—867.

25. **Рёнке Г.** Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.

26. **Landauer R.** Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 306—316.

27. **Büttiker M.** Four-terminal phase-coherent conductance // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 57. N 14. P. 1761—1764.

28. **Büttiker M.** Role of quantum coherence in series resistors // *Phys. Rev. B*. 1986. V. 33. N 5. P. 3020—3026.

29. **Büttiker M.** Symmetry of electrical conduction // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 3. P. 317—334.

30. **Anderson P. W., Thouless D. J., Abrahams E., Fisher D. S.** New method for a scaling theory of localization // *Phys. Rev. B*. 1980. V. 22. N 8. P. 3519—3526.

31. **Anderson P. W.** New method for scaling theory of localization. II. Multichannel theory of a "wire" and possible extension to higher dimensionality // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 10. P. 4828—4836.

32. **Azbel M. Ya.** Quantum  $\delta$ -dimensional Landauer formula // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1981. V. 14. P. L225—L230.

33. **Fisher D. S., Lee P. A.** Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B* 1981. V. 23. N 12. P. 6851—6854.

34. **Langreth D. C., Abrahams E.** Derivation of the Landauer conductance formula // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 24. N 6. P. 2978—2984.

35. **Büttiker M.** Coherent and sequential tunneling in series barriers // *IBM J. Res. Develop.* 1988. V. 32. N 1. P. 63—75.

36. **Sakaki H.** Scattering suppression of high-mobility effect of size-quantized electrons in ultrafine semiconductor wire structures // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1980. V. 19. N 12. P. L735—L738.

37. **Petroff P. M., Gossard A. C., Logan R. A., Wiegmann W.** Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties // *Appl. Phys. Lett.* 1982. V. 41. N 7. P. 635—638.

38. **Lee J., Spector H. N.** Impurity-limited mobility of semiconducting thin wire // *J. Appl. Phys.* 1983. V. 54. N 7. P. 3921—3925.

39. **Lee J., Vassel M. O.** Low-field electron transport in quasi-one-dimensional semiconducting structures // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1984. V. 17. P. 2525—2535.

40. **Leburton J. P.** Size effects on polar optical phonon scattering of 1-D and 2-D electron gas in synthetic semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1984. V. 56. N 10. P. 2850—2855.

41. **Fishman G.** Phonon-limited mobility in quasi-one-dimensional semiconductor // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 36. N 14. P. 7448—7456.

42. **Lee J., Spector H. N.** Dielectric response function for a quasi-one-dimensional semiconducting system // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. N 2. P. 366—372.

43. **Строшио М., Дутта М.** Фононы в наноструктурах. М.: Физматлит, 2005. 320 с.

44. **Mickevičius R., Mitin V. V., Kim K. W., Strocio M. A., Iafrate G. J.** Electron intersubband scattering by confined and localized phonons in real quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 4959—4970.

45. **Vagner P., Moško M.** Electron-impurity scattering in free-standing quantum wires: Effect of dielectric confinement // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 81. N 7. P. 3196—3200.

46. **Ghoshal A., Mitra B., Ghatak K. P.** On the effective electron mass in quantum well wires of ternary chalcopyrite semiconductors // *Il Nuovo Cimento*. 1990. V. 12D. N 7. P. 891—899.

47. **Ghoshal A., Chattopadhyay P., Bhattacharyya A.** One-dimensional hot-electron transport in quantum-well wires of polar semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1986. V. 59. N 7. P. 2511—2513.

48. **Chattopadhyay D., Bhattacharyya A.** Monte Carlo calculations of transport parameters of one-dimensional hot electrons in quantum-well wires // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 12. P. 7105—7107.

49. **Осадчий В. М.** Исследование методом Монте-Карло нестационарного переноса горячих электронов в квантовых проволоках // *Физика и техника полупроводников*. 1994. Т. 28. Вып. 9. С. 1636—1644.

50. **Борздов В. М., Комаров Ф. Ф.** Моделирование электрофизических свойств твердотельных слоистых структур интегральной электроники. Минск: Изд. БГУ, 1999. 235 с.

51. **Борздов В. М., Жевняк О. Г., Комаров Ф. Ф., Галенчик В. О.** Моделирование методом Монте-Карло приборных структур интегральной электроники. Минск: Изд. БГУ, 2007. 175 с.

52. **Briggs S., Leburton J. P.** Size effects in multisubband quantum wire structures // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 38. N 12. P. 8163—8170.

53. **Mickevičius R., Mitin V., Strocio M. A., Dutta M.** Oscillations of photoconductivity and negative absolute conductivity in quantum wires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1993. V. 5. P. 2233—2254.

54. **Ando Y., Cappy A.** Ensemble Monte Carlo simulation for electron transport in quantum wire structures // *J. Appl. Phys.* 1993. V. 74. N 6. P. 3983—3992.

55. **Telang N., Bandyopadhyay S.** Effects of magnetic field on hot electron transport in quantum wires // *Appl. Phys. Lett.* 1995. V. 66. N 13. P. 1623—1625.

56. **Jacoboni C., Brunetti R., Bordone P., Bertoni A.** Quantum transport and its simulation with the Wigner-function approach // *Int. J. of High Speed Electron. and Syst.* 2001. V. 11. N 2. P. 387—423.

57. **Nedjalkov M., Vasileska P., Ferry O. K., Jacoboni C., Ringhofer C., Dimov I., Palankovski V.** Wigner transport models of the electron-phonon kinetics in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 3. P. 035311-1—18.

58. **Sano N., Natori K.** Drift-velocity degradation caused by an electric field during collision in one-dimensional quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. N 12. P. R8325—R8328.

59. **Rossi F., Poli P., Jacoboni C.** Weighted Monte Carlo approach to electron transport in semiconductors // *Semicond. Sci. Technol.* 1992. V. 7. P. 1017—1035.

60. **Абрамов И. И., Гончаренко И. А., Игнатенко С. А., Королев А. В., Новик Е. Г., Рогачев А. И.** Система модели-

рования нанозлектронных приборов — NANODEV // Микроэлектроника. 2003. Т. 32. № 2. С. 124—133.

61. **Абрамов И. И., Строгова А. С., Рогачев А. И.** Моделирование квантовых проволок на различных материалах с использованием формализма функций Вигнера // "Актуальные проблемы твердотельной электроники и микроэлектроники". Труды девятой междунар. НТК. Ч. 1. Дивноморское, Россия, 12—17 сентября 2004 г. С. 29—32.

62. **Yamada T., Sone J.** High-field electron transport in quantum wires studied by solution of the Boltzmann equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 9. P. 6265—6271.

63. **Briggs S., Leburton J. P.** Breakdown of the linear approximation to the Boltzmann transport equation in quasi-one-dimensional semiconductors // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. N 11. P. 8025—8028.

64. **Bordone P., Pascoli M., Brunetti R., Bertoni A., Jacoboni C., Abramo A.** Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism // *Phys. Rev. B*. 1999. V. 59. N 4. P. 3060—3069.

65. **Jin S., Fischetti M. V., Tang T.** Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature: Surface roughness scattering, dielectric screening, and band nonparabolicity // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 102. N 8. P. 083715-1—14.

66. **Arora V. K.** Quantum size effect in thin-wire transport // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 10. P. 5611—5612.

67. **DasSarma S., Xie X. C.** Calculated transport properties of ultrasubmicrometer quasi-one-dimensional inversion lines // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 18. P. 9875—9878.

68. **Warren A. C., Antoniadis D. A., Smith H. I.** Quasi one-dimensional conduction in multiple, parallel inversion lines // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 56. N 17. P. 1858—1861.

69. **Datta S., Cahay M., McLennan M.** Scatter-matrix approach in quantum transport // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 36. N 10. P. 5655—5658.

70. **Cahay M., McLennan M., Datta S.** Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 17. P. 10125—10136.

71. **Vasilopoulos P., Peeters P. M.** Electrical transport in a quantum wire: Influence of one- and two-body interactions // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 15. P. 10079—10087.

72. **Bagwell P. F.** Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. N 15. P. 10354—10371.

73. **Berthod C., Gagel F., Maschke K.** dc transport in perturbed multichannel quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. N 24. P. 18299—18311.

74. **Tamura H., Ando T.** Conductance fluctuations in quantum wires // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 44. N 4. P. 1792—1800.

75. **Nanostructures. and Quantum Effects: Proc. of JRDC Int. Symp., Tsukuba, Japan, 17—18 Nov., 1993 / Ed. by H. Sakaki, H. Noge.** Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1994. 356 p.

76. **Takagaki Y., Ferry O. K.** Conductance of quantum waveguides with a rough boundary // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. V. 4. P. 10421—10432.

77. **Dacal L. C. O., Damiao A. J., de Andrada e Silva E. A.** Quantum ballistic conductance of quasi-two-dimensional and three-dimensional semiconductor nanowires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 15. P. 155330-1—6.

78. **Khomaykov P. A., Brocks G., Karpan V., Zwierzycki M., Kelly P. J.** Conductance calculations for quantum wires and interfaces: Mode matching and Green's functions // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035450-1—13.

79. **Tekman E., Bagwell P. F.** Fano resonances in quasi-one-dimensional electron waveguides // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 48. N 4. P. 2553—2559.

80. **Неволин В. К.** Q1D-проводники при конечных температурах // *Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника*. 1991. Вып. 6. С. 56—58.

81. **Баграев Н. Т., Иванов В. К., Клячкин Л. Е., Маляренко А. М., Шелых И. А.** Баллистическая проводимость кван-

товой проволоки при конечных температурах // *Физика и техника полупроводников*. 2000. Т. 34. Вып. 6. С. 737—741.

82. **Enss T., Meden V., Andergassen S., Barnabé-Thériault X., Metzner W., Schönhammer K.** Impurity and correlation effects on transport in one-dimensional quantum wires // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 15. P. 155401-1—19.

83. **Келдыш Л. В.** Диаграммная техника для неравновесных процессов // *ЖЭТФ*. 1964. Т. 47. Вып. 4. С. 1515—1527.

84. **Dolcini F., Trauzettel B., Safi I., Grabert H.** Transport properties of single-channel quantum wires with an impurity: Influence of finite length and temperature on average current and noise // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 71. N 16. P. 165309-1—26.

85. **Ponomareva I., Menon M., Srivastava D., Andriotis A. N.** Structure, stability, and quantum conductivity of small diameter silicon nanowires // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. N 26. P. 265502-1—4.

86. **Lherbier A., Persson M. P., Niquet Y.-M., Triozon F., Roche S.** Quantum transport length scales in silicon-based semiconducting nanowires: Surface roughness effects // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. N 8. P. 085301-1—5.

87. **Ciraci S., Buldum A., Batra I. P.** Quantum effects in electrical and thermal transport through nanowires // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2001. V. 13. P. R537—R568.

88. **Pecchia A., Di Carlo A.** Atomistic theory of transport in organic and inorganic nanostructures // *Rep. Prog. Phys.* 2004. V. 67. N 8. P. 1497—1561.

89. **Nanoscience.** Nanotechnologies and Nanophysics / Ed. by C. Dupas, P. Houdy, M. Lahmani. Berlin—Heidelberg—New York: Springer-Verlag. 2007. 823 p.

90. **Datta S.** Steady-state quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. N 8. P. 5830—5833.

91. **Datta S.** A simple kinetic equation for steady-state quantum transport // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1990. V. 2. P. 8023—8052.

92. **McLennan M. J., Lee Y., Datta S.** Voltage drop in mesoscopic systems: A numerical study using a quantum kinetic equation // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 43. N 17. P. 13846—13884.

93. **Цидильковский И. М.** Зонная структура полупроводников. М.: Наука, 1978. 328 с.

94. **Кашельсон А. А., Степанюк В. С., Фарберович О. В., Сас А.** Электронная теория конденсированных сред. М.: МГУ, 1990. 240 с.

95. **Степанов Н. Ф.** Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.

96. **Todorov T. N.** Tight-binding simulation of current-carrying nanostructures // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002. V. 14. P. 3049—3084.

97. **Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча.** М.: Мир, 1987. 400 с.

98. **Kurth S., Stefanucci G., Almladh C.-O., Rubio A., Gross E. K. U.** Time-dependent quantum transport: A practical scheme using density functional theory // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. N 3. P. 035308-1—13.

99. **Lü J. T., Wang J.-S.** Coupled electron and phonon transport in one-dimensional atomic junctions // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. N 16. P. 165418-1—9.

100. **Rurali R., Lorente N.** Metallic and semimetallic silicon < 100 > nanowires // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94. N 2. P. 026805-1—4.

101. **Markussen T., Rurali R., Brandbyge M., Jauho A.-P.** Electronic transport through Si nanowires: Role of bulk and surface disorder // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. N 24. P. 245313-1—11.

102. **Agarwal A., Sen D.** Conductance of quantum wires: A numerical study of effects of an impurity and interactions // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73. N 4. P. 045332-1—14.

103. **Frederiksen T., Paulsson M., Brandbyge M., Jauho A.-P.** Inelastic transport theory from first principles: Methodology and application of nanoscale devices // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. N 20. P. 205413-1—22.

104. **Svizhenko A., Leu P. W., Cho K.** Effect of growth orientation and surface roughness on electron transport in silicon nanowires // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. N 12. P. 125417-1-7.
105. **Ng M.-F., Zhou L., Yang S.-W., Sim L. Y., Tan V. B. C., Wu P.** Theoretical investigation of silicon nanowires: Methodology, geometry, surface modification, and electrical conductivity using a multiscale approach // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 15. P. 155435-1-11.
106. **Malet F., Pi M., Barranco M., Serra L., Lipparini E.** Exchange-correlation effects on quantum wires with spin-orbit interactions under the influence of in-plane magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 11. P. 115306-1-12.
107. **Gudmundsson V., Thorgilsson G., Tang C.-S., Moldoveanu V.** Transient magnetotransport through a quantum wire // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. N 3. P. 035329-1-10.
108. **Thorgilsson G., Tang C.-S., Gudmundsson V.** Time-dependent magnetotransport of a wave packet in a quantum wire with embedded quantum dots // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. N 19. P. 195314-1-9.
109. **Barnett R. N., Landman U.** Cluster-derived structures and conductance fluctuations in nanowires // *Nature.* 1997. V. 387. 19 June. P. 788-790.
110. **Kwapiński T.** Time-dependent transport through a quantum wire // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. N 15. P. 153303-1-4.
111. **Sorée B., Magnus W., Schoenmaker W.** Energy and momentum balance equations: An approach to quantum transport in closed circuits // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. N 3. P. 035318-1-11.
112. **Asari Y., Nara J., Kobayashi N., Ohno T.** Effect of crystalline electrodes on the transport properties of Al monatomic wires at finite biases // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 72. N 3. P. 035459-1-5.
113. **Fabrizio M., Gogolin A. O.** Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 51. N 24. P. 17827-17841.

Библиотека БГУМР