

# МЕТОДЫ РАСЧЁТА ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУР

Королёв Н.В., Чечин Д.А., Клиньских А.Ф.

Воронежский государственный университет, Физический факультет,  
каф. Микроэлектроники и полупроводников  
Тел.: (4732)75-28-08, E-mail: korolev@vmail.ru

Изучение транспортных свойств наноструктур представляет большой научный и практический интерес. Наноструктуры, представляющие собой узкие контакты, нанонити, гетероструктуры, углеродные нанотрубки и т.д., проявляют неожиданные свойства (в том числе и транспортные), отличные от свойств макроскопических образцов. Благодаря своим малым размерам, наноструктуры интересны с практической точки зрения, в частности как элементы молекулярной и наноэлектроники.

В этой работе в рамках подхода Ландауэра рассматривается два метода расчёта электрического сопротивления наноструктур.

**Метод трансфер-матрицы.** Явный вид трансфер-матрицы  $M$ , зависящий от конкретного потенциала  $V(x)$ , позволяет сразу определить коэффициент прохождения  $T$  через потенциал  $V(x)$ :

$$T = \left| \frac{\det M}{M_{22}} \right|^2,$$

величина которого определяет электрическое сопротивление для структур типа квантового каскада в рамках подхода Ландауэра (R. Landauer):

$$R = \frac{\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{T} = \frac{\pi\hbar}{e^2} \left| \frac{M_{22}}{\det M} \right|^2$$

Данный метод удобен для расчёта коэффициента прохождения через цепочку потенциалов, для каждого из которых удаётся аналитически получить трансфер-матрицу.

**Метод прямой спектральной задачи теории солитонов.** Коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $T$  определяются следующим образом:

$$R = |B(x_1)|^2, \quad T = |A(x_2)|^2 / |A(x_1)|^2,$$

где  $x_1$  – левая, а  $x_2$  – правая границы потенциала  $V(x)$ . В рамках подхода Ландауэра контактанс системы выражается следующим образом:

$$G = \frac{\pi\hbar}{e^2} T = \frac{\pi\hbar}{e^2} (1 - |B(x_1)|^2).$$

Данный метод очень удобен для получения численного значения коэффициента прохождения в том случае, когда аналитически вычислить его не удаётся.

## Литература

1. Lee S.-C., Wacker A. Nonequilibrium Green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures. // *Phys. Rev. B.* **66**, 24, 2002. P. 245314 (1-18).
2. Davies J.H. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. CUP, 1998, 451 p.
3. Калоджеро Ф., Дегасперис А. Спектральные преобразования и солитоны. Методы решения и исследования эволюционных уравнений: Пер. с англ. — М.: Мир, 1985. 472 с.