

УДК 530.1  
ББК 22.314  
Д 209



Издание осуществлено при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований  
по проекту №08-02-07047.

**Датта С.**

Квантовый транспорт: от атома к транзистору. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2009. — 532 с.

Книга С. Датта, автора известных работ в области нанофизики и наноэлектроники, посвящена проблемам электронного транспорта в низкоразмерных полупроводниковых структурах. Последовательно рассматриваются различные квантовые системы, от атома водорода до нанотранзистора. Излагаются наиболее общие понятия и методы неравновесной статистической механики и кинетики, и при этом не предполагается первоначальное знакомство читателя с квантовой механикой. В книге приведено большое количество численных примеров, а также программ в пакете MATLAB для проведения расчетов квантовых состояний и транспорта в объемных полупроводниках и низкоразмерных структурах. Дополнения к данному изданию в форме видеолекций, посвященных ключевым результатам книги, содержатся на Интернет-сайте автора.

Книга рассчитана на научных работников, инженеров, студентов старших курсов и аспирантов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния и наноэлектроники.

**ISBN 978-5-93972-744-0**

**ББК 22.314**

© S. Datta 2005

This work was originally published in English by Cambridge University Press under the title *Quantum Transport: Atom to Transistor*. This publication is in copyright. Subject to statutory exception and to the provisions of relevant collective licensing agreements, no reproduction of any part may take place without the written permission of Cambridge University Press.

© Перевод на русский язык:

НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009

<http://shop.rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

# Оглавление

<b>Предисловие редактора перевода</b> . . . . .	9
<b>Предисловие автора к русскому изданию</b> . . . . .	11
<b>Предисловие</b> . . . . .	17
<b>Благодарности</b> . . . . .	21
<b>Список обозначений</b> . . . . .	22
<b>ГЛАВА 1* Пролог. Электрическое сопротивление (квантовый под- ход)</b> . . . . .	25
1.1. Диаграмма энергетических уровней . . . . .	28
1.2. Как возникает электрический ток? . . . . .	33
1.3. Квант кондактанса . . . . .	38
1.4. Профиль распределения потенциала . . . . .	42
1.5. Кулоновская блокада . . . . .	47
1.6. Переход к закону Ома . . . . .	51
<b>ГЛАВА 2* Уравнение Шредингера</b> . . . . .	67
2.1. Атом водорода . . . . .	67
2.2. Метод конечных разностей . . . . .	73
2.3. Примеры . . . . .	76
2.3.1. Частица в потенциальной яме . . . . .	77
2.3.2. Частица в трехмерной потенциальной яме . . . . .	83
<b>ГЛАВА 3* Приближение самосогласованного поля</b> . . . . .	90
3.1. Метод самосогласованного поля (ССП) . . . . .	90
3.2. Связь с многоэлектронной картиной . . . . .	96
3.3. Типы связи . . . . .	106
3.3.1. Валентные электроны . . . . .	106
3.3.2. Ионная связь . . . . .	106
3.3.3. Ковалентная связь . . . . .	110
3.4. Дополнение: многоэлектронная картина . . . . .	115

## 6 ♦ Оглавление

ГЛАВА 4. <b>Базисные функции</b> . . . . .	127
*4.1. Базисные функции как инструмент численных методов . . . . .	128
*4.2. Базисные функции как методология . . . . .	135
4.3. Равновесная матрица плотности . . . . .	142
4.4. Дополнение . . . . .	147
4.4.1. Матрица плотности . . . . .	147
4.4.2. Теория возмущений . . . . .	149
ГЛАВА 5. <b>Зонная структура</b> . . . . .	156
*5.1. Элементарные примеры . . . . .	157
*5.2. Основной результат . . . . .	163
*5.3. Обычные полупроводники . . . . .	171
5.4. Влияние спин-орбитального взаимодействия . . . . .	176
5.5. Дополнение: уравнение Дирака . . . . .	183
ГЛАВА 6. <b>Подзоны</b> . . . . .	187
*6.1. Квантовые ямы, проволоки, точки и «нанотрубки» . . . . .	188
*6.2. Плотность состояний . . . . .	199
*6.3. Минимальное сопротивление проволоки . . . . .	208
6.4. Скорость электрона в (под)зоне . . . . .	214
ГЛАВА 7. <b>Емкость</b> . . . . .	220
*7.1. Модельный гамильтониан . . . . .	222
7.2. Электронная плотность. Матрица плотности . . . . .	229
*7.3. Квантовая и электростатическая емкость . . . . .	239
7.4. Дополнение: многозонный гамильтониан в приближении эффективной массы . . . . .	246
ГЛАВА 8* <b>Уширение уровней</b> . . . . .	255
8.1. Открытые системы . . . . .	258
8.2. Локальная плотность состояний . . . . .	265
8.3. Время жизни . . . . .	276
8.4. Что образует контакт (резервуар)? . . . . .	284
ГЛАВА 9. <b>Когерентный транспорт</b> . . . . .	297
*9.1. Предварительный обзор . . . . .	297
9.2. Матрица плотности . . . . .	304
9.3. Входящий и исходящий токи . . . . .	312
*9.4. Функция пропускания . . . . .	315
*9.5. Примеры . . . . .	325

9.5.1. Аналитический пример . . . . .	325
9.5.2. Численный пример . . . . .	328
<b>ГЛАВА 10. Некогерентный транспорт . . . . .</b>	<b>339</b>
10.1. Почему атом излучает свет? . . . . .	342
10.2. Примеры . . . . .	352
10.2.1. Атомные переходы . . . . .	352
10.2.2. Межзонные переходы в полупроводниках . . . . .	356
10.2.3. Внутризонные переходы в полупроводниках . . . . .	359
10.3. Входящий и выходящий токи . . . . .	362
10.4. Дополнение: фононы . . . . .	367
<b>ГЛАВА 11. От атома к транзистору . . . . .</b>	<b>380</b>
11.1. Уравнения квантового транспорта . . . . .	381
*11.2. Закон Ома . . . . .	387
11.2.1. Классический транспорт . . . . .	387
11.2.2. Когерентный транспорт (одна подзона) . . . . .	390
11.2.3. Когерентный транспорт (много подзон) . . . . .	391
11.2.4. Квантовый транспорт с дефазировкой . . . . .	395
*11.3. Где происходит выделение тепла? . . . . .	396
11.3.1. Эффект «Пельтье» . . . . .	398
*11.4. Где происходит падение напряжения? . . . . .	400
<b>ГЛАВА 12. Эпилог . . . . .</b>	<b>415</b>
<b>Приложение: формализм вторичного квантования . . . . .</b>	<b>425</b>
П.1. Корреляционные функции . . . . .	426
П.2. Неравновесная матрица плотности . . . . .	432
П.3. Входящий и исходящий потоки . . . . .	437
П.4. Электронный ток и неупругие процессы . . . . .	441
П.5. Кулоновская блокада и резонанс Кондо . . . . .	447
<b>Программы на языке MATLAB для построения иллюстраций . . . . .</b>	<b>455</b>
<b>Дополнительная литература . . . . .</b>	<b>516</b>
1. Пролог . . . . .	516
2. Уравнение Шредингера . . . . .	517
3. Самосогласованное поле . . . . .	518
4. Базисные функции . . . . .	519
5. Зонная структура . . . . .	519
6. Подзоны . . . . .	520
7. Емкость . . . . .	520

## 8    ♦    **Оглавление**

8.	Уширение уровней . . . . .	520
9.	Когерентный транспорт . . . . .	521
10.	Некогерентный транспорт . . . . .	521
11.	От атома к транзистору . . . . .	522
12.	Приложение: формализм вторичного квантования . . . . .	522
<b>Литература . . . . .</b>		<b>524</b>
<b>Предметный указатель . . . . .</b>		<b>528</b>