

Mirko Poljak

KVANTNI TRANSPORT NA NANOSKALI



ELEMENT

FER

Sadržaj

1. Uvod	1
1.1. Od mikro do nano, od mega do tera	1
1.2. Važnost numeričkih simulacija i modeliranja u elektronici	6
1.3. Režimi transporta nosilaca	8
1.4. Razine modeliranja transporta nosilaca	12
1.5. Fokus knjige i pregled poglavlja	15
2. Kvantnomehaničke osnove računске nanoelektronike	19
2.1. Temeljni pojmovi iz linearne algebre	19
2.2. Hamiltonijan i Schrödingerova jednađba	23
2.3. Bazne funkcije i transformacije	24
2.4. Valna funkcija i energija slobodne čestice	30
2.5. Kvantizacija u beskonačnoj potencijalnoj jami	30
2.6. Diskretizacija Schrödingerove jednađbe u kvantnoj jami	33
2.7. Sustavi s nehomogenom efektivnom masom	42
2.8. Očuvanje vjerojatnosti i vjerojatnosna struja	46
2.9. Očekivana vrijednost operatora i njena vremenska evolucija	49
2.10. Zadaci za vježbu	51
3. Elektronska i transportna svojstva nanostrukture	55
3.1. Metode za računanje elektronskih svojstava nanostrukture	55
3.2. Model čvrste veze	57
3.3. Matrični model čvrste veze	61
3.4. Grupna brzina čestice u energijskoj vrpici	76
3.5. Gustoća stanja i raspodjela nosilaca	78
3.6. Matrica gustoće za sustav u termodinamičkoj ravnoteži	86
3.7. Veza energijskih vrpica i struje kroz nanostrukturu	90
3.8. Aproksimacija strukture vrpice efektivnom masom	93
3.9. Zadaci za vježbu	106

4. Koherentni kvantni transport	109
4.1. Koherentni transport i neinterakcijski NEGF formalizam	109
4.2. Transmisija kroz potencijalnu barijeru	111
4.3. Posljedice spajanja kontakta	113
4.4. Greenove funkcije i značenje vlastite energije kontakta	116
4.5. Sustav s više stanja spojen na jedan kontakt	119
4.6. Retardirana Greenova funkcija sustava s jednim kontaktom	122
4.7. Spektralna funkcija i gustoća stanja	122
4.8. Matrica proširenja	130
4.9. Raspodjela elektrona u termodinamičkoj ravnoteži	131
4.10. NEGF jednadžbe za sustav spojen na dva kontakta	132
4.11. Veza s Keldyshevim formalizmom	135
4.12. Tok struje kroz strukturu s dva kontakta	136
4.13. Veza s Landauer-Büttikerovim formalizmom	139
4.14. Računanje površinske Greenove funkcije idealnog kontakta	157
4.15. Specifičnosti implementacije s EMA hamiltonijanima	170
4.16. Zadaci za vježbu	182
5. Nekoherentni i disipativni kvantni transport	187
5.1. Kvantni transport u nanosustavima s raspršenjima	187
5.2. Nepolarni akustički i optički fononi	189
5.3. Raspršenja nosilaca na nepolarnim fononima	194
5.4. Samokonzistentna Bornova aproksimacija	198
5.5. NEGF jednadžbe za nekoherentni kvantni transport	199
5.6. Efektivna transmisija i kvazi-Fermijeva funkcija	202
5.7. Veza s Keldyshevim formalizmom	203
5.8. Elastična raspršenja i pojava otpora strukture	204
5.9. Interakcijska matrica i učestalost elastičnih raspršenja	211
5.10. Neelastična raspršenja i pojava disipacije energije	216
5.11. Interakcijska matrica i učestalost neelastičnih raspršenja	218
5.12. Lokalna gustoća struje	220
5.13. Veza kvantnog i poluklasičnog difuzivnog transporta	246
5.14. Granica balističkog i difuzivnog režima transporta	255
5.15. Zadaci za vježbu	260
MATLAB skripte za odabrane primjere	265
Literatura	307
Kazalo pojmova	309
O autoru	314