

**Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu**

Milan Tadić

Nanotehnologije i nanokomponente  
Predavanja

Beograd, 2012.



# Predgovor

Ovaj tekst predstavlja beleške sa predavanja na predmetu "Nanotehnologije i nanokomponente" koje je autor držao u toku letnjeg semestra školske 2006/2007. godine studentima IV godine Smera za nanoelektroniku, optoelektroniku i lasersku tehniku Odseka za fizičku elektroniku Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu. Autor je svestan nesavršenosti i nekompletnosti teksta. Ipak, autor se nada da će ova zbirka predavanja omogućiti studentima efikasniju pripremu za ispit.

Predložena i korisna literatura za pripremu ispita je:

- R. Waser (Ed.), "Nanoelectronics and Information Technology", Wiley-VCH, 2005.
- M. Di Ventra (Ed.), "Introduction to Nanoscale Science and Technology", Springer, 2004.
- K. Gosser, "Nanoelectronics and Nanosystems", Springer, 2004.
- M. Dragoman, "Nanoelectronics: Principles and Devices", Artech House, 2006.
- M. Wilson, "Nanotechnology", Chapman&Hall, 2002.
- J. H. Davies, "The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction", Cambridge University Press, 1997.
- R. Saito, "Physical Properties of Carbon Nanotubes", Imperial College Press, 1998.
- S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press, 1997.

Beograd, 02.7.2007.

Prof. dr Milan Tadić

## Predgovor II izdanju

U ovom izdanju dodato je poglavlje o vertikalnom transportu i ispravljene su uočene štamparske greške.

Beograd, 09.6.2008.

Autor

## **Predgovor III izdanju**

U ovom izdanju dopunjena su i izmenjena poglavlja o jednoelektronskim napravama i dodato je poglavlje o numeričkim metodama za rešavanje Šredingerove jednačine. Pored toga, ispravljene su uočene štamparske greške.

Beograd, 28.6.2010.

Autor

## **Predgovor IV izdanju**

U ovom izdanju dopunjena su i izmenjena poglavlja o transportu, jednoelektronskim napravama i grafenu i uhljeničnim nanotubama. Pored toga, ispravljene su uočene štamparske greške.

Beograd, 04.6.2012.

Autor

# 1

## Numerički metodi za rešavanje Šredingerove jednačine

Šredingerova jednačina se može analitički rešiti za vrlo usku klasu potencijala. Primeri ovih potencijala su beskonačno duboka pravougaona potencijalna jama, Coulombov potencijal, potencijal linearnog harmonijskog oscilatora itd. U velikom broju ovih slučajeva rešenja su izražena preko specijalnih funkcija, koje se moraju numerički odrediti. U opštem slučaju, međutim, do rešenja se može doći samo numerički.

Ovde ćemo se ograničiti na metode kojima se određuju diskretna stanja rešavanjem stacionarne Šredingerove jednačine. Za kontinualna stanja i nestacionarnu Šredingerovu jednačinu, postoje posebni metodi. Problem rešavanja stacionarne Šredingerove jednačine, tj određivanja svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora spada u širu klasu problema graničnih vrednosti, kada je talasna funkcija poznata u graničnim tačka domena, a treba odrediti vrednosti funkcije unutar domena.

Svi metodi za rešavanje stacionarne Šredingerove jednačine mogu se svrstati u dve grupe:

- propagativni metodi;
- matrični metodi.

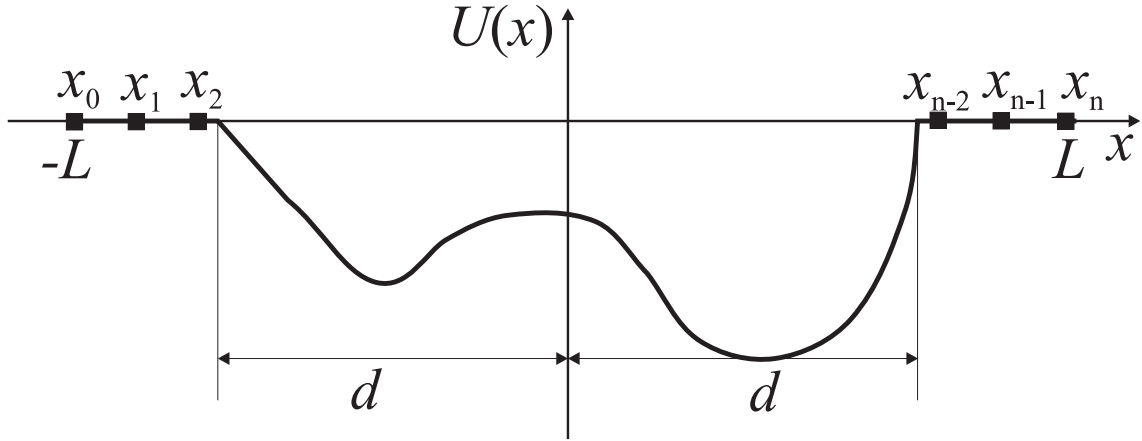
U prvu grupu spadaju sledeći metodi:

- metod gađanja (engl.: shooting);
- metod Numerova;
- metod transfer matrice.

U grupu matričnih metoda spadaju:

- metod ekspanzije;
- metod konačnih razlika;
- metod konačnih elemenata;
- linearni varijacioni metod.

Propagativni metodi se mogu koristiti za rešavanje 1D Šredingerove jednačine, dok se matrični metodi mogu koristiti za proizvoljno dimenzione potencijale.



Sl. 1. Potencijal koji se bira u  $n + 1$  ekvidistantnih tačaka na domenu  $-L < x < L$ . Potencijal odstupa od vrednosti 0 samo u oblastima  $|x| < d$ .

## 1. Propagativni metodi

### 1.1. Metod gadjanja

Posmatramo Šredingerovu jednačinu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi. \quad (1)$$

Pretpostavimo da potencijal ima oblik kao na slici 1. Schrödingerovu jednačinu rešavamo na domenu  $-L \leq x \leq +L$ . Ukoliko je  $L \gg d$ , talasna funkcija je:

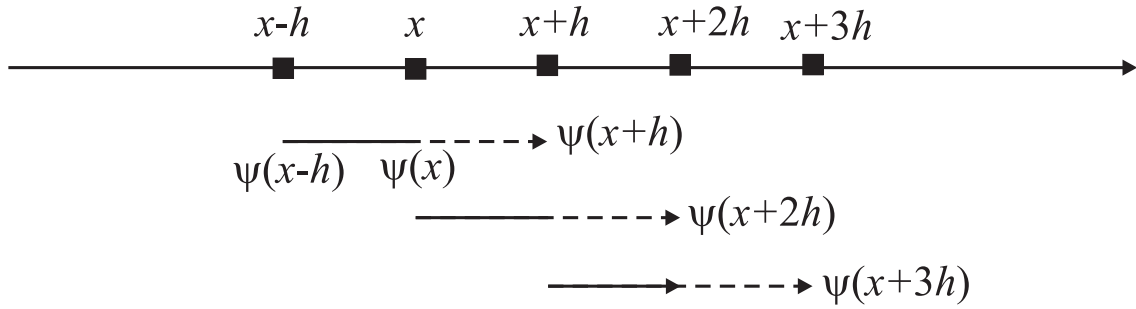
$$\Psi(x = \pm L) \approx 0, \quad (2)$$

a prvi izvod:

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x=\pm L} \approx 0. \quad (3)$$

Ukoliko se za proizvoljnu vrednost energije (ne svojstvenu vrednost) u jednačini (1) postavi uslov  $\Psi(x = -L) = 0$ , vrednost talasne funkcije i prvog izvoda u desnoj granici neće biti jednaki nuli ( $\Psi(x = +L) = 0$ ,  $\Psi'(x = +L) = 0$ ). U numeričkom proračunu, usvoji se da je u levoj granici domena ili (1) talasna funkcija jednaka nuli ili (2) prvi izvod talasne funkcije jednak nuli. Ne mogu se istovremeno primeniti oba granična uslova, za talasnu funkciju i njen prvi izvod, kao što se može zaključiti na osnovu formule za propagaciju talasne funkcije od leve ka desnoj granici domena, koja će biti kasnije izvedena. Za izabranu vrednost energije i postavljeni granični uslov ( $\Psi(x = -L) = 0$ , na primer), Schrödingerova jednačina se rešava nekom od metoda u numeričkoj analizi (metodom konačnih razlika, Runge-Kuta, prediktor-korektor ili sličnom metodom).

Ovde ćemo prikazati postupak rešavanja diskretizacijom diferencijalne jednačine metodom konačnih razlika. Najpre ćemo izvršiti podelu domena na poddomene (korake) dužine  $\Delta x = h$  i označiti granične tačke poddomena (čvorove) sa  $i = 0, \dots, n$ . Vrednosti talasne funkcije u ovim



Sl. 2. Princip rešavanja Šredingerove jednačine pomoću metoda gadjanja korišćenjem metoda konačnih razlika za diskretizaciju Šredingerove jednačine.

tačkama su, dakle,  $\Psi_0, \Psi_1, \dots, \Psi_n$ . Drugi izvod talasne funkcije u tački  $x$  ćemo diskretizovati pomoću *centralnih razlika*:

$$\left. \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right|_x \approx \frac{d\Psi/dx|_{x+h} - d\Psi/dx|_{x-h}}{2h}. \quad (4)$$

Ovde je:

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x+h} \approx \frac{\Psi(x+2h) - \Psi(x)}{2h}, \quad (5)$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x-h} \approx \frac{\Psi(x) - \Psi(x-2h)}{2h}. \quad (6)$$

Uz zamenu  $2h \rightarrow h$ :

$$\left. \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right|_x \approx \frac{\Psi(x+h) - 2\Psi(x) + \Psi(x-h)}{h^2}. \quad (7)$$

Zamenom u polaznu Šredingerovu jednačinu:

$$\Psi(x+h) - 2\Psi(x) + \Psi(x-h) = \frac{2m}{\hbar^2} h^2 (U(x) - E) \Psi(x). \quad (8)$$

Odavde sledi:

$$\Psi(x+h) = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} h^2 (U(x) - E) + 2 \right] \Psi(x) - \Psi(x-h), \quad (9)$$

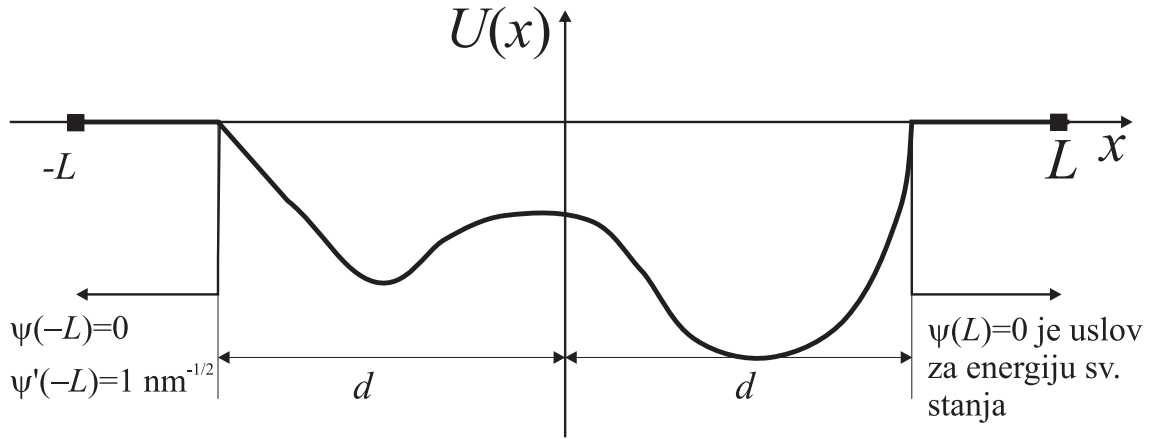
odnosno:

$$\Psi_{i+1} = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} h^2 (U_i - E) + 2 \right] \Psi_i - \Psi_{i-1} \quad (10)$$

Na osnovu ove relacije, ako je vrednost talasne funkcije poznata u dve tačke domena, moguće je izračunati vrednost u trećoj tački. Na ovaj način moguće je propagirati talasnu funkciju od levog ka desnom kraju domena, kao što je prikazano na slici 2.

Pored toga, vidi se da ukoliko se izabere  $\Psi_0 = 0$  i  $\Psi_1 = 0$ , kao rezultat se dobija trivijalno rešenje  $\Psi(x) = 0$ . Postoje dva praktična načina da se odredi rešenje za proizvoljnu energiju. Prvi način je:

$$\Psi_0 = 0, \quad \Psi_1 = 1 \text{ nm}^{-1/2}. \quad (11)$$



Sl. 3. I tip graničnih uslova, koji odgovara ubacivanja sistema u kutiju sa beskonačnim zidovima u  $|x| = L$ .

Za drugi način, primetimo da je rešenje u oblasti konstantnog potencijala s leve strane jame:

$$\Psi(x) = e^{\kappa(x+L)}. \quad (12)$$

Prema tome:

$$\Psi_0 = 1 \text{ nm}^{-1/2} \quad \Psi'_0 = \kappa \text{ nm}^{-1/2}. \quad (13)$$

Kod prvog navedenog tipa graničnih uslova pretpostavljamo da je na granicama domena vrednost funkcije jednaka nuli, dok je vrednost prvog izvoda talasne funkcije konačna. Ovaj slučaj odgovara pretpostavci o beskonačno visokom potencijalu postavljenom na granicama domena. Prvi tip graničnih uslova je aproksimativan i može se primeniti samo ako je tačka  $x = -L$  daleko od mesta u kome postoji značajna varijacija potencijala (vidi sliku).

Kod drugog tipa graničnih uslova, pretpostavljamo da je vrednost funkcije konačna i koristeći asimptotsko ponašanje talasne funkcije, dobijen je granični uslov za prvi izvod. Prema tome, ovi granični uslovi su egzaktni za polubeskonačne barijere i mogu se zadati u  $x = \pm d$  (vidi sliku).

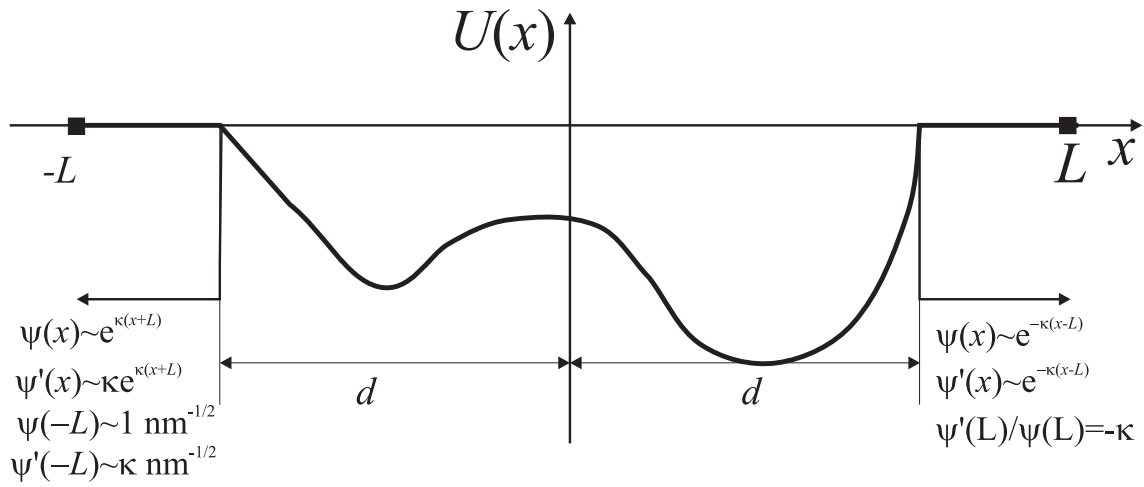
Šematski je postupak prikazan na slici. Na ovaj način se dobija talasna funkcija za proizvoljnu energiju. Ako je primenjen prvi tip graničnih uslova, svojstvena talasna funkcija na desnoj granici domena, ukoliko je ova daleko od oblasti u kojoj postoji značajna varijacija potencijala, mora da zadovolji uslov  $\Psi_n = 0$  i  $d\Psi/dx|_{x=L} = 0$ . Prema tome,  $L$  se bira tako da  $L \gg d$ . U realnosti se traži da bude zadovoljen samo jedan od navedena dva uslova u desnoj granici sa nekom tolerancijom, na primer:

$$|\Psi_n| < \epsilon, \quad (14)$$

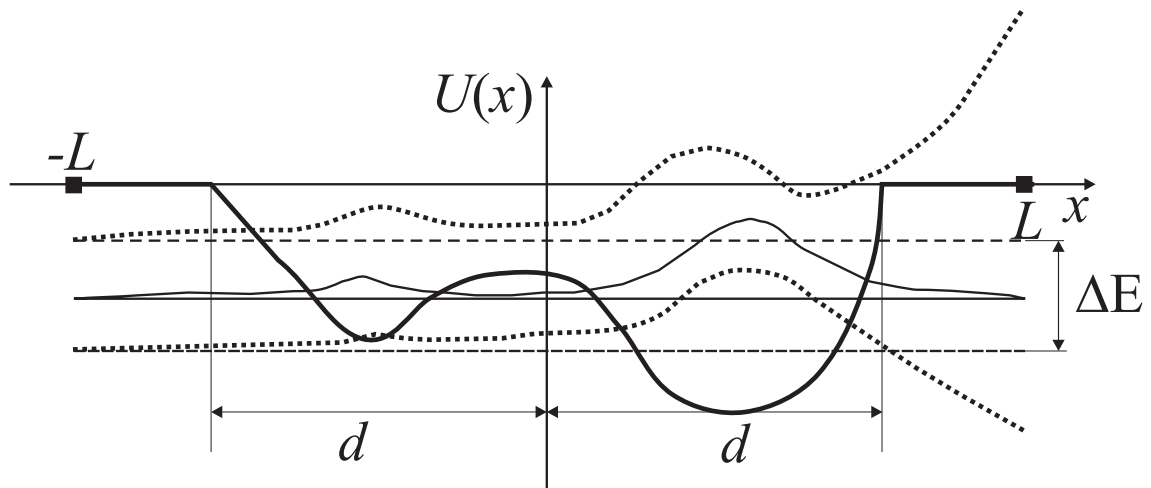
gde je  $\epsilon$  izabrani mali broj. Dobijena talasna funkcija predstavlja stanje u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami, sa potencijalom koji nije ravan između zidova u  $x = \pm L$ .

Ukoliko se primeni II tip graničnih uslova, talasna funkcija i njen prvi izvod moraju zadovoljiti.

$$\frac{\Psi'(x = x_n)}{\Psi(x = x_n)} = -\kappa, \quad (15)$$



Sl. 4. II tip graničnih uslova, izveden na osnovu asimptotskog ponašanja talasne funkcije u oblastima  $|x| > d$ . Za ovaj slučaj praktično se granični uslovi mogu zadati u  $x = \pm d$ .



Sl. 5. Ilustracija metoda gadjanja. Energijska osa se podeli na intervale  $\Delta E$ . Ako se za dve susedne izabrane vrednosti energije pojavi promena znaka talasne funkcije u  $x = +L$ , svojstvena vrednost energije se nalazi na datom intervalu bisekcijom.

koji je dobijen na osnovu asimptotskog ponašanja talasne funkcije u oblasti  $x > d$ , tj  $\Psi(x) = e^{-k(x-L)}$ . Kao što je napred rečeno, primenom ovih graničnih uslova, Schrödingerovu jednačinu je moguće numerički rešiti na domenu  $[-d, d]$ .

Na ovaj način se "testiraju" energije od minimuma potencijalne energije  $U_{min}$  do  $E = 0$ . Za dve energije moguća situacija je kao na slici. Promena znaka talasne funkcije na desnoj granici domena ukazuje da je svojstvena vrednost za energiju između dve uočene vrednosti energije. Nadalje se do svojstvene vrednosti energije dolazi polovljenjem intervala. Algoritamska šema postupka ima izgled kao na slici.

Ako je potencijal simetričan, stanja se mogu klasifikovati kao parna i neparna. Za obe vrste stanja, složenost postupka se redukuje dva puta, ako se rešavanje sprovede u oblasti  $x \geq 0$ . Na primer, za parna stanja, usvojimo  $\Psi_0 = 1 \text{ nm}^{-1/2}$ , što je prvi granični uslov. Pored toga, s obzirom da je  $\Psi(-h) = \Psi(h)$ , izraz:

$$\Psi(h) = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} h^2 (U_0 - E) + 2 \right] \Psi(0) - \Psi(-h) \quad (16)$$

postaje:

$$\Psi_1 = \Psi(h) = \frac{m}{\hbar^2} h^2 (U_0 - E) + 1, \quad (17)$$

što predstavlja drugi granični uslov. Korišćenjem vrednosti  $\Psi_0$  i  $\Psi_1$ , Schrödingerova jednačina se rešava slično kao u celom domenu za asimetrični potencijal.

Granični uslovi za neparna stanja su:

$$\Psi_0 = 0 \text{ nm}^{-1/2}, \quad \Psi_1 = 1 \text{ nm}^{-1/2}. \quad (18)$$

Izbor  $\Psi_1$  je proizvoljan, jer se na kraju svaka svojstvena funkcija normira.

## 2. Metod Numerova

Metod Numerova je varijanta metoda gađanja. Napišimo Šredingerovu jednačinu u obliku:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -f(x)\Psi, \quad (19)$$

gde je:

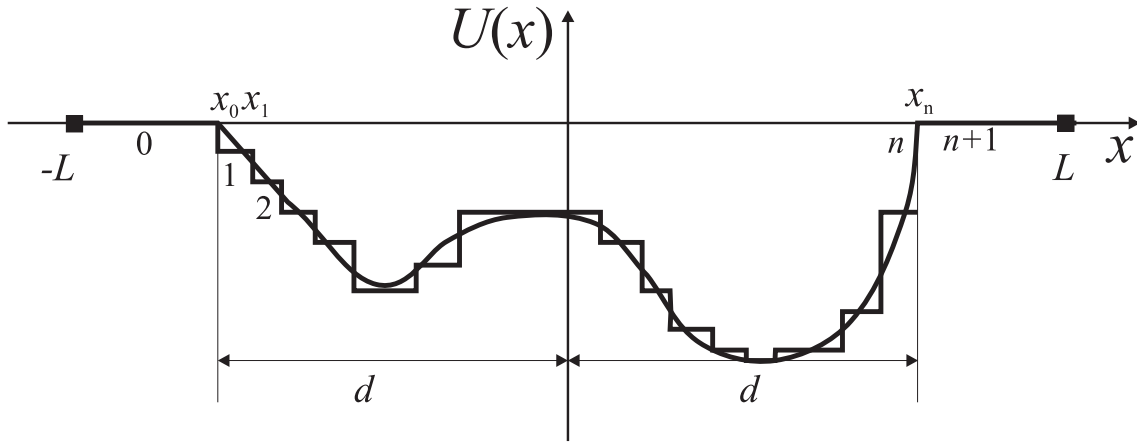
$$f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)). \quad (20)$$

Analiza greške pri diskretizaciji drugog izvoda daje:

$$\frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{h^2} = \Psi'' + \frac{h^2}{12} \Psi_i^{(4)}. \quad (21)$$

Na osnovu Šredingerove jednačine:

$$\Psi^{(4)} = -\frac{d^2}{dx^2} (f(x)\Psi). \quad (22)$$



Sl. 6. Aproximacija kontinualnog potencijala horizontalnim pravolinijskim segmentima. Redni broj segmenta je dat ispod segmenta. Granični uslovi se postavljaju na granicama između segmenata. Segmenti 0 i  $n + 1$  su polubeskonačni.

Dakle:

$$\Psi_i^{(4)} = -\frac{1}{h^2} (f_{i+1}\Psi_{i+1} - 2f_i\Psi_i + f_{i-1}\Psi_{i-1}). \quad (23)$$

Prema tome:

$$\begin{aligned} \frac{h^2}{12}\Psi_i^{(4)} &= -\frac{1}{12} (f_{i+1}\Psi_{i+1} - 2f_i\Psi_i + f_{i-1}\Psi_{i-1}) \\ &= \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{h^2} - \Psi_i'' = \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{h^2} + f_i\Psi_i. \end{aligned} \quad (24)$$

Šredingerova jednačina se svodi na diferencnu jednačinu:

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}f_{i+1}\right)\Psi_{i+1} - 2\left(1 - \frac{5}{12}h^2f_i\right)\Psi_i + \left(1 + \frac{h^2}{12}f_{i-1}\right)\Psi_{i-1} = 0. \quad (25)$$

Postupak rešavanja se sprovodi na isti način kao kod metoda gađanja, tj postavse se granični uslovi, ispropagira se rešenje od leve ka desnoj granici. Svojstvena energija je ona vrednost za koju su zadovoljeni uslovi za talasnu funkciju i prvi izvod kao kod metod gađanja. Metod Numerova se najčešće koristi za procenu efikasnosti novih metoda za rešavanje Šredingerove jednačine.

### 3. Metod transfer matrice

U ovom metodu se potencijal diskretizuje na određeni način, najjednostavnije horizontalnim pravolinijskim segmentima, kao na slici.

Označimo segmente rednim brojem  $i = 1, \dots, n$ . Smatramo da su prvi segment (označen sa 0) i poslednji segment (označen sa  $n + 1$ ) beskonačno dugački. U pravolinijskom segmentu  $i$ , u kome potencijal ima vrednost  $U_i$ , možemo pisati:

$$\Psi^{(i)}(x) = C_1^{(i)} \cos(k_i x) + C_2^{(i)} \sin(k_i x), \quad (26)$$

ako je vrednost  $E > U_i$ , odnosno:

$$\Psi^{(i)}(x) = C_1^{(i)} e^{k_i x} + C_2^{(i)} e^{-k_i x}, \quad (27)$$

za  $E < U_i$ . Ovu funkciju i njen prvi izvod možemo pisati u formi:

$$\begin{bmatrix} \Psi^{(i)}(x) \\ \Psi^{(i)'}(x) \end{bmatrix} = M_i(x) \begin{bmatrix} C_1^{(i)} \\ C_2^{(i)} \end{bmatrix}, \quad (28)$$

gde je  $M_i(x)$  transfer matrica, koja za  $E > U_i$   $k_i = \sqrt{2m_i(E - U_i)}$  ima oblik:

$$M_i(x) = \begin{bmatrix} \cos(k_i x) & \sin(k_i x) \\ -k_i \sin(k_i x) & k_i \cos(k_i x) \end{bmatrix}, \quad (29)$$

a za  $E < U_i$  ( $k_i = \sqrt{2m_i(U_i - E)/\hbar^2}$ ):

$$M_i(x) = \begin{bmatrix} e^{k_i x} & e^{-k_i x} \\ k_i e^{k_i x} & -k_i e^{-k_i x} \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Talasna funkcija se povezuje na granicama između dva segmenta:

$$\begin{bmatrix} \Psi^{(i+1)}(x_i) \\ \Psi^{(i+1)'}(x_i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi^{(i)}(x_i) \\ \Psi^{(i)'}(x_i) \end{bmatrix}. \quad (31)$$

Na drugi način napisana ova jednakost ima formu:

$$M_{i+1}(x_i) \begin{bmatrix} C_1^{(i+1)} \\ C_2^{(i+1)} \end{bmatrix} = M_i(x_i) \begin{bmatrix} C_1^{(i)} \\ C_2^{(i)} \end{bmatrix}. \quad (32)$$

Odavde sledi:

$$\begin{bmatrix} C_1^{(i+1)} \\ C_2^{(i+1)} \end{bmatrix} = M_{i+1}^{-1}(x_i) M_i(x_i) \begin{bmatrix} C_1^{(i)} \\ C_2^{(i)} \end{bmatrix}. \quad (33)$$

Postavljanjem graničnih uslova na desnim granicama od segmenta 0 (tačka  $x_0$ ) do segmenta  $n$  (tačka  $x_n$ ):

$$\begin{bmatrix} C_1^{(n+1)} \\ C_2^{(n+1)} \end{bmatrix} = M_{n+1}^{-1}(x_n) M_n(x_n) M_n^{-1}(x_{n-1}) M_{(n-1)}(x_{n-1}) \dots M_1^{-1}(x_0) M_0(x_0) \begin{bmatrix} C_1^{(0)} \\ C_2^{(0)} \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Ovaj uslov se može pisati u formi:

$$\begin{bmatrix} C_1^{(n+1)} \\ C_2^{(n+1)} \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} C_1^{(0)} \\ C_2^{(0)} \end{bmatrix}, \quad (35)$$

gde je  $T$  transfer matrica:

$$T = \prod_{i=0}^n M_{i+1}^{-1}(x_i) M_i(x_i). \quad (36)$$

Prema tome, za poznate koeficijente  $C_1^{(0)}$  i  $C_2^{(0)}$  mogu se odrediti koeficijenti  $C_1^{(n+1)}$  i  $C_2^{(n+1)}$ . Za *diskretno* svojstveno stanje, oblici talasnih funkcija u prvom ( $i = 0$ ) i poslednjem segmentu:

$$\psi^{(0)}(x) = C_1^{(0)} e^{k_0 x} + C_2^{(0)} e^{-k_0 x}, \quad (37)$$

$$\psi^{(n+1)}(x) = C_1^{(n+1)} e^{k_{n+1} x} + C_2^{(n+1)} e^{-k_{n+1} x}. \quad (38)$$

S obzirom da su prvi i poslednji segment beskonačno dugački, za rešenje koje ima fizički smisao, mora biti  $C_2^{(0)} = 0$  i  $C_1^{(n+1)} = 0$ .

Postupak je sledeći. Izaberu se energije u opsegu ( $U_{min} < E < 0$ ), recimo one koje su razmaknute za  $\Delta E$ . Odredi se transfer matrica za zadatu vrednost energije. Postavi se  $C_2^{(1)} = 0$ , a zatim ispropagira rešenje od  $x_0$  do  $x_n$  (videti sliku). Svojstvena vrednost za energiju je ona vrednost energije za koju je:

$$|C_1^{(n+1)}| < \varepsilon, \quad (39)$$

gde je  $\varepsilon$  unapred zadata tolerancija.

Metod je pogodan za potencijale koji su kombinacija pravougaonih potencijala, kada je broj segmenata relativno mali. Za kontinualne potencijale, u velikom broju slučajeva, potrebno je koristiti veliki broj segmenata za datu preciznost. Po efikasnosti izračunavanja (brzini i memorijskim zahtevima) ovaj metod se može porediti sa metodom Numerova. Najefikasniji postupak za računanje od 3 prikazana propagativna metoda je metod gađanja, ali sa Runge-Kuta ili sličnim metodom za rešavanje diferencijalnih jednačina. Kod metoda transfer matrice, kada se izračuna svojstvena energija, svojstvena funkcija se može izračunati u proizvoljnim tačkama, dok je kod druga dva metoda potrebno uraditi interpolaciju.

## 4. Matrični metodi

### 4.1. Metod ekspanzije (na celom domenu)

Posmatramo Šredingerovu jednačinu:

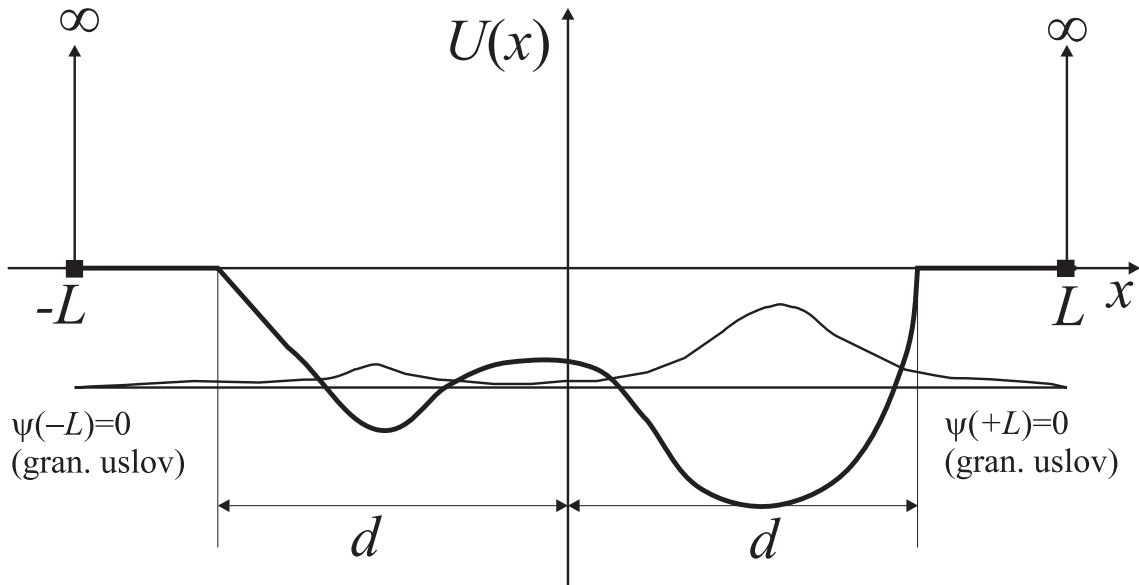
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi = E \psi, \quad (40)$$

koju rešavamo za potencijal oblika kao na slici 7

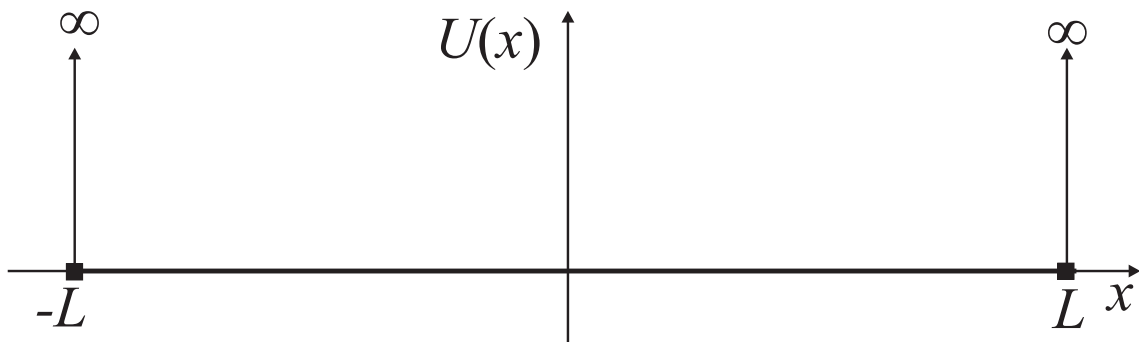
S obzirom da talasna funkcija opadne na zanemarljivu vrednost sa rastojanjem od jame, tj oblasti u kojoj postoji varijacija potencijala, moguće je ubaciti sistem u beskonačno duboku kvantnu jamu sa zidovima na velikom rastojanju (slično kao kod jednog od dva tipa graničnih uslova kod metoda gađanja). Ubacivanje sistema u kutiju na velikom rastojanju nema velikog uticaja na dobijene energije i talasne funkcije. Naime, ako je  $L - d \gg 1/\kappa$ , gde je  $\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  (na primer, za  $L - d \sim 5/\kappa$ , talasna funkcija ( $\sim e^{-\kappa(L-d)}$ ) opadne na  $e^{-5}$  od vrednosti u  $x = d$ ).

Talasne funkcije  $\psi$  razvijemo u bazis formiran of svojstvenih funkcija čestice u pravougaonoj beskonačno dubokoj jami (prikazanoj na slici 8):

$$\chi_j(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(j \frac{\pi x}{2L}\right), & j > 0, \text{mod}(j, 2) = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(j \frac{\pi x}{2L}\right), & j > 0, \text{mod}(j, 2) = 0 \end{cases}. \quad (41)$$



Sl. 7. Aproksimacija kontinualnog potencijala horizontalnim pravolinijskim segmentima. Redni broj segmenta je dat ispod segmenta. Granični uslovi se postavljaju na granicama izmedju segmenata. Segmenti 0 i  $n + 1$  su polubeskonačni.



Sl. 8. Pogodan skup bazisnih funkcija se dobija rešavanjem problema kvantovanja u beskonačno dubokoj kvantnoj jami.

Primetimo da su ove funkcije ortonormirane  $\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij}$ .

Podsetimo se da su svojstvene energije u beskonačno dubokoj kvantnoj jami:

$$E_{\infty j} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{j^2 \pi^2}{L^2}. \quad (42)$$

Razvijemo talasnu funkciju u red po svojstvenim funkcijama  $\chi_j$ :

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^n c_j \chi_j(x). \quad (43)$$

Ovde je  $n$  red bazisa. Naime, u praksi se mora uzeti konačan broj bazisnih funkcija u razmatranje. Dakle,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \sum_{j=1}^n c_j \chi_j(x) + U(x) \sum_{j=1}^n c_j \chi_j(x) = E \sum_{j=1}^n c_j \chi_j(x). \quad (44)$$

Pomnožimo ovu jednačinu sa  $\chi_i^*$  i uzmimo u obzir da su bazisne svojstvene funkcije ortonormirane:

$$\sum_{j=1}^n (\langle \chi_i | \hat{T} | \chi_j \rangle + \langle \chi_i | U(x) | \chi_j \rangle) c_j = E \sum_{j=1}^n \underbrace{\langle \chi_i | \chi_j \rangle}_{\delta_{ij}} c_j. \quad (45)$$

Ovde se matrični elementi računaju integracijom od  $-L$  do  $+L$ , npr:

$$\langle \chi_i | U(x) | \chi_j \rangle = \int_{-L}^{+L} \chi_i^* U(x) \chi_j dx. \quad (46)$$

Primetimo da je:

$$\langle \chi_i | \hat{T} | \chi_j \rangle = E_{\infty j} \delta_{ij}. \quad (47)$$

Jednačina (45) predstavlja jednu jednačinu za koeficijente ekspanzije  $a_i$ .

Ukoliko se prikazani postupak množenja Šredingerove jednačine sa  $\chi_i$  i integracije u izabranom domenu ponovi za preostale  $\chi_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , dobija se sistem linearnih jednačina, oblika:

$$\begin{bmatrix} E_{\infty 1} + U_{11} & U_{12} & \dots & U_{1n} \\ U_{21} & E_{\infty 2} & \dots & U_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ U_{n1} & \dots & \dots & E_{\infty n} + U_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}. \quad (48)$$

Ovde je:

$$U_{ij} = \langle \chi_i | U(x) | \chi_j \rangle. \quad (49)$$

Problem rešavanja Šredingerove jednačine sveden je, dakle, na problem rešavanja svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora matrice, oblika:

$$Hc = Ec, \quad (50)$$

gde  $H$  predstavlja matricu čiji su matrični elementi očekivane vrednosti za bazisne funkcije. Iz ovog razloga  $\langle \chi_i | H | \chi_j \rangle$  naziva se *matrični element*. Matrica  $H$  je *Hamiltonova matrica*, a  $c$

je kolona koeficijenata ekspanzije. Hamiltonova matrica je hermitska matrica (sledi na osnovu hermitivnosti hamiltonijana):

$$H = H^\dagger, \quad (51)$$

gde  $H^\dagger = (H^T)^*$  označava hermitski konjugovanu matricu. Treba primetiti da su dijagonalni elementi hermitskih matrica realni ( $H_{ii}^* = H_{ii}$ ), a vandijagonalni matrični elementi su:

$$H_{ij} = H_{ji}^*. \quad (52)$$

Ukoliko su bazisne funkcije realne, Hamiltonova matrica postaje simetrična realna matrica, za koju važi:

$$H_{ij} = H_{ji}. \quad (53)$$

Ukoliko se posmatrani potencijal za koji rešavamo Šredingerovu jednačinu poklapa sa potencijalom za koji je dobijen bazis, tada je matrica dijagonalna po formi, tj svi vandijagonalni matrični elementi su jednaki nuli,  $U_{ij} = 0$ ,  $i \neq j$ . Matrica  $H$  se može svesti na dijagonalnu formu, ukoliko se pogodno izabere unitarna matrica  $U$  (koja zadovoljava  $U^{-1} = U^\dagger$ , gde  $U^\dagger$  predstavlja hermitski konjugovanu matricu). Može se pokazati da *unitarne matrice imaju osobinu očuvanja ortonormiranosti svojstvenih vektora*. Drugim rečima, ako su svojstveni vektori koji odgovaraju različitim energijama ortogonalni ( $\langle c^{(i)} | c^{(j)} \rangle = 0$ ), vektori  $d$  dobijeni unitarnom transformacijom ( $d = Uc$ ) su takođe ortogonalni ( $\langle d^{(i)} | d^{(j)} \rangle = 0$ ). Pored toga,

$$c = U^\dagger d, \quad (54)$$

$$HU^\dagger d = EU^\dagger d. \quad (55)$$

Pomnožimo poslednju jednačinu sa  $U$ :

$$UHU^\dagger d = EUU^\dagger d. \quad (56)$$

Ako obeležimo sa  $H' = UHU^\dagger$  i uzmimo u obzir  $UU^\dagger = 1$ , sledi:

$$H'd = Ed. \quad (57)$$

Ako je matrica  $H'$  dijagonalna, direktno se čitaju svojstvene vrednosti za energiju:

$$\begin{bmatrix} H'_{11} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & H'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}, \quad (58)$$

tj

$$E_1 = H'_{11} \quad (59)$$

$$\vdots \quad (60)$$

$$E_2 = H'_{nn}. \quad (61)$$

Dijagonalizacija, tj svodjenje matrice na dijagonalnu formu se u praksi sprovodi iterativno u numeričkom postupku. Na kraju postupka dijagonalizacije talasne funkcije se normiraju. Najpre se odredi:

$$c = U^\dagger d, \quad (62)$$

a zatim:

$$\int_{-L}^{+L} \psi^{(i)*} \psi^{(i)} dx = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j^{(i)*} c_k^{(i)} \langle \chi_i | \chi_j \rangle = \sum_{j=1}^n |c_j|^2 = c^\dagger c = 1. \quad (63)$$

Programi za dijagonalizaciju matrica obično sprovode normiranje svojstvenih vektora.<sup>1</sup> Može se pokazati da ne postoje svojstvene vrednosti ispod minimuma potencijalne energije. Ukoliko je matrica reda  $n$ , u postupku dijagonalizacije dobiće se  $n$  svojstvenih vrednosti, od kojih su samo neke *diskretne*, dok se ostale nalaze u kontinualnoj oblasti spektra. Naime, kontinualni spektar je diskretizovan ubacivanjem sistema u kutiju sa beskonačnim zidovima. Po pravilu su Hamiltonove matrice po ovom metodu pune, tako da je vreme dijagonalizacije reda  $O(N^3)$ . Ovo znači da ukoliko se red bazis uveća 2 puta, vreme dijagonalizacije poraste 8 puta.

Metod ekspanzije se efikasno primenjuje za rešavanje višedimenzionih Schrödingerove jednačine, kada se propagativni metodi ne mogu primeniti. Tada je najjednostavnije izabrati bazis koji se sastoji od proizvoda jednodimenzionih bazisnih funkcija zavisnih od pojedinačnih koordinata. Na primer, za 2D slučaj:

$$\psi(x, y) = \sum_j \sum_k c_{jk} \chi_{jx}(x) \chi_{ky}(y). \quad (64)$$

Koeficijenti  $c_{jk}$  se mogu poredati u matricu:

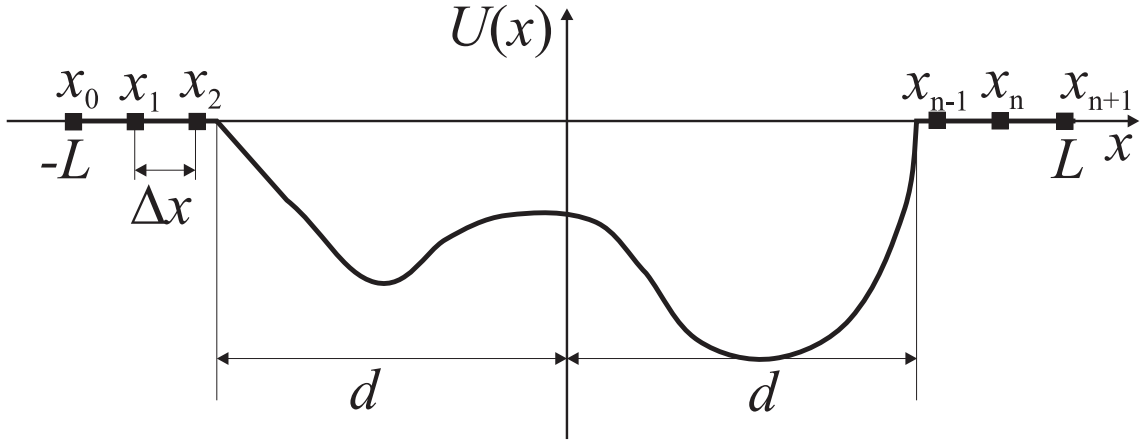
$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (65)$$

Radi praktične primene, potrebno je ove koeficijente poredati u jednu kolonu, npr:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{n1} \\ a_{12} \\ \vdots \\ a_{n2} \\ a_{1n} \\ \vdots \\ a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (66)$$

Ako je bazis sačinjen od  $n_x$  bazisnih funkcija u  $x$  pravcu i  $n_y$  bazisnih funkcija u  $y$  pravcu, broj bazisnih funkcija je  $n = n_x n_y$ . Na primer, ako je  $n_x = 100$  i  $n_y = 100$ , tada je  $n = 10^4$ , što znači

<sup>1</sup>To ipak treba proveriti u uputstvu za svaku konkretnu rutinu odnosno funkciju koja dijagonalizuje matricu.



Sl. 9. Podela domena na korake dužine  $\Delta x$ , radi transformacije diferencijalne Šredingerove jednačine u diferencnu jednačinu metodom konačnih razlika.

da je vreme dijagonalizacije  $O(10^{12})$ . S druge strane, kod jednodimenzionog problema sa istim brojem bazisnih funkcija, vreme dijagonalizacije je  $O(10^6)$ . Odnos vremena dijagonalizacije za 2D i 1D problem je, dakle,  $10^6$ . Na primer, ako dijagonalizacija u 1D postupku sa istim brojem 1D bazisnih funkcija traje 1 s, dijagonalizacija 2D problema traje oko  $10^6$  s. Metod ekspanzije nije efikasan za 3D probleme, a često nije ni moguć, s obzirom na memorijska ograničenja. Za 3D svojstvene probleme koriste se najčešće metodi diskretizacije u realnom prostoru, kao što je metod konačnih razlika i metod konačnih elemenata.

## 5. Metod konačnih razlika

Metod konačnih razlika ne spada u klasu metoda ekspanzije, ali dovodi do matrica koje se dijagonalizuju. Posmatrajmo najpre jednodimenzioni potencijal kao na slici. Podelimo ovaj domen na poddomene dužine  $\Delta x$ , (kao na slici 9) i uzmimo da su tačke ekvidistantno raspoređene:

$$x_i = x_0 + i\Delta x; \quad i = 0, 1, 2, \dots, n+1. \quad (67)$$

Diskretizujemo Šredingerovu jednačinu:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)\psi = 0, \quad (68)$$

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2}. \quad (69)$$

Diskretizovana Šredingerova jednačina ima formu (videti poglavlje o metodu gađanja):

$$\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_i - E)\psi_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (70)$$

Ovu jednačinu ćemo pisati u formi:

$$-\psi_{i+1} + (D_i - \lambda)\psi_i - \psi_{i-1} = 0 \quad (71)$$

Ovde je:

$$D_i = \frac{2m}{\hbar^2}(\Delta x)^2 U_i + 2, \quad (72)$$

$$\lambda = \frac{2mE}{(\Delta x)^2 \hbar^2}. \quad (73)$$

Pretpostavljamo da se leva i desna granica domena nalaze dovoljno daleko od oblasti u kojoj je kvantna jama, tako da je  $\psi_0 = \psi_{n+1} = 0$ .

Sistem jednačina za vrednosti talasne funkcije u pojedinim tačkama može se pisati u formi:

$$H\Psi = E\Psi, \quad (74)$$

tj

$$\begin{bmatrix} D_1 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -1 & D_2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & D_3 & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & D_{n-1} & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & D_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix}. \quad (75)$$

Problem nalaženja svojstvenih vrednosti je sličan metodu ekspanzije u bazis na celom domenu. Svojstvene vrednosti se određuju rešavanjem sekularne jednačine:

$$\det(H - \lambda I) = 0. \quad (76)$$

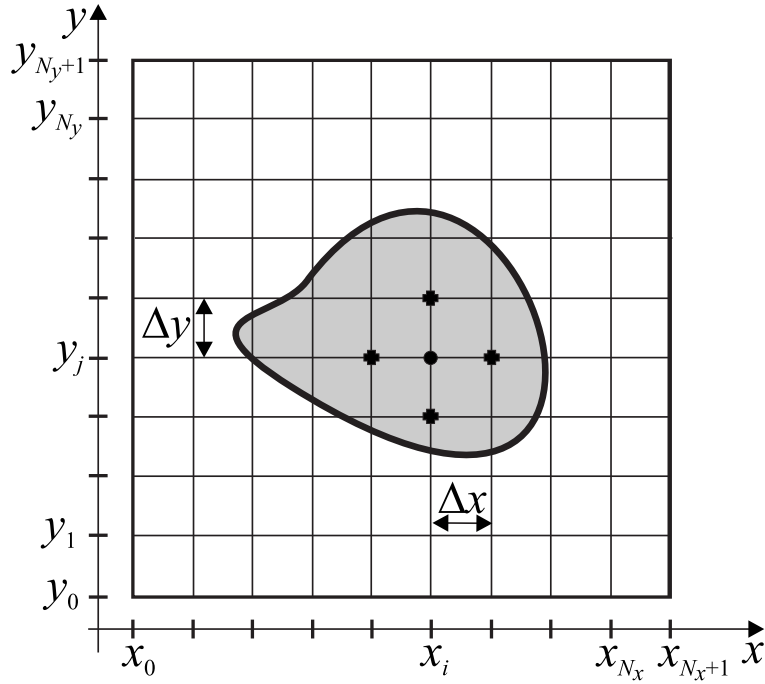
Hamiltonova matrica  $H$  je hermitska i u praksi se nalaženje svojstvenih vrednosti svodi na dijagonalizaciju matrice  $H$ . Svojstvene vrednosti  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Na osnovu ovih svojstvenih vrednosti se dobiju svojstvene energije  $E_i = \hbar^2 \lambda_i / (2m(\Delta x)^2)$ . Pored svojstvenih vrednosti u procesu dijagonalizacije dobijaju se i svojstveni vektori. Hamiltonova matrica  $H$  ima trodiagonalnu formu, tako da je dijagonalizacija matrice pomoću računara vrlo brza. Pored toga, alokacija memorijskih resursa je vrlo mala, jer je od  $n^2$  elemenata matrice, samo  $3n - 2$  različito od nule, tako da se mogu koristiti programi za dijagonalizaciju retkih matrica.

Kao i kod metoda ekspanzije, treba voditi računa o lokaciji  $x_0$  i  $x_{n+1}$  (treba da budu lokalizovane daleko od oblasti u kojoj je varijacija potencijala značajna). Za svaku svojstvenu vrednost energije, vrednosti talasne funkcije su poređane u vektor:

$$\psi^{(i)} = \begin{bmatrix} \psi_1^{(i)} \\ \psi_2^{(i)} \\ \vdots \\ \psi_n^{(i)} \end{bmatrix}. \quad (77)$$

S obzirom da svojstvene funkcije moraju biti normirane:

$$\int |\psi^{(i)}|^2 dx = 1 \quad (78)$$



Sl. 10. Diskretizacija domena za primenu metoda konačnih razlika.

znači:

$$\sum_j |\psi_j^{(i)}|^2 \Delta x = 1, \quad (79)$$

odnosno:

$$\Psi^{(i)\dagger} \Psi^{(i)} = \frac{1}{\Delta x}, \quad (80)$$

gde  $\Psi^{(i)\dagger}$  označava hermitski konjugovanu matricu  $\Psi^{(i)\dagger} = ((\Psi^{(i)})^T)^*$ .

### 5.1. Metod konačnih razlika za višedimenzione probleme

Kao i ostali metodi ekspanzije, metod se efikasno koristi za rešavanje 2D i 3D Šredingerove jednačine. Za 2D potencijal (npr. u kvantnoj žici), koji zavisi od  $x$  i  $y$  koordinate i koji je lokalizovan u oblasti prostora kao na slici, formira se najpre mreža. Iako mreža ne mora biti homogena, jednostavnosti radi, ovde pretpostavićemo homogenu mrežu. Označimo koordinate tačke indeksima  $i$  i  $j$ . Radijus vektor položaja proizvoljne tačke je:

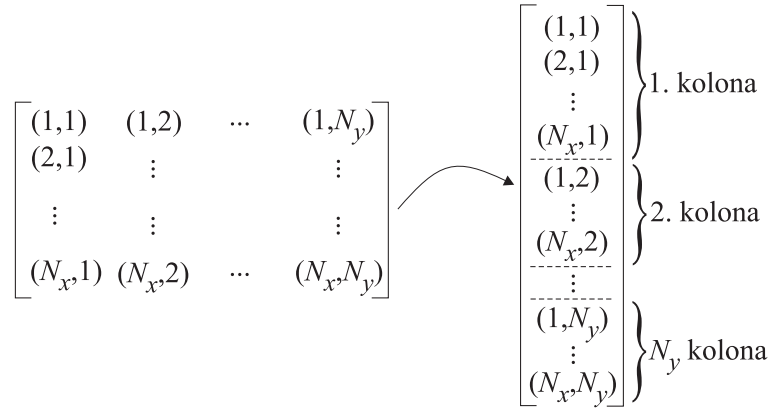
$$\vec{r} = (x_i, y_j). \quad (81)$$

Šredingerova jednačina ima formu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) + U(x, y) \Psi = E \Psi. \quad (82)$$

Ako diskretizujemo druge izводе po  $x$  i  $y$ , na isti način kao za 1D problem, sledi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\Psi_{i+1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\Psi_{i,j+1} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \right] + U_{i,j} \Psi_{i,j} = E \Psi_{i,j}. \quad (83)$$



Sl. 11. Transformacija matrice parova indeksa u 1D vektor.

Ovde je:

$$\Psi_{i,j} = \Psi(x_i, y_j) \quad (84)$$

$$U_{i,j} = U(x_i, y_j). \quad (85)$$

Poslednja diferencna jednačina se svodi na:

$$d\Psi_{i,j} + t_x(\Psi_{i+1,j} + \Psi_{i-1,j}) + t_y(\Psi_{i,j+1} + \Psi_{i,j-1}) = E\Psi_{i,j}. \quad (86)$$

Ovde  $d$  označava dijagonalne matrice elemente Hamiltonove matrice, a  $t_x$  i  $t_y$  su takozvani transfer-matrični elementi, koji sprežu vrednost talasne funkcije u tački  $i, j$  sa vrednostima talasne funkcije u tačkama za jedan manjeg ili većeg indeksa po  $x$  i  $y$  osi, respektivno. Oblici ovih matričnih elemenata su:

$$d = 2\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right) + U_{i,j} \quad (87)$$

$$t_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2}, \quad (88)$$

$$t_y = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta y)^2}. \quad (89)$$

Za diskretna stanja, granični uslov je da je talasna funkcija na granici domena za rešavanje (označimo je sa  $\square$ ) jednaka nuli:

$$\Psi(\square) = 0. \quad (90)$$

Dimenzija matrice je prema tome  $N = N_x \cdot N_y$ . Uredimo parove indeksa tačaka u matricu, koja je prikazana na slici. Ova matrica se može organizovati u vektor sačinjen od kolona složenih po redosledu u matrici parova indeksa. Položaj indeksa  $(i, j)$  u matrici je, dakle:

$$k = (j - 1)N_x + i. \quad (91)$$

Na ovaj način se tačke formirane mreže indeksiraju jedinstvenim brojem. Hamiltonova matrica je petodijagonalna. Različiti od nule su: (1) elementi koji se nalaze na glavnoj dijagonali, (2) na prvoj poddijagonali i prvoj naddijagonali, (3) na poddijagonali i naddijagonali pomerenim za  $\pm N_x$  kolona (ili vrsta). Ako je prikazani domen diskretizovan sa  $N_x$  i  $N_y$  tačaka u  $x$  i  $y$  pravcu, od ukupno  $N^2 = N_x^2 N_y^2$  matriceh elemenata, samo su približno  $5N_x N_y$  tačaka različiti od nule. Pozicije matriceh elemenata koju su različiti od nule su:

$$H = \begin{bmatrix} d_1 & t_x & \cdots & \cdots & t_y & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ t_x & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ t_y & \cdots & \cdots & t_x & d_{N_x+1} & t_x & \cdots & t_y & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & t_y & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & t_x & d_{N+1} \end{bmatrix} \quad (92)$$

Kao primer uzećemo da smo diskretizovali domen mrežom sa  $N_x = N_y = 100$  tačaka unutar domena. Hamiltonova matrica je za ovakvu mrežu reda 10000, sa ukupno  $10^8$  matriceh elemenata. Međutim, samo oko 50000 matriceh elemenata je različito od nule, tj matrica je retka. Na ovaj način mogu se značajno smanjiti memorijski resursi i vreme računanja. Jedan od paketa koji se koristi za dijagonalizaciju retkih matrica je ARPACK, koji je javno dostupan na Internetu (<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>). Dijagonalizacija daje kao rezultat svojstvene vrednosti i odgovarajuće svojstvene vektore. Da bi se prikazale svojstvene funkcije, potrebno je ove jednodimenzione vektore konvertovati u matrice.

## 6. Linearni varijacioni metod

Rešavamo 1D Šredingerovu jednačinu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (93)$$

Svaka svojstvena funkcija ( $\chi$ ) može se odrediti tako da ima realni oblik zavisnosti od  $x$  koordinate.<sup>2</sup> Ovo je posledica činjenice da koficijenti i funkcije u Schrödingerovoj jednačini (masa, potencijal, energija) imaju realne vrednosti.

Procena za svojstvenu vrednost energije osnovnog diskretnog stanja se po varijacionom metodu dobija minimizovanjem funkcionala energije (srednje vrednosti hamiltonijana):

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (94)$$

<sup>2</sup>Ukoliko se odredi kompleksna funkcija kao rešenje, njoj konjugovana funkcija je takođe rešenje. Isto tako, linearna kombinacija kompleksne i njoj konjugovane funkcije je rešenje Šredingerove jednačine, što znači da se bilo koja svojstvena funkcija može izračunati ili formirati tako da ima realnu formu.

U ovom izrazu  $\Psi(x)$  predstavlja realnu varijacionu funkciju. Ova funkcija zavisi od jednog ili više varijacionih parametara. Jedan od načina da se izabere varijaciona funkcija je u formi linearne kombinacije poznatih funkcija:

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^n c_i \chi_i(x) \quad (95)$$

i ovakav izbor čini suštinu linearnog varijacionog metoda za rešavanje Šredingerove jednačine. Ovde su  $c_1, c_2, \dots, c_n$  *linearni varijacioni parametri*, a funkcije  $\chi_i(x)$  se ne menjaju u postupku i realne su funkcije  $x$ . Funkcije  $\chi_i$  formiraju bazu, ali ove funkcije ne moraju biti međusobno ortogonalne.

Jednostavno se dobija (integracija je po relevantnom domenu):

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int \Psi(x) \Psi(x) dx = \int \left( \sum_i c_i \chi_i \right) \left( \sum_j c_j \chi_j \right) dx \\ &= \sum_i \sum_j c_i c_j \langle \chi_i | \chi_j \rangle = \sum_i \sum_j c_i c_j S_{ij}. \end{aligned} \quad (96)$$

Ovde je  $S_{ij} = \langle \chi_i | \chi_j \rangle = \int \chi_i \chi_j dx$  integral preklapanja između funkcija  $\chi_i$  i  $\chi_j$ . Takođe,  $S_{ij} = S_{ji}$ . Slično je (ne zaboraviti da je  $\Psi$  realno),

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \Psi \hat{H} \Psi dx = \sum_i \sum_j c_i c_j \langle \chi_i | \hat{H} | \chi_j \rangle = \sum_i \sum_j c_i c_j H_{ij}. \quad (97)$$

Ovde je  $H_{ij} = \langle \chi_i | \hat{H} | \chi_j \rangle = \int \chi_i \hat{H} \chi_j dx = H_{ji}$  matični element hamiltonijana između funkcija  $\chi_i$  i  $\chi_j$  (isti je kao matični element hamiltonijana između funkcija  $\chi_j$  i  $\chi_i$ ).

Na osnovu izraza za funkcional energije i oblika varijacione funkcije, dakle, dobije se:

$$\langle E \rangle \sum_i \sum_j c_i c_j S_{ij} = \sum_i \sum_j c_i c_j H_{ij}. \quad (98)$$

Funkcional energije zavisi od linearnih varijacionih parametara i procena za svojstvenu vrednost energije dobija se traženjem parcijalnih izvoda  $\langle E \rangle$  po  $c_k$ , koji svi treba da budu jednaki nuli:

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial c_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (99)$$

Prvi izvod jednačine (98) po  $c_k$  je:

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial c_k} \sum_i \sum_j c_i c_j S_{ij} + \langle E \rangle \frac{\partial}{\partial c_k} \sum_i \sum_j c_i c_j S_{ij} = \frac{\partial}{\partial c_k} \sum_i \sum_j c_i c_j H_{ij}. \quad (100)$$

Korišćenjem  $\partial \langle E \rangle / \partial c_k = 0$ , lako se dobije:

$$2 \langle E \rangle \sum_i c_i S_{ik} = 2 \sum_i c_i H_{ik}, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (101)$$

Ovde smo koristili:

$$\frac{\partial (c_i c_k + c_k c_i)}{\partial c_k} = 2c_k, \quad i \neq k, \quad (102)$$

$$\frac{\partial c_i c_k}{\partial c_k} = 2c_k, \quad i = k, \quad (103)$$

$$\frac{\partial c_i c_j}{\partial c_k} = 0, \quad j \neq k. \quad (104)$$

Prema tome,

$$\sum_i (\langle E \rangle S_{ik} - H_{ik}) c_i = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (105)$$

Ovo je jedna jednačina homogenog sistema linearnih jednačina po koeficijentima  $c_i$ . Postupak se može ponoviti za svako  $k = 1, 2, \dots, n$ , pri čemu se formira sistem:

$$Hc = \langle E \rangle Sc, \quad (106)$$

gde su  $H$  i  $S$  kvadratne matrice reda  $n$ , čiji su matični elementi  $H_{ij}$  i  $S_{ij}$ , a  $c$  je vektor koji sadrži linearne varijacione parametre,  $c = [c_1, c_2, \dots, c_n]^T$  ( $T$  je oznaka za transponovano). Poslednja jednačina spada u klasu *generalisanih* (uopštenih) svojstvenih problema, koji se od *standardnih* svojstvenih problema (oblika  $Hc = \langle E \rangle c$ ) razlikuje po  $S \neq I$ . Matrica  $S$  je po pravilu puna, kao posledica neortogonalnosti funkcija  $\chi_i$ . Ukoliko su funkcije  $\chi_i$  međusobno ortogonalne,  $S = I$ , pa se generalisni svojstveni problem svodi na standardni.

Svojstvene vrednosti generalisanog svojstvenog problema dobijaju se rešavanjem sekularne jednačine oblika:

$$\det(H - \langle E \rangle S) = 0. \quad (107)$$

U razvijenoj formi:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \langle E \rangle S_{11} & H_{12} - \langle E \rangle S_{12} & \dots & H_{1n} - \langle E \rangle S_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{n1} - \langle E \rangle S_{n1} & H_{n2} - \langle E \rangle S_{n2} & \dots & H_{nn} - \langle E \rangle S_{nn} \end{vmatrix} = 0. \quad (108)$$

Ova jednačina ima oblik algebarske jednačine reda  $n$  po  $\langle E \rangle$ . Nule polinoma sa leve strane jednačine su  $\langle E \rangle_1, \langle E \rangle_2, \dots, \langle E \rangle_n$ . Petpostavimo da su rešenja za  $\langle E \rangle$  poređana u rastućem redosledu:

$$\langle E \rangle_1 < \langle E \rangle_2 < \dots < \langle E \rangle_n. \quad (109)$$

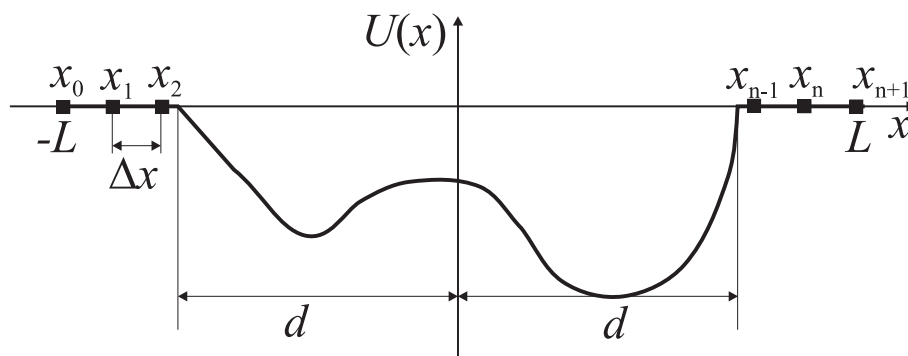
Rešenje sistema linearnih jednačina za  $\langle E \rangle = \langle E \rangle_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ) je:

$$[c_1^{(k)}, c_2^{(k)}, \dots, c_n^{(k)}], \quad (110)$$

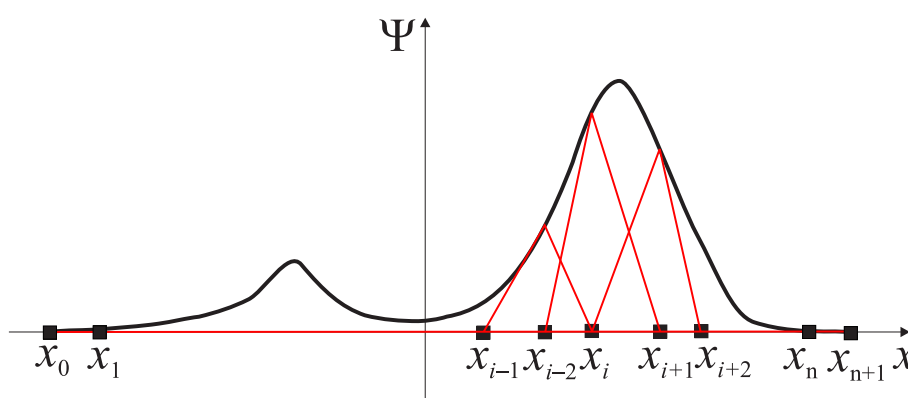
odnosno svojstvena funkcija  $k$ -tog stanja je

$$\Psi_k(x) = \sum_i c_i^{(k)} \chi_i(x). \quad (111)$$

$n$  korena sekularne jednačine predstavljaju procene diskretnih svojstvenih energija sistema. Može se pokazati da su svojstvene energije dobijene rešavanjem pomoću linearnog varijacionog metoda veće od tačnih svojstvenih energija (koje se npr. dobijaju ukoliko se koristi bazis formiran od beskonačnog broja varijacionih funkcija). (Podsetimo se da je procena za svojstvenu vrednost energije osnovnog stanja pomoću varijacionog metoda uvek iznad tačne svojstvene vrednosti.)



Sl. 12. Podela domena na poddomene (elemente) radi rešavanja metodom konačnih elemenata. Granice elemenata predstavljaju tačke mreže.



Sl. 13. Talasna funkcija se predstavlja kao rezultat superpozicije bazisnih funkcija (funkcija oblika) oblika kape, koje imaju vrednost različitu od nule na dva susedna elementa.

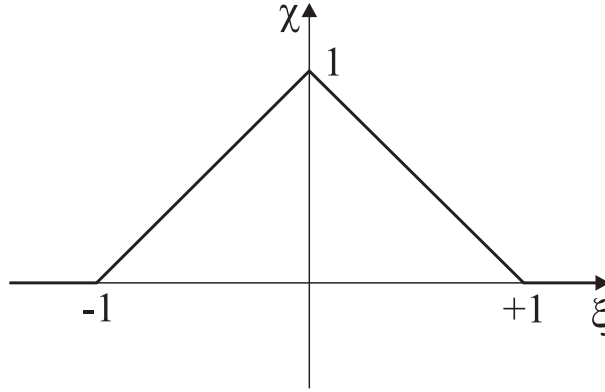
## 7. Metod konačnih elemenata

Metod konačnih elemenata je vrsta linearnog varijacionog metoda. Karakteristika ovog metoda je da su bazisne funkcije lokalno definisane i po pravilu nisu ortonormirane. U tu svrhu posmatrajmo potencijal kao na slici 12. Domen od  $x_0$  do  $x_{n+1}$  podelimo na elemente, ukupno  $n+1$ , koji ne moraju biti iste dužine. Svojstvena funkcija za ovaj potencijal može da ima oblik prikazan na slici 13.

Ovu talasnu funkciju možemo predstaviti kao rezultat slaganja funkcija definisanih na dva susedna elementa, sa maksimumima u tačkama formirane mreže (na granici između elemenata). Ovakve funkcije možemo izraziti kao proizvod vrednosti funkcije u tački mreže i funkcije čiji maksimum ima vrednost 1 na granici između elemenata. Drugim rečima talasna funkcija se može predstaviti u obliku:

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^n a_j f_j(x), \quad (112)$$

gde  $f_j$  predstavljaju bazisne funkcije koje imaju oblik kape. Ove funkcije se nazivaju *funkcije oblika*. Više od jedne funkcije oblika može biti definisano na elementima, ali funkcije oblika kape



Sl. 14. Funkcija oblika kape ima vrednost različitu od nule na master elementu (oznaka  $\chi$  je zamenjena sa  $f$  u tekstu).

su najnižeg (prvog) stepena i uspostavljaju (ne moraju biti jedine takve u bazu višeg reda) neprekidnost talasne funkcije. Jedna funkcija oblika kape, prikazana na slici 14, ima vrednost različitu od nule na takozvanom *master elementu*,  $-1 \leq \xi \leq 1$ . Ovde je  $\xi$  skalirana  $x$  koordinata.

Funkcije oblika su označene prema tačkama formirane mreže. Treba primetiti da je nepoznata talasna funkcija razvijena po lokalno definisanim bazisnim funkcijama centriranim u tačkama formirane mreže. Vrednost talasne funkcije na krajevima domena je aproksimativno jednak nuli, pa su  $a_0$  i  $a_{n+1} = 0$ . Funkcije oblika se najčešće zadaju na master elementu, od -1 do +1, jer se tada matični elementi u kojima učestvuju funkcije oblika dobijaju za zadati korak mreže skaliranjem matičnog elementa izračunatog na master elementu.

Dalji razvoj je sličan kao kod metoda ekspanzije na celom domenu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi, \quad (113)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n a_j \frac{d^2 f_j}{dx^2} + \sum_{j=1}^n a_j U(x) f_j(x) = E \sum_{j=1}^n a_j f_j(x). \quad (114)$$

Pomnožimo ovu jednačinu sa  $f_i$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i \frac{d^2 f_j}{dx^2} + \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) U(x) f_j(x) dx = E \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) f_j(x) dx. \quad (115)$$

Rešimo integral sa drugim izvodom parcijalnom integracijom, koristeći granične uslove. Parcijalna integracija je neophodna jer funkcija oblika nije diferencijabilna na granici između dva elementa:

$$\int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i \frac{d^2 f_j}{dx^2} dx = f_i \frac{df_j}{dx} \Big|_{x_0}^{x_{n+1}} - \int_{x_0}^{x_{n+1}} \frac{df_i}{dx} \frac{df_j}{dx} dx. \quad (116)$$

Oдавde sledi:

$$\sum_{j=1}^n a_j \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_0}^{x_{n+1}} \frac{df_i}{dx} \frac{df_j}{dx} dx + \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) U(x) f_j(x) dx = E \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) f_j(x) dx. \quad (117)$$

Označimo:

$$T_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_0}^{x_{n+1}} \frac{df_i}{dx} \frac{df_j}{dx} dx, \quad (118)$$

$$U_{ij} = \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) U(x) f_j(x) dx, \quad (119)$$

$$S_{ij} = \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) f_j(x) dx, \quad (120)$$

Sledi:

$$\sum_{j=1}^n (T_{ij} + U_{ij}) a_j = E \sum_{j=1}^n S_{ij} a_j. \quad (121)$$

Ovo je jedna jednačina za nepoznate koeficijente  $a_j$ . Ponavljajući ovu proceduru za sve  $f_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , sledi:

$$Ha = ESa, \quad (122)$$

gde  $H$  predstavlja Hamiltonovu matricu:

$$H_{ij} = T_{ij} + U_{ij}, \quad (123)$$

a  $S$  predstavlja matricu sačinjenu od integrala preklapanja (*matrica preklapanja*). Treba primetiti da su formirane matrice  $H$  i  $S$  trodijagonalne za 1D problem, s obzirom da su preklapljene samo funkcije oblika definisane na susednim elementima. Zbog ovoga, memorijski zahtevi pri primeni metoda konačnih elemenata nisu veliki. Metod je po pravilu brži od metoda ekspanzije u bazu definisan na celom domenu, ali je sporiji od metoda konačnih razlika, jer se rešava generalisani svojstveni problem. Kao i ostali matricni metodi, koristi se za rešavanje 2D i 3D problema. Implementacija nehomogene mreže i elemenata višeg reda u konkretnom radu je vrlo jednostavna i svodi se na skaliranje rezultata za master element i integraciju funkcija u kojima učestvuju polinomi višeg reda. Metod je teži za implementaciju na numeričkoj mašini od metoda konačnih razlika i metoda ekspanzije na celom domenu. Međutim, komercijalno razvijeni softver za modelovanje pomoću konačnih elemenata, na primer COMSOL Multiphysics i ANSYS Multiphysics, omogućava da se vreme razvoja modela značajno skрати.



## 2

# Elektronski transport u nanostrukturama

Postoje dva pristupa u teoriji transporta nosilaca u nanostrukturama:

- jednoelektronski-postavljaju se jednačine kojima se prati kretanje jednog elektrona. Odrede se transportne karakteristike za jedan elektron (na primer, koeficijent transmisije), a zatim se električna struja izračuna na osnovu ovih karakteristika;
- kolektivni-koncentracija nosilaca se određuje rešavanjem Bolcmanove jednačine, a zatim se električna struja određuje na osnovu izračunate koncentracije nosilaca.

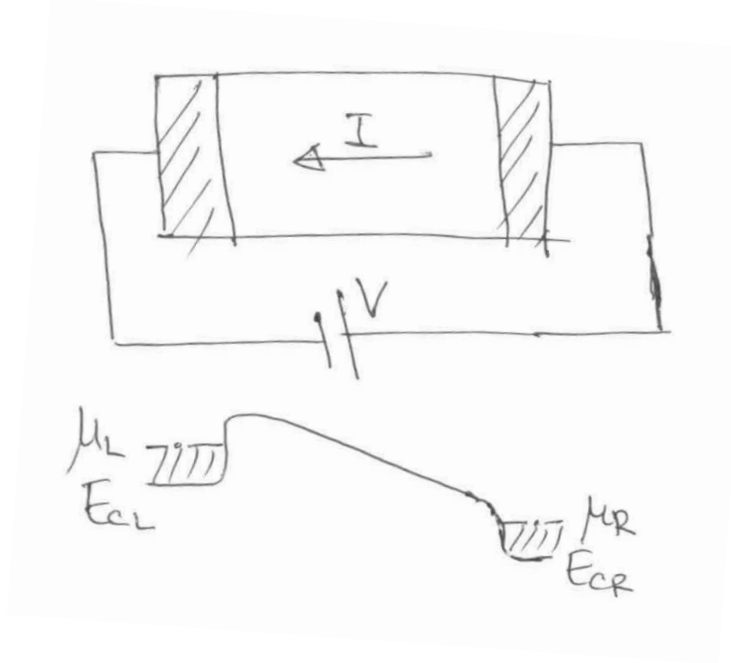
Skup elektrona u ravnoteži se karakteriše:

- temperaturom;
- elektrohemijским potencijalom (energijom Fermijevog nivoa), koji predstavlja promenu energije sistema usled dodavanja jedne čestice. Za elektrone, Fermijeva energija jednaka je elektrohemijском potencijalu na temperaturi 0 K.

Neprekidni strujni tok nosilaca se postiže priključenjem krajeva strukture ili naprave na naponski izvor, kao što je prikazano na slici. Prema pravcu kretanja nosilaca, postoje dve vrste transporta u nanostrukturama:

- vertikalni-normalan na slojeve koji čine nanostrukturu;
- lateralni-paralelan slojevima koji čine nanostrukturu.

Primer naprave koja koristi vertikalni transport je rezonantna tunelska dioda, a primer strukture koja koristi lateralni transport je kvantno-tačkasti kontakt (obe naprave su razmatrane u ovom kursu). Nezavisno od pravca kretanja nosilaca, provodnost  $G$  ili struja  $I$  u teoriji jednoelektronskog transporta, koju ćemo ovde razviti, zavise od koeficijenta transmisije. Naime, ukoliko su dimenzije strukture reda nm, ne može se koristiti Bolcmanova jednačina i drift-difuzioni model, jer Bolcmanova jednačina ne uključuje interferenciju materijalnih talasa rasejanih na različitim centrima rasejanja. Zbog toga je primereni pristup za nanonaprave jednoelektronski. Prema ovom pristupu, prati se jedan kretanje jednog elektrona rešavanjem Šredingerove jednačine, dok se kolektivne promenljive (koncentracija, struja) računaju na osnovu izračunatih svojstvenih vrednosti i svojstvenih funkcija.



Sl. 1. Poprečni presek nanoelektronske naprave. U oblastima kontakata elektronski gas je degenerisan i nalazi se u ravnoteži.

Oblasti od *aktivnog dela naprave* do naponskog izvora su metalne ili poluprovodne dopirane visokom koncentracijom primesa, tako da je elektrohemijski potencijal u provodnoj zoni. U ovim *kontaktnim oblastima (uvodnicima)* nosioci se nalaze u stanju termodinamičke ravnoteže, jer se ne može napraviti oblast visoke provodnosti koja odstupa od ravnotežnog stanja. Naime, mali poremećaj ravnoteže u kontaktima dovodi do toka velikog broja elektrona koji ga ispravlja. Lako je ustanoviti da aktivni deo strukture ili naprave povezuje dva rezervoara koji se nalaze u ravnoteži na različitim hemijskim potencijalima. Raspodela elektrona u kontaktima je:

$$f_L(\vec{k}) = \frac{1}{e^{(E_{CL} - \mu_L)/(k_B T)} + 1}, \quad (1)$$

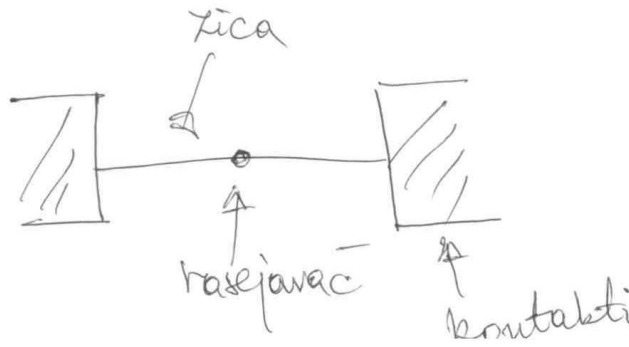
$$f_R(\vec{k}) = \frac{1}{e^{(E_{CR} - \mu_R)/(k_B T)} + 1}. \quad (2)$$

## 1. Transport nosilaca kroz 1D kanal

Posmatramo strukturu tipa 1D kvantne žice, koja je vrlo dugačka u  $z$  pravcu, kao na slici. Gustina struje koju nosi jedno stanje koje propagira sa leve na desnu stranu (sa obe vrednosti spina) je:

$$\Delta I = 2ev_z(k_z)T(k_z)\frac{1}{L_z}. \quad (3)$$

$T(k_z)$  predstavlja činjenicu da ne prelaze svi elektroni put kroz žicu od jednog do drugog kontakta,  $k_z$  je dobar kvantni broj, a faktor 2 je zbog spina. Verovatnoća zauzetosti stanja je data



Sl. 2. 1D žica između dva kontakta.

Fermi-Dirakovom funkcijom raspodele u levom kontaktu  $f[E(k_z), \mu_L]$ . S obzirom da je  $k_z$  dobar kvantni broj:

$$\sum_{k_z} \rightarrow \frac{\int \dots dk_z}{2\pi/L_z}, \quad (4)$$

gde su sumira po svim stanjima. Struja elektrona sa leve na desnu stranu je:

$$I_L = 2e \int_0^{\infty} f[E(k_z), \mu_L] v_z(k_z) T(k_z) \frac{dk_z}{2\pi}. \quad (5)$$

Treba primetiti da je donja granica integracije 0, jer se računa struja elektrona injektovanih sa leve strane. Na osnovu opšteg oblika operatora brzine:

$$\hat{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \hat{H}, \quad (6)$$

može se dobiti očekivana vrednost komponente vektora brzine u  $z$  pravcu:

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_z}. \quad (7)$$

Za paraboličnu podzону:

$$\frac{dE}{dk_z} = \frac{\hbar^2 k_z}{m} = \frac{\hbar p_z}{m} = \hbar v_z. \quad (8)$$

Zamena diferencijala  $dk_z$  diferencijalom  $dE$ :

$$dk_z = \frac{dk_z}{dE} dE = \frac{1}{\hbar v_z} dE. \quad (9)$$

Prema tome, struja elektrona injektovanih sa leve na desnu stranu je:

$$I_L = 2e \int_{\mu_L}^{\infty} f(E, \mu_L) v_z T(E) \frac{dE}{2\pi \hbar v_z}, \quad (10)$$

odnosno:

$$I_L = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} f(E, \mu_L) T(E) dE. \quad (11)$$

Podintegralna funkcija ne sadrži eksplicitno  $v_z$ , već samo koeficijent transmisije i funkciju raspodele koje savise od energije čestice. Ovo se može objasniti manjom gustinom stanja (manjim  $dk_z/dE$ ) stanja sa većim  $v_z$ , tako da je njihov doprinos struji manji. Donja granica integracije je energija dna provodne zone u levom kontaktu.

Struja elektrona injektovanih iz desnog kontakta je obrnutog smera, a koeficijent transmisije ima istu vrednost za datu energiju, pa je:

$$I_R = -\frac{2e}{h} \int_{U_R}^{\infty} f(E, \mu_R) T(E) dE. \quad (12)$$

Stanja sa energijama između  $U_L$  i  $U_R$  ne daju doprinos ukupnoj struji, jer nema incidentnih stanja na levoj strani, a incidentna stanja na desnoj strani se totalno reflektuju. Prema tome:

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} [f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)] T(E) dE. \quad (13)$$

Ovaj izraz ćemo, zbog sličnosti sa formulom za vertikalni transport u slojevitim strukturama (videti kasnije) zvati jednodimenziona Tsu-Esakijska formula. Ova strujno-naponska relacija nema oblik Ohmovog zakona (struja nije u opštem slučaju linearna funkcija primenjenog napona  $V = (U_L - U_R)/e$ ). Ovoj relaciji se mogu dati posebne aproksimativne forme.

### 1.1. Visoki napon polarizacije

Ako je napon polarizacije visok, ne postoji doprinos desne strane struji, pa je:

$$I = I_L = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} f(E, \mu_L) T(E) dE. \quad (14)$$

### 1.2. Niska temperatura

Za slučaj degenerisanog elektronskog gasa na niskoj temperaturi:

$$f_{FD}(E, \mu_L) = \Theta(\mu_L - E) \quad (15)$$

i

$$f_{FD}(E, \mu_R) = \Theta(\mu_R - E), \quad (16)$$

tj

$$f_{FD}(E, \mu_L) - f_{FD}(E, \mu_R) = \Theta(\mu_L - E) - \Theta(\mu_R - E). \quad (17)$$

Ovde možemo posmatrati dva tipična slučaja:

1.  $\mu_R > U_L$ . Tada je:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} T(E) dE. \quad (18)$$

2.  $\mu_R < U_L$ . Tada je:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\mu_L} T(E) dE. \quad (19)$$

### 1.3. Niski napon polarizacije (režim linearnog odziva)

Za niski napon polarizacije, tj malu razliku hemijskih potencijala na levoj i desnoj strani, možemo uvesti srednju vrednost hemijskog potencijala, tako da je:

$$\mu_L = \mu + \frac{1}{2}eV, \quad (20)$$

$$\mu_R = \mu - \frac{1}{2}eV. \quad (21)$$

Kada je razlika hemijskih potencijala mala:

$$f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R) \approx eV \frac{\partial f}{\partial \mu} = -eV \frac{\partial f}{\partial E}, \quad (22)$$

gde smo koristili:

$$f = f(E - \mu). \quad (23)$$

Zamena u izraz za struju daje:

$$I = \frac{2e^2V}{h} \int_{U_L}^{\infty} \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) T(E) dE. \quad (24)$$

Zavisnost struje od napona je linearna, pa važi Omov zakon. Provodnost je:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \int_{U_L}^{\infty} \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) T(E) dE. \quad (25)$$

U ovoj relaciji figuriše kvant provodnosti:

$$\boxed{G_K = \frac{e^2}{h} = 38,7 \mu\text{S}}. \quad (26)$$

Može se definisati kvant otpornosti:

$$\boxed{R_K = \frac{h}{e^2} = 25,8 \text{ k}\Omega}. \quad (27)$$

Kvantovanje provodnosti se meri u eksperimentima sa kvantno-tačkastim kontaktom, a kvantovanje otpornosti postoji kod kvantnog Holovog efekta. Upravo u jedinicama  $R_K$  se kvantuje otpornost (zapravo je zavisnost Holove otpornosti  $R_H \sim R_K/\nu$ , gde je  $\nu$  ceo broj kod celobrojnog kvantnog Holovog efekta, a racionalni broj kod frakcionog kvantnog Holovog efekta).

#### 1.4. Za niske napone polarizacije i za niske temperature

Poseban slučaj prethodnog je degenerisani elektronski gas, tj slučaj niske temperature, kada se Fermi-Dirakova funkcija raspodele može aproksimirati stepenastom funkcijom:

$$f = \Theta(\mu - E). \quad (28)$$

Negativna vrednost prvog izvoda po energiji je:

$$-\frac{\partial f}{\partial E} = \delta(\mu - E). \quad (29)$$

Za ovaj slučaj samo elektroni u okolini Fermijeve energije doprinose struji, jer je prvi izvod Fermi-Dirakove funkcije raspodele oštiri od  $T(E)$ . Eksplicitna integracija daje:

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\mu). \quad (30)$$

## 2. Tsu-Esakijeva formula

Pretpostavimo da je provođenje vertikalno na slojeve strukture tipa kvantne jame. Potencijal u kome su konfinirani elektroni je  $U = U(z)$ , a efektivna masa je konstantna. Za strukture tipa kvantne jame, znamo da važi translatorska invarijantnost u  $xy$  ravni i da su disperzione relacije u kontinualnoj oblasti energijskog spektra parabolične:

$$E(k_{\parallel}, k_z) = U_L + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}}_{E_z} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}. \quad (31)$$

Za iste efektivne mase u strukturi, koeficijent transmisije zavisi samo od  $k_z$ , a ne i od  $k_{\parallel}$ , jer je efektivni potencijal isti za različito  $k_{\parallel}$ . Ovaj slučaj je različit od prethodnog, gde smo pretpostavili da se elektroni kreću samo duž jednog pravca.

Struja koju nosi jedan elektron je:

$$\frac{ev_z T}{L_z}. \quad (32)$$

Struja svih elektrona iz leve žice je:

$$I_L = 2e \sum_{k_{\parallel}, k_z} \frac{v_z T}{L_z} f[E(k_{\parallel}, k_z), \mu_L] \quad (33)$$

Stanja u kontinuumu su okarakterisana sa 3 broja  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$ , koji imaju kontinualno raspoređene vrednosti. Zbog toga je moguće zameniti sumu integralom, koristeći:

$$\sum_{k_i} \rightarrow \frac{\int_{k_i} \dots dk_i}{\Delta k_i}, \quad i = x, y, z. \quad (34)$$

Ovde je

$$\Delta k_i = \frac{2\pi}{L_i}. \quad (35)$$

Gustina struje nosilaca injektovanih sa leve na desnu stranu je:

$$J_L = \frac{1}{L_x L_y} \underbrace{\frac{L_x L_y}{(2\pi)^2}}_{1/\Delta k_x \Delta k_y} \underbrace{(2\pi)}_{\text{int. po uglu}} 2e \int_0^\infty k_{\parallel} dk_{\parallel} \left( \frac{L_z}{2\pi} \right) \int_0^\infty dk_z \frac{v_z T(k_z)}{L_z} f(E, \mu_L). \quad (36)$$

Gustina struje je:

$$J_L = \frac{2e}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_0^\infty dk_z v_z T(k_z) f[E(k_{\parallel}, k_z), \mu_L]. \quad (37)$$

Brzina nosilaca je:

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} = \frac{\hbar k_z}{m}, \quad (38)$$

što daje pogodan zapis izraza za struju nosilaca injektovanih sa leve strane:

$$J_L = \frac{e}{2\pi^2} \frac{\hbar}{m} \int_0^\infty dk_z k_z T(k_z) \int_0^\infty k_{\parallel} dk_{\parallel} f[E(k_{\parallel}, k_z), \mu_L]. \quad (39)$$

Integral po  $k_{\parallel}$  je oblika:

$$K = \int_0^\infty \frac{k_{\parallel} dk_{\parallel}}{e^{a+bk_{\parallel}^2} + 1}. \quad (40)$$

U ovom izrazu:

$$a = \frac{U_L + \hbar^2 k_z^2 / (2m) - \mu_L}{k_B T}, \quad (41)$$

$$b = \frac{\hbar^2}{2mk_B T}. \quad (42)$$

Pomnožimo i podelimo podintegralnu funkciju u  $K$  sa  $e^{-(a+bk_{\parallel}^2)}$ . Ovaj integral postaje:

$$K = \int_0^\infty k_{\parallel} \frac{e^{-(a+bk_{\parallel}^2)} dk_{\parallel}}{1 + e^{-(a+bk_{\parallel}^2)}} dk_{\parallel}. \quad (43)$$

Ako uvedemo smenu:

$$u = 1 + e^{-(a+bk_{\parallel}^2)}, \quad (44)$$

integral postaje:

$$\begin{aligned} K &= \int_1^{1+e^{-a}} \frac{du}{2bu} = \frac{1}{2b} \ln u \Big|_1^{1+e^{-a}} \\ &= \frac{mk_B T}{\hbar^2} \ln \left( 1 + e^{(\mu_L - U_L - \hbar^2 k_z^2 / (2m)) / (k_B T)} \right) = \pi n_{2D} \left( \mu_L - U_L - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right), \end{aligned} \quad (45)$$

pri čemu je uzeto u obzir (videti “Predavanja iz mikroelektronike i nanoelektronike”):

$$n_{2D}(E_F) = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + e^{E_F / (k_B T)} \right). \quad (46)$$

Prema tome,

$$J_L = \frac{e}{2\pi^2} \frac{\hbar}{m} \pi \int_0^\infty k_z dk_z T(k_z) n_{2D} \left( \mu_L - U_L - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right). \quad (47)$$

Ako iskoristimo smenu:

$$E_z = U_L + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad (48)$$

i

$$k_z dk_z = \frac{m}{\hbar^2} dE_z, \quad (49)$$

dobija se integral oblika:

$$J_L = \frac{e}{h} \int_{U_L}^\infty dE_z T(E_z) n_{2D} (\mu_L - E_z). \quad (50)$$

Ukupna gustina struje jednaka je zbiru gustina struje nosilaca injektovanih sa leve i desne strane je:

$$J = J_L - J_R = \frac{e}{h} \int_{U_L}^\infty [n_{2D}(\mu_L - E_z) - n_{2D}(\mu_R - E_z)] T(E_z) dE_z. \quad (51)$$

Ova formula se naziva Tsu-Esakijeva formula, čije ćemo aproksimativne oblike izvesti za slučaj niske temperature (kada je elektronski gas degenerisan) i za:

1. visoki napon polarizacije;
2. niski napon polarizacije.

Da bismo je razlikovali od slučaja transporta kroz 1D kanal, ovu formulu ćemo nazivati 3D Tsu-Esakijeva formula.

### 2.1. Degenerisani 2DEG i visoki napon polarizacije

Ako je temperatura niska, Fermi-Dirakova funkcija raspodele se može aproksimirati sa:

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{(U_L + \hbar^2 k_z^2 / (2m) - \mu_L) / (k_B T) + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m k_B T)} + 1} \approx \Theta [(\mu_L - U_L - \hbar^2 k_z^2 / (2m)) - \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m)]. \quad (52)$$

Uvedimo smenu:

$$u = \mu_L - U_L - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m. \quad (53)$$

Diferencijal je:

$$du = -\frac{\hbar^2}{m} k_{\parallel} dk_{\parallel}. \quad (54)$$

Integral  $K$  postaje:

$$\begin{aligned} K &= \int_0^\infty k_{\parallel} dk_{\parallel} \Theta(\mu_L - (U_L + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m})) = \int_{\mu_L - E_z}^\infty \left(-\frac{m}{\hbar^2}\right) \Theta(u) du \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\mu_L - U_L - \hbar^2 k_z^2 / (2m)} \Theta(u) du = \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\mu_L - E_z} du = \frac{m}{\hbar^2} (\mu_L - E_z). \end{aligned} \quad (55)$$

Prema tome:

$$J_L = \frac{e}{2\pi^2} \frac{\hbar}{m} \frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dk_z k_z T(k_z) (\mu_L - E_z). \quad (56)$$

Zamena:

$$k_z dk_z = \frac{m dE_z}{\hbar^2}. \quad (57)$$

Ako je, pored niske temperature, napon polarizacije visok, ukupna struja jednaka je samo struji nosilaca injektovanih sa leve strane:

$$J = J_L = \frac{e}{\pi \hbar} \frac{m}{\hbar^2} \int_{U_L}^{\mu_L} (\mu_L - E_z) T(E_z) dE_z. \quad (58)$$

Doprinos stanja raste sa  $E_z$ , jer je doprinos stanja u Fermijevoj sferi veći u preseku (1) u odnosu na presek (2).

## 2.2. Degenerisani 2DEG i niski napon polarizacije

Ovde ćemo najpre razmotriti slučaj niskog napona polarizacije i proizvoljne temperature. Za nizak napon polarizacije:

$$\mu_L = \mu + \frac{1}{2} eV, \quad (59)$$

$$\mu_R = \mu - \frac{1}{2} eV, \quad (60)$$

gde je  $\mu$  srednja vrednost hemijskog potencijala. Za nizak napon polarizacije, razlika površinskih koncentracija u izrazu za struju je:

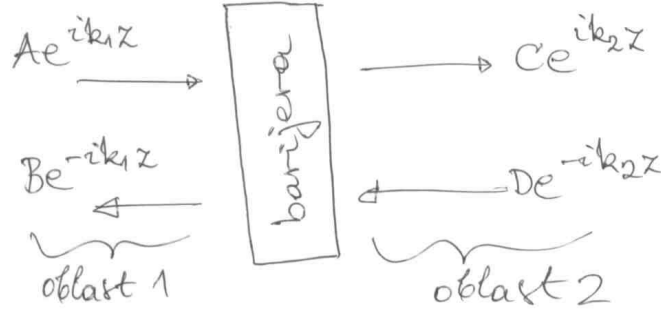
$$n_{2D}(\mu_L - E_z) - n_{2D}(\mu_R - E_z) \approx eV \frac{\partial n_{2D}}{\partial \mu} = -eV \frac{\partial n_{2D}}{\partial E_z}. \quad (61)$$

Izraz za  $n_{2D}$  je:

$$n_{2D} = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left( 1 + e^{(\mu - E_z)/(k_B T)} \right). \quad (62)$$

Parcijalni izvod  $n_{2D}$  po  $E_z$  je:

$$\frac{\partial n_{2D}}{\partial E_z} = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \left( -\frac{1}{k_B T} \right) \frac{1}{1 + e^{(\mu - E_z)/(k_B T)}} e^{(\mu - E_z)/(k_B T)}. \quad (63)$$



Sl. 3. Opšti problem transporta kroz strukturu sa jednom barijerom.

Zamenom u izraz za gustinu struje:

$$J = \frac{e^2}{h} V \int_{U_L}^{\infty} \frac{m}{\pi \hbar^2} f(E_z, \mu) T(E_z) dE_z. \quad (64)$$

Ovo znači da za niske napone polarizacije važi Ohmov zakon, kao za 1D slučaj. Za niske temperature, može se gornja granica integracije zameniti sa  $\mu$ , tako da se za niske temperature i niske napone polarizacije dobija izraz za provodnost po jedinici površine:

$$\tilde{G} = \frac{J}{V} = \frac{e^2}{h} \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{U_L}^{\mu} T(E_z) dE_z. \quad (65)$$

### 3. Metod transfer matrice za kontinualna stanja

Posmatramo opšti problem transporta, skiciran na slici. Barijera se nalazi između dve oblasti u kojima je potencijal ravan. U oblasti levo od barijere, rešenja su:

$$A e^{ik_1 z}, \quad B e^{-ik_1 z}, \quad (66)$$

a u oblasti desno od barijere:

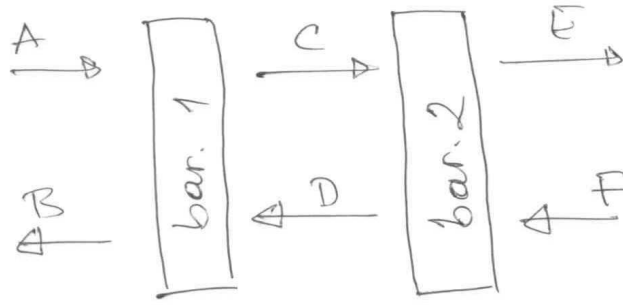
$$C e^{ik_2 z}, \quad D e^{-ik_2 z}. \quad (67)$$

Veza između koeficijenata koji množe izlazne komponente  $C$  i  $B$ , sa ulaznim komponentama je data sa:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} C \\ B \end{bmatrix}}_{\text{izlazi}} = S \underbrace{\begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix}}_{\text{ulazi}}. \quad (68)$$

Ovde  $S$  označava *matricu rasejanja*:

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}. \quad (69)$$



Sl. 4. Opšti problem transporta kroz strukturu sa dve barijere.

Umesto  $S$  matrice, možemo razmotriti *transfer matricu* (razlikovati od transfer matrice u metodu jake veze). Za posmatrani problem barijere sa oblastima ravnog potencijala levo i desno od barijere:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}}_{\text{desno}} = T \underbrace{\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}}_{\text{levo}}. \quad (70)$$

Ovde  $T = T^{(21)}$  povezuje koeficijente na desnoj sa koeficijentima na levoj strani barijere između oblasti 1 i 2. Ako struktura ima tri oblasti ravnog potencijala i dve barijere između njih, kao na slici, tada za drugu barijeru važi:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix}}_{\text{desno}} = T^{(32)} \underbrace{\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}}_{\text{levo}}. \quad (71)$$

Veza između koeficijenata u 3. oblasti sa koeficijentima u 1. oblasti je:

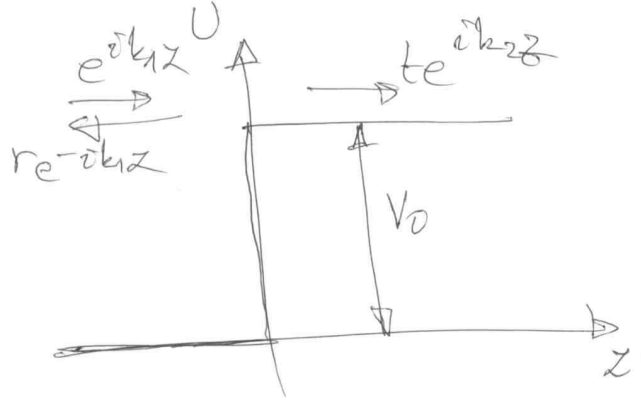
$$\begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = T^{(31)} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}. \quad (72)$$

Transfer matrica za 2 rasejavača i 3 oblasti ravnog potencijala se može izračunati množenjem transfer matrica za pojedine barijere:

$$T^{(31)} = T^{(32)}T^{(21)}. \quad (73)$$

Za rasejanje na jednoj barijeri, konačna vrednosti koeficijenta  $D$  nije fizički opravdana (nema rasejanja na desnoj strani od barijere), pa se amplitude refleksije i transmisije mogu odrediti na osnovu:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}. \quad (74)$$



Sl. 5. Uz odredjivanje transfer matrice za jedan potencijalni stepenik.

Sistem jednačina ima formu:

$$\begin{aligned} T_{12}r - t &= -T_{11} \\ T_{22}r &= -T_{21}. \end{aligned} \quad (75)$$

Na osnovu druge jednačine:

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}}. \quad (76)$$

Zamenom u prvu jednačinu:

$$t = \frac{T_{22}T_{11} - T_{12}T_{21}}{T_{22}}. \quad (77)$$

Kasnije ćemo pokazati da je:

$$T_{22}T_{11} - T_{12}T_{21} = 1, \quad (78)$$

što znači:

$$t = \frac{1}{T_{22}}. \quad (79)$$

Za potencijalni stepenik sistem linearnih jednačina formiran postavljanjem graničnih uslova na mestu  $z = 0$  je:

$$A + B = C + D \quad (80)$$

$$k_1(A - B) = k_2(C - D). \quad (81)$$

Rešenja ovog sistema se mogu pisati u formi:

$$C = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) A + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_1}{k_2} \right) B \quad (82)$$

$$D = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_1}{k_2} \right) A + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) B. \quad (83)$$

Prema tome, za potencijalni stepenik na mestu  $z = 0$  i  $E > V_0$ , gde  $V_0$  označava visinu stepenika, kao što je prikazano na slici, je:

$$T^{(21)} = T(0) = \frac{1}{2k_2} \begin{bmatrix} k_2 + k_1 & k_2 - k_1 \\ k_2 - k_1 & k_2 + k_1 \end{bmatrix}, \quad (84)$$

gde  $T(0)$  predstavlja transfer matricu za potencijalni stepenik u  $z = 0$ . Ovde se  $k_1$  i  $k_2$  određuju prema:

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}, \quad E - V_0 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}. \quad (85)$$

Za  $E < V_0$  definisaćemo  $\kappa_2$  na osnovu:

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa_2^2}{2m}. \quad (86)$$

Transfer matrica se za  $E < V_0$  dobija zamenom  $k_2 \rightarrow i\kappa_2$  u već napisani oblik transfer matrice.

Ako je potencijalni stepenik u  $z = d$ , sprovodi se sledeći postupak:

1. izvrši se transformacija koordinata  $z' = z - d$ , kojom se stepenik translira iz  $z = d$  u  $z' = 0$ . Na ovaj način ulazni (indicentni) talas na levoj strani od stepenika postaje  $e^{ik_1 z'} e^{ik_1 d}$ . Reflektovani (izlazni) talas na levoj strani postaje  $e^{-ik_1 z'} e^{-ik_1 d}$ . Ovo znači da se koeficijenti komponentnih talasa na levoj strani množe matricom:

$$\begin{bmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{bmatrix}; \quad (87)$$

2. pomnoži se poslednja matrica sa  $T(0)$ ;

3. vrati se stepenik u  $z = d$ , tj napravi se transformacija  $z' \rightarrow z - d$ .

Pomeraj stepenika iz  $z = d$  u  $z = 0$  odgovara:

$$\begin{bmatrix} e^{ik_2 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = T(0) \begin{bmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}. \quad (88)$$

Prema tome:

$$T(d) = \begin{bmatrix} e^{-ik_2 d} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 d} \end{bmatrix} T(0) \begin{bmatrix} e^{ik_1 d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d} \end{bmatrix}. \quad (89)$$

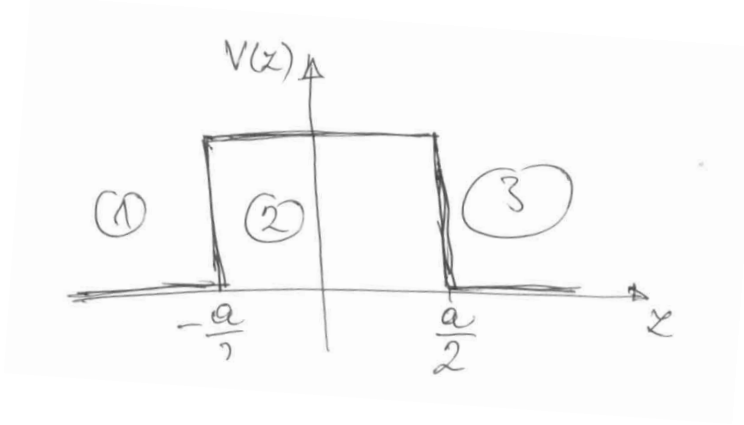
#### 4. Transfer matrica za pravougaonu potencijalnu barijeru

Posmatramo pravougaonu potencijalnu barijeru, kao na slici i slučaj  $E > V_0$ . Za I stepenik, u  $z = -a/2$ :

$$T^{(21)} = \begin{bmatrix} e^{ik_2 a/2} & 0 \\ 0 & e^{-k_2 a/2} \end{bmatrix} T(k_1 \rightarrow k_2) \begin{bmatrix} e^{-ik_1 a/2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 a/2} \end{bmatrix}. \quad (90)$$

Za II stepenik, u  $z = a/2$ :

$$T^{(32)} = \begin{bmatrix} e^{-ik_1 a/2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 a/2} \end{bmatrix} T(k_2 \rightarrow k_1) \begin{bmatrix} e^{ik_2 a/2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 a/2} \end{bmatrix}. \quad (91)$$



Sl. 6. Uz odredjivanje transfer matrice za pravougaonu potencijalnu barijeru.

Ovde je:

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (92)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \quad (93)$$

gde je  $V_0$  visina barijere. Transfer matrica za potencijalnu barijeru je:

$$T^{(31)} = T^{(32)}T^{(21)}, \quad (94)$$

odnosno:

$$T = T^{(31)} = \begin{bmatrix} T_{22}^* & T_{21}^* \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}. \quad (95)$$

Ovde je:

$$T_{21} = \frac{i(k_1^2 - k_2^2) \sin(k_2 a)}{2k_1 k_2}, \quad (96)$$

$$T_{22} = \frac{2k_1 k_2 \cos(k_2 a) - i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 a)}{2k_1 k_2} e^{ik_1 a}. \quad (97)$$

## 5. Osobine transfer matrice

U transfer matrici figurišu 4 kompleksna broja, odnosno 8 realnih. U izrazima za transfer matricu za potencijalni stepenik i pravougaonu potencijalnu barijeru figurišu 2 kompleksna broja ( $T_{22}$  i  $T_{21}$ , na primer), odnosno 4 realna. S obzirom da važi održanje gustine struje verovatnoće,  $T$  matrica sadrži samo 3 nezavisna realna broja.

Ovde ćemo pokazati da je oblik  $T$  matrice u opštem slučaju:

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{bmatrix}. \quad (98)$$

Ovaj oblik se zasniva na:



Sl. 7. Rasejanje na potencijalnoj barijeri, sa istim nivoima potencijala sa jedne i druge strane barijere.

- invarijantnosti u odnosu na inverziju vremena;
- održanju gustine struje verovatnoće.

Posmatrajmo nestacionarnu Šredingerovu jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(t). \quad (99)$$

Ovde je samo istaknuta zavisnost  $\Psi$  od vremena, ali talasna funkcija, naravno, zavisi i od prostornih koordinata. Ako je  $\hat{H}$  realno (suma proizvoda realnih koeficijenata i hermitskih operatora) i nezavisno od vremena, izmena smera vremenske ose:

$$\hat{H}\Psi(-t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(-t)}{\partial (-t)} = -i\hbar \frac{\partial \Psi(-t)}{\partial t}, \quad (100)$$

a zatim konjugovanje daje:

$$\hat{H}\Psi^*(-t) = i\hbar \frac{\partial \Psi^*(-t)}{\partial t}. \quad (101)$$

Ovo je ista forma nestacionarne Šredingerove jednačine, kao polazna jednačina. Ovo znači da ako je  $\Psi(t)$  rešenje vremenski zavisne Šredingerove jednačine,  $\Psi^*(-t)$  je takođe rešenje. Ovo predstavlja simetriju u odnosu na inverziju vremena. Napomenimo da simetrija u odnosu na inverziju vremena nije direktno ispunjena kada je primenjeno magnetsko polje, tj kada je  $\vec{B} \neq 0$ . Oblik simetrije u odnosu na inverziju vremena je sledeći:

$$\Psi(t)|_{\vec{B}} \rightarrow \Psi^*(-t)|_{-\vec{B}}. \quad (102)$$

Primenimo sada simetriju u odnosu na inverziju vremena na potencijalnu barijeru (oblast 2) sa ravnim potencijalima van barijere na istom nivou (oblasti 1 i 3), kao na slici. Ako su rešenja u oblastima 1 i 3 oblika za direktni tok vremena  $\rightarrow$ :

$$\Psi_1^{\rightarrow} = Ae^{ikz} + Be^{-ikz} \quad (103)$$

$$\Psi_3^{\rightarrow} = Ce^{ikz} + De^{-ikz}, \quad (104)$$

tada su rešenja za inverzni tok vremena:

$$\Psi_1^{\leftarrow} = B^*e^{ikz} + A^*e^{-ikz} \quad (105)$$

$$\Psi_3^{\leftarrow} = D^*e^{ikz} + C^*e^{-ikz}. \quad (106)$$

Fizički sistem se ne menja usled izmene smeru vremenske ose. Prema tome, za direktni tok vremena ( $\rightarrow$ ) važi:

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}A + T_{12}B \\ T_{21}A + T_{22}B \end{bmatrix}, \quad (107)$$

za inverzni tok vremena biće:

$$\begin{bmatrix} D^* \\ C^* \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} B^* \\ A^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}B^* + T_{12}A^* \\ T_{21}B^* + T_{22}A^* \end{bmatrix}. \quad (108)$$

Izmena vrsta i kolona u poslednjem sistemu jednačina daje:

$$\begin{bmatrix} C^* \\ D^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{22} & T_{21} \\ T_{12} & T_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^* \\ B^* \end{bmatrix}. \quad (109)$$

Konjugovanje poslednje jednačine daje za inverzni tok vremena:

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{22}^* & T_{21}^* \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}. \quad (110)$$

Poređenje poslednje jednačine sa početnom za direktni tok vremena dovodi do jednakosti:

$$T_{22} = T_{11}^* \quad (111)$$

$$T_{21} = T_{12}^*. \quad (112)$$

Prema tome, transfer matrica ima oblik:

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{bmatrix}. \quad (113)$$

Pored simetrije u odnosu na inverziju vremena, mora važiti održanje gustine struje verovatnoće. Podsetimo se da je gustina struje verovatnoće:

$$J = \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^* \frac{d\Psi}{dz} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dz} \right). \quad (114)$$

Gustina struje verovatnoće na levoj strani od barijere je:

$$J_L = (|A|^2 - |B|^2) \frac{\hbar k_1}{m} \quad (115)$$

$$J_R = (|C|^2 - |D|^2) \frac{\hbar k_1}{m}. \quad (116)$$

Na osnovu održanja gustine struje verovatnoće:

$$|C|^2 - |D|^2 - |A|^2 + |B|^2 = 0. \quad (117)$$

Na osnovu:

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \quad (118)$$

sledi:

$$\begin{aligned} CC^* &= (T_{11}A + T_{12}B)(T_{11}^*A^* + T_{12}^*B^*) \\ &= |T_{11}|^2|A|^2 + |T_{12}|^2|B|^2 + T_{11}AT_{12}^*B^* + T_{12}BT_{11}^*A^*, \end{aligned} \quad (119)$$

$$\begin{aligned} CC^* &= (T_{12}^*A + T_{11}^*B)(T_{12}A^* + T_{11}B^*) \\ &= |T_{12}|^2|A|^2 + |T_{11}|^2|B|^2 + T_{12}^*AT_{11}B^* + T_{11}^*BT_{12}A^*. \end{aligned} \quad (120)$$

Lako se utvrdi da je:

$$|C|^2 - |D|^2 - |A|^2 + |B|^2 = (|T_{11}|^2 - |T_{12}|^2 - 1)|A|^2 + (-|T_{11}|^2 + |T_{12}|^2 + 1)|B|^2 = 0. \quad (121)$$

Odavde:

$$\boxed{|T_{11}|^2 - |T_{12}|^2 = 1}. \quad (122)$$

Za amplitude reflektovanog i transmitovanog talasa, ranije su izvedeni izrazi:

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}}, \quad (123)$$

$$t = \frac{T_{22}T_{11} - T_{12}T_{21}}{T_{22}}. \quad (124)$$

S obzirom da je:

$$T_{22} = T_{11}^*, \quad T_{21} = T_{12}^* \quad (125)$$

i

$$T_{22}T_{11} - T_{12}T_{21} = 1, \quad (126)$$

transfer matrica za propagaciju sa leve na desnu stranu se može pisati u formi:

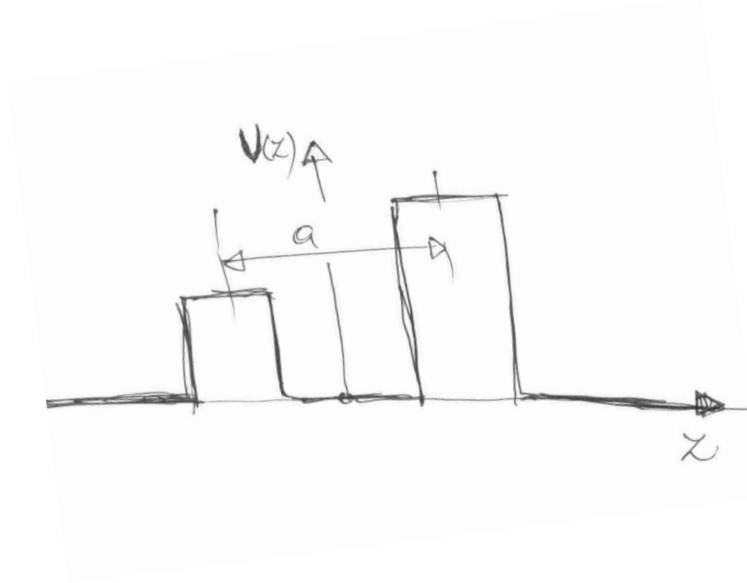
$$\boxed{T = T^{(21)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{t^*} & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{bmatrix}}. \quad (127)$$

Lako se proveriti da je  $\det(T) = 1$ , jer je  $|r|^2 - |t|^2 = 1$ . Za slučaj propagacije s desne na levu stranu, izmene se uloge izlaznih i ulaznih stanja:

$$\begin{bmatrix} B \\ A \end{bmatrix} = T^{(12)} \begin{bmatrix} D \\ C \end{bmatrix}. \quad (128)$$

Ovde  $T^{(12)} = T'$  označava transfer matricu za propagaciju s desne na levu stranu, koja predstavlja matricu  $T^{-1}$ :

$$T' = T^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{t^*} & \frac{r}{t} \\ \frac{r^*}{t^*} & \frac{1}{t} \end{bmatrix}. \quad (129)$$



Sl. 8. Transmisiona karakteristika rezonantne tunelske diode.

S druge strane,  $T'$  se može pisati u formi matrice  $T$ :

$$T' = \begin{bmatrix} \frac{1}{t'^*} & -\frac{r'^*}{t'^*} \\ -\frac{r'}{t'} & \frac{1}{t'} \end{bmatrix}, \quad (130)$$

gde su  $r'$  i  $t'$  amplitude reflektovanih i transmitovanih talasa s desna na levo. Na osnovu prethodnog sledi da je za proizvoljnu barijeru sa istim nivoima ravnog potencijala sa jedne i druge strane:

$$t' = t, \quad r' = -\frac{t}{t^*} r^*, \quad (131)$$

što znači da su  $t$  isti sa obe strane, a da se  $r$  i  $r'$  razlikuju u fazi.

Može se pokazati da ove jednakosti važe i za nejednake nivoe ravnih potencijala sa jedne i druge strane barijere.

## 6. Koeficijent transmisije za rezonantnu tunelsku diodu

Transfer matrica za strukturu sačinjenu od dve pravougaone barijere, moguće nejednake visine i širine, kao na slici, ima opštu formu:

$$T = \begin{bmatrix} T_{22}^* & T_{21}^* \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \quad (132)$$

Pojedini matični elementi imaju formu:

$$T_{21} = \frac{r_L^* e^{-ika} - r_R e^{ika}}{t_L^* t_R}, \quad (133)$$

$$T_{22} = \frac{1 - r_L r_R e^{i2ka}}{t_L t_R}, \quad (134)$$

gde se  $r_L$  i  $t_L$  odnose na levu barijeru, a  $t_L$  i  $t_R$  na desnu barijeru. Amplituda transmisije je:

$$t = \frac{t_L t_R}{1 - r_L r_R e^{i2ka}}. \quad (135)$$

Ako amplitude refleksije napišemo u formi:

$$r_L = |r_L| e^{i\varphi_L}, \quad (136)$$

$$r_R = |r_R| e^{i\varphi_R}, \quad (137)$$

koeficijent transmisije je:

$$T = |t|^2 = \frac{T_L T_R}{1 + R_L R_R - 2\sqrt{R_L R_R} \cos(2ka + \varphi_L + \varphi_R)}, \quad (138)$$

odnosno:

$$T = \frac{T_L T_R}{(1 - \sqrt{R_L R_R})^2 + 4\sqrt{R_L R_R} \sin^2 \frac{\Phi}{2}}, \quad (139)$$

gde je:

$$\Phi = 2ka + \varphi_L + \varphi_R. \quad (140)$$

Ovde je  $k = k_z$  talasni broj elektrona u  $z$  pravcu, koji se za paraboličnu zonu može odrediti na osnovu  $E_z = \hbar^2 k_z^2 / (2m)$ . Zavisnost koeficijenta transmisije od energije za dve delta barijere iste "težine" je prikazana na slici. Jasno se uočavaju rezonancije, u kojima je koeficijent transmisije maksimalan i ima vrednost 1. Koeficijent transmisije opada vrlo brzo u okolini rezonancije, dominantno zbog promene faze talasa. Maksimalna vrednost  $T$  je za  $\sin \Phi/2 = 0$ , što znači da je uslov za rezonantnu energiju:

$$\boxed{\Phi = 2n\pi}. \quad (141)$$

Vrednost maksimalnog koeficijenta transmisije (u rezonanciji) je:

$$T_{max} = \frac{T_L T_R}{(1 - \sqrt{R_L R_R})^2}. \quad (142)$$

Razmotrićemo nekoliko tipičnih vrednosti  $T_{max}$ .

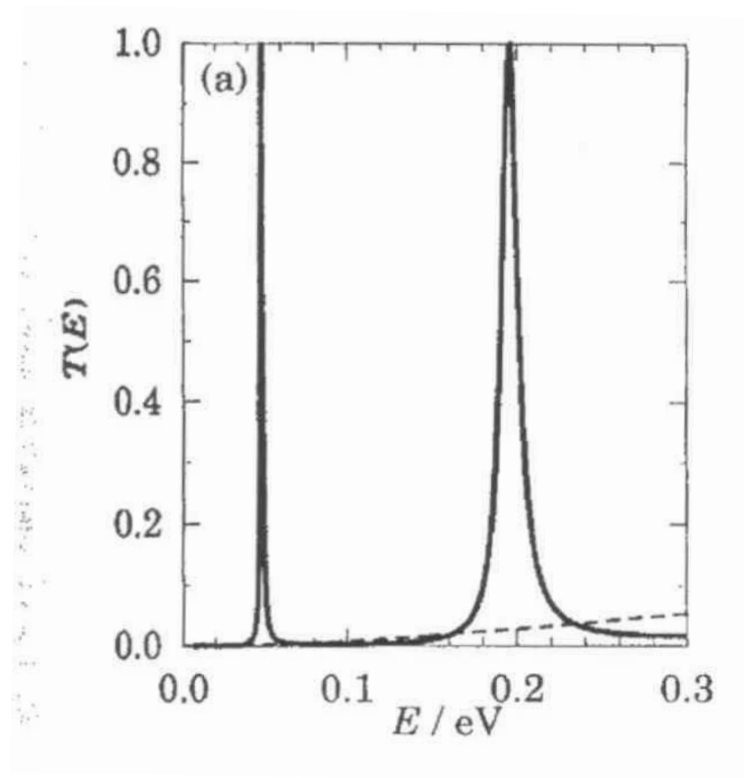
### 6.1. $T_{max}$ za dve iste barijere

Ako je koeficijent transmisije (takođe koeficijent refleksije) isti za obe barijere, tj ako je  $T_L = T_R$ , tada je:

$$T = \frac{T_L^2}{(1 - R_L)^2}. \quad (143)$$

S obzirom da je  $R_L = 1 - T_L$ , lako se dobija da je za dve iste barijere:

$$T_{max} = 1. \quad (144)$$



Sl. 9. Rasejanje na potencijalnoj barijeri, sa istim nivoima potencijala sa jedne i druge strane barijere.

**6.2.  $T_{max}$  za dve različite barijere**

Posmatramo slučaj kada se  $T_L$  i  $T_R$  značajno razlikuju, tj kada je  $T_L \ll T_R$  ili  $T_R \ll T_L$ . Označimo manji od dva koeficijenta transmisije,  $T_L$  i  $T_R$ , sa  $T_{\downarrow}$ , a veći koeficijent transmisije sa  $T_{\uparrow}$ .

$$T_{max} \approx \frac{4T_{\downarrow}}{T_{\uparrow}}. \quad (145)$$

Maksimalna vrednost koeficijenta transmisije je određena manje propusnom barijerom.

**6.3. Malo  $T_L$  i  $T_R$  (podbarijerna stanja)**

$T_L$  i  $T_R$  su tipično mali za podbarijerna stanja, tako da se u opštem slučaju različitih barijera može pisati:

$$\sqrt{R_L R_R} = \sqrt{(1 - T_L)(1 - T_R)} \approx \sqrt{1 - (T_L + T_R)} \approx 1 - \frac{T_L + T_R}{2}. \quad (146)$$

Ovo znači da je:

$$(1 - \sqrt{R_L R_R})^2 \approx \frac{(T_L + T_R)^2}{4}. \quad (147)$$

**6.4. Mali  $T_L$  i  $T_R$  i van rezonancije**

Već ranije smo pokazali da ako su  $T_L$  i  $T_R$  mali:

$$\sqrt{R_L R_R} \approx 1 - \frac{T_L + T_R}{2}, \quad (148)$$

što znači da je:

$$T \approx \frac{T_L T_R}{\frac{1}{4}(T_L + T_R)^2 + 4 \sin^2 \frac{\Phi}{2}} = \frac{T_{max}}{1 + \frac{16}{(T_L + T_R)^2} \sin^2 \frac{\Phi}{2}}. \quad (149)$$

Aproksimirajmo van rezonancije,

$$\sin^2 \frac{\Phi}{2} \approx \frac{1}{2}. \quad (150)$$

Koeficijent transmisije se dakle, van rezonancije, za male  $T_L$  i  $T_R$  (podbarijerna stanja) može pisati u formi:

$$T \approx \frac{T_{max}}{1 + \frac{16}{(T_L + T_R)^2} \frac{1}{2}} \approx \frac{\frac{4T_L T_R}{(T_L + T_R)^2}}{\frac{8}{(T_L + T_R)^2}} = \frac{1}{2} T_L T_R. \quad (151)$$

Za ovaj slučaj, ukupno  $T$  je proporcionalno proizvodu koeficijenta transmisije za dve barijere.

**6.5. Mali  $T_L$  i  $T_R$  i u okolini rezonancije**

U okolini rezonancije:

$$\Phi = 2n\pi + \delta\Phi, \quad (152)$$

tako da je:

$$\sin^2 \left( \frac{\Phi}{2} \right) \approx \frac{\delta\Phi^2}{4}. \quad (153)$$

Koeficijent transmisije se može aproksimirati sa:

$$T \approx \frac{T_{max}}{1 + \frac{4\delta\Phi^2}{(T_L + T_R)^2}} = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{\delta\Phi}{\frac{1}{2}\Phi_0}\right)^2}. \quad (154)$$

Ovde je:

$$\Phi_0 = T_L + T_R. \quad (155)$$

Pokažimo da se  $\delta\Phi/\Phi_0$  može pisati u obliku:

$$\frac{\delta\Phi}{\Phi_0} = \frac{\delta E}{\Gamma} \rightarrow \frac{\delta E}{\delta\Phi} = \frac{\Gamma}{\Phi_0}, \quad (156)$$

gde  $\Gamma$  ne zavisi od energije, a  $\delta E$  je varijacija energije  $E_z$  u okolini maksimuma.

Varijacija  $\delta\Phi$  je:

$$\delta\Phi = 2a\delta k. \quad (157)$$

Varijacija talasnog broja elektrona je:

$$\delta k = \left. \frac{dk}{dE_z} \right|_{E_r} \delta E = \left. \frac{\delta E}{\frac{\hbar^2 k_z}{m}} \right|_{E_r} = \frac{\delta E}{\hbar v_{zr}}. \quad (158)$$

Prema tome:

$$\delta\Phi = 2\delta k a = 2 \frac{\delta E}{\hbar v_z} a. \quad (159)$$

Odavde sledi:

$$\frac{\delta E}{\delta\Phi} = \frac{\hbar v_z}{2a}. \quad (160)$$

Odavde:

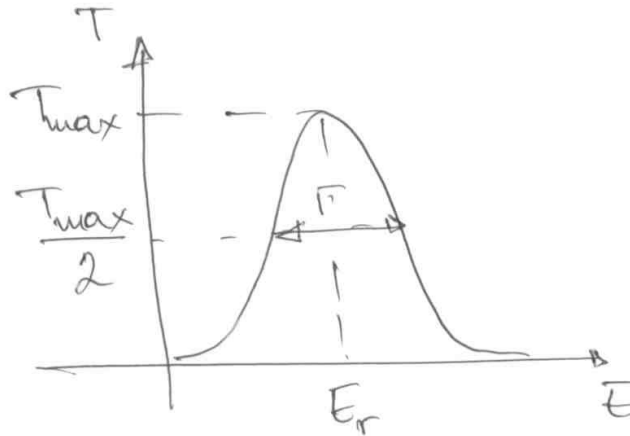
$$\Gamma = \frac{\hbar v_{zr}}{2a} \Phi_0 = \frac{\hbar v_{zr}}{2a} (T_L + T_R) \quad (161)$$

i ne zavisi od energije. Zavisnost koeficijenta transmisije od energije je:

$$\boxed{T(E_z) = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{E_z - E_r}{\Gamma/2}\right)^2}}. \quad (162)$$

Parametar  $\Gamma$  predstavlja širinu rezonancije na polovini maksimuma. Obo je poznata Breit-Wignerova formula, koja se ne može koristiti kada:

- $T_L$  i  $T_R$  nisu sporo promenljivi u okviru rezonancije, tj na širini  $\Gamma$ . Brza promena  $T_L$  i  $T_R$  postoji u blizini vrha barijere, pa se Breit-Wignerova formula ne može koristiti u tim situacijama;
- $T_L$  i  $T_R$  nisu mali.



Sl. 10. Rezonantna kriva opisana Breit-Wignerovom formulom.

## 7. Struja kroz rezonantnu tunelsku diodu

Primena napona na krajevima rezonantne tunelske diode ima višestruki efekat na karakteristike rezonantne tunelske diode:

- menja se položaj Fermijevih nivoa;
- menja se energija rezonantnog stanja;
- menja se koeficijent transmisije.

Strujno-naponska karakteristika, prikazana na slici, može se izračunati samo numerički. Ovde ćemo, međutim, sprovesti aproksimativni analitički proračun dela strujno naponske karakteristike u kome postoji značajan rast struje do maksimuma strujno-naponske karakteristike.

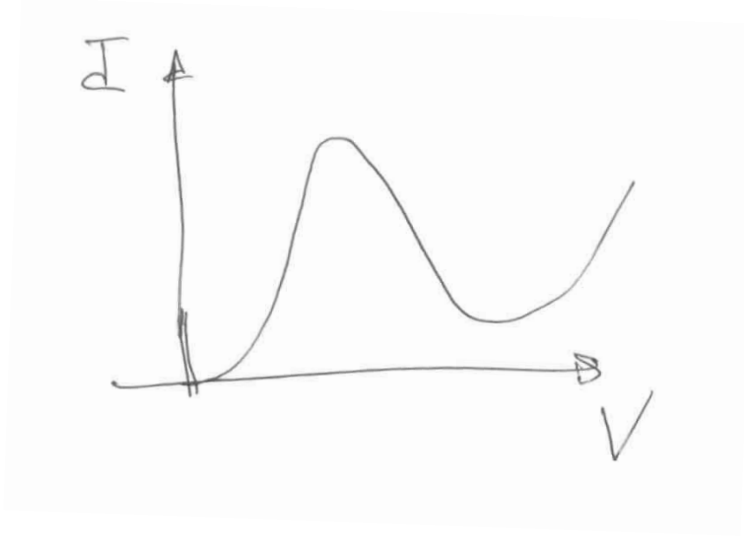
Za visoke napone polarizacije i niske temperature već smo izveli izraz:

$$J = \frac{e}{h} \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{U_L}^{\mu_L} (\mu_L - E_z) T(E_z) dE_z. \quad (163)$$

Ovde koristimo zavisnost izvedenu u prethodnom poglavlju:

$$T(E_z) = \frac{T_{max}}{1 + \left( \frac{E_z - E_r}{\Gamma/2} \right)^2}. \quad (164)$$

Pretpostavljamo da se samo jedna rezonancija nalazi u oblasti energija od interesa i koristimo aproksimaciju lorencijanom za  $T(E_z)$ .  $\mu_L - E_z$  se sporije menja u funkciji energije od  $T(E_z)$ , pa se može zameniti sa  $\mu_L - E_r$ . Dalje za rezonantnu energiju u oblasti  $U_L < E_r < \mu_L$ , može se pisati  $\mu_L - E_r \approx \mu_L - E_r(0) + \frac{1}{2}eV$ , gde je  $E_r(0)$  rezonantna energija za  $V = 0$ , a  $V$  primenjeni



Sl. 11. Oblik strujno-naponske karakteristike rezonantne tunelske diode.

napon. Ovo znači da je rezonantni nivo opao tačno za polovinu razlike hemijskih potencijala u levom i desnom kontaktu. Izraz za struju je:

$$J = \frac{e}{h} \frac{m}{\pi \hbar^2} (\mu_L - E_r(0) + \frac{1}{2}eV) \int_{U_L}^{\mu_L} T(E_z) dE_z. \quad (165)$$

Prepostavljajući malu širinu rezonancije, tj malo  $\Gamma$ ,

$$\int_{U_L}^{\mu_L} T(E_z) dE_z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} T(E_z) dE_z = \frac{\pi}{2} \Gamma T_{max}. \quad (166)$$

Ovde je:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{E_z - E_r}{\Gamma/2}\right)^2} dE_z = \frac{\Gamma T_{max}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{1 + u^2} = \frac{\Gamma T_{max}}{2} \text{artcg } u \Big|_{-\infty}^{+\infty} = \frac{\pi}{2} \Gamma T_{max}, \quad (167)$$

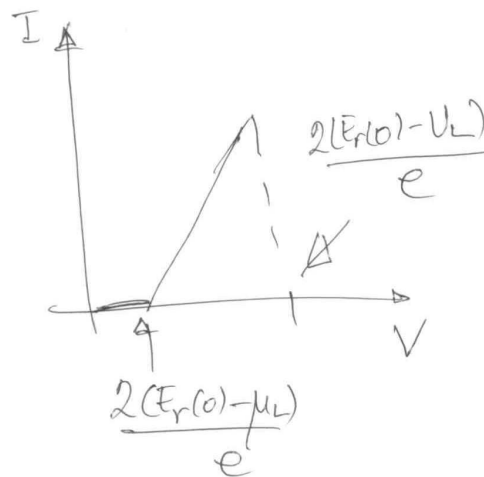
gde je:

$$u = \frac{E_z - E_r}{\Gamma/2}. \quad (168)$$

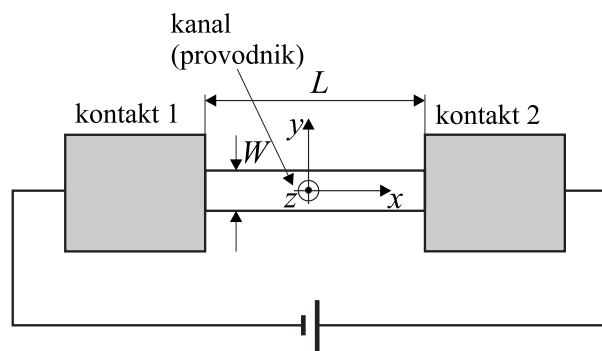
Izvedena zavisnost  $J(V)$  je linearna i ima maksimum za:

$$E_r(0) - \frac{1}{2}eV = U_L, \quad (169)$$

tj kada se rezonantni nivo za dati napon polarizacije poklopi sa  $U_L$ .



Sl. 12. Aproximativna linearna zavisnost u oblasti porasta struje.



Sl. 13. Princip eksperimenata u režimu lateralnog transporta u nanostrukturama i nanokomponentama.

## 8. Lateralni transport

Posmatramo komponentu u kojoj postoji 2DEG, recimo HEMT. Kontrola transporta nosilaca od sorsa do drejna se postiže naponom na gejtju. Transport nosilaca je *lateralan*, tj u ravni 2DEG. Smatramo da *kanal* u kome je formiran 2DEG ima konačnu širinu  $W$  i dužinu  $L$ . Ukoliko je  $L \gg W$ , kanal predstavlja kvantnu žicu, tj u kanalu se formira 1DEG. Pored toga, smatramo da je debljina kvantne jame u kojoj je lociran 2DEG mala, tako da se može smatrati da su svi elektroni locirani u ravni. Sors i drejn su realizovani kao visokoprovodne, odnosno metalne oblasti velike površine. Ovo je način na koji se izvodi veliki broj transportnih eksperimenata u fizici nanostrukture.

## 9. Transverzalni modovi

S obzirom da su elektroni locirani u ravni u jednom poluprovodniku, njihova efektivna masa je kao u masivnom poluprovodniku. U slučaju različitih vrednosti debljine (reda nekoliko nm) i širine kanala (reda nekoliko desetina nm) u odnosu na dužinu kanala (reda nekoliko 100 nm), potencijal (potencijalna energija elektrona) može se pisati u formi:

$$V(x, y, z) = V_{2D}(y, z) + V_x(x). \quad (170)$$

Ovaj izraz predstavlja *adijabatsku aproksimaciju*. Prema adijabatskoj aproksimaciji, dakle, razdvoje se koordinate u kojima su nosioci jako konfinirani od koordinate u kojima postoji slabo konfiniranje nosilaca (ili su talasne funkcije prostoperiodične). S obzirom da su širina i debljina kanala tipično različitog reda veličine, mogu se razdvojiti i  $y$  i  $z$  koordinata  $V_{2D}(y, z) = V_y(y) + V_z(z)$ , a ako je potencijal u  $x$  pravcu slabo promenljiv,

$$E = E_y + E_z + \frac{\hbar^2}{2m}k^2, \quad (171)$$

gde je  $k$  talasni vektor elektrona duž žice ( $x$  pravac),  $E_z$  je energija  $z$  moda, a  $E_y$  je energija *transverzalnog moda*. Za tipične vrednosti debljine kvantne jame od oko 5-10 nm, razlika energije između dva susedna  $z$  moda je reda 100 meV, pa se može pretpostaviti da je samo jedan  $z$  mod popunjen nosiocima.

Širina kvantne žice je za red veličine veća od debljine kvantne žice, tako da je razlika energija dva susedna transverzalna moda reda meV. Zbog toga je veliki broj ovih modova populisan. Ovi modovi se nazivaju *transverzalni* po analogiji sa transverzalnim modovima kod elektromagnet-skih talasovoda.

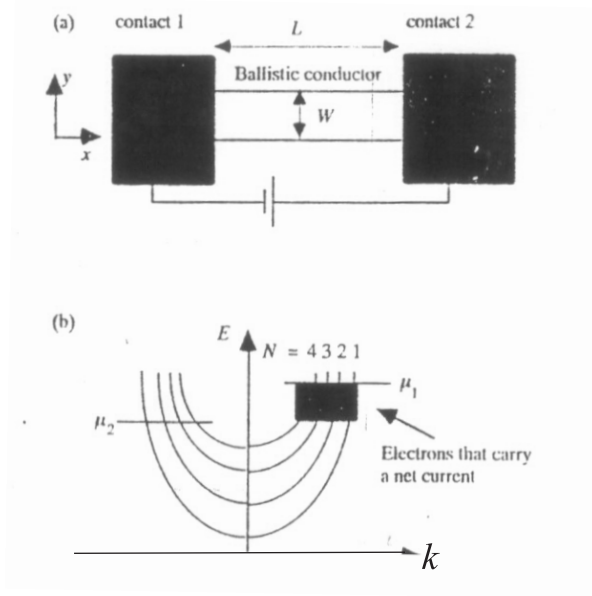
Tipičan raspored transverzalnih modova u jednom provodniku je prikazan na slici 14. Raspored Fermijevih nivoa je diskutovan u poglavlju "Kontakt na otpornost"

## 10. Karakteristične dužine

Transport nosilaca u nanostrukturama zavisi od odnosa dimenzija strukture i tri karakteristične dužine:

- srednja dužina slobodnog puta, odnosno dužina relaksacije linearnog momenta (impulsa)  $L_m$ ;
- Fermijeva talasna dužina  $\lambda_F$ ;
- dužina relaksacije faze  $L_\varphi$ .

U transportnim eksperimentima na niskoj temperaturi, samo elektroni u okolini Fermijeve energije doprinose struji, tako da se srednja dužina slobodnog puta i dužina relaksacije faze određuju na osnovu Fermijeve brzine  $v_F$ .



Sl. 14. Transverzalni modovi u jednom provodniku (kanalu) konačne širine formiranog od 2DEG.

### 10.1. Srednja dužina slobodnog puta

U opštem slučaju, pri transportu nosilaca u poluprovodnicima postoji rasejanje na primesama, fononima i elektronima. Rasejanje menja stanje čestice, što znači promenu linearnog momenta (impulsa). Srednja dužina slobodnog puta je srednje rastojanje koje elektron pređe između dva sudara.

### 10.2. Fermijeva talasna dužina

Fermijeva talasna dužina je de Broljeva talasna dužina elektrona sa Fermijevom energijom. Fermijev talasni vektor je talasni vektor elektrona sa Fermijevom energijom u zoni ili podzoni:

$$E_F = \mu(T = 0 \text{ K} = E_{i0} + \frac{\hbar^2 k_{Fi}^2}{2m} \rightarrow \hbar k_{Fi} = \sqrt{2m(E_F - E_{i0})}, \quad (172)$$

gde  $m$  označava efektivnu masu u oblasti kanala, a  $E_{i0}$  je energija dna podzone. Na niskoj temperaturi:

$$n_{2D} = \sum_i \frac{D_i}{LW} (E_F - E_{i0}), \quad (173)$$

gde je  $D_i$  doprinos gustini stanja  $i$ -te podzone 2DEG:

$$D_i = LW \frac{m}{\pi \hbar^2} \Theta(E - E_{i0}). \quad (174)$$

Ako je samo jedna podzona populisana ( $E_F = E_{F1}$ ),

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2} (E_F - E_{10}). \quad (175)$$

Odavde sledi:

$$m(E_F - E_{10}) = \pi \hbar^2 n_{2D}, \quad (176)$$

odnosno:

$$k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}}. \quad (177)$$

Fermijeva talasna dužina je:

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \sqrt{\frac{2\pi}{n_{2D}}}. \quad (178)$$

Ovo znači da se merenjem  $n_{2D}$  može odrediti  $\lambda_F$ .

### 10.3. Dužina relaksacije faze

Dužina relaksacije faze  $L_\varphi$  je dužina na kojoj je elektronski talas koherentan sa drugim talasom. Na dužini  $L_\varphi$  elektronski talas može da interferira sa drugim elektronskim talasima. Koherencija se narušava ako se promeni stanje elektrona. Različita rasejanja različito utiču na ovu dužinu. Može se izdvojiti klasa *statičkih* primesa ili defekata, na kojima je rasejanje elektrona elastično, što dovodi samo do promene faze, ali ne i stanja elektrona. Naime, prema kvantnoj mehanici, merna sonda, koja određuje putanju čestice sa 2 otvora u interferencionom eksperimentu sa materijalnim talasima, narušava interferencionu sliku. Ako se stanje elektrona po rasejanju sa primesom promeni, promeni se i stanja prime, tako da se merenjem stanja prime, može odrediti koja je aktuelna putanja čestice u eksperimentu sa dva otvora. Interakcija elektrona sa dinamičkim centrima rasejanja, dakle, narušava efekte interferencije između materijalnih talasa. Ovo se dešava pri sudaru sa drugim elektronima ili sa primesama čije se stanje menja po sudaru. Primer su magnetske prime, čiji spin fluktuiira u funkciji vremena.

## 11. Transportni režimi

Specifična provodnost  $\sigma$  i provodnost  $G$  2DEG se definišu kao za 3DEG:

$$J = \sigma K \quad (179)$$

i

$$I = GV, \quad (180)$$

respektivno. Ako je električno polje konstantno između elektroda na rastojanju  $L$  (dužina kanala):

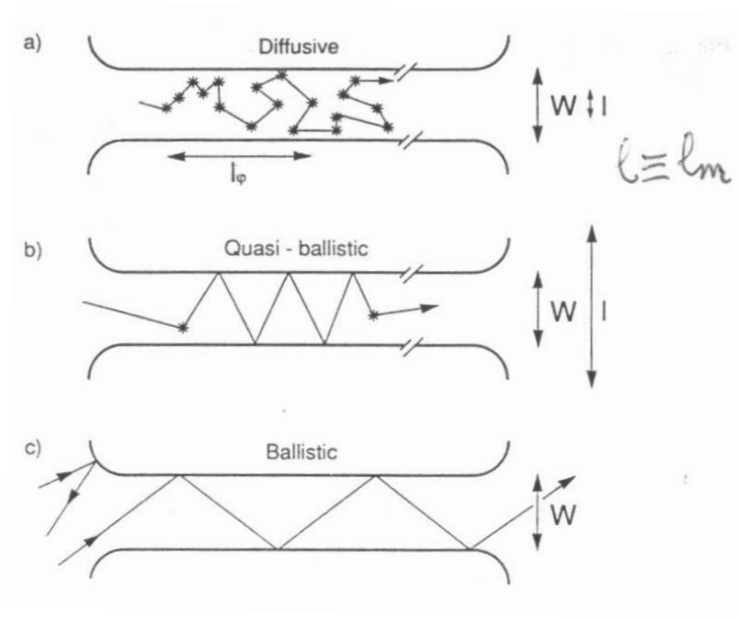
$$V = KL. \quad (181)$$

Za 2DEG lociran u ravni, gustina struje je:

$$J = \frac{I}{W}. \quad (182)$$

Na osnovu veze  $J(K)$  i  $K = V/L$ , sledi:

$$\frac{I}{W} = \sigma \frac{V}{L} \rightarrow I = \sigma \frac{W}{L} V. \quad (183)$$



Sl. 15. Tipovi transporta u nanostrukturama: (a) difuzioni, (b) kvazi-balistički i (c) balistički.

Provodnost je:

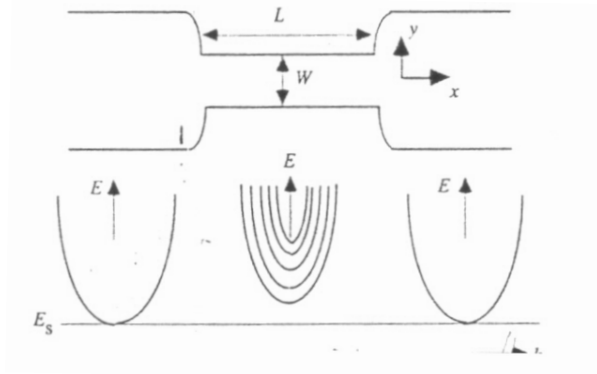
$$G = \sigma \frac{W}{L} \quad (184)$$

i ima istu dimenziju kao  $\sigma$ , tj obe veličine se izražavaju u istim jedinicama (simens, S).

Veza između provodnosti i specifične provodnosti važi za slučaj *difuzionog transporta*, kada su i dužina  $L$  i širina kanala  $W$  veće od srednje dužine slobodnog puta. Ako je širina kanala manja od srednje dužine slobodnog puta, ali je srednja dužina slobodnog puta manja od dužine kanala,  $W < L_m < L$ , tada elektron na putu kroz kanal doživi samo nekoliko sudara. Ovaj transport je *kvazibalistički*. Ako su, međutim, obe dimenzije,  $W$  i  $L$ , mnogo manje od  $L_m$ , tada je transport *balistički*. Kod balističkog transporta samo se dešavaju sudari sa nepokretnim zidovima kanala. Sva tri tipa transporta su šematski prikazana na slici 15.

Na visokoj temperaturi i čistim uzorcima,  $L \ll L_m$ , ali je  $L \gg L_\varphi$ , što znači da je transport balistički bez fazne koherencije. Da bi transport postao koherentan potrebno je da se smanji temperatura. Ako se dužina provodnika smanji, eksperimentalno je konstatovano da otpornost provodnika ne teži nuli već vrednosti  $G_C$ , dok se na osnovu relacije (184), može zaključiti da ukoliko se dužina kanala smanji, provodnost raste. Specifična provodnost i srednja dužina slobodnog puta, ne mogu se, dakle, koristiti kao validni parametri nanostrukture koje rade u ovom režimu transporta.

Dužina relaksacije faze  $L_\varphi$  može biti veća od  $L_m$ . U ovom slučaju, specifična provodnost  $\sigma$  se može koristiti kao karakteristika provodnika samo za  $L > L_\varphi$ . Pored toga, za ovakvu dužinu kanala, može se koristiti i formula za rednu veza otpornosti. Za male uzorke na niskim temperaturama, međutim,  $L_\varphi$  može biti reda veličine dužine uzorka, pa se kao transportni parametar može koristiti samo  $G$  (a ne  $\sigma$ ), čak i kada je transport difuzioni. Ukoliko je  $L_\varphi > L$  i  $L \ll L_m$ , transport je *koherentni* balistički. Kao i kod nekoherentnog transporta kroz balistički



Sl. 16. Međupovršinska otpornost nastaje usled različitog broja transverzalnih modova u kanalu i kontaktima. U kanalu je zbog manje širine u odnosu na kontakte prisutan manji broj transverzalnih modova koji su razdvojeni za veću vrednost energije u odnosu na kontakte gde su transverzalni modovi kontinualno raspoređeni (kontakti su sistem sa 2DEG).

provodnik, otpornost provodnika je različita od nule.

## 12. Kontaktna (Sharvinova) otpornost

S obzirom da je dužina relaksacije faze mnogo manja od  $L$ , poreklo konačne provodnosti se ne može opisati efektima kvantne koherencije. Zapravo, otpornost  $1/G_C$  je posledica međupovršni kanal-kontakti. Kanal i kontakti su oblasti sa različitim osobinama. Provođenje struje u kontaktima se dešava kroz 2DEG, koji se može predstaviti kao skup kontinualno raspoređenih 1D modova, dok u kanalu postoji konačan broj transverzalnih modova. Promena broja modova na granici kontakt-kanal dovodi do kontaktne (međupovršinske) otpornosti, kao što je šematski prikazano na slici 16. Numerički proračun pokazuje da se transport nosilaca iz oblasti 1DEG u oblast 2DEG dešava skoro potpuno bez refleksije, osim za energije u blizini dna zone.

Posmatramo kontakte na kojima nema refleksije ( $R = 0$ ). Za ovakve kontakte,  $+k$  stanja potiču samo od stanja iz levog kontakta, dok  $-k$  stanja potiču iz desnog kontakta. Naime, desni kontakt se prazni transportom  $+k$  nosilaca bez refleksije. Prema tome, Fermijev nivo  $+k$  stanja je  $\mu_1$ , tj Fermijev nivo u levom kontaktu. Naime, ako promenimo hemijski potencijal  $\mu_2$  u desnom kontaktu, to nema uticaja na kvazi-Fermijev nivo  $+k$  stanja, jer ne postoji kauzalna veza između desnog kontakta i  $+k$  stanja. Pored toga, s obzirom da se transport  $+k$  i  $-k$  nosilaca dešava u suprotnom smeru, doprinos struji daju samo  $+k$  stanja u opsegu energija od  $\mu_2$  do  $\mu_1$ . Ako je desni kontakt na višem potencijalu, Fermijevi nivoi su postavljeni kao na slici 14.

Svaki transverzalni mod u kanalu se opisuje disperzionom relacijom  $E_i(k)$ . Minimum energije moda je  $E_{i0} = E_i(k = 0)$ . Broj modova sa energijom manjom od  $E$ :

$$M(E) = \sum_i \Theta(E - E_{i0}), \quad (185)$$

gde  $\Theta$  označava Hevisajdovu stepenastu funkciju.

Posmatrajmo  $+k$  stanje u podzoni  $i$ . Funkcija raspodele ovog stanja je  $f^+(E) = f_{FD}(+k)$ . Pretpostavimo da je elektronski gas uniforman po dužini kanala (zavisnost potencijala  $V_x$  od  $x$  je slaba), sa  $n$  elektrona brzine  $v$  po jedinici dužine. Struja ovih nosilaca je  $env$ . Broj nosilaca u stanju  $k$  na dužini  $L$  je  $n = 1/L$ , tako da je ukupna struja  $+k$  stanja:

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_{k,s} v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_{k,s} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} f^+(E). \quad (186)$$

Ova suma se može transformisati u integral, ukoliko je dužina kanala velika:

$$\sum_{k,s} \dots \rightarrow 2 \times \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty \dots dk. \quad (187)$$

Prema tome:

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{E_{i0}}^\infty f^+(E) dE, \quad (188)$$

gde  $E_{i0}$  označava minimalnu energiju moda (podzone)  $i$ .

Ukoliko više  $+k$  modova učestvuje u transportu nosilaca:

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f^+(E) M(E) dE. \quad (189)$$

$M(E)$  predstavlja broj modova na energiji  $E$  za koje važi  $E > E_{i0}$ . Koeficijent ispred znaka integrala predstavlja struju koju nosi jedan mod po jediničnom intervalu energije. Ukupna struja je:

$$I = I^+ - I^- = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} M(E) (f^+(E) - f^-(E)) dE. \quad (190)$$

Na  $T = 0$  K, doprinos ukupnoj struji daju samo modovi u opsegu energija od  $\mu_2$  do  $\mu_1$ , jer je doprinos stanja manjih energija od  $\mu_2$  jednak nuli: struji  $I_+$  se suprotstavlja struja  $I_-$ . Ako pretpostavimo da je broj modova  $M$  u opsegu energija  $\mu_2 < E < \mu_1$  konstantan (za male varijacije potencijala), može se pisati ( $\int_{\mu_2}^{\mu_1} dE = \mu_1 - \mu_2$ ):

$$I = \frac{2e^2}{h} M \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}. \quad (191)$$

S obzirom da je:

$$V = \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}, \quad (192)$$

provodnost balističkog provodnika je:

$$G_C = \frac{2e^2}{h} M. \quad (193)$$

Ovde  $M$  označava broj modova koji doprinose struji u intervalu  $[\mu_2, \mu_1]$ . Ovo je *kontaktna (Sharvinova) otpornost* balističkog provodnika. Kontaktna otpornost je:

$$R_C = G_C^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} = \frac{R_K/2}{M} = \frac{12.9k\Omega}{M}. \quad (194)$$

Ukoliko samo jedan transverzalni mod učestvuje u transportu, kontaktna otpornost je:

$$R_C \approx 12.9 \text{ k}\Omega, \quad (195)$$

dok ova otpornost opada ukoliko broj modova u kanalu raste, tj ukoliko je  $W$  veliko. Za veliko  $W$ , broj modova se može odrediti primenom periodičnih graničnih uslova. Ako je  $W$  veliko, dozvoljene vrednosti  $k_y$  su razdvojene za  $\Delta k_y = 2\pi/W$ . Oblast vrednosti  $k$  u kontaktima je predstavljena krugovima poluprečnika  $k_F$ , što znači da  $k_y$  mora imati vrednosti u opsegu  $-k_F < k_y < k_F$  da bi učestvovalo u transportu. Prema tome, broj propagativnih modova je:

$$M = \text{Int} \left( \frac{2k_F}{2\pi/W} \right) = \text{Int} \left( \frac{k_F W}{\pi} \right) = \text{Int} \left( \frac{W}{\lambda_F/2} \right). \quad (196)$$

Ako je  $\lambda_F = 30 \text{ nm}$ , broj modova u  $15 \mu\text{m}$  širokom kanalu je 1000, tako da je kontaktna otpornost oko  $12,9 \Omega$ .

### 13. Landauerova formula

Posmatramo 1D provodnik spojen na dva velika kontakta pomoću žica (uvodnika), kao na slici 17. Pretpostavljamo da su žice balistički provodnici, od kojih svaki sadrži  $M$  transverzalnih modova. Pretpostavljamo da nema refleksije nosilaca na kontaktima. Kao i ranije, zaključujemo da doprinos struji daju stanja sa energijama između  $\mu_2$  i  $\mu_1$ . Označimo sa  $T$  srednju vrednost koeficijenta transmisije kroz provodnik između žica:

$$T = \frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \int_{\mu_2}^{\mu_1} T(E) dE. \quad (197)$$

Struja elektrona kroz žicu 1 (sa leve strane provodnika) ka provodniku je:

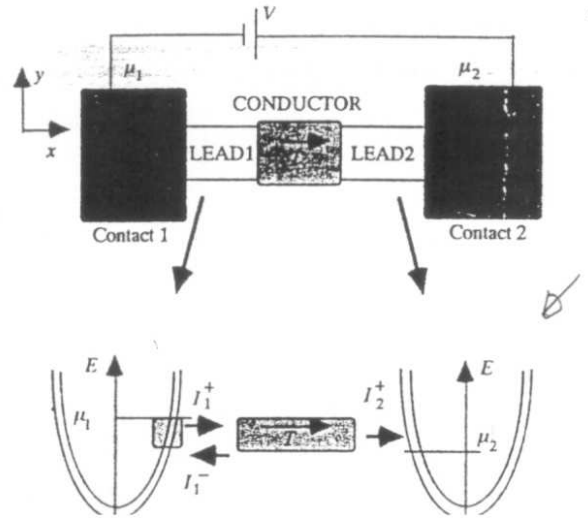
$$I_1^+ = \frac{2e}{h} M (\mu_1 - \mu_2). \quad (198)$$

Izlazna struja iz žice 2 (desne žice) je

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} M T (\mu_1 - \mu_2). \quad (199)$$

Struja koja je reflektovana ka kontaktu 1 je:

$$I_1^- = \frac{2e}{h} M (1 - T) (\mu_1 - \mu_2). \quad (200)$$



Sl. 17. Provodnik čija je karakteristika konačna vrednost koeficijenta transmisije se nalazi između dva balistička provodnika (žice) spojene na široke kontakte. Ovo je sistem za koji važi Landaurova formula.

Neto struja je:

$$I = I_1^+ - I_1^- = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2). \quad (201)$$

Prema tome, provodnost je:

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (202)$$

Ovo je *Landaurova formula za provodnost*. Ako je verovatnoća transmisije jednaka jedan, na osnovu Landaurove formule, dobija se izraz za kontaktanu otpornost balističkog provodnika.

Ako su uvodnici različite širine, moguće je međumodno rasejanje. Doprinos provodnosti elektrona koji su incidentni u modu  $m$  a izlaze u modu  $n$  je:

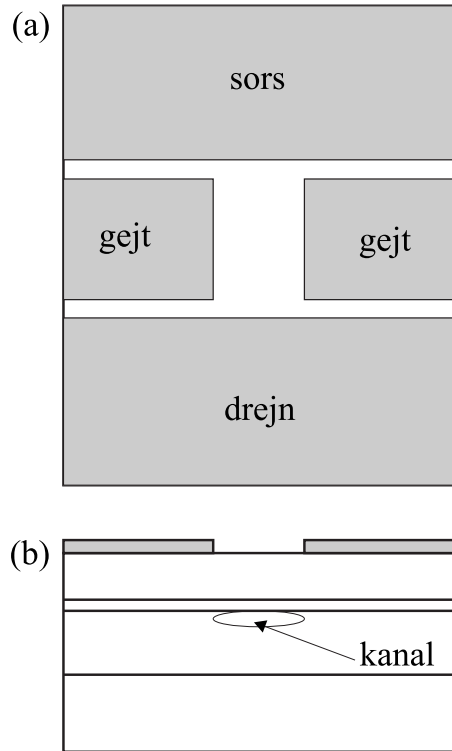
$$T_{nm} = |t_{nm}|^2, \quad m \rightarrow n, \quad (203)$$

gde  $t_{nm}$  označava amplitudu transmisije iz moda  $m$  u mod  $n$ . Od koeficijenata  $t_{nm}$  može se konstruisati *matrica rasejanja*, koju ćemo označiti sa  $t$ . Ukupna provodnost je:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_m \sum_n |t_{nm}|^2. \quad (204)$$

Ovde je pretpostavljeno da je dužina fazne relaksacije mala, tj da nema koherencije između elektrona u različitim modovima, što odgovara balističkom transportu bez fazne koherencije. Ovaj izraz se može transformisati u:

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} \sum_{m,n} t_{nm} t_{nm}^* = \frac{2e^2}{h} \sum_{m,n} t_{nm} t_{mn}^+ \\ &= \frac{2e^2}{h} \sum_n (tt^+)_{nn} = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(tt^+). \end{aligned} \quad (205)$$



Sl. 18. (a) Metalni kontakti na površini. Transport je od sorsa ka drejnu. Širina kanala se kontroliše pomoću napona na podjeljenom gejtju. (b) Kanal je formiran od 2DEG, koji se formira na heterospoju (na primer  $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ , kao kod HEMT-a).

## 14. Kvantno-tačkasti kontakt

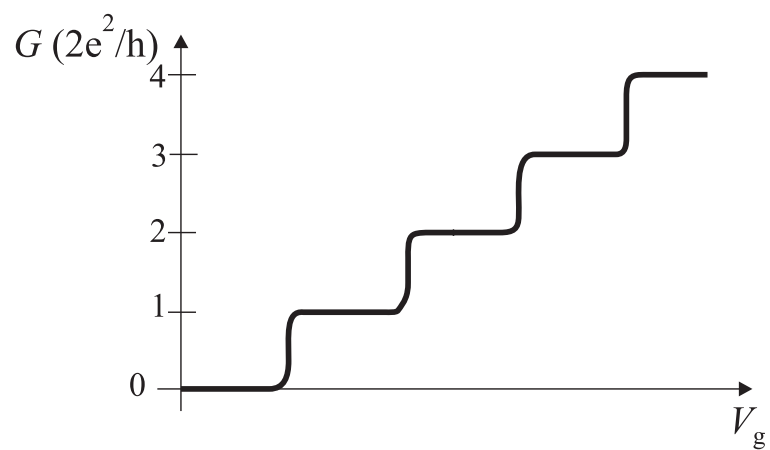
Kvantno-tačkasti kontakt predstavlja kratku žicu ili užlebljenje, čije su dve projekcije prikazane na slici 18. Žica je oblast između sorsa i drejna i predstavlja kanal za transport elektrona. Širina transverznog potencijala u kome su konfinirani elektroni u žici se menja pomoću napona na gejtju.

Za zadatu vrednost napona gejta  $M$  modova daje doprinos električnoj struji. Elektroni koji populišu ove modove imaju najniže energije. Dakle, ovaj broj se menja sa porastom napona na gejtju, dok je verovatnoća transmisije kroz kratku oblast kanala približno jednaka 1:

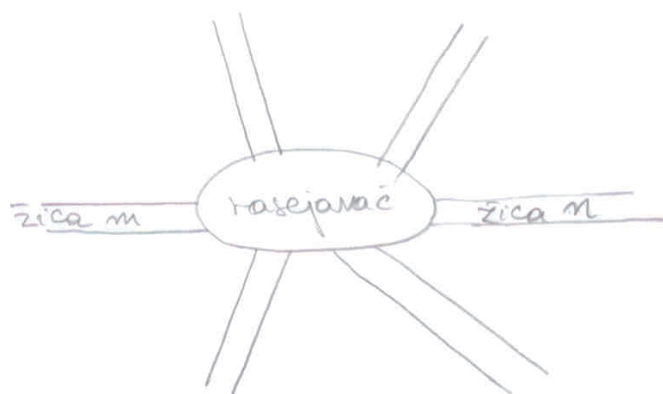
$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(t^\dagger t) \approx \frac{2e^2}{h} M. \quad (206)$$

Rezultat je stepenasta zavisnost provodnosti od napona na gejtju, odnosno kvantovanje provodnosti, kao što je prikazano na slici 19.

Reći ćemo još da bi se efekat kvantovanja provodnosti eksperimentalno konstatovao, potrebno je da rasejanje unazad bude zanemarljivo, što se postiže malom dužinom kanala (podsetiti se da amplituda transmisije raste sa smanjenjem debljine barijere).



Sl. 19. Zavisnost provodnosti od napona na gejtju jednog kvantno-tačkastog kontakta.



Sl. 20. Ilustracija sistema sa više uvodnika (žica).

## 15. Sistemi sa više žica

Posmatramo sistem koji se sastoji od “rasejavača” na koji je spojeno više žica. Neke žice služe za injekciju struje, dok se druge koriste za merenje napona. Primeri ovakvih sistema su  $T$  spoj, most za merenje otpornosti, most za merenje Holovog napona. Označimo sa  $m$  i  $n$  indekse žice, a  $\alpha$  i  $\beta$  označavaju propagativne modove u žicama. Broj modova u žicama je  $N_m$ . Pretpostavljamo da žice imaju konstantan poprečni presek. Za mod  $\alpha$  u žici  $m$ :

$$I_{m\alpha}^{inc} = \frac{2e^2}{h} V_m. \quad (207)$$

Ako se elektroni raseju u mod  $n\beta$ , struja je:

$$-I_{m\alpha}^{inc} |t_{n\beta, m\alpha}|^2. \quad (208)$$

Amplituda refleksije je:

$$r_{m\beta, m\alpha} = t_{m\beta, m\alpha}. \quad (209)$$

Drugim rečima,  $t_{m\beta, m\alpha}$  je pogodna oznaka. Ukupna struja u žici  $n$  usled elektrona injektovanih iz žice  $m$  je:

$$I_{nm} = -\frac{2e^2}{h} V_m \sum_{\beta=1}^{N_n} \sum_{\alpha=1}^{N_m} |t_{n\beta, m\alpha}|^2. \quad (210)$$

Uvedimo “koeficijente refleksije i transmisije”:

$$T_{nm} = \sum_{\beta=1}^{N_n} \sum_{\alpha=1}^{N_m} |t_{n\beta, m\alpha}|^2, \quad (211)$$

$$T_{mm} = \sum_{\beta=1}^{N_m} \sum_{\alpha=1}^{N_m} |r_{m\beta, m\alpha}|^2. \quad (212)$$

Ova dva koeficijenta nisu “pravi” koeficijenti refleksije i transmisije, jer njihove vrednosti mogu biti veće od 1.

Struja injektovana u žicu  $m$  je:

$$I_{mm} = \frac{2e^2}{h} N_m V_m - \frac{2e^2}{h} R_m V_m, \quad (213)$$

gde prvi sabirak predstavlja incidentnu komponentu, a drugi sabirak je reflektovana struja.

(1) Na osnovu jednačine kontinuiteta:

$$I_{mm} = \sum_{n \neq m} I_{nm}. \quad (214)$$

Ova jednačina se svodi na sumaciono pravilo za koeficijente transmisije:

$$N_m - R_m = \sum_{n \neq m} T_{nm}. \quad (215)$$

Žica  $n$  daje doprinos struji u žici  $m$  (struja nosilaca je od rasejavača):

$$I_{m\beta, m\alpha}^{tran} = -\frac{2e^2}{h} T_{mn} V_n. \quad (216)$$

Konačno za struju u žici  $m$  dobija se izraz:

$$I_m = \frac{2e^2}{h} \left[ (N_m - R_m) V_m - \sum_{n \neq m} T_{mn} V_n \right]. \quad (217)$$

Ovo je *Landauer-Büttikerova formula*, koja se može pisati i u formi:

$$I_m = \frac{2e^2}{h} \left( \sum_{n \neq m} T_{nm} V_m - \sum_{n \neq m} T_{mn} V_n \right) = \frac{2e^2}{h} \sum_{n \neq m} (T_{nm} V_m - T_{mn} V_n) \quad (218)$$

ili

$$I_m = \sum_n G_{mn} V_n, \quad (219)$$

$$G_{mn} = \frac{2e^2}{h} [(N_m - R_m) \delta_{mn} - T_{mn} (1 - \delta_{mn})]. \quad (220)$$

Ekvivalentno se Landauer-Büttikerova formula može pisati u formi:

$$I = GV, \quad (221)$$

odnosno:

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1N} \\ G_{21} & G_{22} & \dots & G_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{N1} & G_{N2} & \dots & G_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_N \end{bmatrix}. \quad (222)$$

*Za male varijacije potencijala koeficijenti  $G$  ne zavise od napona polarizacije (linearni odziv).*

(2) Postavimo uslov da su svi potencijali jednaki ( $V_m = V$ ,  $m = 1, \dots, N$ ). Tada nema toka struje ( $I_m = 0$ ,  $m = 1, \dots, N$ ). Odavde sledi:

$$I_m = \sum_n G_{mn} V_n = \left( \sum_n G_{mn} \right) V = 0, \quad (223)$$

odnosno:

$$\sum_n G_{mn} = 0, \quad (224)$$

što znači da je suma elemenata u svakoj vrsti matrice  $G$  jednaka nuli. Ovaj uslov je ekvivalentan

$$N_m - R_m = \sum_{n \neq m} T_{mn}. \quad (225)$$

Koristeći prethodno izvedeno sumaciono pravilo za koeficijente transmisije:

$$\sum_{n \neq m} T_{nm} = \sum_{n \neq m} T_{mn}. \quad (226)$$

Izraz za struju u žici  $m$  postaje:

$$I_m = \frac{2e^2}{h} \sum_{n \neq m} T_{mn} (V_m - V_n). \quad (227)$$

Ovaj izraz ima formu Landaureove formule. Kao što se može očekivati, struja savisi samo od razlike potencijala.

(3) da je  $V_n \neq 0$ , a da je  $V_m = 0$ , za sve  $n \neq m$ . Na osnovu jednačine kontinuiteta (I Kirchovog zakona):

$$\sum_m I_m = 0 \rightarrow \sum_m \left( \sum_n G_{mn} \right) V_n = \sum_n \left( \sum_m G_{mn} \right) V_n = 0, \quad (228)$$

odakle sledi:

$$\sum_m G_{mn} = 0. \quad (229)$$

Dakle, suma elemenata u svakoj koloni matrice  $G$  jednaka je nuli. Ovaj uslov je:

$$\sum_m (N_m - R_m) \delta_{mn} - T_{mn} (1 - \delta_{mn}) = 0, \quad (230)$$

odakle sledi:

$$N_m - R_m = \sum_{m \neq n} T_{mn}. \quad (231)$$

## 16. Veza izmedju balističkog i difuzionog transporta

Posmatramo 2D provodnik u režimu *linearnog odziva*, tj za male vrednosti primenjenog napona  $V$ , na niskoj temperaturi. Pretpostavljamo da su dužina i širina kanala,  $L$  i  $W$ , respektivno, velike, tj mnogo veće od debljine 2DEG. Kao i ranije, kontakti se nalaze u ravnoteži na različitim elektrohemijским potencijalima  $\mu_1$  i  $\mu_2 = \mu_1 - eV$ .

Pretpostavimo da je razmatrani provodnik “elastični otpornik”: transport nosilaca u elastičnom otporniku je elastičan, tj nema gubitaka energije. Za razliku od balističkog provodnika, elektroni se u elastičnom otporniku mogu kretati i difuzijom. U elastičnom otporniku struja stanja u energijskom opsegu  $[E, E + dE]$  je nezavisna od struje stanja u drugim energijskim opsezima, tj ne postoji transfer nosilaca iz jednog transportnog (transverznog) moda u drugi.

Konstruisaćemo (ne izvesti) kvazi-klasični izraz za provodnost ovog otpornika. Pretpostavimo da je samo jedna podzona u 2DEG popunjena, gustina stanja u transportnom kanalu između kontakata ima oblik kao na slici. Doprinos električnoj struji daju stanja u opsegu energija  $E \in [\mu_2, \mu_1]$ . Struja jednog stanja energije  $E$  je:

$$I(E) \sim f_1(E) - f_2(E). \quad (232)$$

Ako je  $f_1(E) = f_2(E)$ , tada je ista zauzetost stanja u levom i desnom kontaktu, tako da je neto struja jednaka nuli. U režimu linearnog odziva, napon polarizacije je  $eV \ll k_B T$ , tako da je:

$$f_1(E) - f_2(E) \approx \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) eV. \quad (233)$$

Ovde je  $f_0$  funkcija raspodele elektrona za  $\mu = \mu_0 = (\mu_1 + \mu_2)/2$ . Lako se nađe:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} = f_0(1 - f_0) \frac{1}{k_B T} \quad (234)$$

i

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE = -f_0|_{-\infty}^{+\infty} = 1. \quad (235)$$

Struja jednog elektrona energije  $E$  je:

$$I_1 = \frac{e}{\Delta t}, \quad (236)$$

gde je  $\Delta t$  vreme transfera elektrona od levog do desnog kontakta. Broj stanja koja nose struju od levog ka desnom kontaktu je:

$$dN = \frac{D(E)}{2} dE, \quad (237)$$

gde je uzeto u obzir da za svaku vrednost energije samo pola stanja (ona koja propagiraju od levog ka desnom kontaktu, tj  $+k$  stanja) daju doprinos struji. Prema tome, struja koju nose stanje sa energijama u opsegu  $[E, E + dE]$  je:

$$dI = dE \frac{D(E)}{2} \frac{e}{\Delta t} (f_1(E) - f_2(E)). \quad (238)$$

Struja svih elektrona je:

$$I = \frac{1}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^2 D(E)}{2\Delta t} (f_1(E) - f_2(E)). \quad (239)$$

Za male vrednosti napona ( $\mu_1 - \mu_2 = eV \ll k_B T$ ) je  $f_1(E) - f_2(E) \approx (-\partial f_0 / \partial E) eV$ , tako da sledi:

$$I = V \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right). \quad (240)$$

Integral na desnoj strani poslednjeg izraza je provodnost, a s obzirom da  $-\partial f_0 / \partial E$  ima značenje funkcije raspodele:

$$G(E) = \frac{e^2 D(E)}{2\Delta t(E)} \quad (241)$$

ima značenje *provodnosti stanja energije  $E$* .

Širina funkcije  $-\partial f_0 / \partial E$  je aproksimativno  $4k_B T$  oko  $\mu_0$ . Drugim rečima, funkcija  $-\partial f_0 / \partial E$  ima zanemarljivu vrednost izvan intervala  $[\mu_0 - 2k_B T, \mu_0 + 2k_B T]$ . Ukoliko su gustina stanja  $D$  i vreme transfera nosilaca  $\Delta t$  nezavisni od energije, lako se dobije:

$$G = \frac{e^2 D}{2\Delta t}. \quad (242)$$

U opštem slučaju, međutim,  $D$  i  $\Delta t$  zavise od energije. Ukoliko je  $L$  malo, tada je transport balistički, a vreme transfera je:

$$\Delta t(E) = \frac{L}{u}, \quad (243)$$

gde je  $u$  srednja brzina elektrona (dobijena usrednjenjem po uglovima). S druge strane, ako je  $L$  veliko, transport je difuzioni. Za ovu vrstu transporta važi (videti Thomas Ihn, “Semiconductor nanostructures”, Oxford UP, 2010.):

$$D_d = \frac{1}{2} \frac{L_m^2}{\tau}. \quad (244)$$

Ukoliko je dužina uzorka  $L$ , može se pisati:

$$D_d = \frac{L^2}{2\Delta t}. \quad (245)$$

Ovde ćemo pretpostaviti (ovo je pretpostavka u modelu!) da je:

$$\Delta t(E) = \frac{L}{u} + \frac{L^2}{2D_d}, \quad (246)$$

tj da je transport kombinacija balističkog i difuzionog i da su dva mehanizma transporta nezavisni, tj da je ukupno vreme transfera jednako zbiru vremena transfera usled balističkog i vremena transfera usled difuzionog transporta. Poslednji izraz postaje:

$$\Delta t(E) = \Delta t_B(E) \left( 1 + \frac{L}{\lambda(E)} \right). \quad (247)$$

Ovde je:

$$\lambda(E) = \frac{2D_d(E)}{u(E)} \quad (248)$$

i može se pokazati da je proporcionalno srednjoj dužini slobodnog puta (skalirana srednja dužila slobodnog puta). Izraz za  $G(E)$  se sada može pisati u obliku:

$$G(E) = \frac{e^2 D(E) \lambda(E)}{\Delta t_B(E) (L + \lambda(E))}. \quad (249)$$

Gustinu stanja 2DEG je:

$$D(E) = W \cdot L \cdot g(E), \quad (250)$$

gde je  $g(E)$  gustina stanja po jedinici površine. Izraz za  $G(E)$  postaje:

$$G(E) = \frac{e^2 g(E) \lambda(E) u}{2} \frac{W}{L + \lambda(E)}. \quad (251)$$

Ako je  $L \gg \lambda(E)$ , tada poslednji izraz postaje:

$$G(E) = \frac{e^2 g(E) \lambda(E) u}{2} \frac{W}{L}. \quad (252)$$

Izraz koji množi  $W/L$  u poslednjem izrazu ima značenje provodnosti stanja sa energijom  $E$ , tj

$$G(E) = \frac{\sigma(E)}{L + \lambda(E)}, \quad (253)$$

gde je:

$$\sigma(E) = \frac{e^2 g(E) \lambda(E) u}{2}. \quad (254)$$

Ako je  $L \ll \lambda(E)$ , tada:

$$G(E) = G_B(E) = \frac{\sigma(E)W}{\lambda(E)}. \quad (255)$$

S obzirom da je u balističkom režimu  $\lambda(E) = 2D_d/u$  i  $\Delta t = L/u$  sledi:

$$\frac{\sigma(E)W}{2D_d/u} = \frac{e^2 D(E)}{2L/u}. \quad (256)$$

Oдавde se direktno dobije:

$$\sigma(E) = \frac{e^2 D(E) D_d(E)}{W L}. \quad (257)$$

Primetimo da smo izraz za  $\sigma(E)$  izveli razmatranjem slučaja balističkog transporta u elastičnom otporniku.

Struja kroz razmtrani otpornik je:

$$I = V \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\sigma(E)W}{L + \lambda(E)} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (258)$$

odnosno:

$$\begin{aligned} I &= V \frac{W}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\sigma(E)}{1 + \lambda(E)/L} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = \\ &V \sigma \frac{W}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\sigma(E)}{1 + \lambda(E)/L} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) / \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sigma(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \end{aligned} \quad (259)$$

gde je uzeto u obzir:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (260)$$

## 17. Drudeova formula

Za 3DEG važi Drudeova formula za specifičnu provodnost:

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}. \quad (261)$$

Formula za provodnost:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (262)$$

koju smo izveli za slučaj 2DEG, osim što je definicija  $\sigma$  drukčija ( $G = \sigma A/L$ ), tako da je za 3DEG:

$$\sigma(E) = \frac{e^2 D(E) D_d(E)}{AL}, \quad (263)$$

gde je  $A$  površina poprečnog preseka otpornika. Pokažimo da se korišćenjem poslednjaj dva izraz može izvesti Drudeova formula. Označimo sa  $N$  broj stanja do proizvoljne energije  $E$ :

$$N(E) = \int_{-\infty}^E D(E) dE, \quad (264)$$

odnosno:

$$D(E) = \frac{dN}{dE}. \quad (265)$$

Podsetimo se da je brzina  $v = dE/dp$ . Izraz za  $D(E)$  postaje:

$$D(E) = \frac{dN}{dp} \frac{dp}{dE} = \frac{1}{v} \frac{dN}{dp} = \frac{m}{p} \frac{dN}{dp}. \quad (266)$$

U poslednjoj jednakosti  $N = N(p)$  i dato je je izrazom:

$$N(p) = \frac{(4/3)\pi p^3}{\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}, \quad (267)$$

gde su za pretpostavljene periodične granične uslove:

$$\Delta p_i = \hbar \Delta k_i = \hbar 2\pi / L_i. \quad (268)$$

Ovde je  $L_i$  dimenzija sistema u pravu  $i$  ( $i = x, y, z$ ). Dakle:

$$\frac{dN}{dp} = \frac{4\pi}{3} AL \frac{3p^2}{h^3} = 3 \frac{N}{p}. \quad (269)$$

Gustina stanja je:

$$D(E) = \frac{3N}{p} \frac{1}{v}. \quad (270)$$

Odavde se dobije korisna relacija:

$$\boxed{D(E)p(E)v(E) = 3N}. \quad (271)$$

Može se pokazati da je koeficijent difuzije u 3DEG:

$$D_d = \frac{v^2(E)\tau(E)}{3}. \quad (272)$$

Zamenom poslednja dva izraza u izraz za  $\sigma(E)$ :

$$\sigma(E) = \frac{e^2 D_d D}{AL} = \frac{e^2 N(E) \tau(E)}{AL m(E)}. \quad (273)$$

Pretpostavimo da u  $\tau$  i  $m$  konstantni. Takva situacija postoji u poluprovodnicima sa paraboličnim zonama koje su dobro opisane jednozonskom aproksimacijom efektivnih masa. Za ovaj slučaj je:

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{m} \frac{1}{AL} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E). \quad (274)$$

Poslednji integral se može izračunati parcijalnom integracijom:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) N(E) = [-N(E) f_0(E)]|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{dN}{dE} f_0(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D(E) f_0(E) = N_{tot}. \quad (275)$$

Ovde je  $N_{tot}$  ukupan broj elektrona. Prema tome,

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{m} \frac{N_{tot}}{AL} = \frac{e^2 \tau n}{m}. \quad (276)$$

Ovo je Drudeova formula, koja važi pod pretpostavkom  $m = const$  i  $\tau = const$  i može se sa uspehom primeniti na elektrone u materijalima čije su podzone parabolične. Ako su podzone neparabolične, Drudeova formula ne važi. Primer takvog sistema je grafen, gde su disperzione relacije linearne u okolini  $K$  i  $K'$  tačaka u Brillouinovoj zoni (videti poglavlje o grafenu i ugljeničnim nanotubama).



### 3

## Višezonski $k \cdot p$ modeli

Usled preklapanja atomskih orbitala susednih atoma u poluprovodniku elektronski nivoi izolovanih atoma se razdvajaju. Rezultat za veliki broj atoma je pojava energijskih zona u čvrstom telu. Usled sprezanja između atoma, stanja se pocepaju na vezujuće i antivezujuće orbitale, od kojih nastaju odgovarajuće zone, koje mogu biti popunjene elektronima, kada se nazivaju *valentne*, ili prazne, kada ih zovemo *provodne*. Šematski prikaz cepanja orbitala atoma u molekulu i kristalu prikazan je na slikama 1(a) i 1(b).

U poluprovodnicima sa tetraedarskom koordinacijom, kao što su dijamantska i sfaleritna rešetka, svaki atom je okružen sa četiri najbliža suseda, koji se nalaze u temenima tetraedra. Vektori koji povezuju centralni atom sa ostalim su različiti. pa kod opisa zonske strukture nije pogodno koristiti koordinatni sistem sa  $z \parallel \vec{a}$ , gde je  $\vec{a}$  vektor položaja susednog atoma u odnosu na uočeni, već je pogodnije da se kristalografske ose izaberu za koordinatne ose. Sferni harmonici atomskih orbitala  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  imaju oblike u odnosu na ovaj koordinatni sistem:

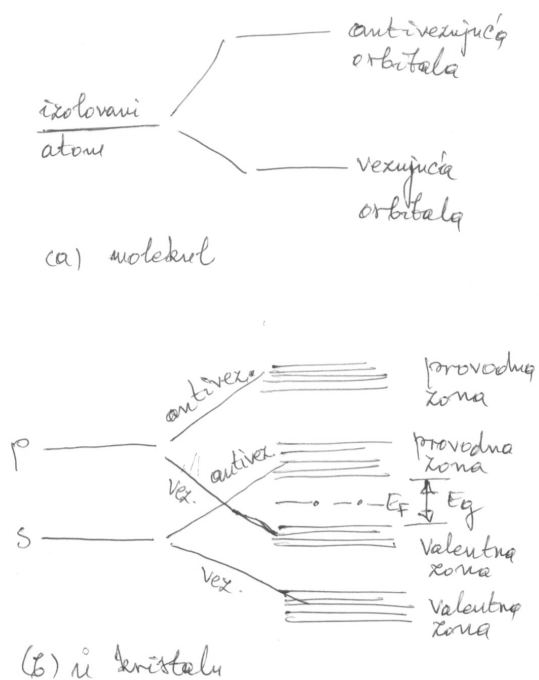
$$l = 0 \text{ (s orbitala)} \quad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (1)$$

$$l = 1 \text{ (p orbitala)} \quad Y_{10} = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \frac{z}{r}, \quad (2)$$

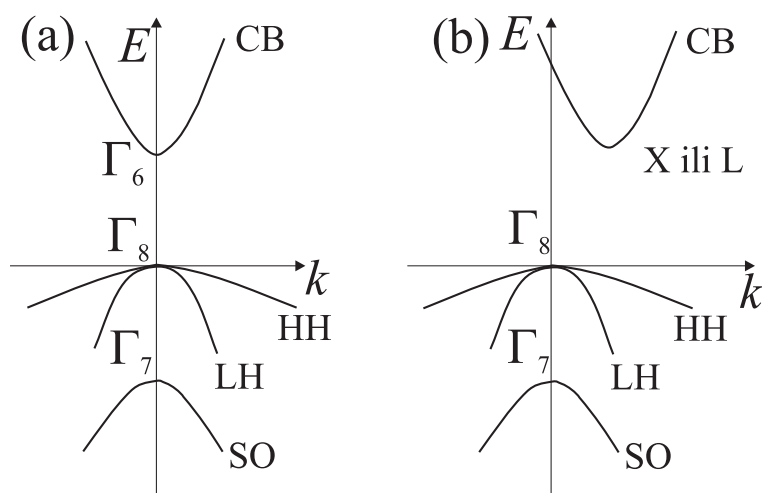
$$Y_{1,\pm 1} = \mp \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}. \quad (3)$$

Poznato je da se energije koje određuju transportne i optičke osobine nalaze u blizini ekstremuma najniže provodne i najviše valentne zone. Provodnu zonu formiraju antivezujuće  $s$  orbitale, dok su stanja u valentnoj zoni dominantno formirana od vezujućih  $p$  orbitala. U zavisnosti od položaja minimuma provodne zone, poluprovodnici koji imaju kristalnu rešetku dijamanta ili sfalerita, mogu se klasifikovati na direktne (maksimum u  $k = 0$  i indirektne (maksimum u  $k \neq 0$ ). Disperzione relacije za dva tipa poluprovodnika su prikazane na slikama 2(a) i 2(b), respektivno. Bez obzira na tip poluprovodnika, vrh valentne zone se nalazi u  $k = 0$  tački, koja se obeležava sa  $\Gamma$  i valentna zona u ovoj tački je dvostruko degenerisana. Dve valentne zone se nazivaju *zona teških* i *zona lakih šupljina*, dok je treća zona otcepljena usled spin orbitne interakcije, pa se naziva *otcepljena zona*.

Za teorijski opis elektronske strukture masivnih materijala može se koristiti više metoda. Najjednostavniji je opis disperzione relacije u okviru aproksimacije efektivnih masa. Ovakav opis



Sl. 1. Cepanje elektronskih nivoa u izolovanim atomima u: (a) molekulima, (b) monokristalima.



Sl. 2. Elektronska struktura: (a) direktnog, (b) indirektnog poluprovodnika.

je dobar za provodnu zonu širokozonalnih poluprovodnika, dok je za uskozonalne poluprovodnike neparaboličnost provodne zone velika. Nezavisno od širine energijskog procepa, disperzione relacije u valentnoj zoni su anizotropne, tako da se ne može dati jednostavan opis samo pomoću efektivne mase. Jedan od načina da se modeluje disperziona relacija je  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model, u kome se disperziona relacija  $E(\mathbf{k})$  za  $\mathbf{k} \neq 0$  izračunava na osnovu energija i talasnih funkcija za  $\mathbf{k} = 0$ . Pri tome su moguća dva pristupa:

- disperziona relacija se računa korišćenjem teorije perturbacija. Ovakav model se naziva perturbacioni  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model i primeren je za provodnu zonu;
- stanja za  $\vec{k} \neq 0$  se razviju u bazisni set formiran od stanja za  $\vec{k} = 0$ . Ovakvi modeli se nazivaju višezonski  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  modeli.

## 1. Perturbacioni $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model

Polazimo od Šredingerove jednačine za elektron u kristalu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\Psi_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}}\Psi_{n\vec{k}}, \quad (4)$$

gde je  $V(\vec{r})$  periodični potencijal u kome se kreće elektron (potencijal kristala), a  $m_0$  je masa slobodnog elektrona. Pošto Blohova talasna funkcija stanja sa talasnim vektorom  $\vec{k}$  u zoni  $n$  ima oblik:

$$\Psi_{n\vec{k}} = u_{n\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (5)$$

gde je  $u_{n\vec{k}}$  periodični deo Blohove funkcije, poslednju jednačinu možemo transformisati u obliku:

$$\left[\frac{1}{2m_0}(\vec{p} + \hbar\vec{k})^2 + V(\vec{r})\right]u_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}}u_{n\vec{k}}, \quad (6)$$

ili u razvijenoj formi:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\vec{p} + V(\vec{r})\right)u_{n\vec{k}} = E'_{n\vec{k}}u_{n\vec{k}}, \quad (7)$$

gde je:

$$E'_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}. \quad (8)$$

Rešenje za proizvoljno  $\vec{k}$  se nalazi ako su poznate  $u_{n0}$  i energije u centru Brillouinove zone  $E_{n0}$  pomoću teorije perturbacija. Ako je  $\hbar k \ll p$ , tada je neperturbovani hamiltonijan:

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}), \quad (9)$$

dok je:

$$\hat{H}_1 = \frac{\hbar}{m_0}\vec{k} \cdot \vec{p} \quad (10)$$

i

$$H_2 = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} \quad (11)$$

mogu tretirati kao perturbacije I i II reda, respektivno. Po teoriji perturbacija I reda,  $u_{n\vec{k}}$  i  $E_{n\vec{k}}$  se mogu odrediti kao:

$$u_{n\vec{k}} = u_{n0} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n'0 | \vec{k} \cdot \vec{p} | n0 \rangle}{E_{n0} - E_{n'0}} u_{n'0}, \quad (12)$$

$$E_{n\vec{k}} = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \langle n0 | \vec{k} \cdot \vec{p} | n0 \rangle. \quad (13)$$

U kristalima sa centrom inverzione simetrije (IV grupa periodnog sistema) matrični element koji predstavlja perturbaciju za energiju jednak je nuli, dok je u većini III-V i II-VI jedinjenja vrlo mali. Matrični elementi perturbacije za talasnu funkciju, međutim, mogu biti različiti od nule, posebno ako stanja imaju različitu parnost, što je slučaj sa sprežanjem  $|s\rangle$  stanja u provodnoj zoni i  $|p\rangle$  stanja u valentnoj zoni.

S obzirom da je popravka za energiju po teoriji perturbacija I reda jednaka nuli u poluprovodnicima sa centrom inverzione simetrije, mora se koristiti teorija perturbacija II reda, inače bi elektron u svakoj zoni imao efektivnu masu jednaku masi slobodnog elektrona:

$$E_{n\vec{k}} = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'0 | \vec{k} \cdot \vec{p} | n0 \rangle|^2}{E_{n0} - E_{n'0}}. \quad (14)$$

Ovaj rezultat može se izraziti u obliku:

$$E_{n\vec{k}} = E_{n0} + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2m_{ij}} k_i k_j. \quad (15)$$

Ovde je  $1/m_{ij}$  tenzor efektivne mase:

$$\frac{m_0}{m_{ij}} = \delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{n', n' \neq n} \frac{\langle n0 | p_i | n'0 \rangle \langle n'0 | p_j | n0 \rangle}{E_{n0} - E_{n'0}}. \quad (16)$$

Prema tome, matrični elementi impulsa između date zone i ostalih zona su uzrok za odstupanje  $m_{ij}$  od  $m_0$ . Postojanje matričnih elemenata naziva se *mešanje zona*. Ova teorija se može primeniti i na valentnu zonu, ali je potrebno primeniti teoriju perturbacija za degenerisane nivoe, jer su zone teških i lakih šupljina degenerisane za  $k = 0$ . S obzirom da su zone šupljina neparabolične i anizotropne, potrebno je koristiti teoriju perturbacija višeg reda. Bolji način da se izračuna elektronska struktura valentne zone je razvojem u bazis formiran od periodičnih delova Blohových funkcija u centru Brillouinove zone (metod ekspanzije).

## 2. Dvozonski model bez spin-orbitne interakcije

Dvozonski model je najjednostavniji višezonski model. Posmatramo samo dve zone indeksa  $n$  i  $n'$  koje svrstavamo u klasu A. Pretpostavljamo da ove dve zone imaju različitu simetriju. Ostale zone, koje pripadaju klasi B, ne mešaju se sa datim zonama (ne uračunavamo ih čak ni

perturbativno). Pored toga, smatramo da je spin-orbitna interakcija zanemarljiva. Periodični delovi Blohových funkcija u centru Brillouinove zone su ortonormirani u jediničnoj ćeliji:

$$\int_V u_{n0}^* u_{n'0} dV = \delta_{nn'}. \quad (17)$$

Šredingerova jednačina za zonu  $n$  u tački  $\vec{k}$  je:

$$\left( H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left( E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (18)$$

Ovde, kao i u prethodnom poglavlju,  $H_0$  označava hamiltonijan elektrona u  $k = 0$ .  $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$  predstavimo kao linearnu kombinaciju  $u_{n0}(\vec{r})$  i  $u_{n'0}(\vec{r})$ :

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = a_n(\vec{k}) u_{n0}(\vec{r}) + a_{n'}(\vec{k}) u_{n'0}(\vec{r}). \quad (19)$$

Pomnožimo ovu jednačinu sa  $u_{n0}$  i integralimo po jediničnoj ćeliji:

$$\left( E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) a_n + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} a_{n'} = E(\vec{k}) a_n, \quad (20)$$

gde je:

$$\vec{p}_{nn'} = \langle n0 | \vec{p} | n'0 \rangle. \quad (21)$$

Takođe, množenjem sa  $u_{n'0}$ :

$$\left( E_{n'0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) a_{n'} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} a_n = E(\vec{k}) a_{n'}. \quad (22)$$

Pri ovome smo iskoristili da je  $\vec{p}$  hermitski operator:

$$\langle u_{n0} | \vec{p} | u_{n'0} \rangle = \langle u_{n'0} | \vec{p} | u_{n0} \rangle \quad (23)$$

U matričnoj formi:

$$H a = E a, \quad (24)$$

gde je  $H$  Hamiltonova matrica:

$$H = \begin{bmatrix} E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} \\ \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{nn'} & E_{n'0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix}, \quad (25)$$

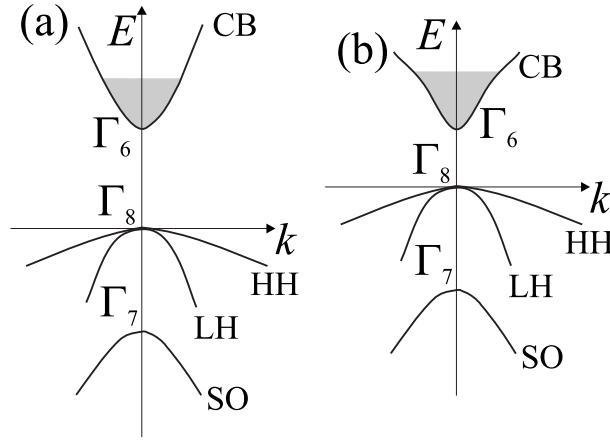
a

$$a = \begin{bmatrix} a_{n0} \\ a_{n'0} \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Disperzione relacije zona nalazimo rešavanjem sekularne jednačine:

$$\det(H - E(\vec{k})I) = 0, \quad (27)$$

gde je  $I$  jedinična matrica.



Sl. 3. (a) Jednozonski model. (b) Jednozonski model sa energijski zavisnom efektivnom masom. Šrafurom su označene oblasti energija od interesa.

### 3. Višezonski modeli sa spin-orbitnom interakcijom

Kod ovih modela izabere se bazis zona od interesa i formira Hamiltonijan eksplicitnim tretiranjem mešanja između zona u bazisu, dok se uticaj ostalih zona, čije su energije više i niže od izabranog skupa izračuna perturbativno. Broj zona u modelu zavisi od:

1. vrednosti energija od interesa;
2. energijskog procepa;
3. energije cepanja usled spin-orbitne interakcije  $\Delta$ ;
4. željene tačnosti računanja elektronske strukture.

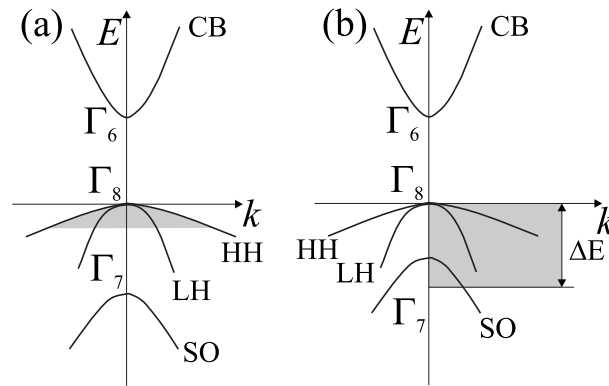
Ovde ćemo nabrojati modele koji se koriste za izračunavanje stanja u nanostrukturama i koji se sa uspehom primenjuju na masivne materijale.

#### 3.1. Jednozonski model

Jednozonski model je primeren za provodnu zonu. Za heterostrukturu, model postaje Šredingerova jednačina u kojoj figuriše efektivna masa i potencijal formiran od diskontinuiteta zona na heterospoju. Ovaj model je dobar za širokozonalne poluprovodnike i strukture bazirane na njima.

#### 3.2. Jednozonski model sa energijski zavisnom efektivnom masom

Ovaj model se koristi za opis neparabolične provodne zone uskozonalnih poluprovodnika i struktura baziranih na njima. Zavisnost efektivne mase od energije se dobija fitovanjem disperzione relacije zone na eksperiment ili neki višezonski model. U heterostrukturi, s obzirom da efektivna masa zavisi od nepoznate energije, Šredingerova jednačina se rešava iterativno. Jednozonski modeli sa i bez energijski zavisne efektivne mase su prikazani na slikama 3(a) i 3(b).



Sl. 4. (a) 2-zonski (4-zonski sa spinom) Latindžer-Konov model. Opseg energija od interesa obuhvata samo zonu teških i lakih šupljina. (b) 3-zonski (6-zonski) Latindžer-Konov model. Opseg energija od interesa obuhvata i otcepljenu zonu.

### 3.3. Dvozonski (Latindžer-Konov) model

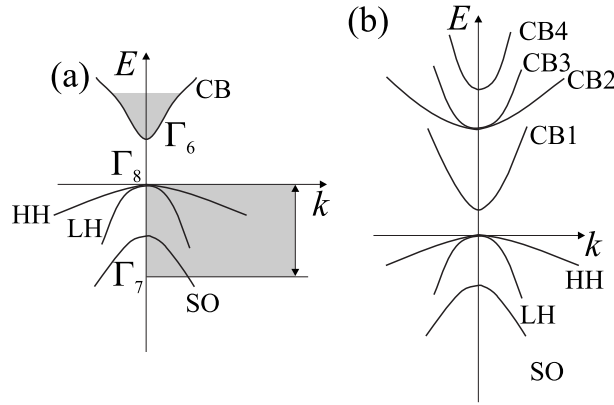
U ovom modelu Hamiltonijan je matrica reda 4 (2 zone  $\times$  2 vrednosti projekcije spina na izabranu osu). Model opisuje anizotropnu elektronsku strukturu valentne zone i može se koristiti ako su širina zabranjene zone  $E_g$  i cepanje  $\Delta$  usled spin-orbitne interakcije veliki u odnosu na opseg energija od interesa. Model tretira eksplicitno mešanje (u hamiltonijanu postoje vandijagonalni matričnih elementi) između zona teških i lakih šupljina. Da bi se dobila elektronska struktura valentne zone, potrebno je rešiti svojstveni problem za 4 spregnute diferencijalne jednačine. Primer strukture je GaAs/AlGaAs.

### 3.4. Trozonski (Latindžer-Konov) model

Hamiltonijan po ovom modelu je matrica reda šest (3 zone  $\times$  2 projekcije spina). Model eksplicitno uzima u obzir mešanje između zone teških šupljina, zone lakih šupljina i otcepljene zone. Ovaj model se koristi kada je  $E_g$  veliko, a  $\Delta$  po redu veličine ili manje od opsega energija od interesa u valentnoj zoni. Dvozonski i trozonski Latindžer-Konovi modeli su predstavljeni na slikama 4(a) i (b). Primer strukture koje se mogu na ovaj način tretirati su GeSi/Si strukture. U heterostrukturi je potrebno rešiti sistem od 6 spregnutih diferencijalnih jednačina.

### 3.5. Četvorozonski model

U modelu se eksplicitno uzima mešanje između provodne zone, zone teških šupljina, zone lakih šupljina i otcepljene zone. Hamiltonijan je matrica  $8 \times 8$ . Koristi se za opis elektronske strukture uskozonalnih poluprovodnika, kada je neparaboličnost provodne zone izražena. Pored stanja u provodnoj zoni, mogu se odrediti stanja u opsegu energija 3 valentne zone koje su uključene u model. Opseg primene modela je skicirana na slici 5(a), zajedno sa opsezima energija od interesa. U nanostrukturama rešava se sistem od 8 spregnutih diferencijalnih jednačina.



Sl. 5. (a) 4-zonski (8-zonski sa spinom) Kejnov model. Opseg energija od interesa može obuhvatati sve četiri prikazane zone, čije je mešanje uzeto eksplicitno u modelu. (b) 7-zonski (14-zonski sa spinom) model.

### 3.6. Sedmozonski (petonivoski) model efektivnih masa

U ovom modelu se eksplicitno uzima mešanje između 4 provodne i tri valentne zone, kao što je prikazano na slici 5(b). Neparaboličnost zona koje su uključene u model može biti značajna (nije posebno naglašen na slici).

Broj zona može biti veći od 7. Postoji modeli koji dovode do matrica reda 30. Međutim, ovakvi model su vrlo kompleksni i u njima se pojavljuju parametri koji se ne mere eksperimentalno, pa se moraju odrediti poređenjem rezultata ovih modela sa kompleksnijim modelima, kao što je metod jake veze ili metod pseudopotencijala.

## 4. Latindžer-Konov model

Prema ovom modelu, mešanje između zona šupljina se uzima eksplicitno, dok se uticaj ostalih zona uzima perturbativno, na osnovu Levdinove perturbacione teorije. Postupak izvođenja je dosta složen i uzima u obzir simetriju kristala (dijamantska ili sfaleritna rešetka). Hamiltonijan ima formu:

$$H_{LK} = \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \end{bmatrix}. \quad (28)$$

Sa desne strane formiranog hamiltonijana su date bazisne funkcije na koje se odnose pojedine vrste u ovom hamiltonijanu. Ovde se  $m_J = \pm 3/2$  odnose na stanja teških šupljina, dok  $m_J =$

$\pm 1/2$  predstavljaju stanja lakih šupljina. Pojedini članovi u hamiltonijanu su:

$$P = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (29)$$

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \quad (30)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}\left[\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}(k_x - ik_y)^2 + \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2}(k_x + ik_y)^2\right], \quad (31)$$

$$S = -\frac{\hbar^2}{2m_0}2\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z, \quad (32)$$

a  $R^\dagger$  i  $S^\dagger$  su adjungovani operatori. Ovaj hamiltonijan je napisan za energijsku osu orijentisanu na gore, od valentne ka provodnoj zoni. Često se, međutim, pri proračunu elektronske strukture i optičkih osobina nanostrukture ova osa orijentiše na dole. Ukoliko se posmatra masivni materijal,  $k_x$ ,  $k_y$  i  $k_z$  du dobri kvantni brojevi. Tada je  $R^\dagger = R^*$  i  $S^\dagger = S^*$ . Parametri  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  i  $\gamma_3$  nazivaju se Latindžerovi parametri.

Na osnovu Latindžer-Konovog hamiltonijana moguće je dobiti disperzione relacije u masivnom materijalu, kao rešenja sekularne jednačine:

$$\det(H_{LK} - EI) = 0. \quad (33)$$

Rešenje je:

$$E = P \pm \sqrt{Q^2 + |R|^2 + |S|^2}. \quad (34)$$

Ovde je:

$$|R|^2 = RR^\dagger, \quad (35)$$

$$|S|^2 = SS^\dagger, \quad (36)$$

a gornji znak se odnosi na teške, a donji na lake šupljine. U razvijenoj formi:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\gamma_1 k^2 \mp \sqrt{4\gamma_2^2 k^4 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)}\right). \quad (37)$$

Ekvienergijske linije, prikazane na slici 6(a) i (b), za teške i lake šupljine, respektivno, značajno odstupaju od kružnica, što znači da su disperzione relacije anizotropne. Ipak, treba primetiti da su ove linije simetrične u odnosu na  $x$  osu,  $y$  osu i pravac  $\varphi = \pi/4$  u  $xy$  ravni.

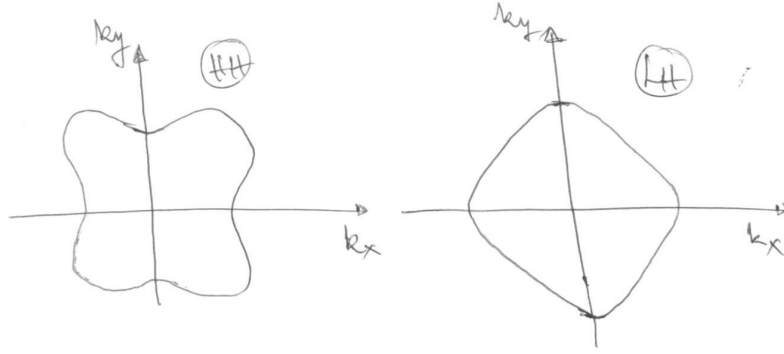
## 5. Anvelopne funkcije

Ukoliko se umesto masivnog poluprovodnika posmatra nanostruktura, sačinjena od različitih poluprovodnika, tada se Hamiltonijan može pisati u obliku:

$$(H_0 + V(\vec{r}))\chi(\vec{r}) = E\chi(\vec{r}), \quad (38)$$

gde  $\chi$  označava detaljnu talasnu funkciju. Formirajmo zatim bazis:

$$\eta_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{n0}(\vec{r}). \quad (39)$$



Sl. 6. Ekvienergijske površi za: (a) teške i (b) lake šupljine.

Treba primetiti da ove funkcije, koje su indeksirane brojačem zone  $n$  i talasnim vektorom elektrona, nisu Blohove funkcije (ukoliko bi umesto  $u_{n0}$  stajalo  $u_{nk}$ , tada bi funkcija bila Blohova).

Razvijmo talasnu funkciju  $\chi$  po bazisnim funkcijama, vodeći računa da je talasni vektor elektrona u beskonačnom kristalu veličina koja može imati kontinualne vrednosti unutar prve Brillouinove zone (suma po  $\vec{k}$  postaje integral):

$$\chi(\vec{r}) = \sum_n \int_{\vec{k}} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} a_n(\vec{k}) \eta_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (40)$$

Rezultat ekspanzije funkcije  $\chi$  u red po funkcijama  $\eta$  je:

$$\chi(\vec{r}) = \sum_j^{n_j} F_j(\vec{r}) u_{j0}(\vec{r}). \quad (41)$$

Broj sabiraka u sumi je jednak redu Hamiltonijana. Za 4-zonski Latindžer-Konov model, broj sabiraka je  $n_j = 4$ . Ovde je:

$$F_j(\vec{r}) = \int_{\vec{k}} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_j(\vec{k}). \quad (42)$$

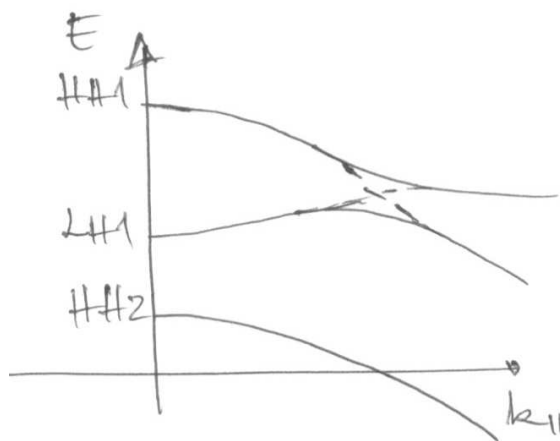
Funkcije  $F_j$  su sporo promenljive na dimenzijama reda veličine konstante rešetke i naziva se *anvelopne funkcija*.

Može se pokazati da za slabu promenu potencijala usled heterostrukture, tj slabu varijaciju dna zone ili zona koje se eksplicitno tretiraju u modelu, potencijal figuriše samo u dijagonalnim članovima hamiltonijana:

$$(H_{LK} + V_{LK})F = EF, \quad (43)$$

gde  $H_{LK}$  predstavlja kinetički deo Hamiltonijana u kome  $k_x$ ,  $k_y$  i  $k_z$  treba pisati u operatorskoj formi, a  $V_{LK}$  je dijagonalna matrica:

$$V - LK = \begin{bmatrix} V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V \end{bmatrix} \quad (44)$$



Sl. 7. Podzone u valentnoj zoni strukture tipa kvantne jame. Isprekidana linija prikazuje ukrštanje koje postaje antiukrštanje pod dejstvom vandijagonalnih matričnih elemenata.

## 6. Karakteristike zonske strukture valentne zone kvantne jame

Svojstvene vrednosti energije elektrona u valentnoj zoni kvantne jame imaju tipičan oblik kao na slici 7. Treba uočiti nekoliko karakteristika disperzionih relacija podzona.

- Latindžer-Konov hamiltonijan za nanostrukturu je dijagonalna matrica za  $k_{\parallel} = 0$ , tako da se stanja mogu okarakterisati kao stanja teških šupljina ili stanja lakih šupljina. Inače su stanja mešana;
- osnovno stanje je stanje teških šupljina, zbog veće efektivne mase u odnosu na lake šupljine;
- efektivna masa LH1 podzone u  $k_{\parallel} = 0$  je po pravilu negativna, tj ima isti znak kao elektronska efektivna masa;
- vandijagonalni matrični elementi u hamiltonijanu dovode do antiukrštanja podzona. Bez vandijagonalnih matričnih elemenata došlo bi do ukrštanja, kao što je prikazano isprekidanom linijom na slici;
- po antiukrštanju podzone izmene međusobno karakter, tj ako je stanje do antiukrštanja bilo dominantno teškošupljinsko (iskazano npr. kao  $\int_{-\infty}^{\infty} (|F_1|^2 + |F_4|^2) dz > \int_{-\infty}^{\infty} (|F_2|^2 + |F_3|^2) dz$  u blok-dijagonalnom aksijalno-simetričnom modelu) po antiukrštanju postaje lako šupljinsko;
- podzone su nepravilno poredane po karakteru. Na primer, redosled šupljinskih podzona može biti: HH1, LH1, HH2, HH3,...;
- ako postoje 3 podzone, kao na slici, uticaj antukrštanja između HH1 i LH1 nije veliki na zonu HH2, jer su energije u ovoj podzoni udaljenije od antiukrštanja u odnosu na HH1.



## 4

# Metod jake veze

Teorija efektivnih masa dobro opisuje stanja u okolini ekstremuma zona i bazira se na opisu elektronske strukture masivnih materijala (u teoriji figurišu parametri elektronske strukture masivnih materijala). Ova teorija se sa uspehom koristi za opis elektronske strukture poluprovodničkih nanostrukture u okolini ekstremuma zona i ako su dimenzije različitih oblasti u nanostrukтури velike. Ako su dimenzije oblasti u nanostrukтури male, uticaj površine postaje značajan, tako da teorija efektivnih masa slabo reprodukuje eksperimentalne rezultate.

Jedan od metoda kojim se prevazilaze ograničenja teorije efektivnih masa je metod jake veze. Ovaj metod koristi: (1) poznatu elektronsku strukturu (svojstvene energije i talasne funkcije) atoma koji formiraju razmtrani materijal (ili nanostrukтуру) i (2) informacije o simetriji kristala. Bitna razlika u odnosu na teoriju efektivnih masa je korišćenje atomskih talasnih funkcija, a ne parametara masivnih materijala. Pristup je, dakle, bitno drukčiji: koriste se atomske talasne funkcije, pa nema ograničenja za debljinu sloja i opseg energija.

Treba primetiti da se metod jake veze, slično kao  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  metod i drugi metodi za računanje elektronske strukture, koristi za računanje jednočestičnih stanja (stanja jednog elektrona).

## 1. Vezujuća i antivezujuća stanja

Posmatratmo sistem od dve pravougaone potencijalne jame. Za jednu potencijalnu jamu (potencijalna energija  $V(x)$ ):

$$\hat{H}_1 = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (1)$$

Energija i svojstvena funkcija osnovnog stanja<sup>1</sup> u ovoj kvantnoj jami su  $\varepsilon$  i  $\phi$ , respektivno:

$$\hat{H}\phi = \varepsilon\phi. \quad (2)$$

U sistemu dve kvantne jame, pretpostavljamo da je centar prve na mestu  $x_L$ , a centar druge na mestu  $x_R$ . Hamiltonijan ovog sistema je:

$$\hat{H} = \hat{T} + V_L + V_R. \quad (3)$$

---

<sup>1</sup>U metodu jake veze to mogu biti i stanja stanja date simetrije-po ugaonom momentu ili nekom drugom kvantnom broju-ako se stanja u poluprovodniku ili nanostrukтури mogu klasifikovati bar približno po toj simetriji.

Pretpostavimo da se talasna funkcija osnovnog stanja u dvostrukoj kvantnoj jami može napisati kao linearna kombinacija osnovnih stanja u dve kvantne jame,  $\phi_L$  i  $\phi_R$ . Ostala stanja ne uzimamo u obzir u razmatranju (ovo je aproksimacija koja može biti zasnovana na simetriji ili malom udelu ostalih stanja u talasnim funkcijama koje se određuju)  $\phi_L$  i  $\phi_R$  su rešenja jednačina:

$$(\hat{T} + V_L)\phi_L = \varepsilon\phi_L, \quad (4)$$

$$(\hat{T} + V_R)\phi_R = \varepsilon\phi_R. \quad (5)$$

Talasne funkcije  $\phi_L$  i  $\phi_R$  nisu ortogonalne, a talasna funkcija u sistemu dve kvantne jame je linearna kombinacija

$$\Psi = \sum_{n=1}^2 a_n \phi_n = a_L \phi_L + a_R \phi_R. \quad (6)$$

Zamenom ove funkcije u jednačinu

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (7)$$

množenjem sa  $\phi_m^*$  i integracijom po relevantnom domenu:

$$\sum_{n=1}^2 H_{mn} a_n = E \sum_{n=1}^2 S_{mn} a_n, \quad (8)$$

gde je  $H_{mn} = \int \phi_m^* \hat{H} \phi_n dx$ ,  $S_{mn} = \int \phi_m^* \phi_n dx$ . Na ovaj način dobija se generalisani svojstveni problem oblika:

$$Ha = ESa, \quad (9)$$

gde je  $a = [a_L, a_R]$ . S obzirom da stanja u levoj i desnoj jami, opisana funkcijama  $\phi_L$  i  $\phi_R$ , nisu ortogonalna, matrica  $S$  nije jedinična. Hamiltononova matrica ima četiri elementa:

$$H = \begin{bmatrix} H_{LL} & H_{LR} \\ H_{RL} & H_{RR} \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Matrični element  $H_{LL}$  je:

$$H_{LL} = \int \phi_L^* (\hat{T} + V_L + V_R) \phi_L = \varepsilon + \int \phi_L^* V_R \phi_L dx = \varepsilon - c. \quad (11)$$

$c$  je očekivana vrednost potencijala  $V_R$  u stanju opisanom funkcijom  $\phi_L$  i naziva se *polje kristala*. Uz  $c$  stoji znak  $-$  jer potencijalna energija predstavlja privlačnu interakciju

$$\int V_R |\phi_L|^2 dx < 0. \quad (12)$$

Ako su jame iste širine i dubine, drugi matrični element na glavnoj dijagonali  $H_{RR}$  ima istu vrednost kao  $H_{LL}$ ,  $H_{RR} = H_{LL}$ .

Vandijagonalni članovi su takođe jednaki,  $H_{LR} = H_{RL}$ . Matrični element  $H_{RL}$  je:

$$H_{RL} = \int \phi_R^* (\hat{T} + V_L + V_R) \phi_L dx = \varepsilon \int \phi_R^* \phi_L dx + \int \phi_R^* V_R \phi_L dx = \varepsilon s - t. \quad (13)$$

Ovde  $s$  označava *faktor neortogonalnosti*:  $s \neq 0$ , jer stanja opisana funkcijama  $\phi_L$  i  $\phi_R$  nisu ortogonalna. Drugi član  $-t$  se naziva *transfer* ili *tunelski integral*. Ovaj integral sadrži proizvode dve funkcije i jednog potencijala i opisuje transfer elektrona iz jedne jame u drugu jamu. Ovde smo uzeli da je  $-t < 0$ , mada  $-t$  može biti veće od nule.

Dijagonalni elementi matrice  $S$  su zbog normiranja funkcija  $\phi_L$  i  $\phi_R$ :

$$S_{LL} = S_{RR} = 1, \quad (14)$$

a vandijagonalni elementi su:

$$S_{LR} = S_{RL} = s. \quad (15)$$

Oblici matrica  $H$  i  $S$  su, dakle:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon - c & \varepsilon s - t \\ \varepsilon s - t & \varepsilon - c \end{bmatrix}, \quad (16)$$

$$S = \begin{bmatrix} 1 & s \\ s & 1 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Svojstvene vrednosti energije se dobijaju rešavanjem sekularne jednačine:

$$\det(ES - H) = 0, \quad (18)$$

što daje:

$$(E - \varepsilon + c)^2 = (Es - \varepsilon s + t)^2. \quad (19)$$

Lako se dobije:

$$E_{\pm} = \varepsilon - \frac{c}{1 \mp s} \pm \frac{t}{1 \mp s}. \quad (20)$$

Ako je preklapanje dve talasne funkcije malo, faktor neortogonalnosti  $s \ll 1$ , pa se izraz za svojstvene energije može aproksimirati sa (razvojem u Taylorov red do prvo stepena po  $s$ ):

$$E_{\pm} = \varepsilon - c(1 \pm s) \pm t(1 \pm s). \quad (21)$$

U ovom slučaju je:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon - c & -t \\ -t & \varepsilon - c \end{bmatrix}, \quad (22)$$

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Ovaj izraz se dalje može aproksimirati ako uočimo da je  $\phi_L$  u  $c$  zamenjeno  $\phi_R$  u  $t$ . Ova zamena (uz prisustvo potencijala  $V_R$ ) znači da je  $|t| > c$ . Pretpostavimo  $t \gg c$ . Ako potpuno zanemarimo  $s$  u izrazu za  $E_{\pm}$ :

$$E_{\pm} = \varepsilon \pm t. \quad (24)$$

Prema tome, integral  $t$  razdvaja stanja u sistemu dve spregnute kvantne jame.

Svojstveni vektor koji odgovara nižoj svojstvenoj energiji  $E_-$  je

$$a_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (25)$$

a svojstveni vektor koji odgovara višoj energiji  $E_+$  je:

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Svojstvene funkcije su, dakle

$$\phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_L + \phi_R), \quad (27)$$

$$\phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_L - \phi_R). \quad (28)$$

$\phi_-$  predstavlja vezujuće, a  $\phi_+$  antivezujuće stanje. Kod vezujućeg stanja, talasna funkcija je različita od nule između dva atoma, dok talasna funkcija antivezujućeg stanja ima nulu između dva atoma. Svojstvena energija vezujućeg stanja je manja od svojstvene energije u jednom atomu, što je posledica većeg domena u kome je elektron konfiniran u strukturi koja se sastoji od dve spregnute kvantne jame.

## 2. Elektronska struktura jednodimenzionog kristala

Posmatramo beskonačan broj kvantnih jama u superrešetki ili jednodimenzionom kristalu. Na osnovu prethodnog razmatranja dve kvantne jame, ako se rastojanje između jama smanjuje, razlika svojstvenih energija raste, jer raste  $t$ . Ukoliko se sistem sastoji od  $N$  kvantnih jama, osnovno stanje u jednoj kvantnoj jami se pocepa na  $N$  nivoa. Za  $N \rightarrow \infty$  ovi nivoi formiraju energijsku zonu (traku).

Hamiltonijan u razmatranom jednodimenzionom kristalu ima oblik:

$$\hat{H} = T + \sum_n V_n. \quad (29)$$

Ovde  $V_n$  označava potencijal  $n$ -te kvantne jame. Orbitala (talasna funkcija) pridružena  $n$ -toj kvantnoj jami je  $\phi_n$  i zadovoljava

$$(\hat{T} + V_n)\phi_n = \varepsilon\phi_n. \quad (30)$$

Orbitale od različitih kvantnih jama su iste, osim što se razlikuju po položaju:

$$\phi_n = \phi(x - x_n), \quad (31)$$

gde je  $x_n$  položaj  $n$ -te kvantne jame.

Talasnu funkciju elektrona u razmatranom jednodimenzionom kristalu predstavljamo kao linearnu kombinaciju

$$\Psi = \sum_n c_n \phi_n. \quad (32)$$

Slično kao za dve spregnute kvantne jame, korišćenje prethodne smene dovodi do generalisanog svojstvenog problema:

$$Hc = ESC. \quad (33)$$

Ovde su, međutim, matrice  $H$  i  $S$  beskonačne. Za jednodimenzioni kristal može se koristiti Blochova teorema, po kojoj je:

$$\Psi_k = \sum_n c_n^{(k)} \phi_n, \quad (34)$$

gde su:

$$c_n^{(k)} = e^{ikx_n} = e^{ikna}. \quad (35)$$

Ovo je *ansatz* (opravdan izbor). U ovim relacijama  $k$  označava talasni vektor (kvantni broj elektrona u kristalu), a  $n$  je oznaka jame.

Posmatrajmo jednu vrstu  $Hc = ESC$ :

$$\sum_n H_{mn} e^{ikna} = E(k) \sum_n S_{mn} e^{ikna}. \quad (36)$$

Ova jednačina važi za svako  $m$ . Matrični elementi hamiltonijan su:

$$H_{mn} = \int \phi_m^* (\hat{T} + V_n + \sum_{l \neq n} V_l) \phi_n dx = \varepsilon S_{mn} + \sum_{l \neq n} V_{mn}^{(l)}. \quad (37)$$

Matrični elementi uključuju 3 sajta:  $m$  i  $n$  za dve orbitale i  $l$  za jamu. U većini situacija, matrični elementi  $V_{mn}^{(l)}$  su mali, osim između najbližih kvantnih jama i njima pridruženih orbitala, što čini osnovu *aproksimacije najbližih suseda*. Ovi matrični elementi imaju istu vrednost kao kod dve spregnute kvantne jame. Dijagonalni matrični elementi su:

$$H_{mm} = \varepsilon S_{mm} + V_{mm}^{(m-1)} + V_{mm}^{(m+1)} = \varepsilon - 2c. \quad (38)$$

Ovde je  $c$  polje kristala: očekivana vrednost potencijala jame  $m \pm 1$  u orbitali jame  $m$ :

$$-c = V_{mm}^{(m \pm 1)}. \quad (39)$$

U aproksimaciji najbližih suseda, samo su  $H_{m,m \pm 1}$  različiti od nule:

$$H_{m,m \pm 1} = \varepsilon S_{m,m \pm 1} + V_{m,m \pm 1}^{(m)} = \varepsilon s - t. \quad (40)$$

Ovde je:

$$s = S_{m,m \pm 1}, \quad (41)$$

$$-t = V_{m,m \pm 1}^{(m)}. \quad (42)$$

Na osnovu izloženog, leva strana jednačine (36) postaje:

$$\sum_n H_{mn} e^{ikna} \approx (H_{mm} + H_{m,m+1} e^{ika} + H_{m,m-1} e^{-ika}) e^{ikma}, \quad (43)$$

odnosno:

$$\sum_n H_{mn} e^{ikna} \approx [\varepsilon - 2c + 2(\varepsilon s - t) \cos ka] e^{ikma}. \quad (44)$$

Slično prethodnom, desna strana (36) postaje:

$$\sum_n S_{mn} e^{ikna} \approx (1 + 2s \cos ka) e^{ikma}. \quad (45)$$

Disperziona relacija  $E(k)$  u posmatranom jednodimenzionom kristalu je:

$$E(k) = \frac{\sum_n H_{mn} e^{ikna}}{\sum_n S_{mn} e^{ikna}} = \frac{\varepsilon - 2c + 2(\varepsilon s - t) \cos ka}{1 + 2s \cos ka}. \quad (46)$$

Ova disperziona relacije se dalje može transformisati u:

$$E(k) = \frac{\varepsilon(1 + 2s) \cos ka - 2c - 2t \cos ka}{1 + 2s \cos ka} = \varepsilon - 2 \frac{c + t \cos ka}{1 + 2s \cos ka} \approx \varepsilon - 2t \cos ka. \quad (47)$$

Disperziona relacija je, dakle, opisana izrazom  $\cos ka$ , a širina zone je  $4t$ . Na sličan način se može modelovati elektronska struktura 2D i 3D kristala. Za dvodimenzionu kristalnu rešetku je, na primer

$$E(\vec{k}) \approx \varepsilon - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (48)$$

U ovom slučaju je širina zone  $8t$ . Širina zone zavisi od “sposobnosti” tunelovanja elektrona iz jedne jame u drugu. Elektroni koji su jako vezani (malo  $t$ ) formiraju uske zone, a elektroni koji su slabo vezani (veliko  $t$ ) formiraju široke zone. U praksi, integrali koji se javljaju u izrazima dobijenim po metodi jake veze, umesto da se računaju, dobijaju se fitovanjem teorijskih krivih na eksperimentalne podatke.

### 3. Metod jake veze za jednodimenzioni kristal sa dva neekvivalentna metoda u jediničnoj ćeliji

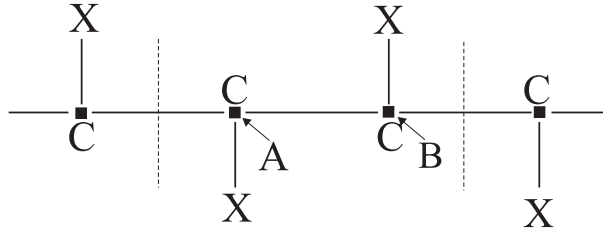
Posmatramo jednodimenzioni kristal sačinjen od  $N$  neekvivalentnih atoma. Primer je linijski makromolekul, koji je prikazan na slici 1 i koji se sastoji od atoma jednog elementa (A) koji su raspoređeni na jednoj pravoj liniji, a za koje su vezani atomi drugog elementa (X) raspoređeni sa dve strane ovog molekula. S obzirom da je okruženje susednih atoma raspoređenih na liniji različito, jedinična ćelija je sačinjena od dva ovakva atoma, zajedno sa dva X atoma. Pretpostavimo da je konstanta rešetke ovog kristala  $a$ . Uzimamo samo jednu orbitalu po atomu i smatramo da postoji preklapanje samo između najbližih suseda.

Vektor rešetke (duž pravca označenog indeksom 1) je:

$$\vec{a}_1 = (a, 0, 0). \quad (49)$$

Vektor recipročne rešetke je:

$$\vec{b}_1 = (2\pi/a, 0, 0), \quad (50)$$



Sl. 1. Linijski makromolekul sa neekivalentnim atomima u jediničnoj ćeliji čije su granice označene isprekidanim linijama. Neekvivalentni atomi ugljenika su označeni sa  $A$  i  $B$ .

a Brillouinova zona je smeštena u:

$$-a/\pi \leq k \leq a/\pi. \quad (51)$$

U metodu jake veze Blohove funkcije se sastoje od svojstvenih funkcija atoma  $A$  i  $B$ :

$$\Phi_j(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x_i} e^{ikx_i} \varphi_j(x - x_i), \quad i = A, B. \quad (52)$$

Pri računanju dijagonalnih elemenata transfer matrice zanemarićemo preklapanje atoma iste vrste u različitim jediničnim ćelijama. Elementi transfer matrice su:

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{x_n=x'_n} e^{ik(x-x')} \langle \varphi_A(x - x'_n) | H | \varphi_A(x - x_n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{x_n=x'_n} E_0. \quad (53)$$

Za vandijagonalne matrične elemente, najveću vrednost imaju oni od susednih atoma  $A$  i  $B$  (atomi  $B$  su pomereni za  $\pm a/2$  u odnosu na atom  $A$ ):

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{x_n} \left[ e^{ika/2} \langle \varphi_A(x - x_n) | \hat{H} | \varphi_B(x - x_n - a/2) \rangle + e^{-ika/2} \langle \varphi_A(x - x_n) | \hat{H} | \varphi_B(x - x_n + a/2) \rangle \right] = 2t \cos(ka/2). \quad (54)$$

Dva matrična elementa koja se pojavljuju u poslednjem izrazu imaju istu vrednost i nazivaju se *transfer integral*  $t$ :

$$t = \langle \varphi_A(x) | H | \varphi_B(x \pm a/2) \rangle. \quad (55)$$

Ako su talasne funkcije jake veze realne, transfer matrica  $H$  je simetrična:

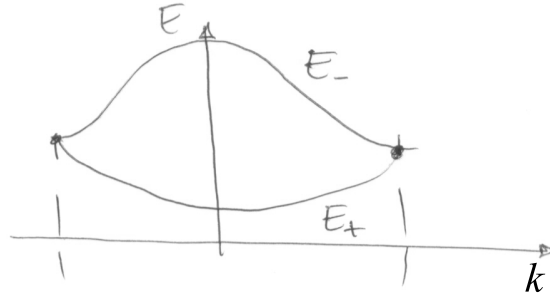
$$H_{BA} = H_{AB}. \quad (56)$$

Na sličan način se računaju elementi matrice preklapanja. S obzirom da su funkcije normirane:

$$S_{AA} = S_{BB} = 1. \quad (57)$$

Slično se dobija:

$$S_{AB} = S_{BA} = 2s \cos(ka/2), \quad (58)$$



Sl. 2. Svojstvene vrednosti energije u jednodimenzionom kristalu sa dva atoma po jediničnoj ćeliji.

gde je  $s$  integral preklapanja između najbližih atoma:

$$s = \langle \varphi_A(x) | \varphi_B(x \pm a/2) \rangle. \quad (59)$$

Sekularna jednačina je:

$$\begin{vmatrix} E_0 - E & 2(t - sE) \cos(ka/2) \\ 2(t - sE) \cos(ka/2) & E_0 - E \end{vmatrix} = 0$$

$$= (E_0 - E)^2 - 4(t - sE)^2 \cos^2(ka/2) = 0. \quad (60)$$

Disperziona relacija je:

$$E_{\pm} = \frac{E_0 \pm 2t \cos(ka/2)}{1 \pm 2s \cos(ka/2)}, \quad (-\pi/a < k < \pi/a). \quad (61)$$

$E_+$  i  $E_-$  se nazivaju vezujuća i antivezujuća zona. S obzirom da je  $t < 0$ ,  $E_+ < E_-$ . Nivoi su degenerisani u  $ka = \pm\pi$ , tj na granicama Brillouinove zone, kao što je prikazano na slici 2. U  $k = \pm\pi/a$ , vrednosti energije su  $E_{\pm} = E_0$ .

Ovaj model se može koristiti za opis elektronske strukture poliacetilena. S obzirom da svaki atom daje po jedan elektron, oba elektrona zauzimaju stanja u vezujućoj zoni, na taj način smanjujući ukupnu energiju u odnosu na energiju svakog pojedinačnog atoma.

## 4. Opšta formulacija metoda jake veze

Talasna funkcija elektrona u kristalnoj rešetki mora zadovoljiti Blochovu teoremu:

$$T_{\vec{a}} \Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Psi(\vec{r}), \quad (62)$$

gde  $\vec{a}$  označava vektor rešetke,  $\vec{k}$  je talasni vektor elektrona, a  $T_{\vec{a}}$  je operator translacije za vektor  $\vec{a}$ . Blochova teorema je posledica translatorne simetrije kristala i zadovoljena je za *talasne funkcije jake veze* (ovo je *ansatz*, odnosno opravdani izbor):

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (63)$$

Ovde je  $\vec{R}_i$  vektor položaja atoma u rešetki razmatranog kristala;  $\varphi_j$  označava atomsku talasnu funkciju (talasnu funkciju elektrona u stanju  $j$  izolovanog atoma koji čini dati kristal u stanju  $j$ ); pri tome ćemo uzimati u obzir  $n$  orbitala atoma po primitivnoj ćeliji kristala (treba uočiti da neki atomi mogu biti neekvivalentni), što znači da treba konstruisati  $n$  talasnih funkcija jake veze.  $1/\sqrt{N}$  u poslednjem izrazu je normalizaciona konstanta, koja je dobijena pod uslovom da ne postoji preklapanje između atomskih talasnih funkcija susednih atoma. Treba primetiti da su atomske talasne funkcije locirane na mestu  $\vec{R}_i$  ortogonalne i lokalizovane, tako da njihova vrednost brzo opada sa rastojanjem od  $\vec{R}_i$ .

Fazni faktor  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}$  u izrazu za talasnu funkciju jake veze uspostavlja translatornu periodičnost:

$$\begin{aligned}\Phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \varphi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}_i) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{a})} \varphi_j(\vec{r} - (\vec{R}_i - \vec{a})) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}).\end{aligned}\quad (64)$$

U najopštijem slučaju, svojstvene funkcije elektrona u čvrstom telu mogu se predstaviti kao linearne kombinacije talasnih funkcija jake veze  $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$  (njih ukupno  $n$ ):

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j=1}^n c_j(\vec{k}) \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \quad (65)$$

gde su  $c_j$  koeficijenti ekspanzije. Primetimo da ova funkcija zadovoljava Blochovu teoremu, jer je zadovoljavaju talasne funkcije jake veze  $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$ .

Funkciju  $\Psi(\vec{k}, \vec{r})$  koristimo kao probnu funkciju u *linearnom varijacionom metodu*:

$$E(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (66)$$

gde  $\hat{H}$  predstavlja hamiltonijan elektrona u kristalu. Podsetimo se da se u linearnom varijacionom metodu minimizacija funkcionala energije svodi na rešavanje generalisanog svojstvenog problema:

$$\sum_{j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) c_{j'} = E(\vec{k}) \sum_{j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) c_{j'}, \quad (67)$$

odnosno:

$$Hc = ESCc. \quad (68)$$

Ovde je  $H_{jj'} = \langle \Phi_j | \hat{H} | \Phi_{j'} \rangle$  element transfer matrice, a  $S_{jj'} = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle$  je element matrice preklapanja.  $c$  označava kolonu koeficijenata ekspanzije:

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}. \quad (69)$$

Svojstvene vrednosti za energiju se dobijaju rešavanjem sekularne jednačine:

$$\det(H - ES) = 0. \quad (70)$$

Ovo je algebarska jednačina reda  $n$  za svojstvenu vrednost energije za dato  $\vec{k}$ . Njenim rešavanjem se dobija  $n$  svojstvenih vrednosti energije  $E_j(\vec{k})$  za dato  $k$ . Na primer, u grafenu se uzimaju dve atomske funkcije ( $p_z$  orbitale) po primitivnoj ćeliji, tako da su rezultat proračuna disperzione relacije za dve zone, označene sa  $\pi$  i  $\pi^*$ , kao što će biti pokazano kasnije.

U opštem slučaju, postupak računanja zonske strukture poluprovodnika pomoću metoda jake veze je sledeći:

1. odredi se jedinična (primitivna) ćelija kristalne rešetke i specificiraju jedinični vektori  $\vec{a}_i$ . Odrede se koordinate atoma u jediničnoj ćeliji i izabere  $n$  atomskih orbitala;
2. odredi se prva Brillouinova zona i vektori recipročne rešetke. Odrede se pravci visoke simetrije u Brillouinovoj zoni i karakteristične tačke na tim pravcima;
3. za izabrane vrednosti  $\vec{k}$ , izračunaju se matricni elementi  $H_{mn}$  i  $S_{mn}$ ;
4. za dati skup tačaka  $\vec{k}$  reši se sekularna jednačina, tj dobijaju se svojstvene vrednosti  $E_j(\vec{k})$  i koeficijenti  $c_j(\vec{k})$ ;  $j$  je indeks zone.

## 5. Karakteristike metoda jake veze

Metod jake veze se često koristi za opis poluprovodnika sa: (1) uskim energijskim procepom, (2) izraženom neparaboličnošću zone, i (3) poluprovodnika sa indirektnim energijskim procepom. Rezultati modelovanja pomoću metoda jake veze su detaljniji u odnosu na model efektivnih masa.

Dobre osobine metoda jake veze za primenu su:

1. može se relativno jednostavno implementirati;
2. broj bazisnih funkcija je mali u poređenju sa metodima razvoja u ravanske talase (metodi razvoja u ravanske talase nisu eksplicitno obrađeni u ovom kursu);
3. za razliku od  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  metoda, metod jake veze omogućava računanje zonske strukture u celoj Brillouinovoj zoni;
4. često se mogu izvesti analitičke formule za fizičke osobine od interesa;
5. pomoću metoda jake veze mogu se razmotriti ultratanki slojevi (debljine čak 1 monosloja);
6. metod jake veze omogućava razmatranje rekonstrukcije atoma na površini i računanje elektronske strukture klastera sačinjenih od malog broja atoma;
7. u metod jake veze je uključena simetrija kristala i mogu se proceniti mešanje između zona i efekti inverzione asimetrije;
8. tačnost proračuna je vrlo često zadovoljavajuća i može se povećati na sistemski način (uključivanjem preklapanja sa atomskim orbitalama daljih suseda, na primer);
9. mogu se na jedinstven način razmotriti efekti rasejanja.

Nedostaci metoda jake veze su sledeći:

1. atomske orbitale ne opisuju precizno oblast između atoma u kristalu;
2. metod jake veze nije samosaglasni metod;
3. postoje ograničenja u primeni na nanodstrukture sačinjene od velikog broja atoma (dimenzije matrica  $H$  i  $S$  postaju velike);
4. tačnost se ne može povećati na jednostavan način; recimo, metod jake veze sa preklapanjem između najbližih suseda se značajno razlikuje od metoda jake veze koji uključuje preklapanje između talasnih funkcija daljih suseda.



# 5

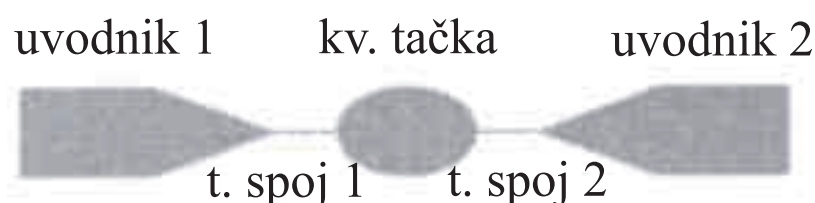
## Jednoelektronske naprave

### 1. Kapacitivnost kvantne tačke

Kvantnu tačku shvatamo kao malo naelektrisano ostrvo koje je povezano sa uvodnicima (žicama) koji obezbeđuju strujni tok kroz kvantnu tačku. Ukoliko je kvantna tačka (skoro potpuno) izolovana od okoline, tako da je moguće samo slabo tunelovanje između tačke i uvodnika, može se pojaviti fenomen jednoelektronskog tunelovanja. Kvantna tačka se još naziva *Coulombovo ostrvo* i mogu se realizovati na razne načine: kao samoasemblirane, litografski definisane i slično.

Kada elektron tuneluje iz uvodnika u kvantnu tačku, dolazi do preraspodele naelektrisanja na elektrodi, što dovodi do promene elektrostatičkog potencijala kvantne tačke. U malim kvantnim tačkama, promena potencijala može biti veća od termalne energije  $k_B T$ , posebno na niskoj temperaturi. Velika promena elektrostatičke energije usled transfera naelektrisanja dovodi do energijskog procepa (Coulombov procep) i do fenomena Coulombove blokade, gde je tunelovanje elektrona zabranjeno sve dok se energija naelektrisanja tačke ne postigne pomoću napona polarizacije.

Posmatrajmo kvantnu tačku oblika diska napravljenu konfiniranjem 2DEG (litografski definisanu, na primer). Ovu kvantnu tačku ćemo posmatrati kao metalni disk koji je smešten u homogenu dielektričnu sredinu relativne permitivnosti  $\epsilon$ . Samokapacitivnost ove kvantne tačke



Sl. 1. Skica jednoelektronske naprave: kvantna tačka je povezana sa uvodnicima pomoću tunelskih spojeva.

je:

$$C = \frac{dQ}{dU} = 8\epsilon_s\epsilon_0 R. \quad (1)$$

Ovde je  $dQ$  dodatno naelektrisanje u kvantnoj tački,  $dU$  promena potencijala tačke usled dodatnog naelektrisanja, a  $R$  poluprečnik kvantne tačke. Za kvantnu tačku poluprečnika  $R = 100$  nm i relativne permitivnost  $\epsilon = 13$ , vrednost samokapacitivnosti kvantne tačke je  $C = 92$  aF.

Pretpostavimo da je naelektrisanje diska  $-en$ , gde je  $n$  broj elektrona u kvantnoj tački. Elektrostatika energija kvantne tačke je:

$$E_{el}(n) = \frac{e^2 n^2}{2C} = \frac{e^2 n^2}{16\epsilon\epsilon_0 R}. \quad (2)$$

Lako se uoči da je elektrostatika energija ostrva proporcionalna  $n^2$  i da je obrnuto proporcionalna veličini ostrva  $R$ . Povećanje elektrostatika energije usled dodavanja još jednog elektrona u ostrvo je:

$$\Delta E_{el} = E_{el}(n+1) - E_{el}(n) = \frac{e^2}{C} \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (3)$$

Definišimo *energiju naelektrisavanja* kvantne tačke:

$$E_C = \Delta E_{el}(n+1) - \Delta E_{el}(n) = \frac{e^2}{C} = \frac{e^2}{8\epsilon\epsilon_0 R}. \quad (4)$$

Za gore navedene podatke  $E_C = e^2/C \approx 1,7$  meV.

Uporedimo sada energiju naelektrisavanja sa energijom kvantovanja u kvantnoj tački. Pretpostavimo da je kvantna tačka realizovana konfiniranjem 2DEG. Podsetimo se da je gustina stanja 2DEG:

$$D(E) = S \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_i \Theta(E - E_{i0}). \quad (5)$$

Pretpostavimo da su stanja u kvantnoj tački nastala samo od osnovne podzone i izaberimo energiju dna podzone za referentnu vrednost energije. Broj elektrona u kvantnoj tački sa energijama manjim od Fermijeve energije jednak je:

$$n = \pi r^2 \frac{m}{\pi \hbar^2} E_F. \quad (6)$$

Ukupna energija konfiniranja sistema od  $n$  elektrona je:

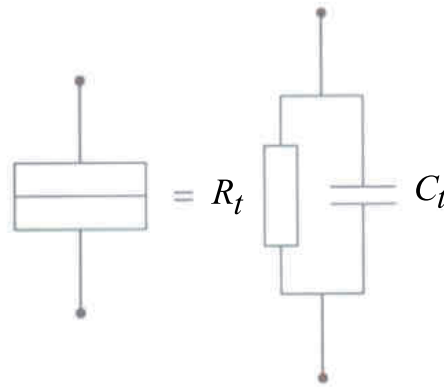
$$E_q(n) = \int_0^{E_F} E \pi R^2 \frac{m}{\pi \hbar^2} dE = \pi R^2 \frac{m}{2\pi \hbar^2} E_F^2 = \frac{\hbar^2}{2mR^2} n^2. \quad (7)$$

Energija konfiniranja je, dakle, proporcionalna kvadratu broja elektrona. Promena energije konfiniranja usled dodavanja jednog elektrona je:

$$\Delta E_q = E_q(n+1) - E_q(n) = \frac{\hbar^2}{2mR^2} ((n+1)^2 - n^2) \approx \frac{\hbar^2}{mR^2} n. \quad (8)$$

Razlika energija jednočestičnih nivoa je:

$$\Delta = \Delta E_q(n+1) - \Delta E_q(n) = \frac{\hbar^2}{mR^2}. \quad (9)$$



Sl. 2. Tunelski spoj je paralelna veza kondenzatora kapacitivnosti i otpornika.

Za  $R = 100$  nm,  $\Delta = 0,11$  meV, što je za red veličine manje od  $\Delta E_C$ .

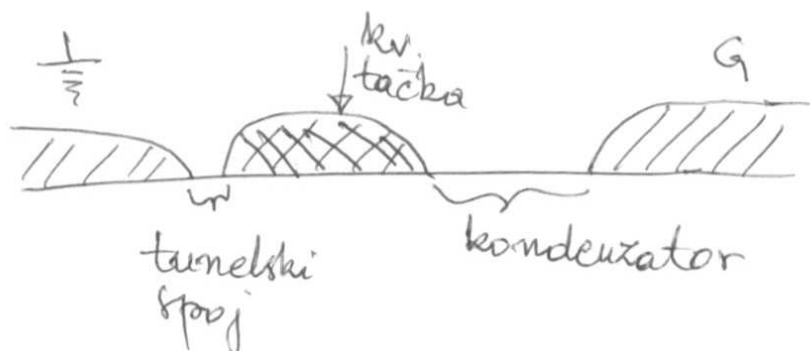
Zavisnosti elektrostaticke energije ostrva i energije konfiniranja se ukrštaju za vrednost poluprečnika tačke reda veličine efektivnog Bohrovog radijusa (to je Bohrov radijus za masu jednaku efektivnoj masi i permitivnost jednaku permitivnosti materijala tačke). Poluprečnik litografski definisanih kvantnih tačaka je veći od Bohrovog radijusa, tako da dominira Coulombova energija, dok je u samoasembliranim kvantnim tačkama poluprečnik kvantne tačke manji od Bohrovog radijusa, tako da se efekti kvantnog konfiniranja moraju uzeti u obzir. Dakle, za dovoljno velike kvantne tačke efekti kvantnog konfiniranja se mogu zanemariti, ali da bi se uočili jednočestični efekti tačka ne sme biti prevelika, jer je kapacitivnost takve kvantne tačke velika, što dovodi do smanjenja energije naelektrisanja, koja za datu temperaturu može biti manja od termalne energije  $k_B T$ , tako da se jednočestični efekti ne uočavaju (videti kasnije).

U GaAs efektivni Bohrov radijus je reda  $a_B^* \sim 10$  nm, tako da su u litografski definisanim tačkama baziranim na elektronskom gasu u ovom materijalu efekti Coulombove interakcije dominantni. S druge strane, u InAs efektivni Bohrov radijus je reda  $a_B^* \sim 30$  nm, tako da su efekti konfiniranja u samoasembliranim kvantnim tačkama tipične dimenzije  $R = 20$  nm dominantni. Mi ćemo se u daljem baviti jednoelektronskim transportom kroz litografski definisane tačke, podrazumevajući da je ispunjen uslov  $E_C \gg k_B T$ .

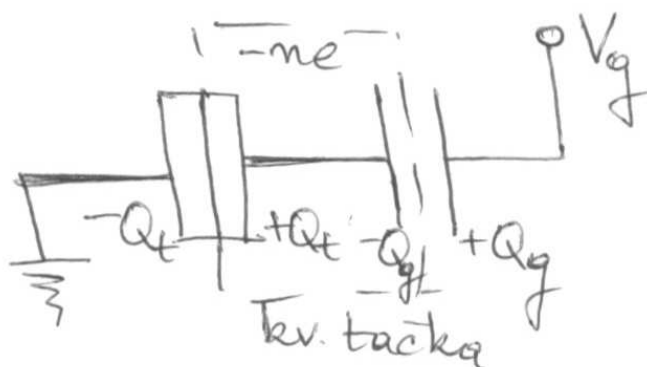
## 2. Jednoelektronska kutija

U jednoelektronskim napravama kontroliše se transport jednog elektrona. Bitni delovi svake jednoelektronske naprave su kvantna tačka i tunelski spoj. Tunelski spoj je paralelna veza kondenzatora (tunelske) kapacitivnosti  $C_t$  i otpornika (tunelske) otpornosti  $R_t$ , kao što je prikazano na slici.

Poprečni presek najjednostavnije komponente ovog tipa, jednoelektronske kutije, prikazan je



Sl. 3. Principijski izgled jednoelektronske kutije: kvantna tačka se nalazi između dve elektrode. Između mase i kvantne tačke je tunelski spoj, a između gejtne i kvantne tačke je formiran kondenzator.



Sl. 4. Ekvivalentno kolo jednoelektronske kutije.

na slici 3. Leva elektroda se nalazi na masi, a desna elektroda predstavlja elektrodu gejt. Gejt kontroliše transport nosilaca kroz kvantnu tačku. Elektron ne može da tuneluje kroz kondenzator formiran između kvantne tačke i gejtne, već samo kroz tunelski spoj između mase i kvantne tačke. Porastom napona na gejt dolazi do akumulacije naelektrisanja u kvantnoj tački. Elektroni koji su ušli u kvantnu tačku deluju na sledeći elektron koji ulazi kroz tunelski spoj odbojnom silom, tako da je transfer elektrona u kvantnu tačku onemogućen, sve dok napon na gejtu ne poraste do odgovarajuće vrednosti (*Coulombova blokada*). Ekvivalentno kolo jednoelektronske kutije je prikazano na slici 4.

Pretpostavimo da se  $n$  elektrona nalazi u kvantnoj tački. Naelektrisanje kvantne tačke je, dakle  $-ne$ . Na niskoj temperaturi elektroni nemaju dovoljnu veliku termičku energiju da uđu u kvantnu tačku. Da bi postojala Coulombova blokada:

$$E_C \gg k_B T, \quad (10)$$

gde  $E_C$  označava energiju naelektrisanja kvantne tačke dodatnim elektronom. Prema tome,

uslov za Coulombovu blokadu je:

$$\frac{e^2}{C} \gg k_B T, \quad (11)$$

gde je  $C$  samokapacitivnost kvantne tačke, a  $T$  je temperatura sistema. Ako je  $T$  visoko, transport nije dobro kontrolisan, zbog termičkih efekata.

Ako nije bilo elektrona u kvantnoj tački, elektron ulazi u kvantnu tačku, ako napon na gejtju poraste iznad određene vrednosti. Dalji rast  $V_g$  dovodi do porasta broja elektrona u kvantnoj tački i to za određene vrednosti  $V_g$ .

Da bi Coulombova blokada postojala, pored  $E_C \gg k_B T$ , mora biti:

$$R_t \gg \frac{h}{e^2}. \quad (12)$$

Ovaj uslov znači da su *zanemarljive fluktuacije u broju elektrona u kvantnoj tački*. Drugim rečima, elektroni su lokalizovani u tački. Ovaj uslov se može izvesti na osnovu relacije neodređenosti:

$$\Delta E \Delta t > h. \quad (13)$$

Uzmimo najpre da je neodređenost energije naelektrisanja kvantne tačke reda same vrednosti energije naelektrisanja:

$$\Delta E \sim \frac{e^2}{C}. \quad (14)$$

Vreme naelektrisanja je reda vremenske konstante:

$$\Delta t = R_t C. \quad (15)$$

Na osnovu poslednje 3 relacije sledi:

$$\Delta E \Delta t \sim \frac{e^2}{C} R_t C = e^2 R_t > h, \quad (16)$$

odakle sledi:

$$R_t > \frac{h}{e^2}. \quad (17)$$

Ova procena je dobijena na osnovu fluktuacije energije naelektrisanja koja je reda same energije naelektrisanja. Da bi ova fluktuacija bila mnogo manja od  $E_C$ , mora biti:

$$R_t \gg \frac{h}{e^2}, \quad (18)$$

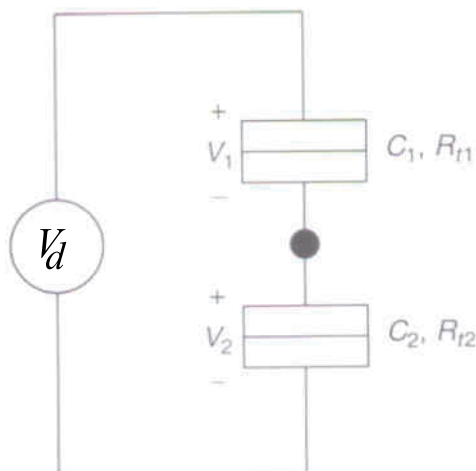
gde je  $h/e^2$  kvant otpornosti tj recipročna vrednost kvanta provodnosti

Može se pokazati da je uslov za egzistenciju  $n$  elektrona u kvantnoj tački:

$$\left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g} < V_g < \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g}. \quad (19)$$

Za  $n = 0$  ovaj uslov odgovara:

$$-\frac{1}{2} \frac{e}{C_g} < V_g < \frac{1}{2} \frac{e}{C_g}. \quad (20)$$



Sl. 5. Ekvivalentno kolo jednoelektronske naprave sa dva tunelska spoja i metalnom tačkom.

### 3. Coulombova blokada u strukturi sa dva tunelska spoja

Efekti kvantnog konfiniranja se mogu zanemariti u litografski definisanim kvantnim tačkama. Dominantni jednočestični efekat je energija naelektrisanja usled transfera individualnih elektrona,  $e^2/C$ . Kao parametar tunelovanja se koristi elektrostatička energija za tunelovanje elektrona. Ova energija se naziva *Coulombov procep*.

Posmatramo kvanntu tačku koja je slabo spregnuto pomoću tankih izolatora (tunelskih spojeva) sa metalnim uvodnicima, kao što je prikazano na slici na početku ovog poglavlja. Smatramo da su uvodnici priključeni na naponski izvor  $V_d$ , tako da je ekvivalentno kolo prikazano na slici. Po pravilu je tunelska barijera vrlo visoka i tanka. Zbog toga je tunelska otpornost praktično nezavisna od pada napona na spoju. U analizi koja sledi pretpostavlja se *model sekvencijalnog tunelovanja*. Elektroni koji tuneluju kroz jedan ili drugi spoj se trenutno relaksiraju rasejanjem na drugim elektronima, tako da se može zanemariti simultano tunelovanje kroz obe barijere.

Tunelska otpornost se razlikuje od obične omske otpornosti. Kod uobičajenih otpornika, tok naelektrisanja je kvazi-kontinualan i menja se skoro trenutno kao odziv na promenu električnog polja, sa vremenskom konstantom reda srednjeg vremena između dva sudara, što je reda ps. S druge strane, tunelovanje predstavlja injekciju individualnog elektrona i dešava se na više vremenskih skala. Vreme tunelovanja je vreme za tunelovanje sa jedne strane barijere na drugu i reda je 0,01 ps. Vreme između tunelskih događaja je reda tunelske struje podeljene sa  $e$  ( $\Delta t = I/e$ ). Za tipičnu vrednost struje reda nA, srednja vrednost između dva tunelska događaja je 100 ps, dakle 100 puta sporije od slučaja klasičnog otpornika. S druge strane, vreme preraspodele naelektrisanja na elektrodama usled tunelovanja je vrlo kratko. Prema tome, tunelski spojevi se mogu posmatrati kao idealni kondenzatori kroz koje naelektrisanje sporo curi.

Naelektrisanja kondenzatora koji predstavljaju tunnelske spojeve su:

$$Q_1 = C_1 V_1, \quad (21)$$

$$Q_2 = C_2 V_2. \quad (22)$$

Naelektrisanje ostrva  $Q$  je razlika ova dva naelektrisanja. Bez tunelovanja, nema injekcije nosilaca u ostrvo, tako da je ostrvo neutralno, a  $Q_1 = Q_2$ . Pomoću tunelovanja, višak naelektrisanja se akumulira na ostrvu:

$$Q = Q_2 - Q_1 = -ne, \quad (23)$$

gde je  $n = n_1 - n_2$  neto naelektrisanje *dodatnih* elektrona u ostrvu (od početnog trenutka do datog trenutka). Ovo naelektrisanje može biti pozitivno i negativno (voditi računa da se radi o dodatnom naelektrisanju!). Ovde je  $n_1$  broj elektrona koji tuneluju u ostrvo kroz spoj 1, dok je  $n_2$  broj elektrona koji tuneluju iz ostrva kroz spoj 2. Zbir napona na tunnelskim spojevima je primenjeni napon polarizacije  $V_d$  ( $V_d = V_1 + V_2$ ):

$$V_1 = \frac{1}{C_{eq}}(C_2 V_d + ne), \quad (24)$$

$$V_2 = \frac{1}{C_{eq}}(C_1 V_d - ne). \quad (25)$$

Ovde je  $C_{eq} = C_1 + C_2$  *kapacitivnost ostrva*. To je ekvivalentna kapacitivnost dva tunnelska spoja, sa kratko spojenim naponskim izvorom. Elektrostatička energija uskladištena u kondenzatorima (energija naelektrisavanja ostrva) data je sa:

$$E_C = \frac{Q_1^2}{2C_1} + \frac{Q_2^2}{2C_2}. \quad (26)$$

Na osnovu prethodnih jednačina, lako se dobije:

$$E_C = \frac{1}{2C_{eq}}(C_1 C_2 V_d^2 + Q^2). \quad (27)$$

Pored  $E_C$ , pri razmatranju energijskog balansa, treba uzeti u obzir rad naponskih izvora pri transferu naelektrisanja u i izvan ostrva pomoću tunelovanja. Rad naponskih izvora je:

$$A_C = \int dt V_d I(t) dt = V_d \Delta Q, \quad (28)$$

gde je  $\Delta Q$  ukupno naelektrisanje iz naponskog izvora, koje uključuje elektrone koji tuneluju u ostrvo i polarizaciono naelektrisanje koje se formira kao odgovor na promene elektrostatičkog potencijala ostrva.

Promena naelektrisanja ostrva usled tunelovanja elektrona kroz 2. barijeru iz ostrva ( $n'_2 = n_2 + 1$ ) dovodi do promene naelektrisanja ostrva ( $Q' = Q + e$ ; smanjuje negativno naelektrisanje) i  $n' = n - 1$ ). Ovo dovodi do promene napona na krajevima spoja broj 1:

$$V'_1 = V_1 - \frac{e}{C_{eq}}. \quad (29)$$

To dovodi do toka polarizacionog naelektrisanja iz naponskog izvora

$$\Delta Q = -eC_1/C_{eq}. \quad (30)$$

Ukupan rad za prenos  $n_2$  elektrona kroz tunelski spoj broj 2 ka uvodniku je:

$$A_2 = -n_2 e V_d \frac{C_1}{C_{eq}}. \quad (31)$$

Slično se može zaključiti da je rad za prenos  $n_1$  naelektrisanja kroz spoj broj 1 dat sa:

$$A_1 = -n_1 e V_d \frac{C_2}{C_{eq}}. \quad (32)$$

Ukupna energija celog kola, uključiv naponski izvor je:

$$E(n_1, n_2) = E_C - A_C = \frac{1}{2C_{eq}}(C_1 C_2 V_d^2 + Q^2) + \frac{eV_d}{C_{eq}}(C_1 n_2 + C_2 n_1). \quad (33)$$

Treba primetiti da se rad naponskih izvora računa sa znakom  $-$ , jer  $E$  ovde označava ukupnu električnu energiju. Naime, rad električnih sila pri transferu (pozitivnog) naelektrisanja od negativnog ka pozitivnom kraju je negativna, jer je električna sila suprotno usmerena. Može se lako zaključiti da ukoliko elektroni izlaze iz kvantne tačke, rad električnih sila je negativan, dok je rad pri transferu elektrona u kvantnu tačku pozitivan.

Na temperaturi  $T = 0$  K, tunelski prelazi koji povećavaju energiju sistema nisu dozvoljeni. Promena energije sistema usled tunelovanja elektrona kroz drugi spoj je:

$$\begin{aligned} \Delta E_2^\pm &= E(n_1, n_2) - E(n_1, n_2 \pm 1) \\ &= \frac{Q^2}{2C_{eq}} - \frac{(Q \pm e)^2}{2C_{eq}} \mp \frac{eV_d C_1}{C_{eq}} = \frac{e}{C_{eq}} \left[ -\frac{e}{2} \pm (ne - V_d C_1) \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

Slično, promena energije sistema usled tunelovanja elektrona kroz spoj broj 1 je:

$$\Delta E_1^\pm = E(n_1, n_2) - E(n_1 \pm 1, n_2) = \frac{e}{C_{eq}} \left[ -\frac{e}{2} \mp (ne + V_d C_2) \right]. \quad (35)$$

Samo su prelazi sa  $\Delta E_j^\pm > 0$  dozvoljeni na  $T = 0$  K.

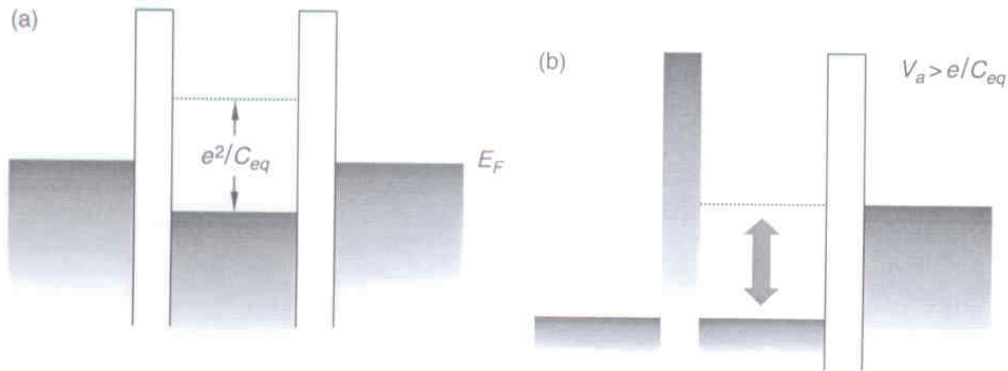
Pretpostavimo da je ostrvo električno neutralno za  $V_d = 0$ , tako da je  $n = 0$ . Prethodne jednačine postaju:

$$\Delta E_{1,2}^\pm = -\frac{e^2}{2C_{eq}} \pm \frac{eV_d C_{2,1}}{C_{eq}}. \quad (36)$$

Član koji predstavlja Coulombovu energiju ostrva je negativan i  $\Delta E < 0$ , sve dok  $V_d$  ne premaši prag, koji zavisi od manje od dve kapacitivnosti tunelskih spojeva. Za  $C_1 = C_2 = C$ , uslov  $\Delta E > 0$  je ispunjen za

$$|V_d| > \frac{e}{C_{eq}}. \quad (37)$$

Za  $|V_d| \leq e/C_{eq}$ , struja ne teče kroz tunelske spojeve, što se uočava u strujno-naponskoj karakteristici  $I_d(V_d)$ . Ova pojava se naziva *Coulombova blokada*, a opseg vrednosti  $V_d$ ,  $-e/C_{eq} \leq$



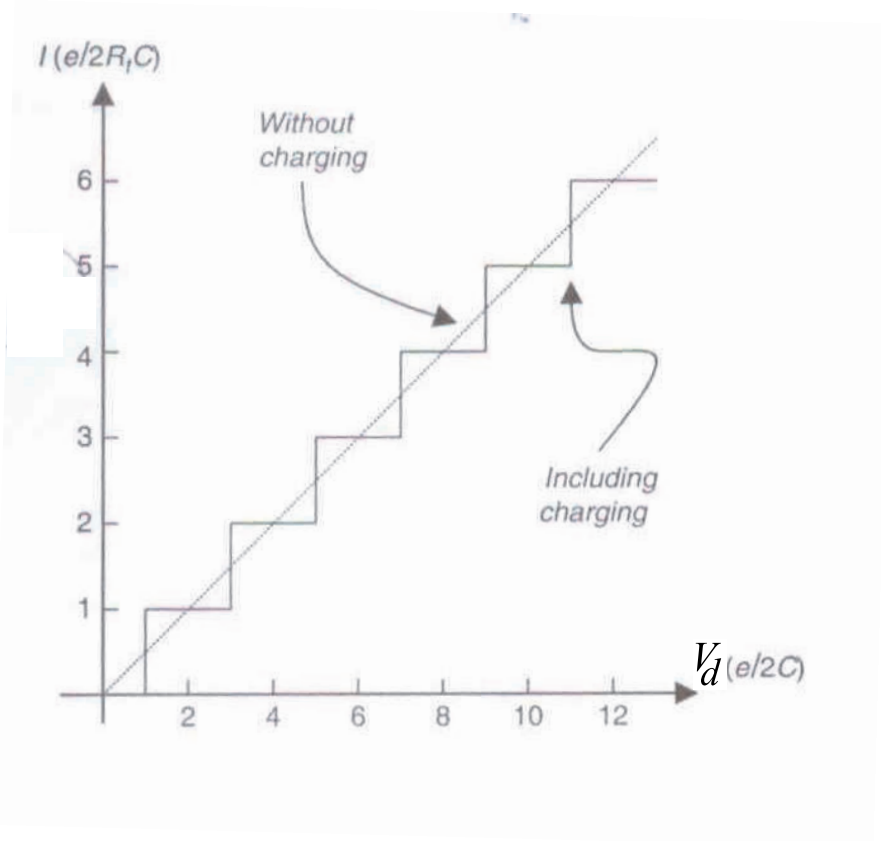
Sl. 6. Energijski dijagram koji ilustruje pojavu Coulombovog procepa u strukturi od dva tunelska spoja. Na slici  $V_d$  označava primenjeni napon polarizacije ( $V_d$  u tekstu).

$V_d \leq e/C_{eq}$ , naziva se *oblast Coulombove blokade*. Coulombova blokada je posledica dodatne Coulombove energije  $e^2/(2C_{eq})$  koju elektron mora imati da bi tunelovao u ostrvo ili izvan ostrva. Efekat Coulombove blokade je oblast vrlo niske provodnosti u okolini koordinatnog početka strujno-naponske karakteristike. Da bi se Coulombova blokada uočila potrebno je da  $C_{eq}$  bude dovoljno malo. Ako spojevi imaju veliku površinu,  $C_{eq}$  je veliko, tako da se oblast Coulombove blokade ne može uočiti, a struja teče usled konačne tunelske otpornosti spojeva,  $R_{t1}$  i  $R_{t2}$ .

Na slici je prikazan ravnotežni zonski dijagram sistema sa dve tunelske barijere za  $C_1 = C_2 = C$ . Na Fermijevoj energiji metalnog ostrva postoji Coulombov procep  $e^2/C_{eq}$ : pola procepa je iznad, a pola ispod originalne Fermijeve energije. Na energiji Fermijevog nivoa metalnih uvodnika, ne postoji stanje u ostrvu na koje bi elektroni iz elektroda tunelovali. Slično, za elektrone u ostrvu nema praznih stanja na koja bi tunelovali.

Ako napon na krajevima strukture poraste iznad vrednosti  $e/(2C)$  ( $V_d > e/(2C)$ ), jedan elektron će tunelovati u ostrvo i broj elektrona je  $n = 1$ . Tada se Fermijeva energija u tački poveća za  $e/C_{eq}$  (strelica na gore na slici), ali postoji procep koji sprečava tunelovanje drugog elektrona iz desne elektrode, sve dok  $V_d > 3e/2C$ . U ovoj oblasti ( $e/2C < V_d < 3e/2C$ ), ne postoji tok drugog elektrona, sve dok dodatni elektron ne napusti jamu tunelovanjem u levu elektrodu, što dovodi do smanjenja Fermijeve energije u ostrvu. Prema tome, procesi tunelovanja elektrona u i van tačke su korelisani, a struja je konačna.

Zavisnost struje od napona polarizacije je stepenasta, ali samo pod uslovom da su spojevi asimetrični, tj ako su bilo kapacitivnosti bilo tunelske otpornosti spojeva različite. Pretpostavimo da su kapacitivnosti spojeva iste ( $C_1 = C_2 = C$ ), ali da su tunelske otpornosti različite, tako da je  $R_{t1} > R_{t2}$ . Za ovu situaciju, ograničavajući faktor je tunelovanje kroz prvu barijeru, tako da u opsegu napona za koji je  $\Delta E_2 > 0$  ostrvo ostaje u istom naelektrisanom stanju. Kada elektron tuneluje kroz spoj 1 napolje, drugi elektron tuneluje u tačku kroz spoj 2. Struja je u situaciji  $R_{t1}$  veće od  $R_{t2}$  određena padom napona na spoju 1, koji je za jednake



Sl. 7. Idealna strujno-naponska karakteristika asimetričnog sistema sa dva tunelska spoja. Ako se ne uzmu u obzir efekti naelektrisanja, struja se menja linearno, inače se dobija stepenasta zavisnost. Za ovaj sistem je  $C_1 = C_2$  i  $R_{t1} \gg R_{t2}$ .

kapacitivnosti spojeva:

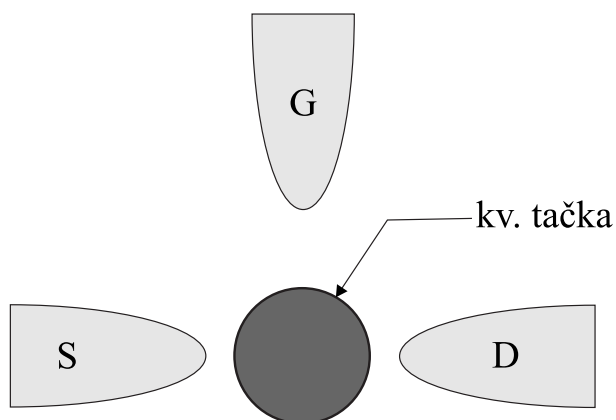
$$V_1 = \frac{V_d}{2} + \frac{ne}{C_{eq}}. \quad (38)$$

Napon na krajevima prvog spoja poraste za  $e/C_{eq}$ , kada  $n$  poraste usled tunelovanja kroz spoj 2. Struja poraste za:

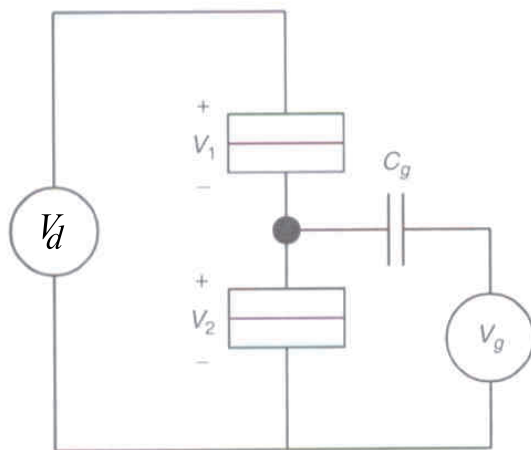
$$\Delta I \approx \frac{\Delta V_1}{R_{t1}} = \frac{e}{C_{eq} R_{t1}} = \frac{e}{2C R_{t1}}. \quad (39)$$

Struja se slabo menja između stepenika, tako da je strujno-naponska karakteristika stepenasta kao na slici.

Postojanje stepenika u strujno-naponskoj karakteristici zavisi od odnosa energije Coulombovog procepa i termalne energije  $k_B T$ . Kao što smo već diskutovali, da bi se eksperimentalno verifikovali jednočestični efekti, Coulombov procep mora biti veći od  $k_B T$ . Pored ovoga, kvantne fluktuacije u broju nosilaca u ostrvu  $n$ , treba da budu male da bi naelektrisanje bilo dobro lokalizovano u ostrvu ( $R_t > \frac{h}{e^2} = 25.81 \, \Omega$ ).



Sl. 8. Skica jednoelektronskog tranzistora: kvantna tačka se nalazi između dva tunelska spoja uz sors i drejn i kondenzatora uz gejt.



Sl. 9. Ekvivalentno kolo jednoelektronskog tranzistora.

#### 4. Jednoelektronski tranzistor

Ako se postavi kontakt gejtja, koji je kapacitivno spregnut sa ostrvom, realizuje se jednoelektronski tranzistor. Posmatrajmo kolo u koje je uključen jednoelektronski tranzistor. Nezavisni naponski izvor  $V_g$  je spregnut sa ostrvom pomoću kondenzatora kapacitivnosti  $C_g$ . Ovaj kondenzator je idealan, tj ima beskonačnu tunelsku otpornost. Napon gejtja promeni naelektrisanje ostrva za:

$$Q_g = C_g(V_g - V_2). \quad (40)$$

Naelektrisanje ostrva je:

$$Q = Q_2 - Q_1 - Q_g = -ne. \quad (41)$$

Koristeći još:

$$Q_1 = C_1 V_1, \quad (42)$$

$$Q_2 = C_2 V_2, \quad (43)$$

$$V_d = V_1 + V_2, \quad (44)$$

lako se dobije:

$$V_1 = \frac{1}{C_{eq}}((C_g + C_2)V_d - C_g V_g + ne), \quad (45)$$

$$V_2 = \frac{1}{C_{eq}}(C_1 V_d + C_g V_g - ne). \quad (46)$$

Ekvivalentna kapacitivnost ostrva se dobija ako se kratko spoje nezavisni naponski izvori:

$$C_{eq} = C_1 + C_2 + C_g. \quad (47)$$

Elektrostatika energija je:

$$E_C = \frac{1}{2C_{eq}}(C_g C_1 (V_d - V_g)^2 + C_1 C_2 V_a^2 + C_g C_2 V_g^2 + Q^2). \quad (48)$$

Rad naponskih izvora za tunelovanje kroz spojeve 1 i 2 uključuje rad naponskog izvora  $V_g$ :

$$A_C(n_2) = -n_2 \left[ \frac{C_1}{C_{eq}} e V_d + \frac{C_g}{C_{eq}} e V_g \right], \quad (49)$$

$$A_C(n_1) = -n_1 \left[ \frac{C_2}{C_{eq}} e V_d + \frac{C_g}{C_{eq}} e (V_d - V_g) \right]. \quad (50)$$

Ako elektron tuneluje kroz spoj 1, promena energije sistema je:

$$\begin{aligned} \Delta E_1^\pm &= \frac{Q^2}{2C_{eq}} - \frac{(Q \pm e)^2}{2C_{eq}} \mp \frac{e}{C_{eq}}((C_g + C_2)V_d - C_g V_g) \\ &= \frac{e}{C_{eq}} \left[ -\frac{e}{2} \mp (en + (C_g + C_2)V_a - C_g V_g) \right]. \end{aligned} \quad (51)$$

Za tunelovanje kroz spoj broj 2, promena energije je data sa:

$$\Delta E_2^\pm = \frac{Q^2}{2C_{eq}} - \frac{(Q \pm e)^2}{2C_{eq}} \mp \frac{e}{C_{eq}}(C_1 V_d + C_g V_g) = \frac{e}{C_{eq}} \left[ -\frac{e}{2} \pm (en - C_1 V_d - C_g V_g) \right]. \quad (52)$$

Napon gejta omogućava da se menja naelektrisanje ostrva i da se pomera oblast Coulombove blokade. U jednoelektronskom tranzistoru, stabilna oblast Coulombove blokade može se postići za  $n \neq 0$ . Uslov za tunelovanje je kao kod dva tunnelska spoja  $\Delta E_{1,2} > 0$ , tako da se energija sistema po tunelovanju smanjuje. Uslovi za tunelovanje su:

$$-\frac{e}{2} \mp (en + (C_g + C_2)V_d - C_g V_g) > 0, \quad (53)$$

$$-\frac{e}{2} \pm (en - C_1 V_d - C_g V_g) > 0. \quad (54)$$

Za svaku vrednost  $n$ , mogu se nacrtati četiri familije pravih linija  $V_d(V_g)$ . U preseku ovih krivih se dobijaju oblasti koje su osenčene u kojima tunelovanje nije moguće (oblasti stabilnosti). U ovim oblastima postoji Coulombova blokada. Svakoј oblasti odgovara različit broj dodatnih elektrona u ostrvu. Ovaj broj se ne može promeniti na niskoj temperaturi, kada su termalne fluktuacije zanemarljive. Promenom napona na gejtu, međutim, može se promeniti naelektrisanje ostrva, oduzimanjem ili dodavanjem elektrona. Ovakve oblasti se nazivaju *Coulombovi dijamanti* i eksperimentalno se konstatuju.

Posledica postojanja Coulombovih dijamanta je pojava Coulombovih oscilacija u provodnosti sa porastom napona na gejtu. Maksimalna blokada postoji za  $C_g V_g = me$ , za  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Kada  $C_g V_g$  teži polucelobrojnim vrednostima naelektrisanja elektrona, širina oblasti Coulombove blokade teži nuli i može doći do tunelovanja. Ako primenimo mali napon između sorsa i drejna  $V_d$ , struja u funkciji napona gejta pokazuje maksimume u uskoј oblasti vrednosti napona gejta oko polucelobrojne vrednosti naelektrisanja gejta. Rastojanje između maksimuma je  $\Delta V_g = e/C_g$ . Između dva maksimuma broj elektrona u kvantnoj tački je konstantan. Ako je  $eV_d < k_B T$ , širina maksimuma zavisi od temperature. Pored toga, potrebno je da bude ispunjeno  $e^2/C > k_B T$ .

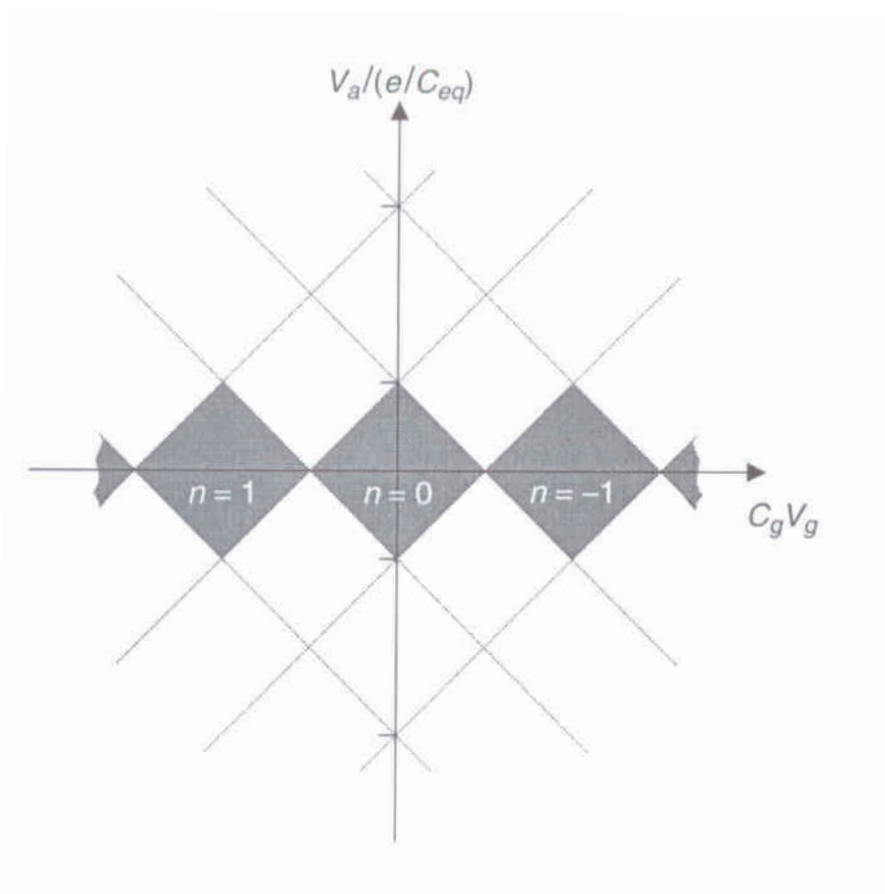
Postojanje Coulombovih oscilacija može se razumeti na osnovu dijagrama na slici. Sistem prikazan na slici (a) je van rezonancije. Uslov rezonancije se postiže kada je ekscitovano stanje usled naelektrisavanja kvantne tačke između Fermijevih energija na levoj i desnoj strani.

Primer strukture u kojoj se pojavljuju Coulombova blokada je prikazan na slici 12. Radi se o strukturi koja je formirana od 2DEG litografijom i ecovanjem. Prečnik formiranog stubića je nekoliko stotina nm (s obzirom da je efektivna masa nosilaca mala i temperatura na kojoj radi komponenta niska, u strukturi se pojave kvantni efekti). Kvantna tačka se formira između dve tunnelske barijere. Visina kvantne tačke je reda 10 nm, dok se lateralne dimenzije mogu menjati pomoću napona na gejtu, koji potpuno obuhvata kvantnu tačku.

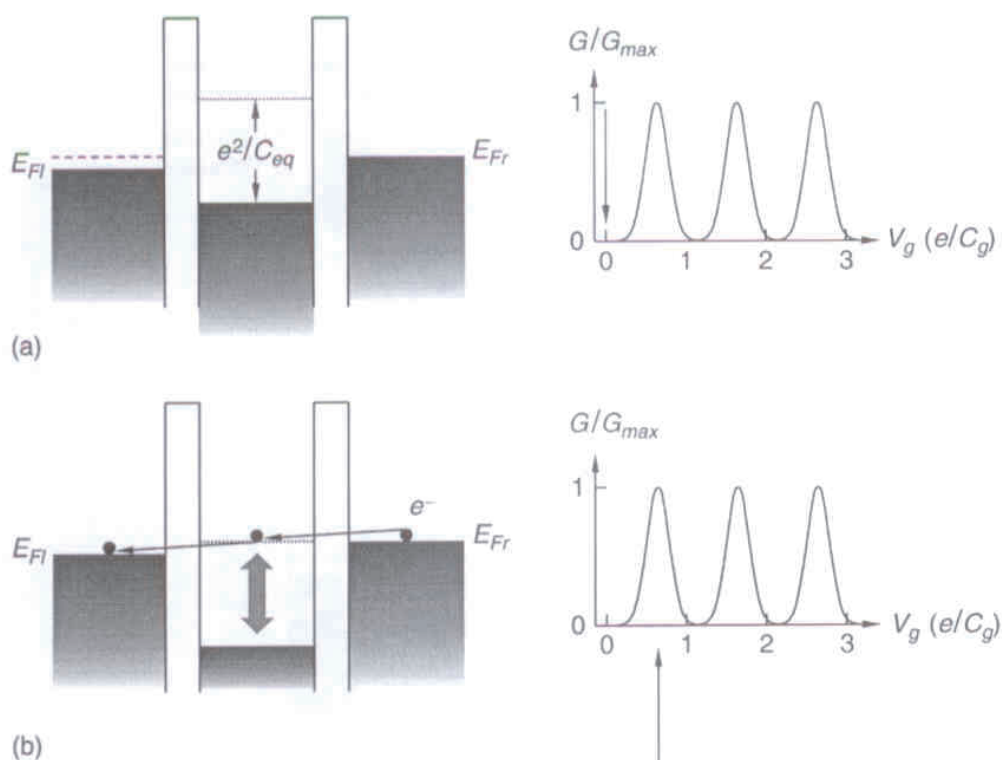
U realnosti postoji odstupanje od jednostavne teorije koju smo ovde prikazali, kao posledica činjenice da postoji izmenska interakcija između elektrona. Kao rezultat, energija usled dodavanja jednog elektrona je:

$$E_d = E_C + \Delta E, \quad (55)$$

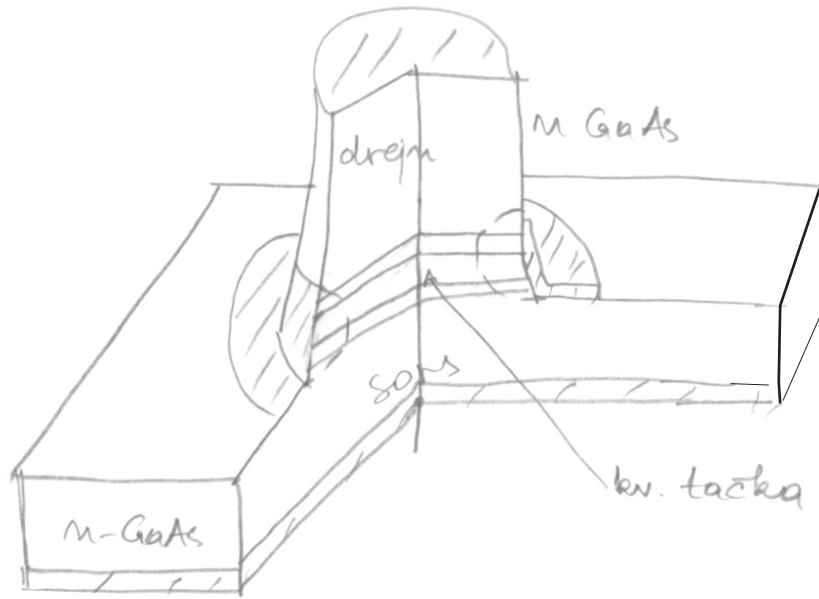
gde je  $\Delta E$  promena energije u kvantnoj tački usled dodavanja jednog elektrona (kao rezultat kvantno-mehaničke interakcije).



Sl. 10. Dijagram stabilnosti jednoelektronskog tranzistora za  $C_2 = C_g = C$ ,  $C_1 = 2C$  ( $V_a$  je u tekstu označeno sa  $V_d$ ). U osenčenim oblastima tunelovanje na 0 K nije moguće kroz oba tunelska spoja. Broj elektrona u kvantnoj tački je upisan u površ.



Sl. 11. Energijski dijagram sistema sa dva spoja koji ilustruje pojavu pikova provodnosti usled Coulombove blokade. (a) Sistem je polarizovan van rezonancije. (b) Uslov rezonancije kada ekscitovano stanje usled Coulombovog naelektrisanja leži izmedju hemijskih potencijala (Fermijevih energija na 0 K) u levom i desnom uvodniku.



Sl. 12. Tipični izgled jednoelektronskog tranzistora.

## 5. Zadaci

1. Jednoelektronska kutija sadrži redno vezani tunelski spoj kapacitivnosti  $C_t$  i kondenzator kapacitivnosti  $C_g$ . Napon na krajevima kutije je jednak  $V_g$ . (a) Izvesti uslov za  $V_g$  da bi kvantna tačka između spoja i kondenzatora sadržala  $n$  elektrona. (b) Nacrtati zavisnost  $n$  od  $C_g V_g / e$ . (c) Izvesti uslov za naelektrisanje  $Q_t$  na tunelskom spoju za proizvoljno  $n$ .

**Rešenje.** (a) Razlika polarizacionog naelektrisanja na tunelskom spoju i kondenzatoru jednaka je naelektrisanju u kvantnoj tački:

$$Q_t - Q_g = -ne. \quad (56)$$

Zbir napona na krajevima tunelskog spoja i kondenzatora je:

$$\frac{Q_t}{C_t} + \frac{Q_g}{C_g} = V_g. \quad (57)$$

Energija naelektrisanja kvantne tačke je:

$$E_c(n) = \frac{Q_t^2}{2C_t} + \frac{Q_g^2}{2C_g}. \quad (58)$$

Koristeći prve dve jednačine, lako se dobije:

$$E_c(n) = \frac{e^2 n^2}{2C_{eq}} + \frac{1}{2} \frac{C_t C_g V_g^2}{C_{eq}}, \quad (59)$$

gde je  $C_{eq} = C_t + C_g$  kapacitivnost kvantne tačke. Za transfer  $n$  elektrona u kutiju, naponski izvor izvrši rad:

$$W_C(n) = \int I(t) V_g(t) dt = Q_g V_g = en \frac{C_g}{C_{eq}} V_g + \frac{C_t C_g V_g^2}{C_{eq}}. \quad (60)$$

Ukupna energija celog kola je:

$$E(n) = E_C(n) - W_C(n) = \frac{e^2 n^2}{2C_{eq}} - \frac{C_g}{C_{eq}} n e V_g - \frac{C_g C_t}{C_{eq}} V_g^2. \quad (61)$$

Razlika energije za  $n$  i  $n \pm 1$  elektrona u kvantnoj tački je:

$$\Delta E^\pm = E(n) - E(n \pm 1) = -\frac{e^2}{2C_{eq}} \mp \frac{e^2 n - e C_g V_g}{C_{eq}}. \quad (62)$$

Prema tome, da bi broj tačaka u kvantnoj tački bio jednak  $n$ , mora biti  $\Delta E^\pm \leq 0$ . Ako je  $V_g = 0$ :  $\Delta E^+(n=0) = -e^2/(2C_{eq})$ ,  $\Delta E^+(n=1) = -3e^2/(2C_{eq})$ ,  $\Delta E^+(n=2) = -5e^2/(2C_{eq})$ , itd. Slično je  $\Delta E^-(n=0) = -e^2/(2C_{eq})$ ,  $\Delta E^-(n=1) = e^2/(2C_{eq})$ ,  $\Delta E^-(n=2) = 3e^2/(2C_{eq})$  itd.

Sa rastom broja elektrona u kvantnoj tački povećava se energija koju treba da ima dodatni elektron da bi ušao u kvantnu tačku. Za dato  $n$ ,  $\Delta E^+ \leq 0$ . Da ne bi  $n+1$ -vi elektron ušao u kvantnu tačku, potrebno je da:

$$\frac{e C_g V_g}{C_{eq}} \leq \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{C_{eq}}, \quad (63)$$

odnosno:

$$V_g \leq \frac{e}{C_g} \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (64)$$

Da se ne bi broj elektrona smanjio, potrebno je da  $\Delta E^- \leq 0$ :

$$\frac{e C_g V_g}{C_{eq}} \geq \left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{C_{eq}}, \quad (65)$$

odnosno

$$V_g \geq \frac{e}{C_g} \left(n - \frac{1}{2}\right). \quad (66)$$

Zajedno:

$$\left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g} < V_g < \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g}. \quad (67)$$

(b) Zavisnost  $n$  je prikazana na slici.

(c) Na osnovu izraza za naelektrisanje tačke ( $Q_t - Q_g = -ne$ ) i  $V_g$ :

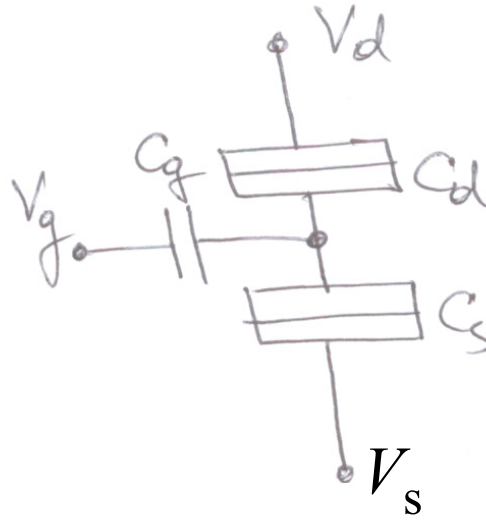
$$Q_t = -\frac{C_t}{C_{eq}} en + \frac{C_g C_t}{C_{eq}} V_g. \quad (68)$$

Na osnovu izraza za  $V_g$  sledi:

$$\left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{e C_t}{C_{eq}} \leq \frac{C_g C_t}{C_{eq}} V_g \leq \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e C_t}{C_{eq}}. \quad (69)$$

Kada se oduzme  $C_t en/C_{eq}$ , lako se dobija:

$$-\frac{e C_t}{2 C_{eq}} \leq Q_t \leq \frac{e C_t}{2 C_{eq}}. \quad (70)$$



Sl. 13. Ekvivalentno kolo jednoelektronskog tranzistora.

Ovaj uslov se može pisati u obliku:

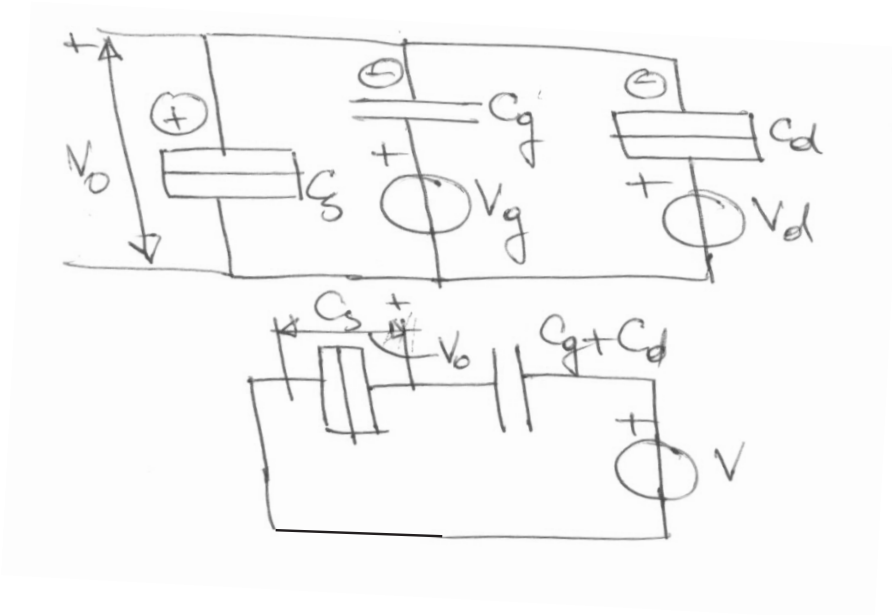
$$|Q_t| \leq Q_c, \quad (71)$$

gde je  $Q_c = eC_t/(2C_{eq})$  kritično polarizaciono naelektrisanje na oblogama tunelskog spoja. Vrednost tunelskog naelektrisanja za postojanje Coulombove blokade, dakle, ne zavisi od broja nosilaca naelektrisanja u kvantnoj tački.

**2.** Jednoelektronski tranzistor je polarisan naponima drejn-sors  $V_d$  i gejt-sors  $V_g$ , kao što je prikazano na slici. Formirajući ekvivalentna kola sa (1) paralelno spojenim kapacitivnostima  $C_g$  i  $C_d$  i (2) paralelno spojenim kapacitivnostima  $C_g$  i  $C_s$ : (a) odrediti oblasti u  $V_d(V_g)$  zavisnosti u kojima se formiraju Coulombovi dijamanti; (b) Skicirati strujno naponsku karakteristiku za malo  $V_d$ .

**Rešenje.** Jednoelektronski tranzistor se može predstaviti ekvivalentnom šemom prikazanom na slici 13.

Ekvivalentno kolo se sastoji od kondenzatora kapacitivnosti  $C_g$  i dva tunelska spoja kapacitivnosti  $C_d$  i  $C_s$ . Postavimo sors na masu ( $V_s = 0$ ) i transfiguriramo kolo na način prikazan na slici 14. Ekvivalentno kolo ovom kolu je prikazano na slici i ono ima oblik ekvivalentnog kola jednoelektronske kutije. Na ovaj način je model troterminalne komponente (jednoelektronskog tranzistora) sveden na model dvoterminalne (jednoelektronske kutije). Ovde treba odrediti elektromotornu silu naponskog generatora  $V$ . U ovom kolu  $C_g + C_d$  označava ekvivalentnu kapacitivnost paralelne veze kapacitivnosti tunelskog spoja drejna i kondenzatora gejta (kada su  $V_g = V_d = 0$ ). Ako označimo sa  $V_0$  napon na krajevima  $C_s$ , a sa  $Q_1$  i  $Q_2$  naelektrisanja na  $C_g$  i  $C_d$  respektivno:



Sl. 14. Prvo ekvivalentno kolo jednoelektronskog tranzistora koje svodi jednoelektronski tranzistor na jednoelektronsku kutiju.

$$V - \frac{Q_1 + Q_2}{C_g + C_d} = V_0 \quad (72)$$

$$V_g - \frac{Q_1}{C_g} = V_0 \quad (73)$$

$$V_d - \frac{Q_2}{C_d} = V_0. \quad (74)$$

Odavde se lako dobija:

$$V = \frac{C_d V_d + C_g V_g}{C_d + C_g} \quad (75)$$

$$Q_1 = -C_g(V_0 - V_g) \quad (76)$$

$$Q_2 = -C_d(V_0 - V_g) \quad (77)$$

Kao za jednoelektronsku kutiju, uslov da  $n$  elektrona bude u kvantnoj tački:

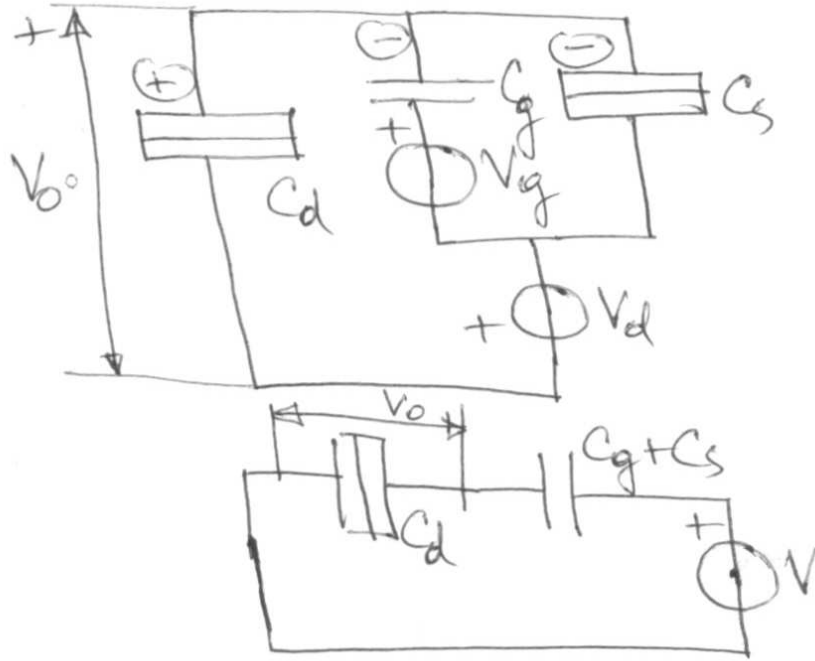
$$\left(n - \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g + C_d} \leq \frac{C_g V_g + C_d V_d}{C_g + C_d} \leq \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e}{C_g + C_d}, \quad (78)$$

odnosno:

$$\frac{1}{C_d} \left(ne - \frac{e}{2} - C_g V_g\right) \leq V_d \leq \frac{1}{C_d} \left(ne + \frac{e}{2} - C_g V_g\right). \quad (79)$$

Za različite vrednosti  $n$ , ove nejednakosti predstavljaju oblasti u  $(V_g, V_d)$  dijagramu ograničene pravim linijama sa negativnim nagibom.

Moguće je kolo transfigurisati i na način prikazan na slici 14. Kao i u prethodnom slučaju, kolo predstavljamo ekvivalentnom šemom. Ovde je:



Sl. 15. Drugo ekvivalentno kolo jednoelektronskog tranzistora koje svodi jednoelektronski tranzistora na jednoelektronsku kutiju.

$$V - \frac{Q_1 + Q_2}{C_g + C_s} = V_0 \quad (80)$$

$$V_g - \frac{Q_1}{C_g} - V_d = V_0 \quad (81)$$

$$-V_d - \frac{Q_2}{C_s} = V_0. \quad (82)$$

Oдавде se lako dobija:

$$V = -V_d + \frac{C_g V_g}{C_g + C_s} \quad (83)$$

$$Q_1 = -C_g(V_0 + V_d - V_g) \quad (84)$$

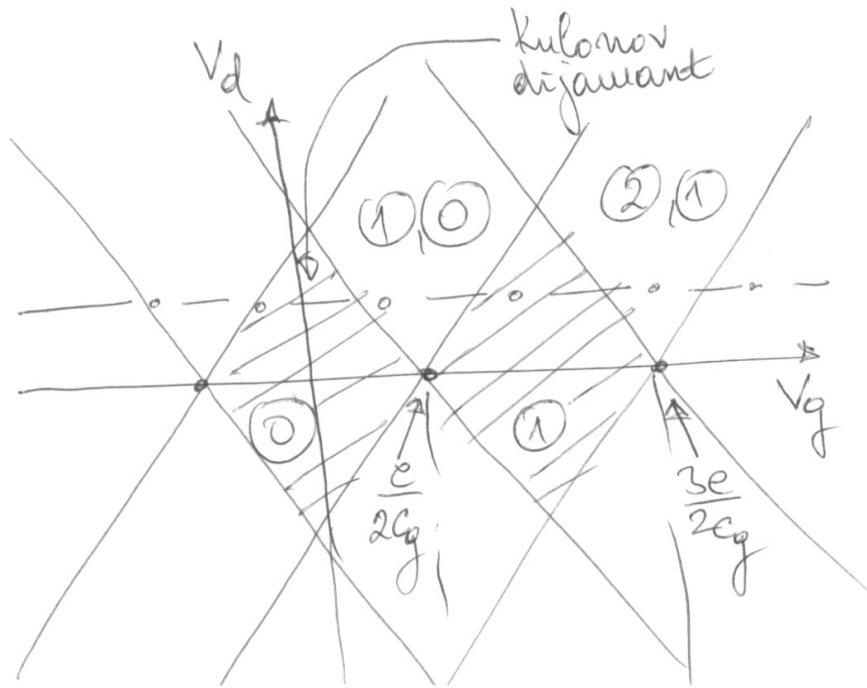
$$Q_2 = -C_s(V_0 + V_d). \quad (85)$$

Za II ekvivalentno kolo:

$$\frac{-ne + e/2 + C_g V_g}{C_s + C_g} > V_d > \frac{-ne - e/2 + C_g V_g}{C_s + C_g}. \quad (86)$$

Na osnovu prethodna 2 ekvivalentna kola za  $n = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{-e/2 - C_g V_g}{C_d} < V_d < \frac{e/2 - C_g V_g}{C_d} \\ \frac{e/2 + C_g V_g}{C_s + C_g} > V_d > \frac{-e/2 + C_g V_g}{C_s + C_g}. \end{aligned} \quad (87)$$



Sl. 16. Šrafirane površine predstavljaju Coulombove dijamante, kao oblasti u  $(V_d, V_g)$  ravni u kojima može u kvantnoj tački egzistirati određen broj elektrona.

Prave linije (koje predstavljaju granične slučajeve, sa znacima jednakosti koji zamene znake nejednakosti u gornjim relacijama) se seku u tačkama:

$$V_g = (2n + 1) \frac{e}{2C_g}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (88)$$

Ako su tunelske barijer simetrične, tada je nagib drugih pravih linija (sa pozitivnim nagibom) veći od nagiba prve klase pravih linija (sa negativnim nagibom) i situacija izgleda kao na slici 16. Oblasti u okolini  $V_d = 0$  ograničene pravim linijama naivaju se Coulombovi dijamanti. U ovim oblastima može da egzistira tačno određeni broj elektrona. U susednim oblastima moguća je egzistencija dva broja elektrona, npr. 0 i 1, ili 1 i 2, kao na slici. Fiksirajmo napon na drejnu i posmatrajmo kako se obavlja transport elektrona od sorsa ka drejnu, samo pod uticajem napona na gejt. Najpre je napon na gejt jednak nuli i broj elektrona unutar kvantne tačke je jednak nuli. Elektron nema dovoljno energije da savlada tunelsku barijeru između sorsa i kvantne tačke. Ako se napon na gejt poveća do granice prvog Coulombovog dijamanta (za  $n = 0$ ), broj elektrona u tački poraste na vrednost  $n = 1$ , tunelovanjem iz sorsa u kvantnu tačku. Dalji porast napona na gejt, dovodi do tunelovanja elektrona iz kvantne tačke u drejnu, a drugi elektron tuneluje iz sorsa u kvantnu tačku. Broj elektrona je nadalje jednak  $n = 1$ , a struja jednaka nuli. Strujno-naponska karakteristika  $I_d(V_{gs})$  ove komponente je oscilatorna i predstavlja Coulombove oscilacije.



## 6

# Grafen i ugljenične nanotube

### 1. Struktura grafena i ugljeničnih nanotuba

Ugljenične nanotube su šuplji cilindri sa velikim odnosom dužine i prečnika. Prečnik ugljeničnih nanotuba je u opsegu od oko 1 nm do oko 10 nm, a dužina može biti i reda cm. Ugljenične nanotube su sačinjene isključivo od ugljenikovih atoma i predstavljaju jednu od formi u kojoj ugljenik postoji u čvrstom stanju. Druge forme su dijamant, grafit, sferni fulereni i grafen. Veliki broj struktura potiče od sposobnosti ugljenika da formira hibridizovane orbitale sa različitim konfiguracijama veza.

Grafen je jednoatomske sloj grafita i realizovan je nedavno (2004. godine), tehnikom ljuštenja grafita. Ugljenične nanotube se mogu posmatrati kao uvijeni slojevi grafena u formi cilindara. Ovakve nanotube nazivaju se *jednozidne* (engl: single wall nanotube; SWNT). Moguće je formiranje koncentričnih struktura nanotuba, koje se nazivaju *višeziidne* nanotube (engl.: multi wall nanotube; MWNT). Pored toga, moguće je formiranje *snopova* ugljeničnih nanotuba (nanotube bundles). Tipično rastojanje između dve nanotube u MWNT i snopu je 0,3 nm, što je rastojanje između dve sloja grafena u grafitu, odnosno dužina veze između ugljenikovih atoma u različitim slojevima grafena. Moguće je formiranje spojeva dve različito uvijene nanotube (Y spoj) i spojeva nanotube i molekula sfernog fulerena (nanopupoljak; engl.: nanobud).

Većina jednozidnih nanotuba ima prečnik manji od 2 nm, a dužina je  $10^4$ – $10^5$  puta veća od prečnika, pa se nanotube mogu smatrati jednodimenzionim nanostrukturama. Osobine nanotube zavise od orijentacije šestougla atoma u grafenu u odnosu na osu nanotube. U opštem slučaju pravac šest atoma u odnosu na osu nanotube može biti proizvoljan. Pored toga, dužine veza između ugljenikovih atoma i uglovi između veza se menjaju po uvijanju nanotube, ali je ova promena zanemarljiva. Dakle, samo se pozicija šestougla ugljenikovih atoma menja u odnosu na grafen, ali ne i međusobni položaj atoma u jediničnoj ćeliji. Nanotube mogu biti zatvorene kapom molekula sfernog fulerena.

Parametri strukture nanotube su prikazani na slici (1). Svi stomi u grafenu i nanotubi koja je od njega izvedena mogu se podeliti u dve grupe u zavisnosti od položaja. Na primer, na levom kraju svake horizontalne veze nalazi se atom vrste *A*, dok se na drugom kraju iste veze nalazi atom vrste *B*. Ova dva atoma formiraju dvoatomske motiv kristalne strukture.

Bitni parametri kristalne strukture su jedinični vektori šestouglaone rešetke  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$ , koji su

postavljeni kako je prikazano na slici. Oni povezuju atom  $A$  sa njemu dva najbliža suseda vrste  $A$  i imaju istu dužinu. U odnosu na prikazani koordinatni sistem, vektor  $\vec{a}_1$  se može prikazati kao:

$$\vec{a}_1 = a \cos 30^\circ \vec{e}_x + a \sin 30^\circ \vec{e}_y. \quad (1)$$

Dužina vektora  $\vec{a}_1$  se može odrediti na osnovu jednakokrakog trougla koji formiraju  $\vec{a}_1$  i dve najbliže veze:

$$a = 2a_{cc} \cos 30^\circ = \sqrt{3}a_{cc}, \quad (2)$$

gde je  $a_{cc}$  dužina veze između dva atoma ugljenika (rastojanje između atoma vrste  $A$  i atoma vrste  $B$ ). Dakle, jedinični vektor rešetke je:

$$\vec{a}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right). \quad (3)$$

Slično je:

$$\vec{a}_2 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right). \quad (4)$$

Bitan parametar ugljenične nanotube je hiralni (obodni) vektor  $\vec{C}_h$ , koji povezuje dva atoma iste vrste koji se nalaze na krajevima duži koja ih spaja na obodu nanotube. Po uvijanju grafena u nanotubu, duž od jednog do drugog kraja obodnog vektora postaje krug na obodu nanotube, a atomi na krajevima obodnog vektora se preklape.<sup>1</sup> Struktura (geometrija) nanotube potpuno je određena hiralnim vektorom:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2, \quad (5)$$

odnosno parom brojeva  $(n, m)$ . Hiralni vektor određuje kakav će biti obod nanotube. Lako se može pokazati da je poluprečnik nanotube:

$$D_t = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}. \quad (6)$$

Ovde je  $a$  konstanta rešetke grafena, koja je kako smo pokazali povezana sa dužinom veze:

$$a = \sqrt{3}a_{cc}. \quad (7)$$

Dužina veze ima vrednost  $a_{cc} = 0,142$  nm.

Položaj hiralnog vektora se može odrediti i pomoću *hiralnog ugla*  $\theta$ , koji predstavlja ugao između  $\vec{C}_h$  i  $\vec{a}_1$ . Za date  $n$  i  $m$ , vrednost hiralnog ugla se može odrediti kao:

$$\cos \theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{C}_h||\vec{a}_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}. \quad (8)$$

Zbog šestougaoanog rasporeda atoma, vrednosti ugla  $\theta$  su ograničene na oblast  $0 \leq |\theta| \leq 30^\circ$ . Hiralni ugao je nagibni ugao šestouglova atoma u odnosu na osu nanotube. Nanotube sa  $\theta = 0^\circ$

---

<sup>1</sup>Ovo treba shvatiti samo kao geometrijsku konstrukciju. U stvarnosti ne postoji preklapanje atoma sa drugim atomom, tj ugljenične nanotube se ne dobijaju uvijanjem grafena.

imaju obod oblika cik-cak linije i nazivaju se *cik-cak* nanotube. Hiralni vektor je  $(n, 0)$  za ovu vrstu nanotuba, a postoje veze između atoma ugljenika koje su paralelne osi nanotube. Druga interesantna vrsta nanotuba su  $(n, n)$  nanotube, za koje je  $\theta = 30^\circ$ . Ove nanotube se nazivaju *foteljne*, jer je raspored atoma na obodu nanotube oblika fotelje. Za ove nanotube važi da postoje veze normalne na osu nanotube. Cik-cak i foteljne nanotube su *ahiralne* nanotube, dok su sve ostale *hiralne*. Kod *ahiralnih* nanotuba, povezujući centre susednih šestouglova dobijaju se krugovi, dok se kod *hiralnih* nanotuba dobijaju zavojne linije. Za hiralne tube važi  $(n, m \neq n \neq 0)$ .

Geometrija grafenske rešetke i hiralni vektor određuju ne samo prečnik tube, već i jediničnu ćeliju nanotube i broj ugljenikovih atoma u njoj. Najmanji vektor rešetke  $\vec{T}$  normalan na  $\vec{C}_h$  naziva se vektor translacije rešetke i određuje period translacije  $T$  duže ose tube. Vektor translacije rešetke nanotube se, slično kao hiralni vektor, može pisati u formi  $\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2$ . Koristeći,  $\vec{C}_h \cdot \vec{T} = 0$ , može se pokazati da je:

$$t_1 = \frac{2m + n}{N_R}, \quad (9)$$

$$t_2 = -\frac{2n + m}{N_R}, \quad (10)$$

gde je  $N_R$  najveći zajednički delilac  $2m + n$  i  $2n + m$ . Takođe, dužina vektora translacije je:

$$t = |\vec{T}| = \sqrt{3}a \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{N_R}. \quad (11)$$

Jedinična ćelija nanotube je površina cilindra visine  $t$  i prečnika  $d_t$ . Može se pokazati da je broj atoma u jediničnoj ćeliji:

$$N_C = 4 \frac{n^2 + nm + m^2}{N_R}. \quad (12)$$

## 2. Brillouinova zona grafena

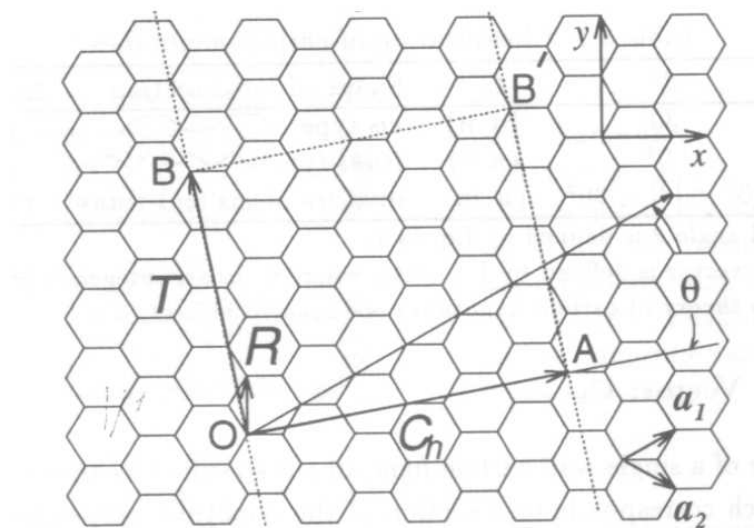
Kao što smo ranije objasnili, susedni atomi ugljenika nisu ekvivalentni, jer nisu okruženi na isti način ostalim atomima ugljenika. Položaj proizvoljnog atoma u sloju grafena  $\vec{R}$  se može predstaviti kao linearna kombinacija jediničnih vektora u sloju:

$$\vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2. \quad (13)$$

Već ranije smo rekli da se jedinični vektori u  $xy$  koordinatnom sistemu mogu izraziti u obliku:

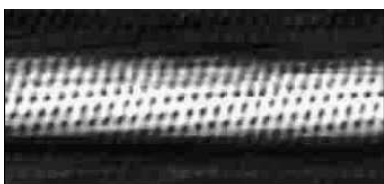
$$\vec{a}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad (14)$$

$$\vec{a}_2 = \left( \frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2} \right). \quad (15)$$

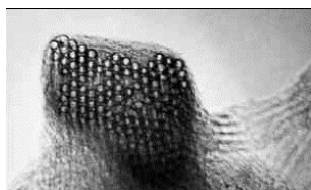


Sl. 1. Sloj grafena od koga se formira nanotuba. Veličine kojima se opisuje simetrija ugljenične nanotube formirane od ovog sloja su označene na crtežu. Od interesa za našu analizu su jedinični vektori  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$ , hiralni vektor  $\vec{C}_h$  i hiralni ugao  $\theta$ . Ako je hiralni vektor duž  $\vec{a}_1$ , radi se o cik-cak nanotubi. Ako je hiralni vektor postavljen duž  $x$  ose, nanotuba se zove foteljna.

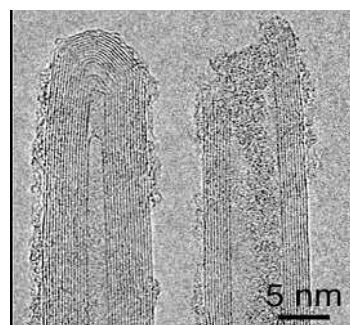
(a)



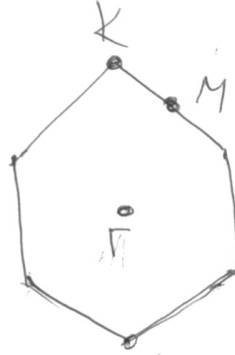
(b)



(c)



Sl. 2. (a) Jednozidna nanotuba (SWNT). (b) Kabl formiran od SWNT. (c) Presek dve višezidne nanotube (MWNT).

Sl. 3. *Brillouinova zona grafena sa karakterističnim tačkama.*

Jedinični vektori recipročne ćelije su:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{e}_z)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{e}_z)} = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad (16)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi(\vec{e}_z \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{e}_z)} = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right), \quad (17)$$

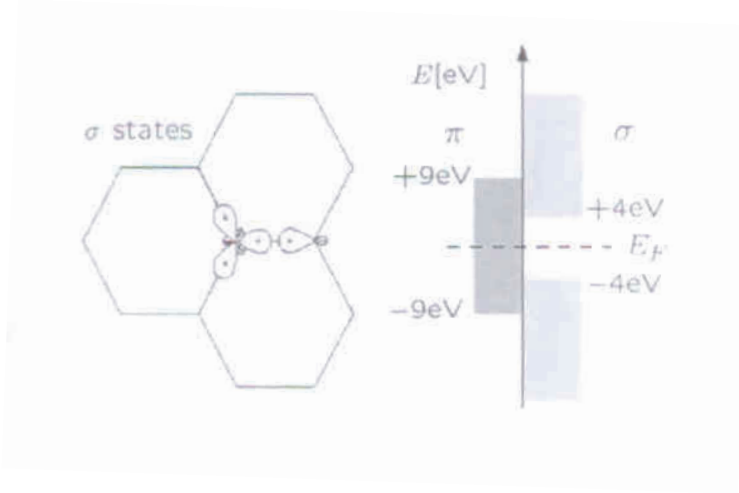
što odgovara konstanti rešetke u inverznom prostoru od  $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = 4\pi/(\sqrt{3}a)$ . Izgled Brillouinove zone prikazan je na slici 3. Na ovoj slici su označene tri tačke visoke simetrije,  $\Gamma$ ,  $K$  i  $M$ , koje su centar Brillouinove zone, teme, i centar stranice prikazanog šestougona, respektivno. Kao što je ranije napomenuto, za elektronske osobine dominantno su odgovorne  $p_z$  orbitale, koje su normalne na ravan grafena i koje čine  $\pi$  kovalentne veze sa ostalim atomima.

### 3. **Energijske zone u grafenu**

U najvišoj ljusci u ugljenikovom atomu, elektroni se nalaze u  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  i  $2p_z$  orbitalama.  $2s$  stanje se hibridizuje sa  $2p_x$  i  $2p_y$  orbitalama i formiraju se  $sp^2$  orbitale.  $sp^2$  orbitale formiraju jake kovalentne veze odgovorne za elastične osobine grafena. Stanja u grafenu nastala preklapanjem ovih orbitala mogu biti vezujuća ( $\sigma$ ) i antivezujuća ( $\sigma^*$ ).

$p_z$  orbitale, koje su normalne na ravan grafena, se, zbog simetrije, ne mešaju sa  $\sigma$  orbitalama. Interakcija elektrona u grafenu na susednim  $p_z$  orbitalama proizvodi vezujuće  $\pi$  i antivezujuće  $\pi^*$  orbitale.  $\pi$  i  $\pi^*$  veze su normalne na ravan grafena i odgovorne su za interakciju između različitih slojeva grafena u grafitu i za elektronske i transportne osobine grafena.

Stanja u grafenu su organizovana u zone, pri čemu su  $\sigma$  i  $\sigma^*$  zone razdvojene energijskim procepom od oko 8 eV, dok su energije u  $\pi$  i  $\pi^*$  zonama u okolini Fermijeve energije. U 3D grafitu, postoji interakcija između pojedinih slojeva grafena, ali je veza između atoma ugljenika u različitim slojevima slabija od veze između atoma u sloju grafena. Zbog toga je rastojanje između susednih slojeva 0,335 nm, što je veće od rastojanja između ugljenikovih atoma u sloju od 0,142 nm.



Sl. 4. Energijske zone u grafenu.

Elektronsku strukturu grafena ćemo odrediti pomoću metoda jake veze. Rezultati dobijeni primenom metoda jake veze dobro se poklapaju sa rezultatima proračuna dobijenim na osnovu prvih principa (*ab initio* metoda).

#### 4. Metod jake veze za grafen

Periodični delovi funkcija jake veze se sastoje od atomskih orbitala za dva neekvivalentna atoma ugljenika na pozicijama  $A$  i  $B$  (videti sliku 1 i poglavlje posvćeno teoriji jake veze, gde su atomi  $A$  povezani jediničnim vektorima, a atom  $B$  se nalazi na primer na  $x$  osi jedinične ćelije u odnosu na početak vektora  $\vec{a}_1$ ). Uzimamo jednu orbitalu u jediničnoj ćeliji kristala. Broj atoma jedne vrste u kristalu je  $N$ .

Položaji pojedinih atoma  $B$  u odnosu na atom  $A$  su:

$$\vec{R}_{01} = a_{cc}\vec{e}_x = \frac{a}{\sqrt{3}}\vec{e}_x, \quad (18)$$

$$\vec{R}_{02} = -\frac{a_{cc}}{2}\vec{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}a_{cc}\vec{e}_y = -\frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_x + \frac{a}{2}\vec{e}_y, \quad (19)$$

$$\vec{R}_{03} = -\frac{a_{cc}}{2}\vec{e}_x - \frac{\sqrt{3}}{2}a_{cc}\vec{e}_y = -\frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_x - \frac{a}{2}\vec{e}_y. \quad (20)$$

Talasna funkcija je:

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = c_A(\vec{k})\Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) + c_B(\vec{k})\Phi_B(\vec{k}, \vec{r}), \quad (21)$$

gde su  $c_A$  i  $c_B$  koeficijenti ekspanzije u talasne funkcije jake veze atoma vrste  $A$  i vrste  $B$ , respektivno. Funkcije jake veze su:

$$\Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \varphi_A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_i), \quad (22)$$

$$\Phi_B(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \varphi_B(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_i). \quad (23)$$

Kao za jednodimenzioni kristal sačinjen od dva neekvivalentna atoma, kod određivanja  $H_{AA}$  i  $H_{BB}$  pretpostavljamo da su matični elementi između atoma u različitim ćelijama jednaki nuli (preklapanje samo između najbližih suseda). Na taj način,

$$H_{AA} = \langle \Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) | \hat{H} | \Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}'_i = \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}'_i)} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}'_i) | \hat{H} | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) \rangle = E_p \langle \varphi(\vec{r}) | \varphi(\vec{r}) \rangle = E_p, \quad (24)$$

gde je  $E_p$  energija elektrona na  $2p_z$  orbitali. Slično je:

$$H_{BB} = E_p. \quad (25)$$

Kod matičnih elemenata između atoma  $A$  i atoma  $B$ , uzimamo u obzir samo preklapanje između orbitala najbližih suseda. Matični element  $H_{AB}$  je:

$$H_{AB} = \langle \Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) | \hat{H} | \Phi_B(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}'_i \neq \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}'_i)} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) | \hat{H} | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}'_i) \rangle. \quad (26)$$

Ovde je:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{r} \in \vec{R}_i} \sum_{\vec{R}'_i \neq \vec{R}_i} \dots = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_{0i}} \dots = \sum_{i=1}^3 \dots, \quad (27)$$

gde je poslednja suma po najbližim susedima atomu proizvoljnom atomu  $A$ . Ovde je uzeto u obzir:

$$\sum_{\vec{R}_i} \dots = N, \quad (28)$$

jer su svi atomi vrste  $A$  ekvivalentni. Dakle,

$$H_{AB} = \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{0i}} \langle \varphi_A(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_{0i}) \rangle. \quad (29)$$

Ovaj matični element može se izraziti u formi:

$$H_{AB} = t(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{01}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{02}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{03}}) = t f(\vec{k}). \quad (30)$$

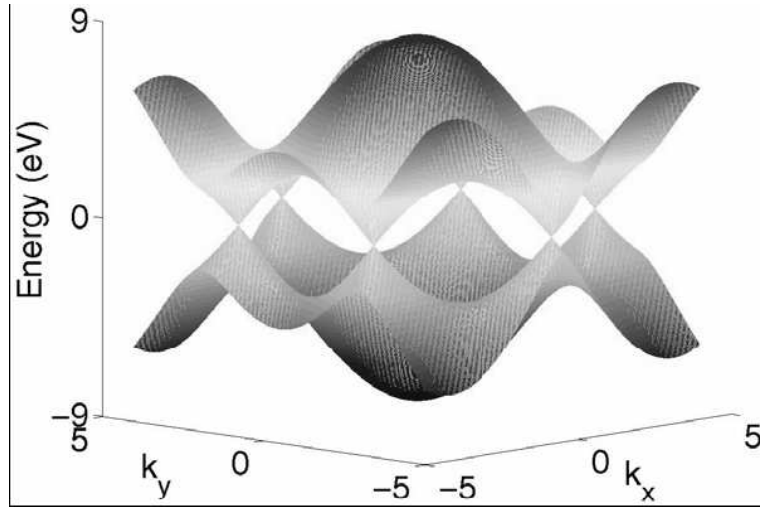
Ovde je:

$$f(\vec{k}) = e^{ik_x a / \sqrt{3}} + 2e^{-ik_x a / (2\sqrt{3})} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right). \quad (31)$$

S obzirom da je transfer matrica hermitska  $H_{AB} = H_{BA}^*$ .

Uz zamenu  $\hat{H} \rightarrow 1$ , uzimajući u obzir samo preklapanje između stanja ekvivalentnih atoma na istim mestima i susednih neekvivalentnih atoma na različitim mestima, lako se nalazi:

$$S_{AA} = S_{BB} = 1, \quad (32)$$



Sl. 5. Disperziona relacija elektrona u grafenu. Treba primetiti da su zone degenerisane u  $K$  tačkama u Brillouinovoj zoni.

$$S_{AB} = sf(\vec{k}) = S_{BA}^*. \quad (33)$$

Transfer matrica je:

$$H = \begin{bmatrix} E_p & tf(\vec{k}) \\ tf(\vec{k})^* & E_p \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Matrica preklapanja je:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & sf(\vec{k}) \\ sf(\vec{k})^* & 1 \end{bmatrix}. \quad (35)$$

Sekularna jednačina

$$\det(H - ES) = 0 \quad (36)$$

ima razvijenu formu:

$$(E_p - E)^2 - (t - Es)^2 |f(\vec{k})|^2 = 0, \quad (37)$$

odnosno:

$$(1 - s^2 w^2) E^2 + 2(tsw^2 - 2E_p)E + (E_p^2 - t^2 w^2) = 0. \quad (38)$$

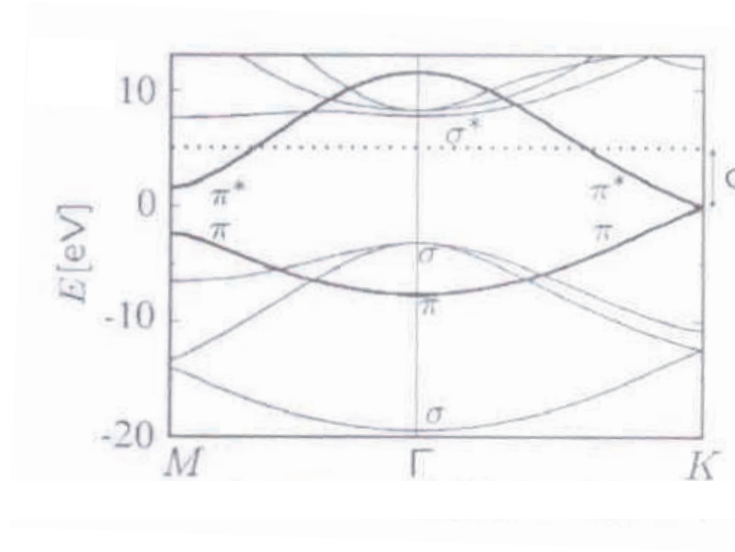
Ovde je:

$$w(\vec{k}) = |f(\vec{k})| = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}. \quad (39)$$

Rešenje sekularne jednačine je:

$$E_{\pm} = \frac{E_p \pm tw(\vec{k})}{1 \pm sw(\vec{k})}. \quad (40)$$

Jednostavnosti radi može se izabrati  $E_p = 0$ . Poređenjem sa *ab initio* modelima, mogu se ekstrahovati parametri zonske strukture:  $t \approx -3$  eV i  $s \approx 0,13$ . Gornja zona (energije veće od 0) predstavlja antivezujuću  $\pi^*$  zonu, dok je donja zona (energije manje od 0)  $\pi$  vezujuća (videti



Sl. 6. Disperzione relacije zona u grafenu duž karakterističnih pravaca: od  $\Gamma$  do  $K$  i od  $\Gamma$  do  $M$  tačke.

sliku 5). Stanje u  $K$  tački je dvostruko degenerisano. Nulti energijski procep je posledica istih atoma (ugljenik) na mestima  $A$  i  $B$  ( $E_p$  je isto za oba ugljenikova atoma u primitivnoj ćeliji).

Dobijene disperzione relacije za  $\pi$  i  $\pi^*$  zone dobijaju jednostavniju formu, ako je  $s = 0$ :

$$E_{\pm}(k_x, k_y) = \pm\gamma_0 \left[ 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right]^{1/2}. \quad (41)$$

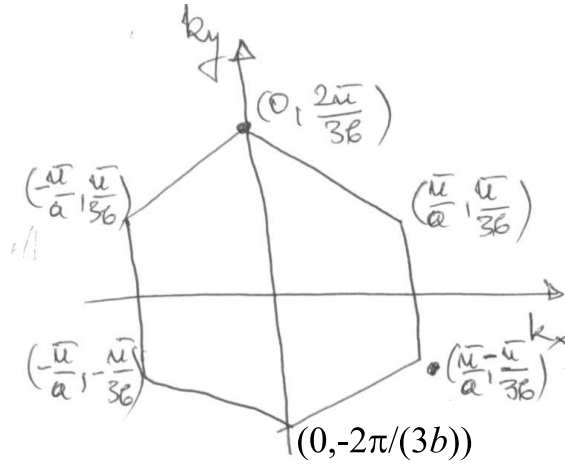
Ovde je  $\gamma_0 = -t$ . Ovo je najčešće korišćen izraz za disperzione relacije  $\pi$  zona u sloju grafena. Vrednosti energija u  $k_x = k_y = 0$  su  $E_{\pm}(0, 0) = \pm 3\gamma_0$ . Ovo znači da je širina svake  $\pi$  zone jednaka  $3\gamma_0$  (ukupna širina obe  $\pi$  zone je  $6\gamma_0 \approx 18$  eV).

## 5. Fermijeva energija u grafenu

Podsetimo se da je Fermijeva energija  $E_F$  vrednost energije najvišeg zauzetog stanja u datom materijalu na  $T = 0$  K.  $E_F$  se može odrediti na osnovu razmatranja popunjavanja stanja  $\pi$  elektrona u Brillouinovoj zoni grafena, sledeći pri tome Paulijev princip isključenja.

Pretpostavimo da u uzorku grafena postoji  $N$  primitivnih ćelija. Primitivna ćelija grafena ima oblik romba i sadrži po jedan atom vrste  $A$  i  $B$  (četiri atoma jedne vrste ( $A$  ili  $B$ ) se dele sa četiri susedne primitivne ćelije). S obzirom da svaki atom ugljenika u grafenu daje jedno stanje (jednu  $p_z$  orbitalu) broj stanja (bez spinske degeneracije) u grafenu je  $2N$ . S obzirom da je svako stanje spinski degenerisano, ukupan broj stanja je  $4N$ . Znamo da su stanja potekla od  $p_z$  orbitala organizovana u 2  $\pi$  zone, tako da je broj stanja u svakoj zoni jednak  $2N$ .

S druge strane, svaki atom ugljenika daje grafenu jedan elektron na  $p_z$  orbitali. Ukupan broj atoma je  $2N$ , pa je ukupan broj elektron jednak  $2N$ . Ovo znači da su sva stanja u valentnoj ( $\pi$ ) zoni popunjena. S obzirom da je najviša vrednost energije elektrona u  $\pi$  zoni u  $K$  tački, najviša



Sl. 7. Brillouinova zona sa koordinatama ekvivalentnih  $K$  tačaka.

vrednost energije zauzetog stanja elektrona je u ovoj tački, a ranije smo usvojili da je vrednost energije u ovoj tački jednaka nuli. Drugim rečima, Fermijeva energija u grafenu je  $E_F = E_p = 0$ , što znači da Fermijev nivo (elektrohemijski potencijal ne  $T = 0$  K) prolazi kroz  $K$  tačku.

Grafen se označava kao: (1) poluprovodnik nultog energijskog procepa ili kao (2) polumetal. Razlog za prvo ime je nepostojanje energijskog procepa (usled dodira provodne i valentne zone). Razlog za drugo ime je činjenica da je u metalima Fermijeva energija u zoni, gde je gustina stanja različitá od nule. U grafenu je, međutim, vrednost gustine stanja jednaka nuli na Fermijevoj energiji.

Na kraju, recimo da se Fermijev nivo može pod neravnotežnim uslovima značajno udaljiti od tačke dodira provodne i valentne zone u grafenu. Ovo se može postići pomoću primenjenog električnog ili magnetskog polje ili dopiranjem.

## 6. $\pi$ zone u grafenu u okolini $K$ tačke

Označimo sa:

$$a_x = \frac{\sqrt{3}a}{2} = \frac{3a_{cc}}{2}, \quad (42)$$

$$a_y = \frac{a}{2} = \frac{\sqrt{3}a_{cc}}{2}. \quad (43)$$

Pozicije  $K$  tačaka su date na slici 7. S obzirom da postoji šest  $K$  tačaka u Brillouinovoj zoni i da je samo jedna trećina doline u okolini svake tačke u I Brillouinovoj zoni, moguće je demontirati I Brillouinovu zonu, tako da su samo tačka na  $k_y$  osi, koju ćemo označiti sa  $K$  i njoj suprotna tačka (prisetiti se demonstracije izvedene na času), označene sa  $K'$ , relevantne.

U novim oznakama, disperziona relacija ima formu:

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos k_y a_y \cos k_x a_x + 4 \cos^2 k_y a_y}. \quad (44)$$

U okolini  $K$  tačke

$$\vec{K} = (k_{xK}, k_{yK}) = (0, \pm 4\pi/(3a)) \quad (45)$$

moguće je razviti izraz pod korenom u disperzionoj relaciji u Tejlorov red do prvog stepena. Dakle,

$$\cos(k_x a_x) \approx 1 - \frac{\delta k_x^2 a_x^2}{2}, \quad (46)$$

$$\cos k_y a_y = \cos((k_{yK} + \delta k_y) a_y) \approx \cos(k_{yK} a_y) - \sin(k_{yK} a_y) \delta k_y a_y = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y, \quad (47)$$

gde je:

$$\delta k_x = k_x; \quad \delta k_y = k_y - \frac{4\pi}{3a}. \quad (48)$$

Zamenom ovih aproksimativnih izraza za kosinuse, lako se dobija:

$$\begin{aligned} & 1 + 4 \cos k_y a_y (\cos k_x a_x + \cos k_y a_y) \\ & \approx 1 + 4 \left( -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y \right) \left( 1 - \frac{\delta k_x^2 a_x^2}{2} - \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y \right). \end{aligned} \quad (49)$$

Zadržavajući se samo na kvadratnim članovima po  $\delta k_x$  i  $\delta k_y$ , sledi:

$$1 + 4 \cos k_y a_y (\cos k_x a_x + \cos k_y a_y) \approx 1 - (1 - \delta k_x^2 a_x^2 - 3\delta k_y^2 a_y^2) = \frac{9a_{cc}^2}{4} \delta k_x^2 + 3\frac{3a_{cc}^2}{4} \delta k_y^2. \quad (50)$$

Konačno, aproksimativne disperzione relacije su:

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{3\gamma_0 a_{cc}}{2} \sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2}, \quad (51)$$

odnosno:

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{\sqrt{3}a}{2} \gamma_0 |\delta \vec{k}|. \quad (52)$$

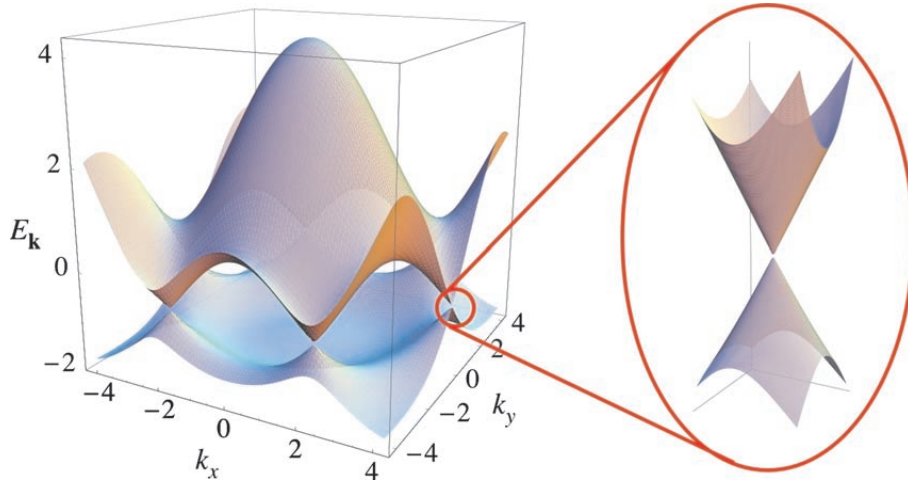
Ovo je linearna disperziona relacija. Disperziona relacija zapravo ima oblik konusa u okolini  $K$  tačke u Brillouinovoj zoni (videti sliku). S obzirom da je  $E_F = 0$ , Fermijeva brzina je proporcionalna nagibu  $E(\vec{k})$  u okolini  $K$  tačke:

$$v_F = |\vec{v}_F| = \left| \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E \right| = \frac{\sqrt{3} a \gamma_0}{2 \hbar} = \frac{3}{2} a_{cc} \frac{\gamma_0}{\hbar}. \quad (53)$$

Teorijska vrednost  $v_F \approx 8 \times 10^5$  m/s se vrlo dobro slaže sa rezultatima merenja.

## 7. Elektronska struktura ugljeničnih nanotuba

Ukoliko se grafen uvije tako da formira nanotubu, samo neke vrednosti  $(k_x, k_y)$  u Brillouinovoj zoni grafena su dozvoljene. U daljnjoj analizi ćemo smatrati da se elektronska struktura *grafena* ne menja pri uvijanju. Drugim rečima, smatramo da je glavni efekat uvijanja grafena u nanotubu



Sl. 8. Disperzione relacije za energiju elektrona u okolini  $K$  tačke imaju vrlo približno oblik konusa.

promena simetrije. Dozvoljene vrednosti u Brillouinovoj zoni se dobijaju na osnovu periodičnih graničnih uslova duž omotača nanotube. Vektori rešetke se mogu izraziti kao:

$$\vec{a}_1 = a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y, \quad (54)$$

$$\vec{a}_2 = a_x \vec{e}_x - a_y \vec{e}_y. \quad (55)$$

Hiralni vektor je:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n+m)a_x \vec{e}_x + (n-m)a_y \vec{e}_y. \quad (56)$$

Zbog translatorne simetrije ( $\Psi(0) = \Psi(\vec{C}_h)$ ; videti talasne funkcije elektrona u kristalu po metodi jake veze) duž pravca definisanog hiralnim vektorom:

$$\vec{k} \cdot \vec{C}_h = 2\pi l. \quad (57)$$

Zamena izraza za  $\vec{C}_h$  u poslednji uslov daje:

$$\vec{k} \cdot \vec{C}_h = k_x a_x (n+m) + k_y a_y (n-m) = 2\pi l, \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (58)$$

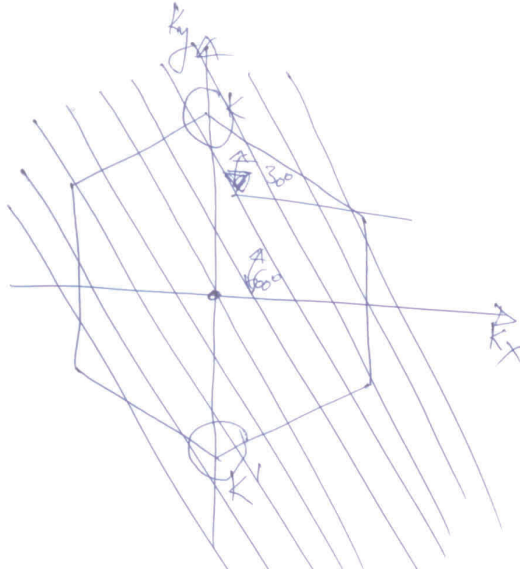
Ovaj uslov predstavlja familiju pravih linija, gde svaka linija odgovara jednoj vrednosti  $l$ .  $l$  je indeks podzone. To znači da su disperzione relacije jednodimenzione, duž svake prave linije. Postojanje energijskog procepa zavisi od toga da li neka prava prolazi kroz  $K$  (ili  $K'$ ) tačku :

$$(k_x a_x, k_y a_y) = (0, \pm 2\pi/3). \quad (59)$$

Da bi prava linija dobijena na osnovu uslova periodičnosti duž normalnog pravca prolazila kroz  $K$  tačku, treba da bude ispunjeno:

$$\boxed{\frac{n-m}{3} = l, \quad l \in \mathbb{Z}}. \quad (60)$$

Ovo znači da  $(n-m)$  mora biti deljivo sa 3. Nanotube koje zadovoljavaju ovaj uslov nazivaju se *metalne*.



Sl. 9. Samo tačke u Brillouinovoj zoni koje se nalaze na prikazanim pravim linijama pod nagibnim uglom od  $60^\circ$  čine inverzni prostor stanja cik-cak nanotube.

### 7.1. Elektronska struktura cik-cak tuba

Ranije smo rekli da ako je  $m = 0$  (vektor  $\vec{C}_h$  duž vektora  $\vec{a}_1$ ), da se radi o cik-cak nanotubama. Tada je:

$$\vec{k} \cdot \vec{C}_h = nk_x a_x + nk_y a_y = 2\pi l, \quad l \in Z. \quad (61)$$

Tada je:

$$n(k_x \sqrt{3}a/2 + k_y a/2) = 2\pi l, \quad (62)$$

odnosno:

$$n(\sqrt{3}k_x + k_y) = \frac{4\pi l}{a}. \quad (63)$$

Da bi za dato  $n$  i  $l$  prava linija prolazila kroz  $k_y = 4\pi/3a$ , mora biti:

$$\boxed{n/3 = l, \quad l \in Z.} \quad (64)$$

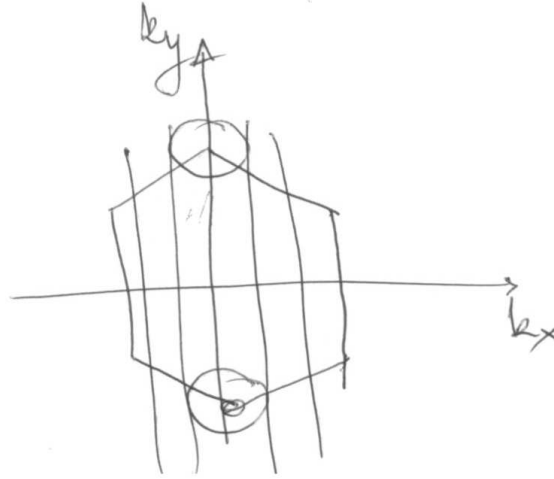
Sledi, dakle, da za cik-cak nanotube  $n$  mora biti deljivo sa 3, da bi bile metalne. Na primer, za  $n = 9$  nanotuba je metalna, a za  $n = 10$  poluprovodna.

Zavisnost  $k_y$  od  $k_x$  je:

$$k_y = \frac{4\pi l}{na} - \sqrt{3}k_x = k_{y0} - \sqrt{3}k_x, \quad (65)$$

gde je  $k_{y0} = k_y(k_x = 0)$ . Ove prave imaju negativan nagib od  $60^\circ$  i pomerene su po  $k_y$  osi za:

$$\Delta k_y = \frac{4\pi}{na}. \quad (66)$$



Sl. 10. Samo tačke u Brillouinovoj zoni koje se nalaze na pravim linijama paralelnim  $k_y$  osi čine inverzni prostor stanja foteljne ugljenične nanotube.

### 7.2. Elektronska struktura foteljastih nanotuba

Ako je  $n = m$ , radi se o foteljastoj nanotubi i tada je hiralni vektor usmeren duž  $x$  ose,  $\vec{C}_h = 2an\vec{e}_x$ . Na osnovu periodičnog graničnog uslova,

$$2nk_xa_x = 2\pi l, \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (67)$$

Ovo su prave linije paralelne  $k_y$  osi, kao što je prikazano na slici 10, a vrednosi  $k_x$  su određene na osnovu uslova:

$$k_x = \frac{\pi l}{na} \quad (68)$$

Podzona sa  $l = 0$  uvek prolazi kroz tačku  $(k_x, k_y) = (0, \pm 4\pi/3a)$ , što znači da su foteljaste nanotube uvek metalne, bez obzira na dužinu vektora  $\vec{C}_h$ .

## 8. Energijski procep u cik-cak nanotubama

Posmatrajmo cik-cak nanotubu, koja je poluprovodna:

$$n = 3l - 1. \quad (69)$$

Ova vrednost  $l$  za dato  $n$  je izabrana, jer je prava linija na kojoj se nalaze dozvoljena stanja u nanotubi najbliža K tački  $(0, 4\pi/3a)$ . Ranije smo izveli:

$$k_y = \frac{4\pi l}{na} - \sqrt{3}k_x. \quad (70)$$

Za ovako izabrano  $n$

$$k_y = \frac{4\pi}{3a} + \frac{4\pi}{3na} - \sqrt{3}k_x, \quad (71)$$

a odstupanje od  $K$  tačke je:

$$\delta k_y = \frac{4\pi}{3na} - \sqrt{3}k_x. \quad (72)$$

Raznije smo izveli da je za male vrednosti  $\vec{k}$ :

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 |\delta \vec{k}| = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2}. \quad (73)$$

Ovde je  $\delta k_x = k_x$ . Da bismo odredili energijski procep, potražimo minimum disperzione relacije u provodnoj (višoj) zoni. Ovo se svodi na traženje minimuma funkcije:

$$f(k_x) = \delta k_x^2 + \delta k_y^2 = k_x^2 + \left( \frac{4\pi}{3na} - \sqrt{3}k_x \right)^2. \quad (74)$$

Označimo sa  $\Delta K = 4\pi/3na$ , tako da je:

$$f(k_x) = \Delta K^2 - 2\sqrt{3}\Delta K k_x + 4k_x^2. \quad (75)$$

Minimum je u:

$$k_{x0} = \frac{\sqrt{3}}{4} \Delta K. \quad (76)$$

Na osnovu (72):

$$\delta k_{y0} = \Delta K - \frac{3}{4} \Delta K = \frac{\Delta K}{4}. \quad (77)$$

Vrednost  $f(k)$  u minimumu je:

$$f_0 = f(k_{x0}) = \delta k_{x0}^2 + \delta k_{y0}^2 = \frac{(\Delta K)^2}{4}. \quad (78)$$

Minimalna vrednost energije u zoni je, dakle:

$$E_{0\pm} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \frac{\Delta K}{2}. \quad (79)$$

Energijski procep je:

$$E_g = E_{0+} - E_{0-} = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \Delta K = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \frac{4\pi}{3na} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{\gamma_0}{n}. \quad (80)$$

Znajući da je:

$$|\vec{C}_h| = \pi D_t = na, \quad (81)$$

sledi:

$$E_g = \frac{2a\gamma_0}{\sqrt{3}D_t}. \quad (82)$$

Ako zamenimo  $a = \sqrt{3}a_{cc}$ , gde je  $a_{cc} = 0,142$  nm i  $\gamma_0 = 2,9$  eV, dobije se praktični izraz za energijski procep cik-cak diode:

$$E_g = \frac{0,82}{D_t} [\text{eV}], \quad (83)$$

za vrednost prečnika nanotube u nm.

## 9. Gustina stanja u grafenu

Posmatramo stanja u provodnoj zoni grafena. Broj stanja u intervalu energija  $[E, E + dE]$  je:

$$dN = 2g_z \frac{dS_{\vec{k}}}{(2\pi)^2/S}. \quad (84)$$

Ovde  $dS_{\vec{k}}$  označava elementarnu (diferencijalnu) površinu u  $\vec{k}$  prostoru,  $(2\pi)^2/S$  je površina koju zauzima jedno stanje, a  $g_z$  je dolinska degeneracija. Za grafen je  $g_z = 2$ , jer postoje 2 neekvivalentne tačke u Brillouinovoj zoni. Ekvienergijske površi u grafenu su krugovi u okolini  $K$  tačke. Diferencijalna površina dobijena povećanjem kruga poluprečnika  $k$  za  $dk$  je:

$$dS_{\vec{k}} = 2\pi k dk. \quad (85)$$

Broj stanja u ovoj površi jednak je površini  $dS_{\vec{k}}$

$$dN = 2\pi k dk / ((2\pi)^2/S) = S \frac{2}{\pi} k dk. \quad (86)$$

Gustina stanja je:

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2}{\pi} S k \frac{dk}{dE}. \quad (87)$$

Koristeći disperzionu relaciju elektrona u provodnoj zoni grafena:

$$E = \hbar v_F k, \quad (88)$$

sledi:

$$dE/dk = \hbar v_F, \quad (89)$$

odakle se dobije:

$$D(E) = S \frac{2}{\pi} \frac{k}{\hbar v_F}, \quad (90)$$

odnosno ( $k = E/(\hbar v_F)$ ):

$$D(E) = S \frac{2}{\pi} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} E. \quad (91)$$

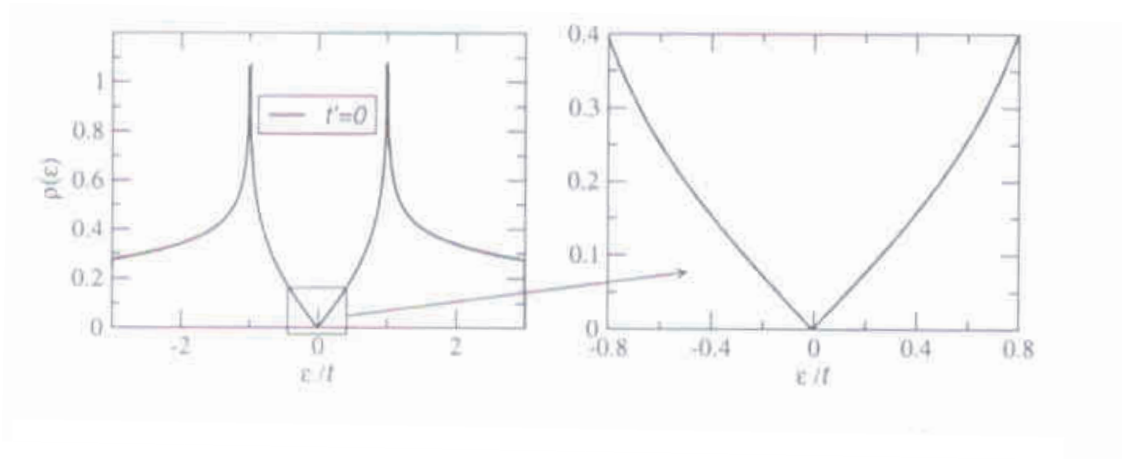
Ovaj izraz važi i za valentnu zonu uz zamenu  $E \rightarrow |E|$ . Gustina stanja po jedinici površine u grafenu je:

$$g(E) = \frac{D(E)}{S} = \frac{2}{\pi(\hbar v_F)^2} |E| = \beta_g |E|. \quad (92)$$

Ovde je:

$$\beta_g \approx 1,5 \frac{1}{\text{eV}^2 \text{nm}^2}. \quad (93)$$

Ovaj izraz je aproksimativni izraz za gustinu stanja u okolini  $E = 0$ . Za veće vrednosti energije, disperziona relacija odstupa od linearne zavisnosti i za  $E = \gamma_0$  divergira, kao što je prikazano na slici. Na ovoj slici  $\gamma_0$  je označeno sa  $t$ , a  $t'$  označava transfer integral sa prvim sledećim susedom ( $t' = 0$ ). Pored divergencije na  $E = \pm \gamma_0$ , gustina stanja u  $\pi$  zonama u grafenu jednaka je nuli za  $E \geq 3\gamma_0$  (ne postoje stanja u  $\pi$  i  $\pi^*$  zonama sa energijama većim od  $3\gamma_0$ ).



Sl. 11. Gustina elektronskih stanja u grafenu.

## 10. Gustina stanja u cik-cak nanotubama

Umesto  $k_x$  i  $k_y$  uvedimo komponente talasnog vektora  $k_\perp$  i  $k_\parallel$ , koji su orijentisani duž obodnog vektora i duž ose nanotube. Ova dva vektora se mogu odrediti rotacijom koordinatnog sistema za  $+30^\circ$ :

$$k_\perp = k_x \cos 30^\circ + k_y \sin 30^\circ, \quad (94)$$

$$k_\parallel = k_y \cos 30^\circ - k_x \sin 30^\circ. \quad (95)$$

Lako se nalazi:

$$k_\perp = \frac{k_{y0}}{2} = \frac{2\pi l}{na}, \quad (96)$$

$$k_\parallel = \frac{\sqrt{3}}{2} k_{y0} - 2k_x. \quad (97)$$

Obrnuto se lako nalazi:

$$k_x = \frac{\sqrt{3}}{2} k_\perp - \frac{k_\parallel}{2}, \quad (98)$$

$$k_y = \frac{1}{2} k_\perp + \frac{\sqrt{3}}{2} k_\parallel. \quad (99)$$

Disperziona relacija u grafenu je:

$$E = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2}. \quad (100)$$

Funcija pod korenom je:

$$\begin{aligned} f(k_\parallel) &= \delta k_x^2 + \delta k_y^2 = (k_x - k_{xK})^2 + (k_y - k_{yK})^2 \\ &= \left( \frac{\sqrt{3}}{2} k_\perp - \frac{k_\parallel}{2} \right)^2 \\ &\quad + \left( \frac{k_\perp}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} k_\parallel - \frac{4\pi}{3a} \right)^2. \end{aligned} \quad (101)$$

Razmotrimo najpre slučaj  $n = 3l - 1$  (poluprovodne nanotube). Lako se nalazi:

$$f(k_{\parallel}) = k_{\parallel}^2 - 4 \frac{k_{\parallel} \pi}{\sqrt{3}a} + \frac{4(1 + 3n^2)\pi^2}{9n^2a^2}. \quad (102)$$

Minimum ove funkcije je u tački:

$$k_{\parallel 0} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}. \quad (103)$$

Talasni vektor u pravcu ose nanotube se može izraziti u formi:

$$k_{\parallel} = k_{\parallel 0} + \delta k_{\parallel}. \quad (104)$$

Lako se dobije:

$$f(\delta k_{\parallel}) = \delta k_{\parallel}^2 + \frac{4\pi^2}{9n^2a^2}. \quad (105)$$

Za ovaj slučaj je, na primer, provodna zona opisana disperzionom relacijom:

$$E(\delta k_{\parallel}) = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{\delta k_{\parallel}^2 + \frac{4\pi^2}{9n^2a^2}}. \quad (106)$$

Za  $\delta k_{\parallel} = 0$ :

$$E_{0+} = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \frac{2\pi}{3na}, \quad (107)$$

a to smo već ranije dobili u  $xy$  koordinatnom sistemu.

Na sličan način se mogu odrediti disperzione relacije podzona za proizvoljno  $n$  i  $l$  (proizvoljnu podzonu za dato  $n$ ):

$$f(k_{\parallel}) = k_{\parallel}^2 - \frac{4k_{\parallel} \pi}{\sqrt{3}a} + \frac{4(9l^2 - 6ln + 4n^2)}{9a^2n^2} \pi^2. \quad (108)$$

Minimum ove funkcije je na istoj vrednosti  $k_{\parallel}$ , kao za  $n = 3l - 1$  slučaj:

$$k_{\parallel 0} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}. \quad (109)$$

Funkcija  $f$  je:

$$f(\delta k_{\parallel}) = \delta k_{\parallel}^2 + \frac{4(n - 3l)^2 \pi^2}{9n^2a^2}. \quad (110)$$

Dakle,

$$E(\delta k_{\parallel}) = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{\delta k_{\parallel}^2 + \frac{4(n - 3l)^2 \pi^2}{9n^2a^2}}, \quad (111)$$

odnosno:

$$E(\delta k_{\parallel}) = \sqrt{E_l^2 + c^2 \delta k_{\parallel}^2}, \quad (112)$$

gde je:

$$c = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0. \quad (113)$$

Koristimo opštu definiciju gustine stanja:

$$D(E) = 2 \sum_i \delta(E - E_i). \quad (114)$$

Ova suma postaje integral po  $\delta k_{\parallel}$ . Za dato  $l$  (doprinos gustini stanja 1 podzone; podintegralna funkcija je parna):

$$D_l(E) = 2 \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - \sqrt{E_l^2 + c^2 \delta k_{\parallel}^2}) d\delta k_{\parallel} = \frac{2L}{\pi} \int_0^{\infty} \delta(E - \sqrt{E_l^2 + c^2 \delta k_{\parallel}^2}) d\delta k_{\parallel}, \quad (115)$$

gde je  $c = \sqrt{3}a\gamma_0/2$ . Napravimo smenu:

$$u = E - \sqrt{E_l^2 + c^2 \delta k_{\parallel}^2}. \quad (116)$$

Odavde sledi da je za pozitivno  $\delta k_{\parallel}$ :

$$\delta k_{\parallel} = \frac{1}{c} \sqrt{(E - u)^2 - E_l^2}. \quad (117)$$

i

$$d\delta k_{\parallel} = \frac{1}{c} \frac{(E - u) du}{\sqrt{(E - u)^2 - E_l^2}}. \quad (118)$$

Za jednu podzonu:

$$D_l(E) = \frac{2L}{\pi c} \frac{E}{\sqrt{E^2 - E_l^2}}. \quad (119)$$

Ovo je doprinos jedne podzone gustini stanja, a ukoliko se uzmu u obzir sve podzone:

$$D(E) = \frac{2L}{\pi c} \sum_l \frac{E}{\sqrt{E^2 - E_l^2}}. \quad (120)$$

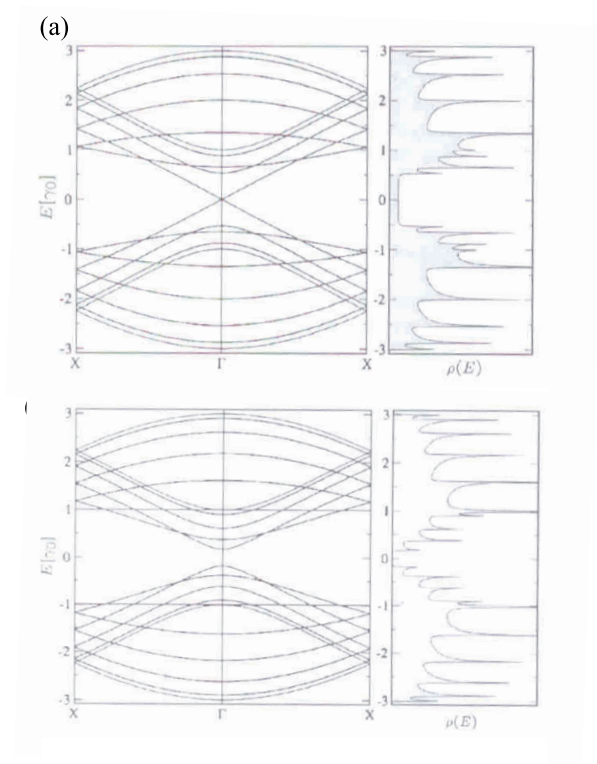
Ovde je  $c = \sqrt{3}a\gamma_0/2$ , a  $E_l$  je energija dna podzone. Za valentnu zonu se dobije sličan rezultat, tako da je gustina stanja u obe zone data izrazom:

$$D(E) = \frac{4L}{\sqrt{3}\pi a\gamma_0} \sum_l \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - E_l^2}}. \quad (121)$$

Ovaj izraz je dobar ako je  $E_l \neq 0$  za sve  $l$ , tj za poluprovodne cik-cak nanotube. Ako je nanotuba metalna, tada je za  $l = n/3$ ,  $E_l = 0$ . Izraz za gustinu stanja u  $l = n/3$  podzoni ima oblik:

$$D_{l=n/3}(E) = \frac{2L}{\pi} \int_0^{\infty} \delta(E - \sqrt{3}a\gamma_0\delta k_{\parallel}/2) d\delta k_{\parallel} = \frac{4L}{\sqrt{3}\pi a\gamma_0} = const. \quad (122)$$

Disperzione relacije podzona u (9,0) i (10,0) cik-cak nanožicama prikazane su na slici 12. Disperzione relacije su prikazane u celoj jednodimenzionoj Brillouinovoj zoni, koja se proteže između  $X$  tačaka sa koordinatama  $k_{\perp}(X) = \pm\pi/T$ , gde je  $T$  dužina vektora translacije. Uočava se da je gustina stanja metalnih cik-cak nanotuba konstantna i konačna u okolini  $K$  tačke (za  $l = n/3$ ), dok je u poluprovodnim cik-cak nanotubama gustina stanja jednaka nuli. Naravno, gustina stanja u oba tipa nanotuba ispoljava divergencije, tj van Hoveove singularitete na energijama dna podzona, slično kao u kvantnim žicama.



Sl. 12. Elektronska struktura i gustina stanja: (a) (9,0) i (b) (10,0) cik-cak nanotuba.  $X$  označava granicu jednodimenzionalne Brillouinove zone nanotube. Vidljivi su van Hoveovi singulariteti na ivicama podzona i nenulta gustina stanja u metalnim nanotubama (slučaj (9,0)).

## 11. Specifična provodnost grafena

Ranije smo pokazali da za elektrone u poluprovodniku važi Drudeova formula za specifičnu provodnost:

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m} \sim n. \quad (123)$$

Ova zavisnost je dobijena pod uslovom da su srednje vreme slobodnog puta i masa elektrona nezavisni od energije, tj  $\tau = \text{const}$  i  $m = \text{const}$ . Ukoliko  $\tau$  i  $m$  nisu konstantni, specifična provodnost nije linearne funkcija koncentracije. Takva mogućnost postoji u grafenu, gde su disperzione relacije neprabolične. Primetićemo i da je Drudeova formula dobijena za slučaj 3DEG, dok je grafen dvodimenzioni monokristalni materijal.

Ranije smo pokazali da su u okolini  $K$  i  $K'$  tačaka u grafenu disperzione relacije i gustina stanja:

$$E_{\pm} = \pm v_F p, \quad (124)$$

$$D(E) = S \beta_g |E| = S \frac{2}{\pi (\hbar v_F)^2} |E|. \quad (125)$$

Takođe smo ranije izveli izraz za specifičnu provodnost zavisnu od energije:

$$\sigma(E) = \frac{e^2 D(E) D_d(E)}{S}. \quad (126)$$

Pored toga, za 2DEG važi:

$$D_d = \frac{v^2 \tau}{2} = \frac{v_F^2 \tau}{2}, \quad (127)$$

gde je uzeta u obzir činjenica da je brzina nosilaca u grafenu  $v = v_F$ . Pored ove eksperimentalne činjenice, pretpostavićemo  $\tau = \text{const}$ , što se može verifikovati merenjima zavisnosti specifične provodnosti od površinske koncentracije (izvedena relacija za zavisnost  $\sigma(n_{2D})$  može se uporediti sa rezultatim merenja i ukoliko se nađe dobro slaganje teorijskog i eksperimentalnog rezultata) to znači da je pretpostavka  $\tau = \text{const}$  usvojena u razvoju modela dobra).

Pretpostavimo, radi jednostavnosti, da je elektrohemijski potencijal  $\mu$  u provodnoj zoni i da je temperatura  $T = 0$  K ( $\mu = E_F$ ). Zamenom izraza za  $D$  i  $D_d$  u izraz za  $\sigma(E)$  dobije se:

$$\sigma(E) = \frac{e^2 v_F^2 \tau}{2S} S \beta_g E = C E. \quad (128)$$

Specifična provodnost je:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (129)$$

Na temperaturi  $T = 0$  K:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} = \delta(E - E_F). \quad (130)$$

Prema tome:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} C E \delta(E - E_F) dE = C E_F. \quad (131)$$

S druge strane, broj elektrona u provodnoj zoni je:

$$N = \int_0^{+\infty} D(E) f_0(E) dE = \int_0^{E_F} S \beta_g dE = S \beta_g \frac{E_F^2}{2}. \quad (132)$$

Oдавde sledi izraz za površinsku koncentraciju ( $n_{2D} = N/S$ ):

$$n_{2D} = \beta_g \frac{E_F^2}{2}, \quad (133)$$

odnosno:

$$E_F = \sqrt{\frac{2}{\beta_g}} \sqrt{n_{2D}}. \quad (134)$$

Zamenom i prethodno izvedeni izraz za  $\sigma$ :

$$\sigma = \frac{e^2 v_F^2 \tau}{2} \sqrt{2\beta_g} \sqrt{n_{2D}}. \quad (135)$$

Ukoliko zamenimo izraz za  $\beta_g$  i izraz za skaliranu srednju dužinu slobodnog puta za 2DEG:

$$\lambda = \frac{\pi}{2} v_F \tau, \quad (136)$$

lako se dobije:

$$\sigma = \frac{4e^2}{h} \lambda \sqrt{\frac{n_{2D}}{\pi}} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} G_K \lambda \sqrt{n_{2D}}. \quad (137)$$

Ovakva zavisnost  $\sigma$  od površinske koncentracije u grafenu su eksperimentalno izmerene, što potvrđuje usvojenu pretpostavku o  $\tau = \text{const}$ .

## 12. Transportne osobine metalnih nanotuba

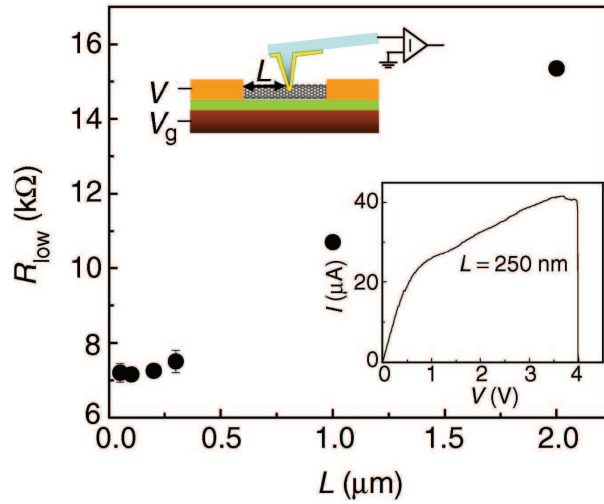
U metalnim nanotubama postoje četiri transportna kanala, koji su posledica dvostruke degeneracije podzona na Fermijevoj energiji. Na osnovu Landauerove formule, provodnost je:

$$G = \frac{4e^2}{h} = 155 \mu S, \quad (138)$$

odnosno otpornost metalne nanotube je  $R = 6,5 \text{ k}\Omega$ . Na konačnoj temperaturi je prisutno rasejanje na fononima sa srednjom dužinom slobodnog puta  $L_m$ , što daje otpornost nanotube  $h/(4e^2)(L/L_m)$ . Ukupna otpornost nanotube je, dakle:

$$R = \frac{h}{4e^2} + R_t. \quad (139)$$

Otpornost metalnih nanotuba je uglavnom određena kontaktnom otpornošću  $R_c$ . Najbolji kontakti se dobijaju naparavanjem Au ili Pd. Zavisnost otpornosti nanotube od dužine je prikazana na slici. Sa smanjenjem dužine nanotube, otpornost nanotube se smanjuje i teži  $h/(4e^2)$  za vrlo kratke tube. Izmerene vrednosti otpornosti metalnih nanotuba su  $R/L =$



Sl. 13. Zavisnost otpornosti metalne nanotube od dužine. Na gornjem umetku ilustrovan je postupak merenja metodom mikroskopije atomskih sila. Na donjem umetku ilustrovana je strujno-naponska karakteristika. Za oko 4 V, dolazi do emisije visokoenergetskih fonona, što značajno smanjuje provodnost.

$4k\Omega/\mu m$ , srednja dužina slobodnog puta  $L_m = 2 \mu m$ , a vrednosti specifične otpornosti  $\rho \approx 10^{-6} \Omega cm$  na sobnoj temperaturi. Vrednost specifične otpornosti bakra je  $1,68 \times 10^{-6} \Omega cm$ . Ovo znači da je specifična provodnost metalnih nanotuba reda veličine ili bolja od specifične provodnosti bakra. Međutim, dobra osobina metalnih nanotuba u odnosu na bakar su maksimalne gustine struje. Za vrednosti gustine struje reda  $10^6 A/cm^2$  u bakru se pojavljuju problemi elektromigracije, tako da se bakar ne može koristiti za još veće vrednosti struje kroz provodne veze. Metalne nanotube izdržavaju bez otkaza struje od  $10^9 A/cm^2$ . Ovako velike vrednosti maksimalne gustine struje kroz metalne ugljenične nanotube su posledica jakih kovalentnih veza između atoma ugljenika, koje čine nanotubu otpornom na elektromigraciju.

### 13. Primeri

1. Odrediti uslov pod kojim su disperzione relacije elektrona u provodnoj i valentnoj zoni u grafenu dobijene pomoću metoda jake veze međusobno simetrične ( $E_{cb} = -E_{vb}$ ).

**Rešenje.** Označimo talasne funkcije jake veze za atome vrste  $A$  i atome vrste  $B$  sa  $\Phi_A$  i  $\Phi_B$ , respektivno. Talasna funkcija elektrona je:

$$\Psi = C_A \Phi_A + C_B \Phi_B. \quad (140)$$

Svojstveni problem je oblika:

$$\begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{AB}^* & H_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{AB}^* & S_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \end{bmatrix}. \quad (141)$$

Ovde je:

$$H_{ij} = \int \Phi_i^* \hat{H} \Phi_j dV, \quad (142)$$

$$S_{ij} = \int \Phi_i^* \Phi_j dV. \quad (143)$$

Sekularna jednačina je:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - ES_{AA} & H_{AB} - ES_{AB} \\ H_{AB}^* - ES_{AB}^* & H_{AA} - ES_{AA} \end{vmatrix} \quad (144)$$

Ako usvojimo  $H_{AA} = 0$  (usvojimo pogodnu referentnu vrednost za energiju), sekularna jednačina postaje:

$$E^2(S_{AA}^2 - |S_{AB}|^2) + E(S_{AB}^* H_{AB} + S_{AB} H_{AB}^*) - |H_{AB}|^2 = 0. \quad (145)$$

Označimo sa:

$$a = S_{AA}^2 - |S_{AB}|^2, \quad (146)$$

$$b = S_{AB}^* H_{AB} + S_{AB} H_{AB}^*, \quad (147)$$

$$c = -|H_{AB}|^2. \quad (148)$$

Rešenja za energiju su:

$$E_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (149)$$

Da bi  $E_- = -E_+$  potrebno je da  $b = 0$ , što znači da je  $S_{AB} = 0$  ili  $H_{AB} = 0$ . Ako je  $H_{AB} = 0$ ,  $c = 0$ , pa se dobije znači da je  $E_{\pm} = 0$ , što su fizička nerealna rešenja. Elektron-šupljina simetrija postoji ako je:

$$S_{AB} = 0. \quad (150)$$

**2.** Izvesti efektivni hamiltonijan za elektronska stanja u grafenu u okolini Diracovih tačaka  $K$  i  $K'$ . Uporediti ovaj hamiltonijan sa Diracovom jednačinom.

**Rešenje.** Hamiltonova matrica za elektronska stanja u grafenu je:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & tf(\vec{k}) \\ tf^*(\vec{k}) & 0 \end{bmatrix}. \quad (151)$$

Ovde je:

$$f(veck) = e^{ik_x a / \sqrt{3}} + 2e^{-ik_x a / 2\sqrt{3}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right). \quad (152)$$

Razvoj u Taylorov red u okolini tačke  $K$  je:

$$f(\vec{K} + \delta\vec{k}) = f(\vec{K}) + \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}) \Big|_{\vec{K}} \cdot \delta\vec{k}, \quad (153)$$

gde je  $\vec{K} = (0, 4\pi/3a)$  i

$$\nabla_{\vec{k}} = \frac{\partial}{\partial k_x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial k_y} \vec{j}. \quad (154)$$

Lako se dobije:

$$f(\vec{K} + \delta\vec{k}) = i\frac{\sqrt{3}}{2}a(\delta k_x + \delta k_y), \quad (155)$$

gde je uzeto u obzir:

$$\delta k_x = k_x, \quad \delta k_y = k_y - \frac{4\pi}{3a}. \quad (156)$$

Dakle,

$$H = \begin{bmatrix} 0 & i(\sqrt{3}at/2)(\delta k_x + i\delta k_y) \\ -i(\sqrt{3}at/2)(\delta k_x - i\delta k_y) & 0 \end{bmatrix}. \quad (157)$$

Podelimo prvu kolonu sa  $+i$ , a drugu kolonu sa  $-i$  (ekvivalentno deljenju koeficijenata  $C_A$  i  $C_B$  sa  $+i$  i  $-i$ , respektivno) i iskoristimo  $v_F = -\sqrt{3}at/2$ . Na posletku, zamenimo talasne brojeve operatorima:

$$\delta k_x \rightarrow \hat{q}_x \quad (158)$$

$$\delta k_y \rightarrow \hat{q}_y. \quad (159)$$

Rezultat poslednjih zamena je efektivni hamiltonijan oblika:

$$\hat{H}_K(\hat{\vec{q}}) = v_F \begin{bmatrix} 0 & \hat{q}_x + i\hat{q}_y \\ \hat{q}_x - i\hat{q}_y & 0 \end{bmatrix}. \quad (160)$$

U kontekstu razmatranja bezmasenih čestica u relativističkoj fizici, ovaj hamiltonijan se naziva *Dirac-Weylov hamiltonijan*. On se može pisati u formi:

$$\hat{H}_K(\hat{\vec{q}}) = v_F \hat{\vec{\sigma}}^* \cdot \hat{\vec{q}}. \quad (161)$$

Slično se može pokazati da je:

$$\hat{H}'_K(\hat{\vec{q}}) = v_F \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{q}}. \quad (162)$$

Prema relativističkoj kvantnoj mehanici, ovakvi oblici hamiltonijana se dobijaju za relativističke čestice bez mase (kakvi su neutrino i foton).

**3.** Odrediti zavisnost sopstvene površinske koncentracije nosilaca u grafenu od temperature. Pretpostaviti linearni zavisnost gustine stanja od energije.

**Rešenje.** Ravnotežna površinska koncentracija elektrona je:

$$n_{2D} = \int_0^{E_{max}} \frac{D(E)}{S} f(E) dE, \quad (163)$$

gde je  $D(E)$  gustina stanja u grafenu, a  $f$  Fermi-Diracova funkcija raspodele. Ranije smo izveli izraz za gustinu stanja u okolini  $K$  tačke:

$$D(E) = \frac{2S}{\pi(\hbar v_F)^2} |E|. \quad (164)$$

Elektrohemijski potencijal u grafenu je  $\mu = 0$ , tako da je:

$$n_{2D} = \frac{2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \int_0^{E_{max}} \frac{E}{1 + e^{E/k_B T}} dE. \quad (165)$$

Integral je po svim stanjima u provodnoj zoni, od 0 do  $E_{max}$ .  $E_{max} \approx 9$  eV je velika vrednost energije, za koju je  $f$  vrlo približno jednako 0, tako da se može smatrati  $E_{max} \rightarrow \infty$ . Ako uvedemo smenu  $\eta = E/k_B T$ , izraz za površinsku sopstvenu koncentraciju elektrona u 2DEG postaje:

$$n = \frac{2(k_B T)^2}{\pi(\hbar v_F)^2} \int_0^\infty \frac{\eta d\eta}{1 + e^\eta}. \quad (166)$$

Ukoliko se podintegralna funkcija pomnoži i podeli sa  $e^{-\eta}$ , integral u poslednjem izrazu postaje:

$$I = \int_0^\infty \frac{\eta e^{-\eta} d\eta}{1 + e^{-\eta}}. \quad (167)$$

Razvijmo podintegralnu funkciju u Taylorov red:

$$\frac{\eta e^{-\eta}}{1 + e^{-\eta}} = \eta e^{-\eta} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n e^{-n\eta}. \quad (168)$$

Ovo znači da je:

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\infty \eta e^{-(n+1)\eta} d\eta. \quad (169)$$

Koristeći vrednost integrala:

$$\int_0^\infty \eta^k e^{-\alpha\eta} d\eta = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}, \quad (170)$$

sledi:

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{(n+1)^2}. \quad (171)$$

Vrednost ovog reda se može analitički odrediti i iznosi:

$$I = \frac{\pi^2}{12}. \quad (172)$$

Konačno je:

$$n_{2Di} = \frac{2}{\pi} \frac{(k_B T)^2}{(\hbar v_F)^2} \frac{\pi^2}{12} = \frac{\pi}{6} \frac{(k_B T)^2}{(\hbar^2 v_F)^2} = 9 \times 10^5 \frac{1}{\text{K}^2 \text{cm}^2} T^2. \quad (173)$$

Treba primetiti da sopstvena površinska koncentracija nosilaca u grafenu zavisi od kvadrata temperature, da je jedina karakteristika od koje zavisi  $n_{2Di}$  Fermijeva brzina i da  $n_{2Di}$  ima vrednost  $8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  na sobnoj temperaturi.