

МОРДОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.П.ОГАРЕВА

На правах рукописи

Кокорева Мария Алексеевна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ НА
ПРИМЕСЯХ В ЭЛЕКТРОННОМ ТРАНСПОРТЕ
КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР**

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор В.А. Маргулис

Саранск – 2011

Оглавление

Введение	4
Обозначения	18
Глава 1 Литературный обзор	19
1.1 Различные модели наноструктур с рассеивателями	19
1.2 Модель потенциалов нулевого радиуса	38
Глава 2 Моделирование электронного транспорта в двухтерминальном кольце Ааронова-Бома с примесями	42
2.1 Гамильтониан и коэффициент прохождения наноустройства . .	43
2.2 Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии одной примеси в кольце	48
2.2.1 Случай симметричного присоединения контактов к кольцу	48
2.2.2 Случай несимметричного присоединения контактов к кольцу	56
2.3 Дискретные уровни, погруженные в непрерывный спектр	60
2.4 Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии двух примесей в кольце	62
2.5 Основные результаты главы	66
Глава 3 Спектральные и транспортные свойства периодической цепочки квантовых колец	68
3.1 Дисперсионные соотношения для цепочки колец, соединенных между собой проводниками	69

3.2	Дисперсионное соотношение для цепочки колец, имеющих между собой точечный контакт	79
3.2.1	Случай диаметрально противоположного соединения колец	79
3.2.2	Случай не диаметрально противоположного соединения колец	83
3.3	Численные методы решения дисперсионного уравнения	86
3.4	Основные результаты главы	89
Глава 4 Моделирование электронного транспорта в квантовом цилиндре при наличии нескольких точечных примесей на его поверхности		92
4.1	Постановка задачи и метод решения	93
4.2	Моделирование рассеяния электронов в цилиндре при наличии одиночной примеси	96
4.3	Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии двух точечных примесей	100
4.4	Основные результаты главы	107
Заключение		109
Приложение А		112
Приложение В		127
Приложение С		155
Список литературы		166

Введение

Физическая постановка задачи

В последние два десятилетия физические свойства наноструктур привлекают к себе все большее внимание. Это обусловлено несколькими причинами. Во-первых, в мезоскопических системах были открыты интересные физические эффекты, имеющие фундаментальное значение: целый [1] и дробный [2] квантовые эффекты Холла, эффект Ааронова–Бома в квантовых кольцах [3], квантование кондактанса в баллистических проводниках [4], резонансы Брейта-Вигнера и Фано в электронном транспорте [5–7] и ряд других. Это дает повод ожидать открытия в наноструктурах и других важных с точки зрения фундаментальной физики эффектов. Во-вторых, устройства на основе наноструктур стали активно внедряться электронной инженерией в производство и стимулировали его прогресс. В современных полупроводниковых технологиях уже применяются такие наноструктуры, как сверхрешетки, квантовые ямы, и проволоки. Успехи в области нанотехнологий позволяют надеяться на возможность создания в будущем новых типов электронных устройств на основе различных наноструктур.

Одними из наиболее интересных приложений мезоскопики являются квантовые вычисления и квантовые компьютеры. Наноэлектронные устройства обладают целым рядом неоспоримых преимуществ перед микроэлектронными устройствами: компактность, энергосбережение, быстродействие и т.д. В ряде работ предложены возможные конструкции квантового интерференционного транзистора, квантового переключателя [8, 9], они, в свою очередь, могут использоваться в качестве структурных элементов квантовых приборов электроники будущего. Сейчас интенсивно ведутся разработки

альтернативных концепций проектирования вычислительных устройств. Одноэлектронный транзистор может применяться как запоминающий элемент в устройствах нано-флэш памяти. Диоды, основанные на резонансном туннелировании, находят различные применения, такие как аналого-цифровые преобразователи с частотой 10-100 ГГц, генераторы квантовых импульсов (для часовых устройств), сдвиговые регистры и элементы памяти со сверхнизким потреблением энергии. Таким образом, наноструктуры могут найти свое применение в области вычислительной электроники, где обычные кремниевые элементы (из-за ограниченности литографической технологии) не дают сравнимых частот, и где применение криогенной техники, возможно, будет оправдано. Очевидно, что электронные свойства наноструктур должны быть исследованы до появления технологии их массового изготовления. В связи с этим исследование электронного транспорта в различных наноструктурах является весьма актуальной задачей.

В последнее время резко возрос интерес к экспериментальным и теоретическим исследованиям искривленных наноструктур с примесями (с различными включениями, в том числе с примесями). Это обусловлено тремя основными причинами. Во-первых, наличие дискретного энергетического спектра электронов в таких структурах позволяет осуществлять резонансный транспортный режим в содержащих их устройствах. Во-вторых, создание идеально чистых образцов является очень трудной технологической задачей. В-третьих, характер электронного транспорта в искривленных структурах сильно зависит от положения контактов и примесей, что делает возможным получение систем с заданными свойствами путем выбора точек присоединения контактов и нахождения примесей. Таким образом, наличие примесей в структуре меняет её магнитные, транспортные и оптические свойства. Для описания этих свойств необходимо изучить влияние примесей. Для рассмотрения этого влияния в свою очередь необходимо построить для изучаемой системы адекватную модель, учитывающую наличие примесей и контактов.

Для исследования влияния примесей на физические свойства различных наноструктур были разработаны различные модели, позволяющие получить решения этой задачи аналитически. Одной из них является модель

сильной связи [10], в которой короткодействующие включения моделируются замкнутой цепочкой нескольких атомов, связанных между собой прыжковым интегралом. Например, в [11] с помощью этой модели описывалась квантовая точка в одном из плеч кольца Ааронова-Бома. Кольцо рассматривалось как одномерная цепочка, состоящая из 2^7 атомов (ячеек). Квантовая точка моделировалась как кластер из трех атомов (ячеек), прыжковый интеграл между которыми отличался по величине от аналогичного между атомами кольца.

В рамках этой модели на основе численных методов, а именно, конечно-разностных схем, можно рассчитать, например, функции Грина и матрицы рассеяния для проводников произвольной формы. Но, наряду с этим неоспоримым преимуществом, метод обладает недостатком: шаг сетки a , на которую заменяется реальная структура, должен стремиться к нулю [10] (должно выполняться условие $ka \rightarrow 0$ (k – волновой вектор электрона) для того, чтобы дисперсионное соотношение для дискретной сетки перешло в соответствующее соотношение для непрерывной структуры). Ясно, что для проведения расчетов с хорошей точностью, необходимо решить систему очень большого количества уравнений, число которых равно числу точек аппроксимации (узлов сетки). Если же брать небольшое число точек, то эта схема будет работать только для области малых энергий. Также следует отметить, что результат в этой модели зависит от числа точек, которыми аппроксимируется примесь.

Для описания возмущений в системах также используют модели, явно учитывающие геометрию включений. Здесь следует отметить работы [5, 12, 13], в которых рассеиватели моделировались потенциальными ямами конечных размеров в соответствующей размерности. Такие модели, естественно, могут успешно применяться, но следует учитывать тот факт, что далеко не каждое возмущение может быть описано простой моделью потенциальной ямы.

Упомянутые выше модели представляют определенный интерес, и позволяют выявить особенности поведения магнитотранспорта и кондаксанса различных структур при наличии примесей. В то же время они имеют и ряд недостатков, о которых было сказано выше.

Имеется еще одна достаточно простая, но очень эффективная модель

для описания примесей и дефектов – это модель потенциалов нулевого радиуса [9, 14–18]. Подробное описание метода потенциалов нулевого радиуса и целый ряд квантовомеханических задач, допускающих точное решение с применением этого метода, представлено в книге [19]. Основы метода изложены и в книге [20], где, в частности, подробно обсуждается предельный переход от потенциальной ямы конечных размеров к точечному потенциалу. Суть метода в том, что при устремлении радиуса потенциальной ямы к нулю и одновременном увеличении характерной глубины ямы (обратно пропорционально квадрату радиуса ямы) частица будет находиться в основном вне ямы, и ее можно будет рассматривать как свободную, если заменить яму граничным условием в соответствующей точке. Граничное условие задает производную функции $(r\psi)$ и имеет вид

$$\frac{1}{r\psi} \frac{\partial(r\psi)}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow 0} = -\alpha, \quad (1)$$

где r — расстояние от частицы до центра потенциальной ямы (r меньше радиуса ямы). Коэффициент $\alpha = \sqrt{2mE_0}/\hbar^2$ (E_0 — энергия связи) в граничном условии может быть как положительным, так и отрицательным; последнее соответствует случаю, когда нет связанного состояния (яма мелкая). Таким образом, задавая величину и знак параметра α , можно поставить задачу как о связанных состояниях, так и о рассеянии. Величину $2\pi/\alpha$ можно условно назвать мощностью потенциальной ямы. Коэффициент α выражается через так называемую длину рассеяния a по формуле $\alpha = 1/a$.

Добавление к потенциалу малого радиуса медленно меняющегося потенциала (внешнее поле) не изменяет граничного условия [20]. Поэтому во всех точках пространства, кроме точки, в которой находится яма нулевого радиуса, волновая функция частицы удовлетворяет уравнению Шредингера $H\psi = E\psi$, где в гамильтониане $H = T + V$ помимо оператора кинетической энергии может присутствовать и некоторый потенциал $V(\vec{r})$, не имеющий особенностей в точке нахождения потенциала нулевого радиуса. В [19] показано, что волновая функция электрона в поле потенциала нулевого радиуса и потенциала $V(\vec{r})$ с точностью до постоянного множителя совпадает с функцией Грина для уравнения Шредингера с потенциалом $V(\vec{r})$. Трехмерная функция

Грина в замкнутой форме может быть найдена для многих важных случаев (например, свободная частица, однородное поле, кулоновское поле, поле гармонического осциллятора и некоторые другие).

В случае, когда имеется несколько потенциалов нулевого радиуса, граничное условие на волновую функцию задается не в одной точке, а в нескольких (в точках, где сосредоточены эти потенциалы).

Таким образом, удобство этого метода заключается в том, что возмущение с потенциалом нулевого радиуса задается с помощью граничных условий.

Этот метод имеет ряд преимуществ. Во-первых, этот метод позволяет точно учесть эффекты, связанные с многократным рассеянием (в том числе на бесконечном числе рассеивателей), действие на физические системы различного рода возмущений, которые не являются малыми, и т.д. Во-вторых, метод дает возможность единообразно и аналитически решить как задачу о связанных состояниях, так и о рассеянии. С его помощью можно исследовать как дискретный, так и сплошной спектр. Для многих важных задач квантовой механики, когда обычные приближенные методы неприменимы (или возможность их применения неясна), аналогичные задачи с потенциалом нулевого радиуса оказываются точно разрешимыми.

Многоцентровое точечное взаимодействие в одномерном, двумерном и трехмерном случаях с математической точки зрения подробно рассматривалось в монографии [21].

При описании электронного транспорта в искривленных наноструктурах метод потенциалов нулевого радиуса можно использовать не только с целью моделирования рассеяния на примесях, но и для моделирования рассеяния на точечных контактах. Этот случай может быть реализован на практике, например, когда один из проводников представляет собой зонд атомного силового микроскопа [22, 23]. Ясно, что устройство с точечными контактами интересно с теоретической точки зрения, поскольку в этом случае удастся получить явные формулы для матрицы рассеяния устройства, которые могут служить основой для понимания и описания результатов, полученных в других, более сложных и реалистичных моделях.

Этот метод широко применялся в физике наноструктур. С его помощью

исследовался транспорт при наличии одиночной точечной примеси в различных наноструктурах, таких, как, квазиодномерный канал в 2DEG в параллельном магнитном поле [24], трехмерное сужение в продольном магнитном поле [25], двумерный канал [26–29]. В [29] теоретически изучалось рассеяние на одиночной примеси в двумерном канале, помещенном в перпендикулярное магнитное поле. В модели потенциалов нулевого радиуса получен явный вид законов дисперсии для углеродной нанотрубки в однородном магнитном поле без примеси [30], а также баллистический кондактанс квантовой проволоки при наличии нескольких примесей [31]. В [32] рассматривались различные модели, описывающие движение двумерных электронов в магнитном поле при наличии примесей, моделируемых потенциалами нулевого радиуса. В [33, 34] из потенциалов нулевого радиуса была построена двумерная решетка. Решетка помещалась в поперечное магнитное поле, поток которого через ячейку решетки рационален. В [33] исследовалась структура спектра в наиболее простом случае, когда элементарная ячейка решетки одноатомная, а поток через элементарную ячейку — четное число. Была найдена функция Грина магнитно-блоховского электрона в двумерной решетке точечных потенциалов, что дало возможность определить спектр этого оператора в случае рационального потока через элементарную ячейку решетки. В [34] была изучена структура спектра H при произвольном рациональном потоке и для общего случая многоатомной ячейки. В [35] изучено рассеяние на точечных дефектах в 2D- и 3D-системах в рамках модели потенциалов нулевого радиуса. Проводимость 2D электронного газа в квантующем магнитном поле при рассеянии на системе потенциалов нулевого радиуса, моделирующих точечные дефекты, исследовалась в [36]. Именно этот метод используется для моделирования примесей и контактов в диссертации. Отметим, что примеси можно описывать как точечные, если скорость электронов предполагается настолько малой, что длина волны частицы велика по сравнению с радиусом действия поля примеси $U(r)$, а энергия частицы мала по сравнению с величиной поля внутри этого радиуса [19, 37].

Общая характеристика работы

Для того, чтобы правильно интерпретировать результаты экспериментов по изучению физических свойств наноструктур с примесями, необходимо теоретически предсказать какие эффекты могут появляться при внесении примесей в систему. Теоретическое исследование транспорта в наноструктурах является сложной проблемой, особенно, если система обладает кривизной. Влияние примесей на свойства искривленных наноструктур является относительно малоизученным, а большинство теоретических исследований в этой области, как правило, ограничиваются априорным введением матрицы рассеяния и слегка модифицированными стартовыми выражениями, а далее применяются численные методы, которые далеко не всегда позволяют выявить физическую природу различных явлений, а также проанализировать их особенности.

В связи с этим возникает **проблема диссертационного исследования**:

1. построить математическую модель для описания электронного транспорта в наноструктурах при наличии нескольких короткодействующих примесей; на основе этой модели исследовать электронный транспорт на поверхности квантового цилиндра, в двухтерминальном кольце Ааронова-Бома и в цепочке колец;
2. получить удобные для анализа аналитические формулы для кондактанса рассматриваемых наносистем, а также одноэлектронный энергетический спектр для цепочки колец;
3. провести аналитическое и численное исследование зависимости кондактанса наноструктур от параметров систем;
4. создать программы для численного расчета кондактанса кольца и цилиндра и для построения спектра цепочки колец;
5. исследовать влияние расположения контактов на полученные зависимости;

6. исследовать влияние расположения примесей на полученные зависимости;
7. изучить влияние параметров контактов и примесей на электронный транспорт;
8. исследовать влияние внешнего магнитного поля на электронный транспорт в кольцах и цилиндре.

Преимуществом рассматриваемой в работе модели является возможность явного учета влияния положения примесей и контактов, а также их параметров на электронный транспорт рассматриваемых наноструктур. Как показано ниже, асимметрия в положении контактов и наличие примесей оказывает существенное влияние на электронный транспорт и может приводить к возникновению таких эффектов, как резонансы Фано.

Перечислим основные используемые в диссертации **методы и подходы**. Для исследования транспортных свойств наноструктур используется формализм Ландауэра-Бюттикера [38–42], позволяющий выразить кондактанс проводника через коэффициенты прохождения электрона через систему. Для построения электронного гамильтониана наноструктуры и определения коэффициентов прохождения электрона в диссертации используется метод, основанный на теории самосопряженных расширений симметрических операторов. Этот метод применен для исследования влияния рассеяния на примесях на электронный транспорт двухтерминального кольца Ааронова-Бома, цепочки колец и квантового цилиндра. В диссертации разработан удобный подход для анализа коэффициента прохождения, основанный на разложении формулы для коэффициента прохождения в ряд Тейлора в окрестности резонансов.

Научная новизна и значимость работы определяется следующими основными результатами теоретического исследования.

1. Построена модель, позволяющая исследовать электронный транспорт в наноструктурах с присоединенными к ним в произвольных точках одномерными проводниками при наличии точечных примесей.

2. На основе этой модели исследован электронный транспорт через кольцо Ааронова-Бома с двумя присоединенными к нему проводниками при наличии точечных примесей. Получены аналитические формулы для коэффициента прохождения электронов в этой системе.
3. Показано, что зависимость коэффициента прохождения электрона через кольцо от энергии носит резонансный характер. Аналитически показано существование асимметричных резонансов Фано в разработанной модели. Найдены положения пиков и нулей резонансов; выражения, связывающие ширины резонансов с параметрами примесей и контактов. Показано, что при определенных положениях примесей наблюдается коллапс резонансов Фано.
4. Исследован электронный транспорт через цепочку одномерных колец при наличии магнитного поля. Найден электронный энергетический спектр для различных моделей соединения колец в цепочку. Изучено влияние параметров контактов между кольцами и соединяющими их одномерными проводниками (длина этих проводников, величина потока магнитного поля через кольца, а также положение контактов) на спектр.
5. Изучен электронный транспорт в квантовом цилиндре при наличии нескольких короткодействующих примесей на его поверхности. Получены аналитические выражения для коэффициента прохождения электрона и кондактанса системы. Исследовано влияние параметров примесей на кондактанс.
6. Разработаны программный комплекс и специальные численные методы для построения энергетического спектра цепочки одномерных колец, а так же программы для построения зависимостей кондактанса двухтерминального кольца Ааронова-Бома и квантового цилиндра от параметров систем при различном числе примесей.

Характеризуя **практическую значимость работы** отметим следующее.

1. Методы и модели, используемые в работе, могут быть использованы при исследовании особенностей электронного транспорта в других наноструктурах, содержащих точечные примеси.
2. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными может дать ценную информацию о параметрах электронного энергетического спектра, примесей и контактов.
3. Результаты проведенного анализа резонансной структуры коэффициента прохождения могут быть использованы при разработке новых резонансных наноэлектронных приборов на базе рассматриваемых систем.
4. Результаты изучения зонной структуры в цепочке колец в зависимости от различных параметров системы могут быть использованы для получения структур с наперед заданным энергетическим спектром. Такие образцы нужны, например, для создания фотодетекторов, работающих на основе переходов между минизонами, в различных диапазонах частот.

Апробация результатов работы

Результаты работы докладывались на конференциях и семинарах:

1. Международная конференция "Fundamentals of Electronic Nanosystem" NanoPeter-2010 (St. Petersburg, 2010).
2. VIII российская конференция по физике полупроводников (Екатеринбург, 2007 г.).
3. VIII и IX всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур и полупроводниковой нано- и оптоэлектронике (Санкт-Петербург, 2006 г., 2007 г.).
4. Всероссийская молодежная научная школа "Материалы нано-, микро- и оптоэлектроники: физические свойства и применение" (Саранск, 2006 г., 2007 г., 2008г., 2009г.).
5. X научная конференция молодых ученых, аспирантов и студентов Мордовского государственного университета имени Н.П. Огарева (Саранск, 2006 г.).

Публикации

По результатам проведенных исследований опубликовано 12 работ [43–54], в том числе 3 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК [43–45].

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Зависимость коэффициента прохождения двухтерминального кольца Ааронова-Бома от энергии электронов носит осцилляционный характер. В присутствии примесей эта зависимость содержит вблизи дискретных энергетических уровней квантового кольца резонансы Фано. Необходимым условием существования резонансов является частичное нарушение симметрии системы. Ширина резонансов существенно зависит от положения точек контактов и примесей.
2. Возможны два механизма исчезновения нулей кондактанса в кольце. Первый механизм — это коллапс резонансов Фано при определенных положениях примесей и значениях магнитного поля. Второй — сдвиг нуля коэффициента прохождения с действительной оси в комплексную плоскость энергий. Коллапс резонансов Фано сопровождается повышением симметрии системы, в то время как второй механизм обусловлен понижением этой симметрии.
3. В общем случае одноэлектронный энергетический спектр цепочки одномерных колец имеет зонную структуру, перекрытия зон не происходит. При определенных условиях в системе имеются дискретные уровни. Параметр взаимосвязи между кольцами определяет ширину запрещенных зон. При отсутствии связи между кольцами разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни изолированного кольца.
4. Зонная структура цепочки колец чувствительна к положению контактов на кольце. При определенных положениях контактов на кольце дискретные уровни могут трансформироваться в минизоны.
5. В спектре цепочки колец, соединенных между собой проводниками в не диаметрально противоположных точках, при наличии магнитного поля появляются не прямые запрещенные зоны.

6. Зависимость кондактанса квантового цилиндра от химического потенциала носит ступенчатый характер. Примесь приводит к появлению провалов, связанных с резонансным рассеянием на виртуальном уровне. Глубина провалов зависит от длины рассеяния примеси. При наличии двух и более примесей на зависимости $G(\mu)$ имеются резонансы Фано. При определенных положениях примесей и значении магнитного поля происходит коллапс резонансов Фано. Кроме коллапса возможен второй механизм исчезновения резонанса — его сглаживание при соответствующих условиях.
7. При наличии двух примесей на одной образующей цилиндра на малом расстоянии друг от друга, зависимость кондактанса от химического потенциала подобна случаю одной примеси. Если расстояние между примесями много больше радиуса цилиндра, то интерференция электронных волн, рассеянных на разных примесях, приводит к появлению осцилляций на зависимости $G(\mu)$.
8. Программные комплексы, разработанные для решения поставленных задач:
 - программа, написанная на языке Pascal, для численного исследования зависимости коэффициента прохождения двухтерминального кольца от параметров системы при наличии нескольких примесей,
 - программный комплекс, разработанный на языке TurboDelphi, для расчета и построения спектра и кондактанса цепочки одномерных колец,
 - программа, написанная на языке Pascal, для численного исследования зависимости кондактанса квантового цилиндра от параметров системы при наличии нескольких примесей.
9. Численные методы, разработанные для расчета спектра и кондактанса цепочки одномерных колец.

Личный вклад автора в работу заключается в участии в решении

поставленных задач и интерпретации полученных результатов. Численный анализ проведен автором самостоятельно.

Изложение диссертационных исследований построено следующим образом.

В **Главе 1** приводится литературный обзор наиболее важных работ, сделанных в области диссертационного исследования.

В **Главе 2** построена модель одномерного двухтерминального кольца Ааронова-Бома при наличии на нем нескольких короткодействующих рассеивателей и с помощью этой модели исследован электронный транспорт в системе. Для моделирования рассеивателей и точек контактов используется теория потенциалов нулевого радиуса. Получено выражение для кондактанса системы в зависимости от энергии электрона, потока магнитного поля через кольцо и положения рассеивателей для общего случая N примесей. Подробно рассмотрены случаи рассеяния электронов на одной и двух примесях. Получены аналитические выражения для амплитудного коэффициента прохождения в этих случаях. Показано, что зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона содержит асимметричные резонансы Фано. Изучено поведение резонансов в зависимости от положения примесей и величины магнитного поля. Выявлены условия возникновения резонансов. Показано, что при определенных параметрах системы может происходить коллапс резонансов Фано.

Глава 3 посвящена получению и исследованию электронного энергетического спектра и кондактанса периодической структуры, состоящей из одномерных колец Ааронова-Бома, соединенных между собой одномерными проводниками. Контакты колец с проводниками моделируются с помощью потенциалов нулевого радиуса. Исследованы случаи различной геометрии соединения колец. Получены дисперсионные соотношения. Изучено влияние положения контактов, длины проводников, соединяющих кольца, а также величины потока магнитного поля через кольцо на структуру энергетического спектра и кондактанс. Установлена возможность и условия существования не прямых запрещенных зон.

В **Главе 4** изучается электронный транспорт квантового цилиндра при

наличии нескольких короткодействующих примесей на его поверхности. Получена явная формула для кондактанса системы при нулевой температуре. Подробно рассмотрены случаи одной и двух примесей. Показано, что наличие точечных возмущений приводит к появлению провалов в кондактансе, связанных с резонансным рассеянием электронов. В случае одной примеси глубина провала равна одному кванту кондактанса, а его положение зависит от силы точечного потенциала. Интерференция электронных волн, рассеянных на разных примесях, приводит к появлению осцилляций на зависимости кондактанса от химического потенциала.

В **Заключении** приводится краткая сводка основных результатов диссертационной работы.

В **Приложениях** приводится листинг программ, разработанных для численных расчетов кондактанса и спектра рассматриваемых систем.

Автор выражает свою глубокую благодарность научному руководителю В.А. Маргулису за неоценимую помощь при подготовке кандидатской диссертации, а также М.А. Пятаеву за консультации и помощь в расчетах.

Обозначения

\mathbf{B} – вектор индукции магнитного поля

c – скорость света в вакууме

e – заряд электрона

m – магнитное квантовое число

m_0 – масса свободного электрона

m^* – эффективная масса электрона

\hbar – постоянная Планка

$\Phi_0 = 2\pi c\hbar/|e|$ – квант магнитного потока

μ – химический потенциал

$k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ – волновое число электрона

E_F – энергия Ферми

$f_0(E) = 1/(1 + \exp[(E - \mu)/T])$ – функция распределения Ферми-Дирака

t – амплитудный коэффициент прохождения

T – энергетический коэффициент прохождения

$G_0 = 2e^2/h$ – квант кондактанса

Глава 1

Литературный обзор

1.1 Различные модели наноструктур с рассеивателями

Большие успехи в области нанотехнологий позволили в настоящее время создавать структуры очень малых размеров с исключительной чистотой и совершенством кристаллической решетки. В таких структурах электрон имеет большую фермиевскую длину волны, сравнимую с размерами структуры (порядка десятков нанометров). Длина свободного пробега электронов в этом случае так же велика (более $10 \text{ } \mu\text{m}$). Появилась возможность изготовления структур, в которых достигается фазовая когерентность на длинах в несколько μm . При низкой температуре в случае, когда длина свободного пробега электронов превышает размер структуры, в этих системах наблюдается баллистический режим электронного транспорта. Этот режим характеризуется тем, что электрон пролетает через структуру, не испытывая влияния рассеивателей. Эксперимент Шарвина по изучению проводимости металлического точечного контакта [39] показал неприменимость в этом случае классической теории электропроводности. В связи с этим возникла необходимость построения новой теории электронного транспорта, основы которой были созданы Ландауэром и Бюттикером [38, 40–42]. Последовательное изложение теории баллистического транспорта в наноструктурах можно найти в [10, 55].

Теория Ландауэра–Бюттикера позволяет выразить кондактанс системы через коэффициенты прохождения электронов для разных электронных мод. При нулевой температуре зависимость кондактанса G от химического потен-

циала μ выражается формулой

$$G(\mu) = G_0 \sum_{n,n'=1}^{\infty} T_{n,n'}(\mu). \quad (1.1)$$

Здесь G_0 — квант кондактанса, а $T_{n,n'}(\mu)$ — вероятность прохождения электрона из состояния с квантовым числом n (из n -ой моды) в состояние с квантовым числом n' . Таким образом задача о нахождении кондактанса системы сводится к задаче о нахождении коэффициентов прохождения электронов. В случае конечной температуры формула для кондактанса приобретает вид

$$G(\mu, T) = \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E) dE, \quad (1.2)$$

где $f_0(E, \mu, T) = 1/(1 + \exp[(E - \mu)/T])$ — функция распределения Ферми, $G(\mu)$ — кондактанс при $T = 0$. Формула Ландауэра–Бюттикера используется в большинстве теоретических работ, посвященных изучению электронного транспорта в наноструктурах.

Первыми работами, в которых была на практике успешно проверена формула Ландауэра, были работы [4, 56], в которых было исследовано квантование кондактанса узкого и короткого сужения в двумерном электронном газе. Была получена ступенчатая зависимость кондактанса от напряжения на затворе. Такая зависимость характерна и для двумерных и трехмерных квантовых сужений [57–59].

В последнее время все большее внимание привлекают системы, в которых вместо ступенчатой зависимости кондактанса от химического потенциала наблюдается резонансный характер транспорта. В частности, значительное внимание уделено влиянию примесей на кондактанс в наноструктурах. Как показано в работах [5, 12, 13, 60, 61], наличие примесей приводит к появлению резонансов в проводимости, причем наряду с обычными резонансами Брейта-Вигнера, в системе могут наблюдаться асимметричные резонансы Фано [62], состоящие из близко расположенных нуля и пика коэффициента прохождения. В окрестности резонанса Фано прозрачность системы описывается универсальной функцией

$$f(\varepsilon) = \frac{A}{1 + q^2} \frac{(\varepsilon + q)^2}{(\varepsilon + 1)^2}, \quad (1.3)$$

где $\varepsilon = (E - E_R)/\Gamma$ — безразмерный параметр, описывающий отклонение энергии E от резонансного значения E_R , Γ — ширина резонанса, A — амплитуда резонанса, а q — параметр асимметрии. В точке $\varepsilon = -q$, которой соответствует энергия $E_0 = E_R - q\Gamma$, коэффициент прохождения обращается в нуль. На комплексной плоскости энергии пику коэффициента прохождения соответствует полюс амплитуды рассеяния в точке $E_R + i\Gamma$, лежащий на нефизическом листе, в то время как нуль находится на действительной оси. Важным свойством резонансов Фано является независимость параметра асимметрии q от ширины резонанса Γ . Резонансы Фано обусловлены интерференцией локализованных состояний дискретного спектра с распространяющимися электронными волнами.

Интерференционные явления, тесно связанные с резонансами Фано, активно изучаются как теоретически, так и экспериментально. Изучению резонансов Фано в электронном транспорте через различные системы посвящено большое количество работ [5, 12, 13, 60, 61, 63, 64]. Среди различных систем, в которых транспорт может носить резонансный характер, можно выделить искривленные наноструктуры, имеющие, например, форму кольца, цилиндра и более сложных поверхностей.

Статья, в которой был представлен первый эксперимент на полупроводниковом кольце (рис. 1.1) в системе GaAs/AlGaAs, была работа [65]. Кольцо (рис. 1.1) было изготовлено методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В этой работе впервые наблюдались осцилляции Ааронова-Бома. Эти осцилляции были обнаружены и в работах [66–68]. Так же в подобных системах был обнаружен ряд интересных физических эффектов, таких как незатухающий ток [65, 69], эффект захвата электронов при наличии магнитного поля [70] и т.д. В последние годы интерес к квантовым кольцам усилился вновь в связи с экспериментальным обнаружением [71, 72] в них резонансов Фано [62] в электронном транспорте. Экспериментальному изучению колец посвящены работы [73–78].

В настоящее время на основе квантовых колец создаются квантовые кольцевые интерферометры, используемые как для экспериментального изучения интерференционных эффектов, так и с целью внедрения в дальнейшем

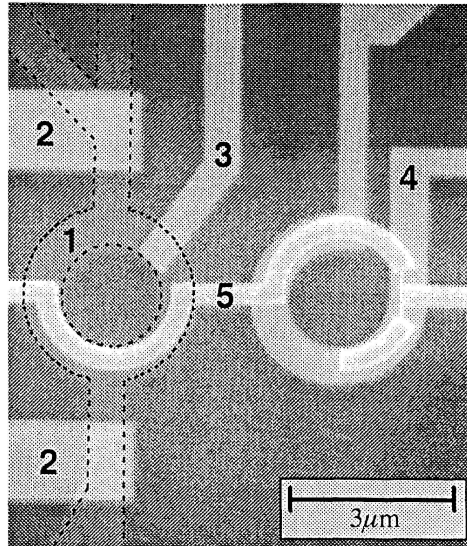


Рис. 1.1. Снимок экспериментальной установки из работы [65], сделанный на электронном микроскопе. Слева кольцо, вытравленное в GaAs 2DEG (помечено 1), с двумя затворами 2 и 3 (управляющие электроды). Справа калибровочное кольцо 4. 5 – SQUID (сверхпроводящий квантовый интерференционный датчик) с двумя соединяющими микромостиками справа.

в производство. В связи с этим сразу встает вопрос о модели, с помощью которой можно изучать кольца теоретически.

Для моделирования колец с целью изучения их различных характеристик, в том числе и транспортных, использовались разнообразные модели. Их можно разделить на две категории: одномерные и двумерные. Остановимся сначала на двумерных. К простейшим моделям колец можно отнести модель двумерной или трехмерной проволоки с периодическими граничными условиями [79, 80]. В [79, 80] кольцо рассматривалось как параболический двумерный квантовый канал. Модель кольца получалась путем наложения периодических граничных условий на волновую функцию электрона в прямом канале с параболическим ограничивающим потенциалом. Так же модель параболического потенциала для моделирования движения электронов по кольцу использовалась в работе [81] по исследованию электрон-электронного взаимодействия и незатухающего тока в 2D кольце. Кроме параболического, для теоретического изучения физических свойств двумерных квантовых колец применяются и другие модели ограничивающих потенциалов [82–86]. В [82] исследовались невзаимодействующие бесспиновые электроны в двумер-

ном кольце, которое получалось наложением радиального потенциала вида

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (1.4)$$

где $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$, а a_1 и a_2 — некоторые константы. В [83] численными методами исследовалось влияние электрон-электронного взаимодействия на намагниченность кольца с малым числом электронов. Для моделирования 2D кольца в этой работе использовался потенциал Хилла в виде смещенной параболы

$$V(r) = \frac{1}{2}(r - r_0)^2 \quad (1.5)$$

(r_0 — средний радиус кольца), который анализировался в работе [84] вместе с потенциалом Волкано (1.4). В [85] вместо ограничивающего потенциала использовалось неоднородное магнитное поле для формирования 2D магнитного квантового кольца. В [86] теоретически исследовалось спин-орбитальное расщепление энергетических уровней $2D$ кольца, помещенного в магнитное поле, перпендикулярное плоскости кольца. Кольцо рассматривалось, как квантовый диск с ограничивающим потенциалом типа жесткой стенки (потенциал равен нулю для $a \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq b$ и бесконечности в остальной области, где a и b — внутренний и внешний радиус соответственно). Также с использованием потенциала твердой стенки в двумерном кольце на основе численных методов изучался равновесный незатухающий ток в работе [87]. Однако экспериментально затруднительно определить явный вид потенциала, описывающего конфайнмент кольца. Но тем не менее о применимости той или иной модели для описания колец можно судить при сравнении экспериментальных данных и теоретических результатов. Численно модели колец конечной ширины исследовались в работах [88, 89]. В работе [88] было предложено моделировать места соединения 2D кольца с проводниками треугольными квантовыми точками. В [89] численно рассматривались квадратные кольца с различными значениями отношения ширины плеча кольца к длине кольца. Исследовалось влияние величины этого отношения на осцилляции Ааронова-Бома.

Так же существует простая, но в то же время очень распространенная модель, когда кольцо считается одномерным. Несмотря на то, что с помо-

щью упомянутых выше моделей иногда удается получить подробное описание поведения некоторых характеристик колец, самая простая, и, казалось бы, самая примитивная модель одномерного кольца в свое время позволила выявить основные черты поведения незатухающего тока и транспорта в реальных кольцах, а так же получить их спектральные характеристики. Суть модели в том, что ширина кольца считается нулевой, поэтому снимаются некоторые проблемные вопросы. Например, вопрос о том, каким образом присоединить проводники к кольцу. Одномерная модель кольца применялась в целом ряде работ [90–98]. В частности, в [90] с использованием матрицы рассеяния была получена периодическая зависимость сопротивления двухтерминального кольца от потока магнитного поля. В [91] изучалась зависимость коэффициента прохождения от изменения фазы в прошедшей волне при различных параметрах связи между проводниками и кольцом. Было установлено наличие резонансов Брейта-Вигнера в коэффициенте прохождения системы, рассмотрены механизмы, приводящие к появлению резонансов. В [92] предлагалась общая теория одномерного квантового волновода, в частности, с помощью граничных условий на волновую функцию в точках пересечения проводников, получен кондактанс двухтерминального кольца как функция потока магнитного поля, длин плеч кольца, и волнового вектора электрона. В [93] получены выражения для кондактанса одномерного кольца, помещенного в магнитное поле, при симметричном и несимметричном подключении проводников к кольцу и исследована зависимость кондактанса от энергии электрона. В [94] построена одномерная модель для интерферометра Ааронова-Бома, состоящего из двух дуг с двумя рассеивающими центрами и без них. Найдены явные выражения для коэффициента прохождения электронами наиболее простых интерферометров различной геометрии. Изучено влияние различных параметров системы на коэффициент прохождения устройства. В работе [95] в рамках модели сильной связи изучены транспортные свойства двухтерминального кольца, а также системы последовательно соединенных мезоскопических колец. Так же в модели сильной связи были исследованы кольца Ааронова-Бома в работах [11, 98, 99]. В этих работах кольца аппроксимируются цепочкой из N узлов, связанных лишь с ближайшими соседями.

В [98] рассчитывался коэффициент прохождения кольца, как функция потока пронизывающего его магнитного поля. Кольцо из M узлов заменялось по определенной схеме на эффективную одномерную систему, состоящую из двух узлов, соединенную с обеих сторон с цепочками, моделирующими присоединенные к кольцу проводники. Следует отметить, что в модели сильной связи результат сильно зависит от числа точек аппроксимации (числа узлов в кольце) [99, 100]. В [78] исследовалась интерференция баллистических носителей тока в мезоскопических кольцах, сформированных из двух квантовых проволок внутри самоупорядоченных кремниевых квантовых ям. Получены периодические осцилляции коэффициента прохождения и фазового сдвига в зависимости от напряжения исток-сток при наличии в проволоках δ -образных барьеров.

Наличие в кольце дополнительных рассеивателей, например, квантовой точки или примеси в одном из плеч открывает дополнительные возможности для управления электронным транспортом [96, 97, 101]. В работе [97] исследовался электронный транспорт и незатухающий ток в одномерном кольце с двумя проводниками, присоединенными диаметрально противоположно, при наличии примеси в одном из плеч. Контакт между проводниками и кольцом и точечный рассеиватель описывались с помощью априорно задаваемой энергонезависимой матрицы рассеяния. Было показано, что при наличии примеси в одном плече могут появляться резонансы Фано в добавление к резонансам Брейта-Вигнера. Форма резонанса Брейта-Вигнера чувствительна к силе взаимосвязи между кольцом и проводниками. Эти резонансы пропадают в пределе сильной взаимосвязи (когда в отсутствие примеси коэффициент прохождения становится равным единице для всех энергий налетающих электронов). Показано, что при определенном положении примеси и значениях магнитного поля может происходить коллапс части резонансов Фано.

Примеси и контакты в кольце в теоретических работах описываются по-разному. В [102] в модели двумерного кольца примесь моделируется при помощи гауссова потенциала $V^{imp}(r) = V_0 e^{-(r-R)^2/d^2}$, где V_0 — сила потенциала, а d — его ширина. В работах, использующих одномерную модель кольца, применяются другие подходы. В [90] все эффекты рассеяния и сдвига фаз в

плече одномерного кольца заменяются на эффект рассеяния на точечной примеси. Каждый рассеиватель описывается с помощью четырех параметров – амплитуд прохождения и отражения слева направо и справа налево. Каждый узел (соединение кольца с проводником) описывается с помощью априорно задаваемой энергонезависимой матрицы рассеяния. Сразу надо отметить, что такой подход, основанный на априорном введении энергонезависимой матрицы рассеяния, является не совсем корректным, так как амплитуды рассеяния электронов в искривленных структурах зависят от энергии налетающих электронов. Поэтому для более реалистичного описания контактов и рассеивателей используются другие методы. В [93] контакты между 1D кольцом и 1D проводниками являются точечными и описываются с помощью теории потенциалов нулевого радиуса путем наложения соответствующих граничных условий. Тем же методом моделировались контакты между кольцом и проводниками и центры рассеяния в кольце в работе [94]. Преимущества этого метода были описаны выше. В [11] квантовая точка в 1D кольце описывается с помощью модели сильной связи как кластер из трех ячеек. В [100] так же в модели сильной связи рассматривается взаимодействие одномерного кольца с кластером из нескольких атомов, прикрепленных к одному из плеч кольца. Использование той или иной модели для описания примесей диктуется, во-первых, выбранной размерностью кольца, во-вторых, используемой моделью кольца, и в-третьих, желанием получить либо аналитический и удобный для анализа результат, либо результат, более соответствующий реальным системам, но не явный и с использованием численных методов.

Во всех вышеперечисленных работах исследован резонансный транспортный режим при различных параметрах системы. Однако, несмотря на большое количество проведенных теоретических исследований, в большинстве случаев рассматривается лишь симметричное присоединение проводников к кольцу, и до настоящего момента не проводился детальный анализ электронного транспорта в квантовом кольце при наличии нескольких рассеивателей. В то же время, следует ожидать, что положение рассеивателей относительно контактов и их взаимное расположение будут существенным образом влиять на поведение резонансов Фано, поскольку эти резонансы имеют

интерференционную природу и чувствительны к изменению фазы волновой функции электрона.

Целью **Главы 2** является исследование электронного транспорта в квантовом кольце при наличии нескольких короткодействующих рассеивающих центров, в роли которых могут выступать одиночные примеси или квантовые точки малого размера. В работе рассматривается модель одномерного квантового кольца с присоединенными к нему одномерными проводниками. Достоинство одномерной модели состоит в том, что она позволяет получить явные выражения для коэффициента прохождения наноустройства, удобные для анализа. В этом случае в системе реализуется одномодовый режим электронного транспорта и кондактанс системы не может превышать одного кванта. Таким образом все транспортные характеристики системы определяются единственным коэффициентом прохождения электрона. Нахождение коэффициента прохождения в настоящей работе основано на подходе, использовавшемся в работах [9, 14–17]. В этих работах контакты между различными частями наноструктуры описываются с помощью граничных условий, общий вид которых определяется на основе теории расширения симметрических операторов [18–21, 103]. Используемый метод предполагает описание всех частей системы с помощью единого гамильтониана, а матрицы рассеяния для каждого контакта в этом случае оказываются зависящими от энергии электрона.

Как было сказано выше, численно исследовались модели колец конечной ширины [68, 86, 88, 89]. Сравнение результатов работ [68, 88] с результатами, полученными в рамках одномерной модели, позволяет говорить о том, что одномерная модель качественно верно описывает основные особенности электронного транспорта в рассматриваемых системах, и в частности, интерференционные эффекты. Заметим, что одним из необходимых условий применимости одномерной модели является малость отношения ширины кольца к его радиусу [89]. Также необходимым условием является то, что ширина кольца по абсолютной величине должна быть достаточно малой, для того, чтобы дискретные уровни, возникающие вследствие влияния поперечного конфайнмента, были хорошо разделены по энергии [11].

Кроме одиночных колец в рамках одномерной модели можно исследо-

вать физические свойства цепочки колец. Интерес к такой системе обусловлен тем, что цепочку колец можно интерпретировать, как кольцевую сверхрешетку.

Недавно были созданы образцы, на которых стало возможным наблюдение чистой минизонной структуры в сверхрешетках [104]. Длина свободного пробега электрона в этих образцах порядка 10^5 Å, а длина одного периода в этих решетках порядка 10^3 Å. Таким образом, на сегодняшний день создаются одномерные сверхрешетки, в которых можно реализовать квазибаллистический транспорт (когда длина свободного пробега электрона сравнима с размерами системы) при размерах структуры порядка 10^5 Å (приблизительно 100 периодов решетки). Есть основания полагать, что на основе таких структур в будущем будут создаваться различные вычислительные устройства. Для того, чтобы создавать различные приборы необходимо получать структуры с наперед заданными свойствами и зонной структурой. Это дает стимул к теоретическому изучению сверхрешеток. В последнее время были созданы и экспериментально исследованы различные виды одномерных полупроводниковых сверхрешеток, такие как цепочка квантовых точек [104], цепочка квантовых колец [105, 106], сужения с периодически модулированным потенциалом [107], которые при большом напряжении смещения на затворе ведут себя подобно цепочке квантовых точек. В то же время ведутся теоретические расчеты электронных свойств конечных цепочек колец [95, 108–115] и сверхрешеток, состоящих, например, из квантовых точек [116].

Так в работе [104] изучены транспортные свойства искусственного одномерного кристалла, состоящего из цепочки пятнадцати квантовых точек, которые электростатически определены в двумерном электронном газе с помощью металлических затворов на поверхности GaAs/AlGaAs гетероструктуры. На экспериментально полученной зависимости кондактанса от напряжения на затворе (рис. 1.2) наблюдались эффекты, свидетельствующие о формировании зонной структуры, а именно глубокие провалы, которые соответствуют запрещенным зонам (уменьшение кондактанса происходит вследствие локализации энергии Ферми внутри запрещенной зоны), а между ними плато кондактанса, состоящие из пятнадцати малых осцилляций (максимумы этих

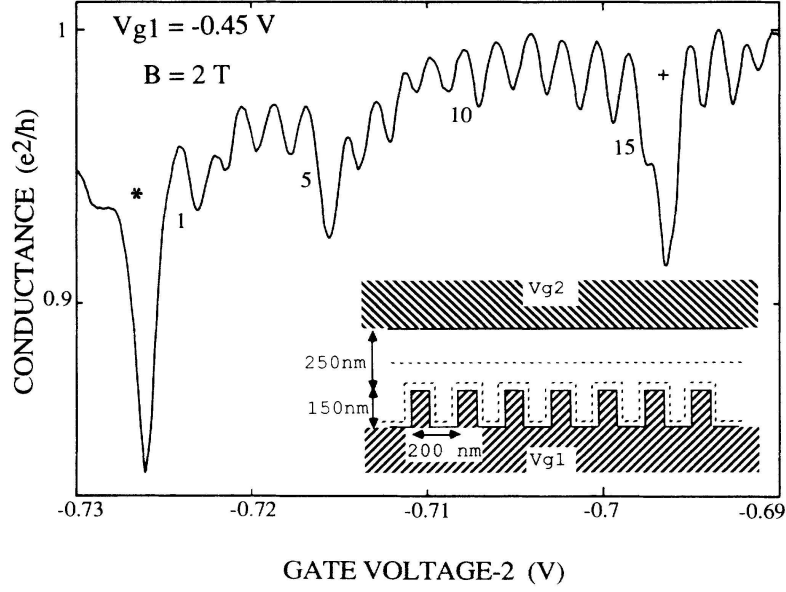


Рис. 1.2. Зависимость кондактанса от напряжения на втором затворе V_{g2} при фиксированном магнитном поле 2 T и напряжении на первом затворе $V_{g1} = -0.45$ V. На вставке схематически изображена геометрия расположения затворов; пунктиром обозначены области обеднения в двумерном электронном газе $2DEG$. Верхняя область обеднения движется вперед к выступам, когда V_{g2} становится еще более отрицательным.

осцилляций соответствуют дискретным состояниям в минизонах), которые точно соответствуют числу квантовых точек в кристалле. Доказано, что эти малые осцилляции возникают из-за взаимосвязи между квантовыми точками.

В работе [105] непосредственно наблюдались осцилляции Ааронова-Бома магнитокондактанса цепочки из одного, трех, десяти и тридцати Ag колец. Наблюдались осцилляции в зависимости от потока магнитного поля с двумя периодами, равными h/e и $h/2e$. Было выявлено, что при постоянной температуре амплитуда осцилляций с периодом h/e уменьшается пропорционально квадратному корню из числа колец, в то время как амплитуда осцилляций кондактанса с периодом $h/2e$ не зависит от числа колец в цепочке.

Имеются экспериментальные работы по наблюдению и изучению незамирающего тока в цепочке полупроводниковых колец. В [106] сообщается об измерениях при низкой температуре магнитного отклика шестнадцати

GaAs/AlGaAs соединенных мезоскопических колец, чья общая длина много больше чем длина фазовой когерентности. Количественный анализ показал, что незатухающий ток, возникающий в кольце, соединенном с другими, незначительно больше незатухающего тока, возникающего в изолированном кольце.

Для того, чтобы на основе рассмотренных цепочек можно было создавать структурные элементы для техники, необходимо исследовать влияние диаметра колец, аперидичности структуры, магнитного поля и силы взаимодействия между кольцами теоретически. Для этого используются различные модели, аналогичные моделям одиночных колец. В [95] транспортные свойства системы последовательно соединенных одномерных мезоскопических колец изучены в рамках модели сильной связи. В работах [111, 112] коэффициент прохождения цепочки N последовательно соединенных одномерных мезоскопических колец в присутствии потока магнитного поля и электростатического потенциала был найден с использованием матриц рассеяния. Амплитуды волны, падающей на первое кольцо связываются с помощью матрицы прохождения с амплитудами волны, прошедшей через N -ое кольцо путем последовательного перемножения матриц прохождения колец и соединяющих каналов. Получено явное выражение для кондактанса N колец, соединенных между собой точечным контактом, в отсутствии полей. Был показан осцилляционный характер вероятности прохождения с широкими нулевыми и единичными промежутками, заключающими в себе малые осцилляции, число которых на единицу меньше числа колец. Такое поведение можно увязать с формированием минизонной структуры в конечной цепочке колец аналогично формированию в других видах сверхрешеток.

В [116] исследовались электронные свойства одномерной сверхрешетки, сконструированной на основе сужения, состоящей из цепочки квантовых точек, соединенных между собой одномерными каналами. Для моделирования системы использовался сильный удерживающий потенциал в z направлении, а так же периодически изменяющий свою ширины поперечный конфаинмент (рис. 1.3).

В [116] продемонстрировано появление двух различных видов запре-

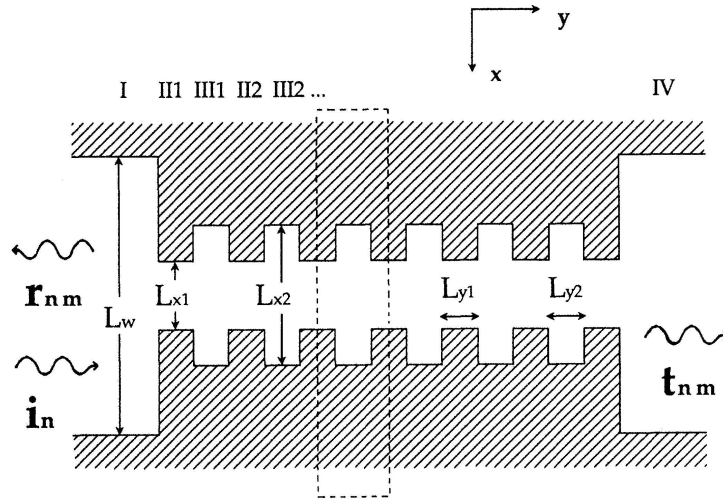


Рис. 1.3. Схематическое изображение поперечного конфайнмента из [116].

щенных зон, в отличие от [107], и объяснено их появление. Первый вид запрещенных зон минизонной структуры возникает из-за взаимодействия между локализованными состояниями квантовых точек вследствие периодичности структуры. А дополнительные запрещенные зоны возникают из-за взаимодействия между $1D$ состояниями при определенных k_y (y — направление оси канала) и виртуальными состояниями открытых квантовых точек в виде пересечений (антикроссингов) между этими состояниями. На основе найденного, но не приведенного в [116] дисперсионного соотношения, полученного с использованием граничных условий на единичную ячейку и блоховских условий, построена минизонная дисперсионная структура для двух случаев: симметричной открытой цепочки квантовых точек и асимметричной относительно оси цепочки, когда один край одномерного канала является плоским.

Такая система качественно сходна с цепочкой колец, и результаты, полученные в рамках этой модели могут быть полезны для объяснения эффектов, наблюдающихся в кольцевой цепочке.

В [113] численно изучались квантовые транспортные свойства цепочки периодически расположенных перевернутых T -образных потенциалов конечной высоты и цепочки одномерных колец, соединенных между собой $1D$ проводниками одинаковой длины l . Проводники присоединялись к кольцу в диаметрально противоположных точках. Коэффициент прохождения через цепочку N периодов находился точно также, как и в работах [111, 112] с помощью последовательного перемножения матриц прохождения колец и соеди-

няющих проводников. Коэффициент прохождения осциллирует как функция потока ϕ с периодом $\phi_0 = hc/e$. На зависимости коэффициента прохождения от kL (k - волновое число электрона, L - длина полукольца) имеются глубокие провалы до нуля, находящиеся между единичными максимумами T , появляющиеся в результате попадания энергии электрона в широкие запрещенные зоны. Зонная структура хорошо формируется уже для пяти колец, когда $L = l$. Зоны проводимости и запрещенные зоны становятся более определенными при увеличении числа колец.

В [114] исследовались транспортные свойства цепочки одномерных колец с примесями, соединенных проводниками одинаковой длины, а также анализировался эффект присутствия примесей на формирование зонной структуры такой системы. Коэффициент прохождения цепочки N колец, находился так же, как и в работах [111–113]. Показано, что зонная структура хорошо формируется, начиная с пяти колец, а число резонансных пиков в зонах проводимости возрастает с числом колец. При увеличении силы потенциалов примесей, расположенных в центрах “плеч” кольца, запрещенные зоны на зависимости T от kr становятся шире, а также возникают новые запрещенные зоны в центрах зон проводимости. Области нулевой проводимости на зависимости T от потока магнитного поля также уширяются с увеличением силы потенциалов примесей, в то время как зоны проводимости становятся более узкими. В [115] исследовались условия возникновения резонансов (кондактанс достигает максимально возможного значения $2e^2/h$) и антирезонансов (кондактанс стремится к нулю) коэффициента прохождения через аналогичную цепочку колец. Представляя кольца, как цепочку квантовых точек и используя модель сильной связи, было найдено, что расположение точек резонансов коэффициента прохождения в зависимости от волнового числа и потока магнитного поля определяется как числом квантовых точек, из которых состоит кольцо, так и разностью числа точек, составляющих верхнее и нижнее “плечи” кольца, а также общим числом колец в цепочке.

В работе [107] исследовалась одномерная полупроводниковая сверхрешетка, сконструированная на основе баллистического сужения с периодически модулированным потенциалом, сформированным с помощью нанесенных

на поверхность гетероструктуры затворов в виде мостиков, на которые подается отрицательное напряжение. Экспериментальные данные также показали, что уже при пяти периодах наблюдаются эффекты, свидетельствующие о формировании минизон. В работе [117] численно показано, что в дополнении к минизонам сверхрешетки в полупроводниковых сверхрешетках с примесями формируются примесные зоны.

На основе результатов выше упомянутых работ можно сделать вывод, что цепочку конечной длины можно моделировать бесконечной цепочкой до тех пор, пока длина свободного пробега электрона сравнима с длиной этой цепочки, а длина волны электрона много меньше длины этой цепочки. Аналогичная цепочка может моделироваться как одномерная, если в транспорте участвует лишь один канал (одна мода). На практике одноканальный режим реализуется, если отношение ширины канала к длине мало, а энергия электрона меньше энергии второго энергетического уровня. Такие системы вполне реальны, поэтому модель бесконечной одномерной цепочки мы будем использовать для изучения транспортных характеристик цепочки колец в **Главе 3**. Для цепочки колец GaAs (энергия Ферми порядка 50 meV) эта модель применима когда ширина кольца меньше 10 нм, а длина больше 100 нм. Контакты между кольцом и проводниками будем моделировать, так же как и в **Главе 2**, с помощью метода потенциалов нулевого радиуса.

Следует отметить, что исследовались не только периодические структуры, но и квазипериодические. В [118] в модели сильной связи исследовали периодическую и квазипериодическую цепочки из N колец. Каждое кольцо заменялось на эффективный одномерный двухячеечный “димер”. Показано, что поведение коэффициента прохождения зависит от числа рассеивателей в каждом плече кольца. Показано, что в периодической цепочке (когда кольца идентичны между собой и соединены одинаковыми проводниками) формируется зонная структура. Наличие аперiodичности в цепочке в виде колец с другим радиусом видоизменяет зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона, делает ее более фрагментарной, но не приводит к появлению новых минизон. Поэтому необходимо более детально исследовать влияние не аперiodичности, а различных параметров периодической системы,

таких как величина потока магнитного поля через кольцо, длина соединяющего кольца проводника, параметра взаимосвязи колец на спектр цепочки, что и сделано в диссертации в **Главе 3**.

Исследования баллистического транспорта в искривленных наноструктурах до последнего времени касались, в основном, квантовых колец. Однако, в последнее время, в связи с получением неплоских наноструктур появились работы и в этой области. В частности, отметим исследования двумерного электронного газа на цилиндрической поверхности [119,120]. Недавно созданная специальная техника (lift-off) позволяет отделять тонкий слой гетероперехода GaAs/AlGaAs вместе с двумерным электронным газом т.е. создавать искривленные двумерные слои в гетероструктурах на основе GaAs [121–124]. Эта оригинальная технология позволяет получать нанотрубки, квантовые рулоны, кольца и спирали с контролируемыми формами и размерами. В настоящее время этой же группой создается технология скручивания графена в нанотрубки. Модель однослойной углеродной нанотрубки представлена на рис. 1.4. В зависимости от радиуса и способа сворачивания графитовых

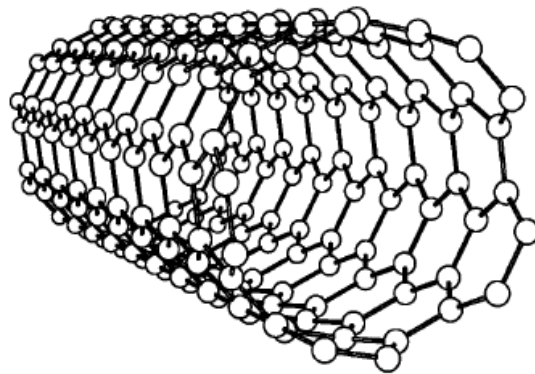


Рис. 1.4. Однослойная углеродная нанотрубка

слоев нанотрубки могут иметь полупроводниковые или металлические свойства. В этих системах экспериментально был обнаружен целый ряд интересных явлений, таких как, квантование кондактанса [125], резонансы Фано в электронном транспорте [126,127], индуцированная и собственная сверхпроводимость [128]. Такие углеродные нанотрубки имеют геометрию, близкую к геометрии цилиндра. Поэтому при их теоретическом изучении можно ис-

пользовать модель тонкого цилиндра.

Уникальные физические свойства нанотрубок делают их весьма привлекательным материалом для создания электронных устройств нового поколения. Уже сегодня на их основе создаются такие устройства, как нанодиоды [129, 130] и одноэлектронные транзисторы [131, 132]. В связи с этим усилился интерес к теоретическому изучению этих объектов. Большинство теоретических исследований по кондактансу в нанотрубках [133–138] основано на применении формулы Ландауэра и приближения сильной связи. В [134] показано, что наличие точечных дефектов в нанотрубках приводит к появлению провалов в кондактансе. В работе [139] в модели сильной связи исследуется электронный транспорт через нанотрубку с одноатомными контактами, присоединенными к боковой поверхности. Показано, что в зависимости от типа трубки, ее радиуса и симметрии, а также от положения контактов проводимость может обращаться в нуль при значениях энергии, в которых имеется сингулярность плотности состояний. В работе [136] численными методами исследуется структура и транспортные свойства контактов между параллельными и скрещенными нанотрубками. Исследовано влияние силы сжатия в месте контакта на транспортные свойства системы. Обзор теоретических исследований по электронному транспорту в нанотрубках до 2000 года приведен в работе [140]. Как видно из вышеизложенного, электронный транспорт на цилиндрических поверхностях вызывает в настоящий момент возрастающий научный и практический интерес. При этом в литературе рассматриваются различные геометрии эксперимента и различные теоретические модели. Отметим некоторые наиболее интересные эксперименты в области электронного транспорта в нанотрубках. В [127] сообщалось, что резонансы Фано возможны в электронном транспорте через однослойную нанотрубку. В работах [22, 23] исследовался кондактанс нанотрубок при комнатной температуре в трехтерминальном устройстве, в котором в качестве одного из электродов используется зонд атомного силового микроскопа. Показано, что в многослойных нанотрубках транспорт носит диффузный характер, а однослойные нанотрубки являются баллистическими проводниками вплоть до длин в несколько микрон. Электронные транспортные свойства контактиру-

ющих однослойных углеродных нанотрубок исследовались в баллистическом режиме [141]. Были обнаружены флуктуации проводимости, в зависимости от энергии Ферми, обусловленные интерференцией электронных волн. Наблюдается резонанс со стоячими волнами в трубках конечной длины.

Что касается моделей цилиндра, то следует отметить, что их можно получить из любой модели кольца путем добавления свободного движения вдоль оси z [80]. В работе [31] квантовая проволока моделировалась с помощью симметричного параболического конфайнмента $V(x, y) = m^* \omega_0^2 (x^2 + y^2)$ (здесь m^* — эффективная масса электрона, ω_0 — характеристическая частота ограничивающего потенциала) в плоскости (x, y) плюс свободное движение вдоль оси z . Такая модель позволяет найти аналитический вид спектра, волновых функций и кондактанса, что важно для теоретического анализа возникающих на экспериментах эффектов. Для моделирования примесей в этой работе использовался метод потенциалов нулевого радиуса. С его помощью удалось получить явную формулу для кондактанса системы, рассмотреть как баллистический, так и диффузионный режимы. Модель потенциалов нулевого радиуса используют не только для моделирования примесей, но и для моделирования самих структур. В [30] потенциал нанотрубки выбирался как сумма потенциалов нулевого радиуса

$$V(\mathbf{r}) = \alpha \sum_{\gamma \in \Gamma} V_{\gamma}, \quad (1.6)$$

где Γ — цепочка атомов трубки, V_{γ} — потенциал конфайнмента атома, α — константа связи. Такая модель позволила определить вид магнитоблоховских зон, в которые расплываются уровни свободного электрона в магнитном поле при приложении потенциала нанотрубки. Для однослойной нанотрубки хорошо подходит модель тонкого цилиндра, которая получается из модели одномерного кольца, а так же одномерная модель цилиндра в приближении сильной связи. Углеродную нанотрубку в этом приближении можно моделировать как сетку колец Ааронова-Бома [142]. В работе [143] приближение сильной связи применялось для изучения зонной структуры спектра углеродной нанотрубки в присутствии магнитного поля. В [144] эта же модель использовалась для вычисления электронной структуры графеновой труб-

ки, находящейся в параллельном магнитном поле. Как уже говорилось, этот метод удобен в случае образцов неидеальной формы. Но с целью изучения качественного поведения электронного транспорта однослойной нанотрубки можно использовать модель тонкого цилиндра [145]. Электронный энергетический спектр в этой модели представляет собой сумму из дискретного спектра одномерного кольца и непрерывного движения вдоль оси z

$$E_{mp} = \varepsilon \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{p^2}{2m^*}, \quad (1.7)$$

где $\varepsilon = \hbar^2/2m^*\rho^2$, ρ — радиус трубки, Φ — поток магнитного поля, Φ_0 — квант потока, p — импульс частицы вдоль оси z , $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — магнитное квантовое число. Эта модель очень удобна для получения простых аналитических выражений для качественных характеристик однослойных нанотрубок. Этим обусловлено то, что эта модель использована в диссертации.

Большинство теоретических исследований электронного транспорта в нанотрубках сосредоточено на случае чистых образцов, в которых отсутствуют дефекты кристаллической решетки или примеси. Однако, недавние теоретические и экспериментальные исследования показывают, что даже одиноким примесь может оказывать существенное влияние на кондактанс квантовой проволоки [15, 134], нарушая его ступенчатую структуру. В частности, возможно появление провалов или всплесков вблизи порогов ступеней кондактанса. В ряде работ [126, 127] по изучению кондактанса нанотрубок подобные эффекты были обнаружены экспериментально. В [146, 147] для толстого тонкостенного цилиндра, в полость которого вставлен соленоид, показано теоретически и получено экспериментально, что рассеяние электронов приводит к уменьшению в два раза периода осцилляций проводимости (период равен половине кванта потока). Следует отметить, что примеси могут появляться на поверхности нанотрубки случайно, а могут быть внедрены в систему направленно, с целью получения новых транспортных характеристик. В частности, примеси могут приводить к появлению резонансов в кондактансе системы, которые могут быть использованы при разработке резонансных наноэлектронных диодов и транзисторов. То есть контролируемое введение примесей в наноструктуры позволяет создавать системы, транспортные ха-

рактеристики которых отличаются большой чувствительностью к изменению внешнего магнитного поля или напряжения на затворе. Из вышесказанного ясно, что несмотря на большое количество работ, посвященных исследованию электронного транспорта в нанотрубках, в этой области еще остается множество нерешенных задач. Отметим, например, задачу о влиянии короткодействующих примесей на кондактанс нанотрубки. Именно этой проблеме и посвящена **Глава 4** диссертации.

1.2 Модель потенциалов нулевого радиуса

Для описания взаимодействия свободно движущейся заряженной частицы с примесями широко используется модель потенциалов нулевого радиуса. Идея использования данной модели восходит к широко известной работе Р. де Л. Кронига и В. Г. Пенни [148], где была построена модель нерелятивистского электрона, движущегося в жесткой кристаллической решетке. В этой работе был рассмотрен одномерный случай. Позже появились исследования, в которых было рассмотрено рассеяние нерелятивистской частицы на бесконечном числе центров, образующих трехмерную кристаллическую решетку [149].

Несмотря на длительную историю развития данной модели, математически строгое ее обоснование впервые было дано лишь в 1961 году в работе Березина и Фаддеева [150], где было предложено определять гамильтонианы, описывающие точечные взаимодействия, как самосопряженные расширения симметрических операторов, а для получения явного вида резольвент расширений использовать формулу Крейна.

Началом интенсивного применения метода потенциалов нулевого радиуса в атомной физике следует считать работы Смирнова и Фирсова [151] и Демкова [152]. За этими работами последовало много других. Метод потенциалов нулевого радиуса применялся к самым разнообразным вопросам теории молекулярных систем, электронных и атомных столкновений и в теории твердого тела.

Метод потенциалов нулевого радиуса и его применение изложены в монографиях [19–21].

Основа описания модели потенциалов нулевого радиуса состоит в следующем. Движение свободной заряженной частицы в евклидовом пространстве \mathbb{R}^1 , \mathbb{R}^2 и \mathbb{R}^3 описывается оператором Лапласа $H_0 = -\hbar^2 \Delta / 2m$.

Формально, возмущение оператора Лапласа некоторой конечной совокупностью потенциалов, сосредоточенных в точках q_1, q_2, \dots, q_n , задается выражением вида

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_{k=1}^n \varepsilon_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{q}_k), \quad (1.8)$$

где ε_k — константы связи.

Для придания строго математического смысла выражению (1.8) в [21] используется так называемый метод "сужения-расширения". Суть этого метода заключается в следующем.

Гамильтониан H представляет собой точечное возмущение гамильтониана H_0 . Операторы H и H_0 совпадают на множестве функций $\forall \psi \in D(H_0)$, удовлетворяющих условию $\varphi(q_k) = 0$. Рассмотрим S — сужение оператора H на область $D(S) = \{\psi \in D(H_0) : \psi(q_k) = 0, k = 1, 2, \dots, n\}$. Хорошо известно, что S — замкнутый симметрический оператор с индексами дефекта (n, n) , а дефектное пространство S порождено функциями $G_0(x, q_k; z)$, где $G_0(x, y; z)$ — функция Грина оператора H_0 (интегральное ядро резольвенты). Тогда гамильтониан H будет самосопряженным расширением оператора S . В то же время, H является сужением оператора S^+ . Область определения оператора S^+ может быть представлена в виде

$$D(S^+) = D(S) \oplus N_z \oplus N_{z^*}, \quad (1.9)$$

где N_z — дефектное пространство оператора S , соответствующее числу z , то есть ядро оператора $(S^+ - z)$. Функции Грина $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z)$ и $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z^*)$ являются базисами дефектных подпространств N_z и N_{z^*} . Поэтому волновые функции $\psi \in D(S^+)$ так же представляют из себя сумму

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_0(\mathbf{x}, E) + \sum_{k=1}^N \alpha_k^+ G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z) + \sum_{k=1}^N \alpha_k^- G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z^*), \quad (1.10)$$

где $\psi_0 \in D(S)$. При действительной энергии ($z = E$) функции $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z)$ и

$G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z^*)$ совпадают, и волновая функция имеет вид

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_0(\mathbf{x}, E) + \sum_{k=1}^N \alpha_k G_0(\mathbf{x}, \mathbf{q}_k; z). \quad (1.11)$$

Коэффициент α определяется требованиями самосопряженности оператора H .

В евклидовых пространствах размерности $d = 1, 2, 3$ функция Грина оператора H_0 представима в виде

$$G_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; z) = F_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + F_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}; z), \quad (1.12)$$

где $F_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}; z)$ — непрерывная функция, а $F_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ имеет вид

$$F_0(x, y) = -\frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{2} |x - y|, \quad (d = 1) \quad (1.13)$$

$$F_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{x} - \mathbf{y}|, \quad (d = 2) \quad (1.14)$$

$$F_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}. \quad (d = 3) \quad (1.15)$$

Самосопряженные расширения оператора S , описывающие возмущения H_0 , образуют некоторое семейство операторов H^P . Каждая примесь характеризуется некоторым параметром P_i , определяющим силу точечного возмущения, который в двумерном случае может быть выражен через длину рассеяния λ на точечном потенциале по формуле $P = \ln \lambda$. Совокупность этих параметров составляет матрицу P . Резольвенты расширений S могут быть описаны с использованием формулы Крейна для резольвент [21, 103, 150], из которой вытекает следующая удобная формула для описания функций Грина возмущений

$$G(x, y; z) = G_0(x, y; z) - \sum_{i,j=1}^n [Q(z) - P]_{ij}^{-1} G_0(q_i, y; z) G_0(x, q_j; z), \quad (1.16)$$

где $G_0(x, y; z)$ — функция Грина исходного оператора, а $Q(z)$ так называемая Q -матрица Крейна, элементы которой представляют из себя функцию Грина

за вычетом ее расходящейся части

$$Q(z) = \begin{pmatrix} F_1(q_1, q_1; z) & G_0(q_1, q_2; z) & \dots & G_0(q_1, q_n; z) \\ G_0(q_2, q_1; z) & F_1(q_2, q_2; z) & \dots & G_0(q_2, q_n; z) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ G_0(q_n, q_1; z) & G_0(q_n, q_2; z) & \dots & F_1(q_n, q_n; z) \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Если имеем случай одноцентрового возмущения, то, исходя из граничных условий, волновая функция будет определяться выражением

$$\psi(x, E) = \psi_0(x, E) - \frac{\psi_0(q, E)}{Q(E) - P} G_0(x, q; z). \quad (1.18)$$

Таким образом находятся собственные функции оператора H , который соответствует системе с возмущениями.

Примеси можно описывать как точечные, если скорость электронов настолько мала, что длина волны частицы велика по сравнению с радиусом действия поля примеси, а энергия частицы мала по сравнению с величиной поля внутри этого радиуса [37]. Примеси и контакты в настоящей диссертации моделируются с помощью метода потенциалов нулевого радиуса.

Глава 2

Моделирование электронного транспорта в двухтерминальном кольце Ааронова-Бома с примесями

Целью этой главы является моделирование и исследование электронного транспорта в двухтерминальном кольце Ааронова-Бома при наличии нескольких короткодействующих рассеивателей на кольце, а так же получение точного аналитического выражения для кондактанса системы. Моделировать такую систему будем с использованием одномерного кольца и проводников. Для моделирования рассеивателей и контактов используется метод потенциалов нулевого радиуса. Предполагается наличие магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости колец. Для того, чтобы эта модель была применима к реальным системам, необходимо, чтобы толщина проводников и кольца была настолько мала, чтобы дискретные уровни энергии в направлении, перпендикулярном оси проводника, были сильно разнесены между собой, для того, чтобы электроны, проводящие ток, находились на нижней подзоне. Это условие обеспечивает одномерную динамику электронов кольца и проводников. Согласно [89] модель одномерного кольца может быть применима к полупроводниковым кольцам на основе GaAs, если их толщина составляет порядка 10 нм, в то время как длина окружности больше 100 нм.

Исследована зависимость кондактанса системы от таких параметров, как энергия электрона, поток магнитного поля через кольцо и положение рассеивателей. Аналитически показано, что зависимость коэффициента про-

хождения от энергии электрона содержит асимметричные резонансы Фано. Изучено поведение резонансов в зависимости от положения примесей и от величины магнитного поля. Показано, что при определенных параметрах системы может наблюдаться коллапс резонансов Фано.

2.1 Гамильтониан и коэффициент прохождения нанорезонатора

Рассмотрим модельную систему, состоящую из кольца S_ρ радиуса ρ с прикрепленными к нему одномерными проводниками W_1 и W_2 (рис. 2.1). Введем полярную систему координат на кольце. Точки контактов между про-

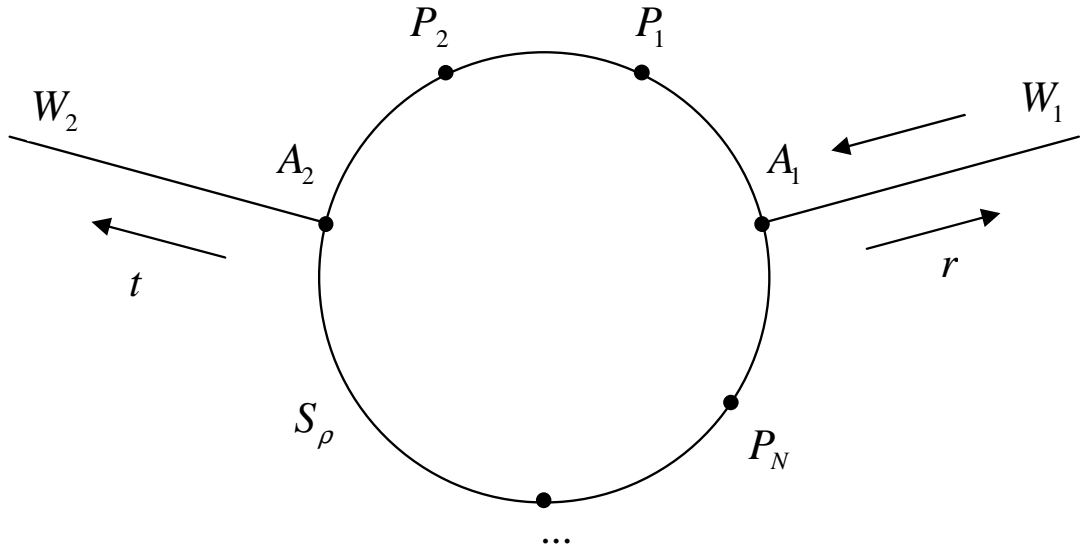


Рис. 2.1. Кольцо Ааронова–Бома с двумя присоединенными проводниками и примесями на кольце. Точками A_j отмечены места соединения проводников с кольцом, P_i — точки нахождения примесей.

водниками и кольцом обозначим A_1 и A_2 . Рассмотрим случай, когда на кольце имеется N короткодействующих рассеивающих центров. Как было отмечено выше, удобным средством для моделирования короткодействующих примесей и точек контактов является метод потенциалов нулевого радиуса [9,14–18], который позволяет использовать единый подход для описания всех точечных возмущений с помощью граничных условий, накладываемых на волновую

функцию. В связи с этим удобно использовать сквозную нумерацию для всех точечных возмущений на кольце. Углы, задающие положения возмущений будем обозначать φ_j , при этом индексы $j = 1, 2$ соответствуют контактам, а $j = 3, \dots, N + 2$ — примесям. Проводники W_j будем моделировать положительными полуосями $x \geq 0$. Кольцо считаем помещенным в магнитное поле B , перпендикулярное плоскости системы. Поток магнитного поля B через кольцо обозначим $\Phi = \pi \rho^2 B$.

Невозмущенный гамильтониан электрона в кольце имеет хорошо известный вид

$$H_\rho = \frac{\hbar^2}{2m^*\rho^2} \left(-i \frac{d}{d\varphi} + \eta \right)^2. \quad (2.1)$$

Здесь m^* — эффективная масса электрона, $\eta = \Phi/\Phi_0$ — число квантов потока магнитного поля через кольцо, $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$ — квант магнитного потока. Отметим, что для того, чтобы через кольцо радиусом 20нм создать поток магнитного поля, равный одному кванту потока, необходимо поле со значением магнитной индукции 1,6 Тл. Для кольца радиусом 100нм поле должно быть в двадцать пять раз меньше.

Электронный энергетический спектр гамильтониана H_ρ также хорошо известен и определяется выражением

$$E_m^\eta = \frac{\hbar^2}{2m^*\rho^2} (m + \eta)^2, \quad (2.2)$$

где m — магнитное квантовое число.

Гамильтониан электрона в каждом проводнике W_j имеет вид

$$H_j = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.3)$$

Волновая функция наноустройства, может быть записана в виде одно-столбцовой матрицы

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_\rho \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

где ψ_ρ — волновая функция электрона в кольце \mathbb{S}_ρ , а ψ_j — волновые функции в проводниках W_j .

Точечные возмущения, создаваемые примесями, будем описывать с помощью потенциала

$$V(\varphi) = \sum_{j=3}^{N+2} V_j \delta(\varphi - \varphi_j), \quad (2.5)$$

где $\delta(\varphi)$ — δ -функция Дирака, а коэффициенты V_j определяют силу точечных возмущений. Отметим, что использование потенциала $V(\varphi)$ эквивалентно заданию линейных граничных условий для волновой функции в точках φ_j

$$\psi_\rho(\varphi_j) = \frac{1}{v_j} [\psi'_\rho(\varphi_j + 0) - \psi'_\rho(\varphi_j - 0)], \quad j = 3, \dots, N + 2, \quad (2.6)$$

где $v_j = 2m^* \rho^2 V_j / \hbar^2$ — безразмерная величина, определяющая силу точечного возмущения.

Для моделирования контактов проводников с кольцом рассмотрим невозмущенный примесями и контактами гамильтониан H_0 , который является прямой суммой гамильтонианов частей $H_0 = H_\rho \oplus H_1 \oplus H_2$. Гамильтониан системы H получается из гамильтониана H_0 путем наложения линейных граничных условий в точках нахождения всех возмущений.

В наиболее общем виде граничные условия в точках контактов можно записать с помощью уравнений [93]

$$\begin{cases} \psi_\rho(\varphi_j) = \frac{b_j}{\rho} [\psi'_\rho(\varphi_j + 0) - \psi'_\rho(\varphi_j - 0)] + a_j \psi'_j(0), & j = 1, 2, \\ \psi_j(0) = \frac{\bar{a}_j}{\rho} [\psi'_\rho(\varphi_j + 0) - \psi'_\rho(\varphi_j - 0)] + c_j \psi'_j(0), & j = 1, 2, \end{cases} \quad (2.7)$$

где a_j — комплексные, а b_j и c_j — действительные коэффициенты, имеющие размерность длины. Каждый контакт в рамках рассматриваемой модели характеризуется четырьмя действительными параметрами.

В настоящей работе мы ограничимся случаем, когда одномерная волновая функция непрерывна в точке контакта. В этом случае, как следует из уравнения (2.7), параметры контакта a_j , b_j и c_j должны быть одинаковыми. Удобно выразить их через безразмерную константу связи u_j по формуле

$$a_j = b_j = c_j = \rho / u_j. \quad (2.8)$$

Тогда граничные условия в точках контактов можно записать в виде

$$\psi_j(0) = \psi_\rho(\varphi_j) = \frac{1}{u_j} \{ \psi'_\rho(\varphi_j + 0) - \psi'_\rho(\varphi_j - 0) + \rho \psi'_j(0) \}, \quad j = 1, 2. \quad (2.9)$$

Для получения коэффициента прохождения электрона необходимо найти решение уравнения Шредингера, которое в первом проводнике является суперпозицией падающей и отраженной волн, а во втором представляет собой прошедшую волну. Пусть по первому проводнику распространяется падающая на кольцо волна $\exp(-ikx)$, где $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ — волновое число электрона (рис. 2.1). Тогда волновая функция электрона в проводнике W_1 имеет вид

$$\psi_1(x) = \exp(-ikx) + r \exp(ikx). \quad (2.10)$$

Здесь r — амплитудный коэффициент отражения. В проводнике W_2 волновую функцию электрона можно записать в виде

$$\psi_2(x) = t \exp(ikx), \quad (2.11)$$

где t — амплитудный коэффициент прохождения. Поскольку возмущения исходного гамильтониана являются точечными, волновая функция $\psi_\rho(\varphi)$ электрона в кольце может быть выражена через функцию Грина $G_\rho(\varphi, \varphi_j; E)$ невозмущенного гамильтониана H_ρ [14, 18]

$$\psi_\rho(\varphi, E) = \sum_{j=1}^{N+2} A_j(E) G_\rho(\varphi, \varphi_j; E). \quad (2.12)$$

Здесь $A_j(E)$ — коэффициенты, определяемые из граничных условий.

Функция Грина гамильтониана H_ρ хорошо известна [93] и может быть записана в виде

$$G_\rho(\varphi, \varphi_j; E) = \frac{m^*}{2\hbar^2 k} \left[\frac{\exp(i(\varphi_j - \varphi \pm \pi)(\eta - k\rho))}{\sin \pi(\eta - k\rho)} - \frac{\exp(i(\varphi_j - \varphi \pm \pi)(\eta + k\rho))}{\sin \pi(\eta + k\rho)} \right], \quad (2.13)$$

где знак «плюс» берется, если $\varphi \geq \varphi_j$, и знак «минус» — в противоположном случае.

Обозначим $Q_{ij}(E) = \frac{\hbar^2}{m^*\rho} G_\rho(\varphi_i, \varphi_j; E)$ и $\alpha_j = \frac{m^*\rho}{\hbar^2} A_j$. Подставив волновые функции (2.10)-(2.12) в граничные условия (2.9), получим систему урав-

нений $N + 4$ порядка

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 Q_{11} + \alpha_2 Q_{12} + \dots + \alpha_{N+2} Q_{1,N+2} = [2\alpha_1 + ik\rho(r-1)]/u_1, \\ \alpha_1 Q_{21} + \alpha_2 Q_{22} + \dots + \alpha_{N+2} Q_{2,N+2} = [2\alpha_2 + ik\rho t]/u_2, \\ \alpha_1 Q_{31} + \alpha_2 Q_{32} + \dots + \alpha_{N+2} Q_{3,N+2} = 2\alpha_3/v_1, \\ \dots \\ \alpha_1 Q_{N+2,1} + \alpha_2 Q_{N+2,2} + \dots + \alpha_{N+2} Q_{N+2,N+2} = 2\alpha_{N+2}/v_N, \\ 1 + r = [2\alpha_1 + ik\rho(r-1)]/u_1, \\ t = [2\alpha_2 + ik\rho t]/u_2. \end{array} \right. \quad (2.14)$$

С помощью двух последних уравнений выразим r и t через α_j . Тогда систему (2.14) можно записать следующим образом

$$\sum_{l=1}^{N+2} [Q_{jl} - P_j \delta_{jl}] \alpha_l = D \delta_{j1}, \quad j = 1 \dots, N+2. \quad (2.15)$$

Здесь

$$P_j(E) = \begin{cases} 2\alpha_j/(u_j - ik\rho), & j = 1, 2 \\ 2/v_j, & j = 3, \dots, N+2, \end{cases}$$

$$D(E) = \frac{2ik\rho}{ik\rho - u_1}.$$

Определитель основной матрицы системы отличен от нуля. Следовательно решение системы (2.15) существует, единственно и, согласно методу Крамера, может быть представлено в виде

$$\alpha_n = \frac{\Delta_n}{\Delta}, \quad (2.16)$$

где Δ — главный определитель системы

$$\Delta = \det [Q_{jl} - P_j \delta_{jl}], \quad (2.17)$$

а Δ_n — определитель матрицы, получающейся из основной матрицы системы заменой n -го столбца на столбец свободных членов

$$\Delta_n = \det [(Q_{jl} - P_j \delta_{jl}) (1 - \delta_{nl}) + D \delta_{j1} \delta_{nl}]. \quad (2.18)$$

С учетом (2.16), амплитудный коэффициент прохождения можно записать в виде

$$t(E) = \frac{2}{u_2 - ik\rho} \frac{\Delta_2}{\Delta}. \quad (2.19)$$

Из системы уравнений (2.15) следует, что для выбранной модели коэффициент прохождения $T(E) = |t(E)|^2$ оказывается функцией $N + 2$ независимых вещественных параметров. Далее для простоты ограничимся случаем одинаковых контактов ($u_1 = u_2 = u$) и примесей ($v_3 = \dots = v_{N+2} = v$). Отметим, что формула (2.19) применима при любых положениях и параметрах примесей и произвольных значениях магнитного поля.

2.2 Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии одной примеси в кольце

2.2.1 Случай симметричного присоединения контактов к кольцу

Вначале рассмотрим рассеяние электронов в кольце при наличии в нем одной примеси. При этом система (2.15) будет состоять из трех уравнений. Нетрудно видеть, что диагональные элементы матрицы Q равны

$$Q_{jj}(E) = \frac{1}{k\rho} \frac{\sin \pi k\rho \cos \pi k\rho}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho}. \quad (2.20)$$

В случае диаметрально противоположного расположения контактов на кольце ($\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \pi$) недиагональные элементы Q_{ij} приобретают вид

$$Q_{12}(E) = Q_{21}(E) = \frac{1}{k\rho} \frac{\sin \pi k\rho \cos \pi\eta}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho}, \quad (2.21)$$

$$Q_{13}(E) = \bar{Q}_{31}(E) = \frac{e^{i\Delta\varphi\eta}}{k\rho} \times \left[\frac{\sin \pi k\rho \cos \pi\eta \cos(\Delta\varphi k\rho) - i \cos \pi k\rho \sin \pi\eta \sin(\Delta\varphi k\rho)}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho} \right], \quad (2.22)$$

$$Q_{23}(E) = \bar{Q}_{32}(E) = \frac{e^{-i(\pi-\Delta\varphi)\eta}}{k\rho} \times \frac{\sin \pi k\rho \cos \pi\eta \cos[(\pi - \Delta\varphi)k\rho] + i \cos \pi k\rho \sin \pi\eta \sin[(\pi - \Delta\varphi)k\rho]}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho} \quad (2.23)$$

где $\Delta\varphi = \varphi_3 - \varphi_2$. Из выражений (2.19)–(2.23) получим формулу для коэффициента прохождения электрона при диаметрально противоположном присоединении контактов и произвольном положении примеси

$$t(k, \eta) = \frac{F_1(k, \eta) + vF_2(k, \eta, \varphi_3)}{F_3(k, \eta, u) + vF_4(k, u, \varphi_3)}. \quad (2.24)$$

Здесь

$$F_1(k, \eta) = -16ik^3\rho^3 \cos \pi\eta \sin \pi k\rho, \quad (2.25)$$

$$F_2(k, \eta, \varphi_3) = 8ik^2\rho^2 e^{-i\pi\eta} \sin[(\pi - \Delta\varphi)k\rho] \sin(\Delta\varphi k\rho), \quad (2.26)$$

$$F_3(k, \eta, u) = 4k\rho\{(-u^2 + k\rho 2iu + 5k^2\rho^2) \sin^2 \pi k\rho - \\ -4ik\rho(iu + k\rho) \sin 2\pi k\rho\} - 16k^3\rho^3 \sin \pi\eta. \quad (2.27)$$

$$F_4(k, u, \varphi_3) = 2k\rho(u - ik\rho)\{2 \cos 2\pi k\rho - \cos(2\Delta\varphi k\rho) - \cos[2(\pi - \Delta\varphi)k\rho]\} + \\ + 2(u - ik\rho)^2 \sin \pi k\rho \cos[(\pi - 2\Delta\varphi)k\rho] + \\ + (5k^2\rho^2 + 2ik\rho u - u^2) \sin 2\pi k\rho. \quad (2.28)$$

Если выразить параметр u через длину рассеяния λ по формуле $u = -2\rho/\lambda$ и положить $v = 0$, то формула (2.24) переходит в выражение для коэффициента прохождения кольца без примесей, полученное в работе [93]. Как видно из формул (2.24)–(2.28) коэффициент прохождения является периодической функцией магнитного потока с периодом, равным кванту потока. При особых значениях магнитного поля, а именно при целом и полуцелом потоке через кольцо, поведение коэффициента прохождения существенно изменяется.

Рассмотрим сначала общий случай ненулевого магнитного поля (с нецелым потоком). Из формул (2.24)–(2.28) видно, что в отсутствие примеси ($v = 0$) в числителе формулы (2.24) остается одно слагаемое, обращающееся в нуль при целых значениях $k\rho$, знаменатель же при ненулевом магнитном потоке содержит действительную и мнимую части, не обращающиеся в нуль одновременно. Поэтому коэффициент прохождения $T(k)$ в отсутствие примеси имеет нули в точках $k\rho = m$, где m — целое. При наличии примеси нули сохраняются только при $\sin m\Delta\varphi = 0$.

Для того, чтобы провести численное исследование зависимости коэффициента прохождения от параметров системы на языке Pascal была разработана программа (**Приложение А**), позволяющая проводить численный эксперимент. Построение графиков зависимостей производилось с помощью программы Origin. Зависимость коэффициента прохождения от безразмерного параметра $k\rho$ показана на рис. 2.2.

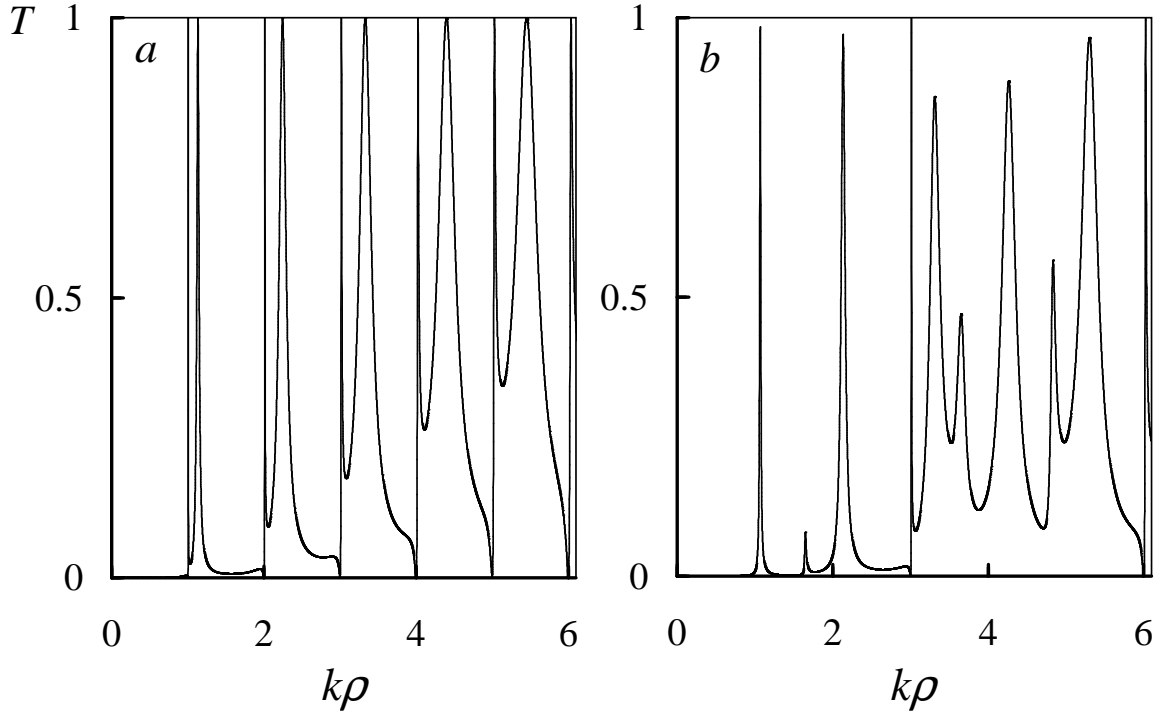


Рис. 2.2. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при наличии магнитного поля $\eta = 0.14$ в отсутствие примеси (а) и при наличии примеси в точке $\varphi_3 = 4\pi/3$ (б). При наличии примеси в кольце нули резонансов остаются только при тех значениях k_m , для которых $\sin(\Delta\varphi k_m\rho) = 0$. Здесь и далее графики построены для $u, v=10$.

Как видно из рисунка, коэффициент прохождения осциллирует как функция энергии электрона. Осцилляции связаны с интерференцией электронных волн, испытывающих многократные отражения в точках контактов проводников и кольца. В отсутствие примеси зависимость $T(k\rho)$ содержит асимметричные резонансы в окрестности точек $k\rho = m$, пик которых доходит до единицы, а провал до нуля. Наличие примеси может приводить к нарушению полного отражения и прохождения в системе, в результате пики коэффициента прохождения не доходят до единицы, а провалы — до нуля.

Исследуем поведение коэффициента прохождения при энергиях, близких к E_m^0 (уровни энергии электрона в изолированном кольце в отсутствие магнитного поля), в окрестности которых возможно возникновение резонансов Фано. Для исследования коэффициента прохождения вблизи $E = E_m^0$ (вблизи нулей коэффициента прохождения) разложим числитель и знаме-

натель формулы (2.24) в ряд Тейлора по $E - E_m^0$ и ограничимся членами первого порядка малости. После несложных преобразований получим оценку для коэффициента прохождения в окрестности точек $E = E_m^0$

$$t(E) \simeq 2i(-1)^m \frac{\pi m^2 \cos(\pi\eta) \Delta E + v E_m^0 e^{-i\pi\eta} \sin^2 m \Delta\varphi}{\pi m (2im - 2u - v) \Delta E + 4m E_m^0 \sin^2 \pi\eta}, \quad (2.29)$$

где $\Delta E = E - E_m^0$.

Из (2.29) видно, что в общем случае, когда имеется примесь на кольце и $\sin m \Delta\varphi \neq 0$, коэффициент прохождения не обращается в нуль при $E = E_m^0$, то есть примесь приводит к исчезновению нулей, которые имелись в ее отсутствии. Но при определенных положениях примеси (при таких $\Delta\varphi$, что $\sin m \Delta\varphi = 0$) нули вблизи m -го уровня сохраняются (рис. 2.2 b). Вблизи этих нулей амплитудный коэффициент прохождения можно записать в виде

$$t(E) \simeq \mu_m \frac{E - E_m^0}{E - E_m^{(r)} - i\Gamma_m}. \quad (2.30)$$

Здесь введены следующие обозначения

$$\mu_m = \frac{(-1)^m 2im \cos \pi\eta}{2im - 2u - v}, \quad (2.31)$$

$$E_m^{(r)} = E_m^0 \left(1 + \frac{4(2u + v) \sin^2 \pi\eta}{\pi[(2u + v)^2 + 4m^2]} \right), \quad (2.32)$$

$$\Gamma_m = \frac{8m E_m^0 \sin^2 \pi\eta}{\pi[(2u + v)^2 + 4m^2]}. \quad (2.33)$$

Из формулы (2.30) видно, что $T(E)$ в окрестности значений E_m^0 имеет форму резонанса Фано [62].

На комплексной плоскости энергии пикам резонансов Фано соответствуют полюсы амплитуды рассеяния в точках $E_m^{(r)} + i\Gamma_m$, где $E_m^{(r)}$ — энергия, определяющая положение резонанса, Γ_m — полуширина резонанса, при этом нули находятся на действительной оси в точках E_m^0 .

Как видно из формулы (2.33), полуширина резонанса Фано пропорциональна $\sin^2 \pi\eta$, поэтому при стремлении потока магнитного поля к целому значению происходит коллапс резонансов Фано, при этом максимум и нуль коэффициента прохождения сближаются $E_m^{(r)} \rightarrow E_m^0$, а ширина резонанса стремится к нулю $\Gamma_m \rightarrow 0$.

Теперь рассмотрим зависимость T от k в случае нулевого магнитного поля (или целого значения потока). В отсутствие примеси имеются осцилля-

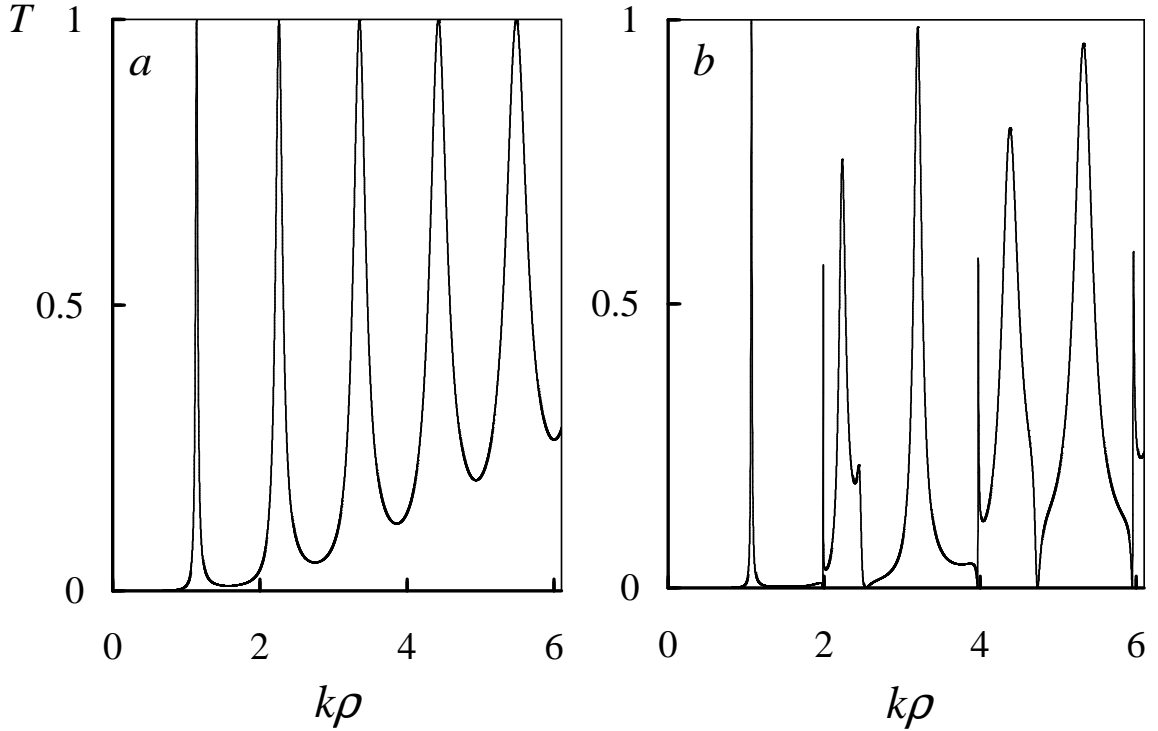


Рис. 2.3. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ в отсутствие примеси (а) и при расположении примеси в точке $\varphi_3 = 1.475\pi$ (b). Магнитное поле отсутствует. Вблизи значений $k_m\rho$, кратных двум, при наличии примеси видны резонансы.

ции коэффициента прохождения [93], максимумы которых достигают единицы (рис. 2.3а). Наличие примеси приводит к тому, что на графике появляются резонансы (рис. 2.3b), причем при определенных положениях примеси на кольце возможен коллапс части резонансов.

Как видно из рис. 2.3b, при наличии примеси на графике $T(k\rho)$ имеются нули слева от точек $k\rho = m$. Обозначим κ_m значения волнового вектора, при которых коэффициент прохождения обращается в нуль. Как следует из формул (2.25) и (2.26), значения κ_m определяются из уравнения

$$2\kappa\rho \sin(\pi\kappa\rho) - v \sin[(\pi - \Delta\varphi)\kappa\rho] \sin(\Delta\varphi\kappa\rho) = 0. \quad (2.34)$$

В случае особых положений примеси $\Delta\varphi \approx l\pi/n$ (n и l — целые числа), для которых величина $\sin(\Delta\varphi\kappa\rho)$ мала, из формулы (2.34) можно получить

приближенную оценку для корней

$$\kappa_n \approx \frac{n}{\rho} - \frac{v \sin^2 n \Delta \varphi}{2\pi n \rho}, \quad (2.35)$$

а из нее энергии электрона, соответствующие нулю коэффициента прохождения

$$E_n^{(z)} = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m^*} \simeq \frac{\hbar^2}{2m^* \rho^2} \left(n - \frac{v \sin^2 n \Delta \varphi}{2\pi n} \right)^2. \quad (2.36)$$

Исследуем поведение коэффициента вблизи значений κ_m в случае, когда $\sin m \Delta \varphi$ является малой величиной. Для этого разложим числитель и знаменатель $t(k)$ в формуле (2.24) в окрестности точек κ_m в ряд Тейлора, и ограничимся слагаемыми первого не исчезающего порядка по $\sin m \Delta \varphi$. В результате для амплитудного коэффициента прохождения в окрестности его нулей получим оценку

$$t(k, 0) \simeq \frac{2i\pi(-1)^{m+1}m^2\rho(k - \kappa_m)}{\pi m \rho(v - 2i)(k - k_m) + v(u - im) \sin^2 m \Delta \varphi}, \quad (2.37)$$

где $k_m = m/\rho$ — волновое число электрона, при котором энергия электрона совпадает с энергетическим уровнем спектра кольца в отсутствие магнитного поля. Обозначив

$$\mu_m = -\frac{2i(-1)^m m}{(v - 2i)}, \quad (2.38)$$

$$E_m^{(r)} \simeq E_m^0 \left(1 - \frac{2v(vu + 2m) \sin^2 m \Delta \varphi}{\pi m^2(v^2 + 4)} \right) \quad (2.39)$$

и

$$\Gamma_m \simeq \frac{2E_m^0 v(vm - 2u) \sin^2 m \Delta \varphi}{\pi m^2(v^2 + 4)}, \quad (2.40)$$

получим следующую формулу для коэффициента прохождения:

$$t(E) \simeq \mu_m \frac{E - E_m^{(z)}}{E - E_m^{(r)} - i\Gamma_m}. \quad (2.41)$$

Из уравнения (2.41) видно, что коэффициент прохождения имеет форму резонанса Фано в окрестности точки $E_m^{(z)}$. Как видно из формул (2.39) и (2.40), положение и ширина резонансов Фано в отсутствие магнитного поля определяются положением примеси. Если $\sin m \Delta \varphi = 0$, то полюс $E_m^{(r)} + i\Gamma_m$ и нуль $E_m^{(z)}$ амплитуды рассеяния совпадают и сокращаются. В результате происходит коллапс резонанса Фано в окрестности точки E_m^0 (рис. 2.4). Отметим,

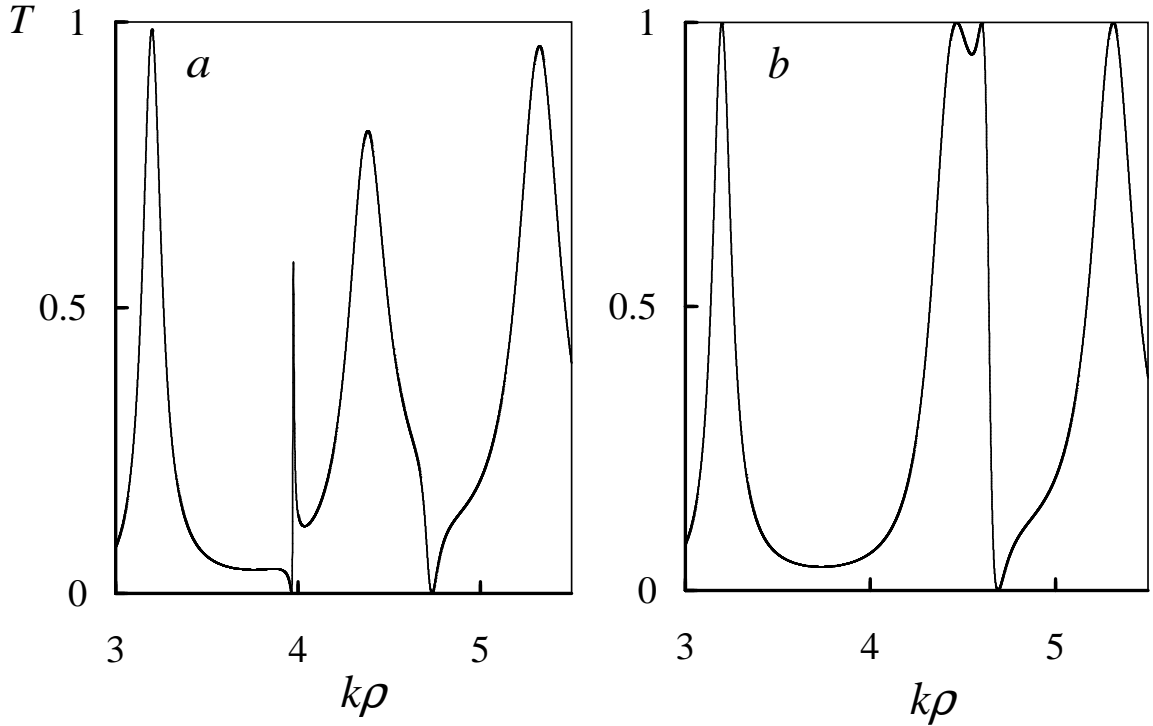


Рис. 2.4. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ в отсутствие магнитного поля. При наличии примеси в точке $\varphi_3 = 1.475\pi$ наблюдается резонанс слева от значения $k\rho = 4$ (a). При нахождении примеси в точке $\varphi_3 = 1.5\pi$ происходит коллапс резонанса (b).

что аналогичный результат (коллапс резонанса Фано при определенном положении примеси) был получен в работе [97] с использованием энергонезависимой матрицы рассеяний для моделирования контактов и δ -функции для описания потенциала примеси. Таким образом, при расположении примеси в точке $\varphi_3 = l\pi/n$ (l и n — целые) в отсутствие поля пропадают резонансы в окрестности всех E_m^0 , для которых m кратно n . При включении поля резонансы в окрестности данных точек возникают снова, но при этом одновременно исчезают нули при всех остальных значениях E_m^0 . Отметим, что при наличии магнитного поля, когда поток отличен от целого и полуцелого, резонансы появляются и в отсутствие примеси.

Теперь подробнее остановимся на случае полуцелого потока. В этом случае при диаметрально противоположном присоединении контактов к кольцу в отсутствие примеси коэффициент прохождения равен нулю для всех энергий электронов. Наличие примеси приводит к возникновению отличного от

нуля коэффициента прохождения. Действительно, при $\eta = n+1/2$ (n — целое) в числителе формулы (2.24) для коэффициента прохождения $F_1(k, \eta) = 0$ и остается только одно слагаемое, связанное с наличием примеси

$$t(k, 1/2) = \frac{v8k^2\rho^2(-1)^n \sin[(\pi - \Delta\varphi)k\rho] \sin(\Delta\varphi k\rho)}{F_3(k, 1/2, u) + vF_4(k, u, \varphi_3)}. \quad (2.42)$$

Как видно из выражения (2.42), при наличии примеси коэффициент прохождения не равен нулю тождественно. Это можно объяснить следующим образом. При наличии магнитного поля волновые функции электронов, прошедших по разным полукольцам, приобретают разные фазы $\pi(k\rho + \eta)$ и $\pi(k\rho - \eta)$, поэтому в точке A_2 (рис. 2.1) разность этих фаз равна $2\pi\eta$. При полуцелом потоке разность фаз становится кратна нечетному числу π , и на выходе из

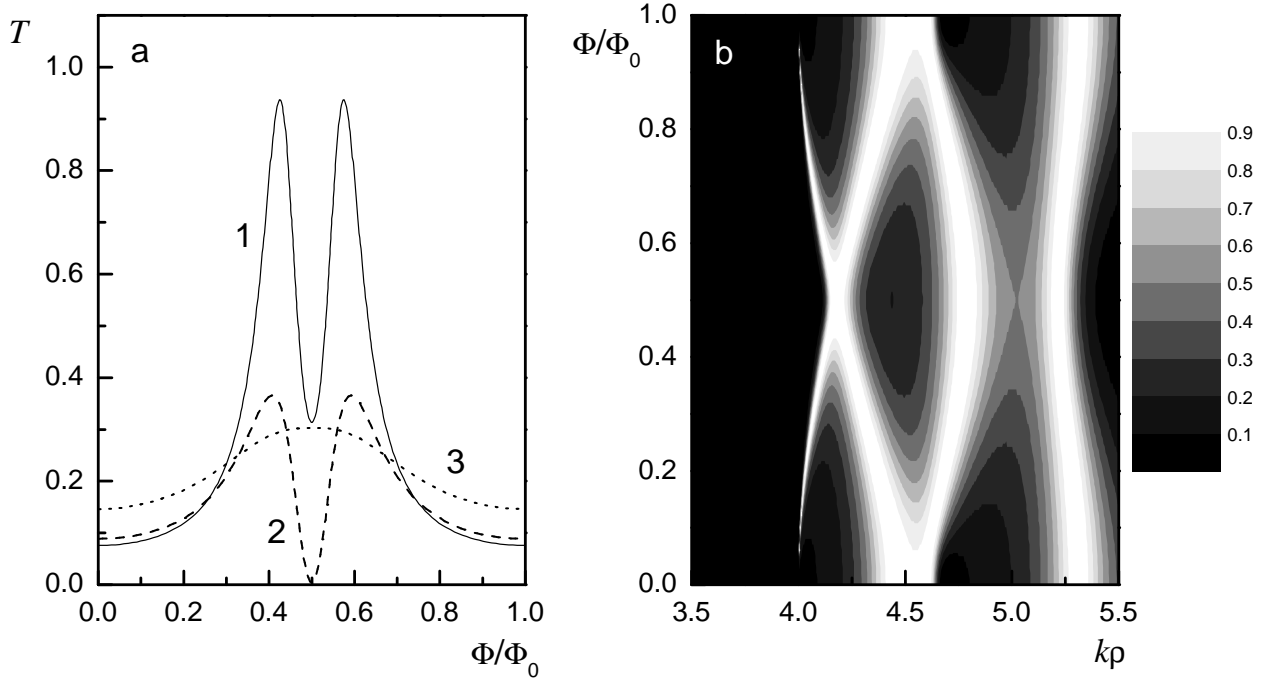


Рис. 2.5. Зависимость коэффициента прохождения от величины потока магнитного поля через кольцо для $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = \pi$ при различных положениях примеси (a). Сплошная кривая 1 соответствует $\varphi_3 = 1.02\pi$, штриховая 2 — $\varphi_3 = 1.033\pi$, пунктирная кривая 3 — $\varphi_3 = 1.06\pi$. Зависимость коэффициента прохождения от величины потока магнитного поля через кольцо и волнового числа электрона (b) при $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = \pi$ и при фиксированном положении примеси в точке $\varphi_3 = 3\pi/2$.

кольца волновые функции электронов компенсируются при любом k . Таким

образом, без примесей данное устройство представляет собой идеальное электронное зеркало. При наличии примеси фазы электронов претерпевают изменения, и при $\eta = 1/2$ на выходе из кольца компенсации волновых функций уже не происходит. Как следствие, коэффициент прохождения наноустройства оказывается отличным от нуля.

Теперь рассмотрим зависимость коэффициента прохождения от магнитного поля (рис. 2.5 а). Из формулы (2.24) видно, что $T(k, \eta)$ является периодической функцией потока η с периодом, равным кванту потока. В зависимости от положения примеси и энергии электрона на периоде может наблюдаться один или два максимума. Зависимость коэффициента прохождения от энергии электрона и от магнитного поля показана на рис. 2.5 б. Как видно из рисунка, при изменении энергии электрона максимумы на зависимости $T(\eta)$ могут сближаться и сливаться в один при целых либо полуцелых значениях потока или же могут расходиться и исчезать. Аналогичная картина наблюдается на зависимости коэффициента прохождения от магнитного потока и положения примеси при фиксированной энергии.

2.2.2 Случай несимметричного присоединения контактов к кольцу

Теперь рассмотрим случай несимметричного расположения контактов $\varphi_2 - \varphi_1 \neq \pi$. В этом случае амплитудный коэффициент прохождения может быть записан в виде

$$t(k, \eta) = \frac{\tilde{F}_1(k, \eta, \varphi_2) + v\tilde{F}_2(k, \eta, \varphi_2, \varphi_3)}{\tilde{F}_3(k, u, \eta, \varphi_2) + v\tilde{F}_4(k, u, \varphi_2, \varphi_3)}. \quad (2.43)$$

Здесь

$$\tilde{F}_1(k, \eta, \varphi_2) = -8ik^3\rho^3e^{-i\varphi_2\eta}\{\sin[(2\pi - \varphi_2)k\rho] + e^{2i\pi\eta}\sin(\varphi_2k\rho)\}, \quad (2.44)$$

$$\tilde{F}_2(k, \eta, \varphi_2, \varphi_3) = 8ik^2\rho^2e^{-i\varphi_2\eta}\sin[(2\pi - \varphi_3)k\rho]\sin(\Delta\varphi k\rho), \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_3(k, u, \eta, \varphi_2) = & 2k\rho\{u^2\cos 2\pi k\rho + (iu + k\rho)^2\cos[2(\pi - \varphi_2)k\rho] + k\rho \times \\ & \times [4k\rho\cos 2\pi\eta - (2iu + 5k\rho)\cos 2\pi k\rho + 4(u - ik\rho)\sin 2\pi k\rho]\}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned}\tilde{F}_4(k, u, \varphi_2, \varphi_3) = & (5k^2\rho^2 + 2ik\rho u - u^2) \sin 2\pi k\rho + \\ & +(iu + k\rho)^2 \{ \sin [2(\pi - \varphi_3)k\rho] - \sin [2(\pi - \varphi_2)k\rho] - \sin [2(\pi - \Delta\varphi)k\rho] \} + \\ & + 2ik\rho(iu + k\rho) \{ \cos [2(\pi - \Delta\varphi)k\rho] + \cos [2(\pi - \varphi_3)k\rho] - 2 \cos 2\pi k\rho \}. \quad (2.47)\end{aligned}$$

Если в кольце нет примесей, то в отсутствии магнитного поля выражение (2.43) принимает вид

$$t(k, 0) = \tilde{F}_1(k, 0, \varphi_2) / \tilde{F}_3(k, u, 0, \varphi_2), \quad (2.48)$$

где $\tilde{F}_1(k, 0, \varphi_2)$ можно представить в виде

$$\tilde{F}_1(k, 0, \varphi_2) = -16ik^3\rho^3 \sin k\pi\rho \cos [(\pi - \varphi_2)k\rho]. \quad (2.49)$$

Из (2.49) видно, что зависимость T от $(k\rho)$ носит осцилляционный характер, нули $T(k\rho)$ имеются в точках, когда либо $\cos [(\pi - \varphi_2)k\rho] = 0$, либо $\sin k\pi\rho = 0$ (рис. 2.6) за исключением тех точек, в которых функция \tilde{F}_3 обращается в нуль.

Можно отметить сходство формы дополнительных осцилляционных пиков, возникающих при несимметричном подключении контактов к кольцу в отсутствии магнитного поля, с формой осцилляций, возникающих в случае симметричного расположения контактов на кольце при наложении магнитного поля. Это связано с тем, что в первом случае разность фаз волновых функций электронов возникает из-за разных длин плеч кольца, а во втором случае из-за того, что магнитное поле сдвигает фазу волновой функции. Таким образом, разность фаз у волновых функций электронов, прошедших по разным полукольцам, можно создать, либо магнитным полем, либо несимметричным присоединением контактов к кольцу, либо введением примесей в кольцо.

Наличие примеси на кольце приводит к сдвигу нулей коэффициента прохождения от точек $k\rho = n$ (рис. 2.7 а). Их положение в этом случае определяются уравнением

$$-2k\rho \sin k\pi\rho \cos [(\pi - \varphi_2)k\rho] + v \sin[(2\pi - \varphi_3)k\rho] \sin(\Delta\varphi k\rho) = 0. \quad (2.50)$$

Из (2.50) видно, что при наличии примеси при значениях $k\rho = n$ и $k\rho = (1+2n)\pi/[2(\pi - \varphi_2)]$, $n = 0, 1, 2, \dots$ нулей уже не имеется. При фиксированном

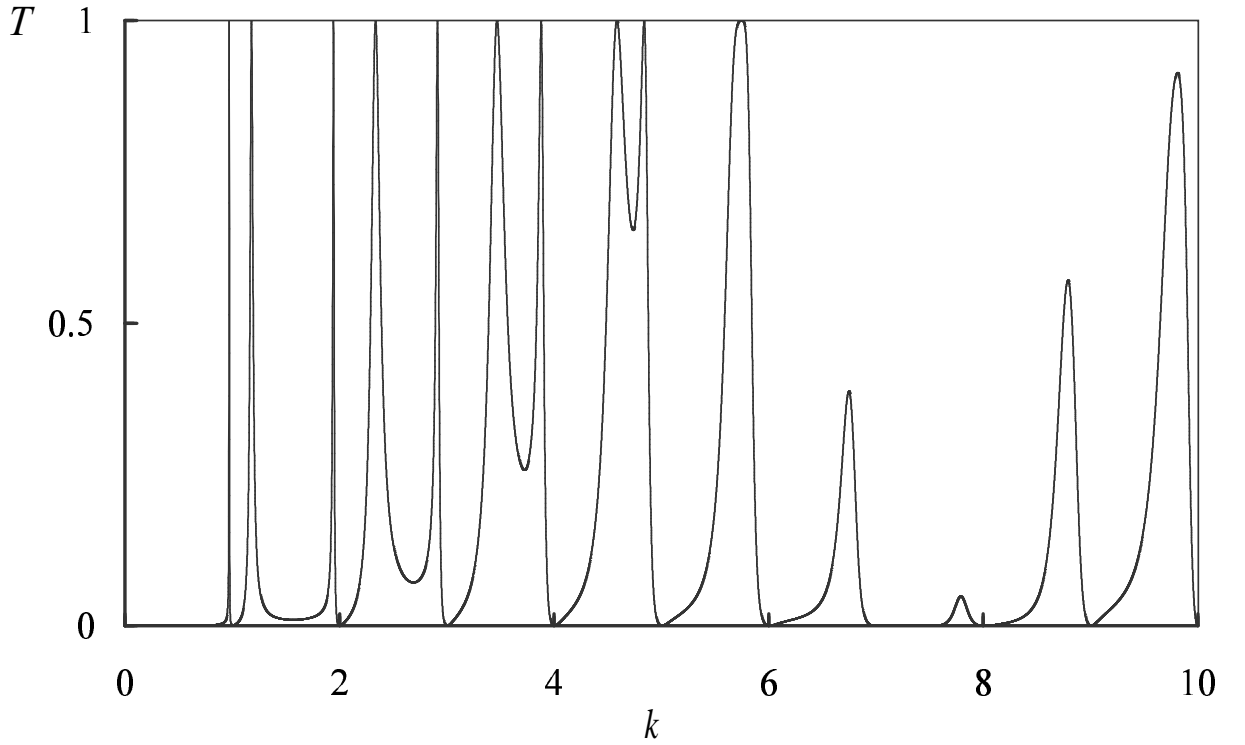


Рис. 2.6. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при несимметричном подключении проводников к кольцу $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 14\pi/15$ в отсутствие примеси и магнитного поля. Нули имеются не только при $k\rho = n$, но и при $k\rho = 7,5$ (первый нуль уравнения $\cos[(\pi - 14\pi/15)k\rho] = 0$).

положении примеси $\Delta\varphi = \pm l\pi/m$ (l и m – целые) при целых $k\rho$ нули будут только в точках $k\rho$, кратных m .

Магнитное поле при наличии примеси в кольце при $\varphi_2 - \varphi_1 \neq \pi$ приводит к исчезновению нулей коэффициента прохождения, как показано на рис. 2.7b. Механизм исчезновения нулей, в отличие от коллапса резонансов Фано, в этом случае другой. Глубина провалов уменьшается в то время как ширина остается конечной. Это происходит вследствие того, что в случае приложения магнитного поля нули коэффициента прохождения на комплексной плоскости энергии сдвигаются от действительной оси на комплексную плоскость и соответствующие провалы перестают достигать нуля. Энергетически положение нулей на комплексной плоскости определяется мнимой частью комплексной энергии, соответствующей нулю коэффициента прохождения, которая возрастает при увеличении магнитного поля. Таким образом существует два ме-

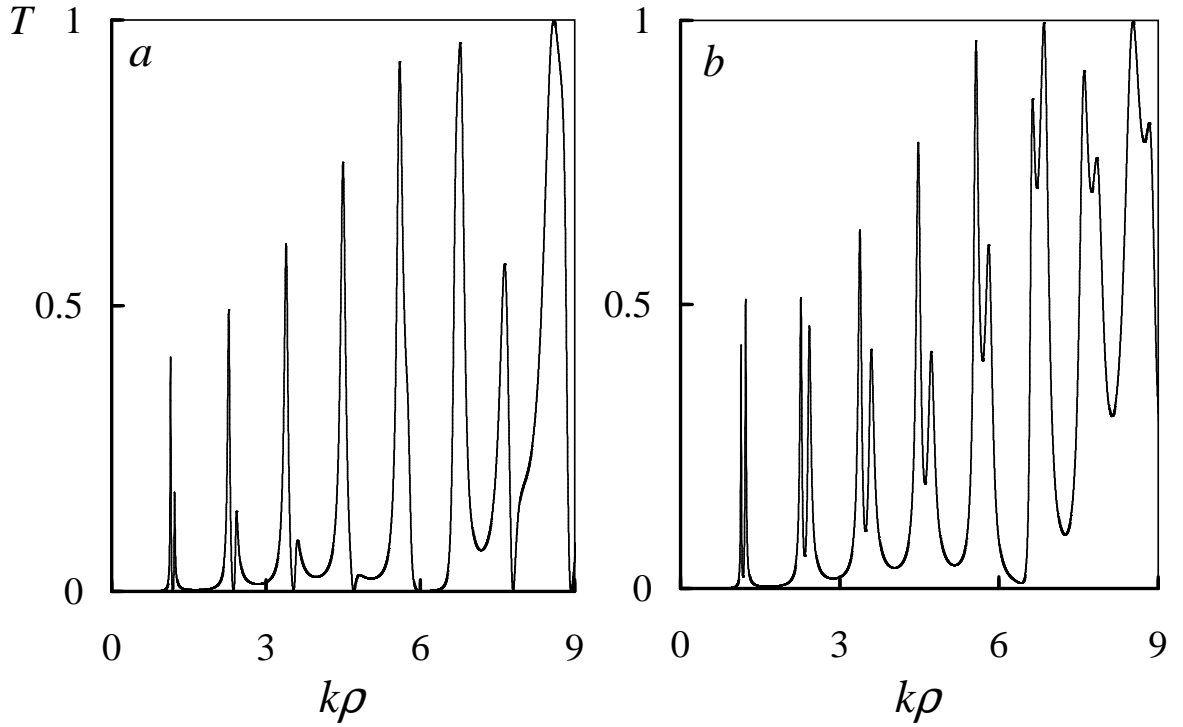


Рис. 2.7. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при несимметричном подключении проводников к кольцу $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 14\pi/15$, $\varphi_3 = 1.1\pi$ в отсутствие магнитного поля (a) и при наличии магнитного поля с потоком $\eta = 0.14$ (b).

ханизма исчезновения нулей в системе: во-первых, коллапс резонансов Фано, когда полюс амплитуды рассеяния спускается с комплексной плоскости на действительную ось в точку, где имеется нуль коэффициента прохождения. Во-вторых, сдвиг нуля коэффициента прохождения с действительной оси на комплексную плоскость. Следует упомянуть, что коллапс резонанса Фано сопровождается повышением симметрии в системе, в то время как второй механизм обусловлен понижением этой симметрии.

Следует отметить, что коэффициент прохождения достигает максимального значения тогда, когда система имеет зеркальную симметрию. В частности, высота пиков кондактанса максимальна, если примесь локализована в середине одной из дуг, соединяющей контакты, и параметры контактов равны.

2.3 Дискретные уровни, погруженные в непрерывный спектр

Известно [12, 13, 60, 61], что коллапс резонансов Фано сопровождается появлением дискретного уровня в непрерывном спектре. Этот уровень соответствует локализованному состоянию на кольце. Волновая функция ψ_ρ^d , соответствующая этому состоянию, должна удовлетворять граничным условиям (2.6) и (2.9) и стремиться к нулю в точках контактов

$$\psi_\rho^d(\varphi_1) = \psi_\rho^d(\varphi_2) = 0. \quad (2.51)$$

Если энергия электрона совпадает с собственным значением E_m^η гамильтониана H_ρ , то волновая функция в кольце представляет из себя линейную комбинацию собственных функций кольца. Собственные же значения E_m^η не вырождены, если значение 2η не целое. В этом случае собственная функция имеет вид

$$\psi_\rho^m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (2.52)$$

Функция $\psi_\rho^m(\varphi)$ не имеет нулей и поэтому не удовлетворяет условию (2.51).

При целых и полуцелых значениях потока магнитного поля η собственные значения E_m^η дважды вырождены. Для этих случаев общий вид волновой функции задается выражением

$$\psi_\rho(\varphi) = C_1 e^{im\varphi} + C_2 e^{-i(m+2\eta)\varphi}, \quad (2.53)$$

где C_1 и C_2 – некоторые коэффициенты. Легко получить такую функцию вида (2.53), чтобы она стремилась к нулю при $\varphi_1 = 0$

$$\psi_\rho^d(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-i\eta\varphi) \sin[(m + \eta)\varphi]. \quad (2.54)$$

В соответствии с выражением (2.51) функция $\psi_\rho^d(\varphi)$ должна стремиться к нулю и в точке φ_2 . Поскольку волновая функция (2.54) гладкая, она должна стремиться к нулю и в точке нахождения примеси φ_3 для того, чтобы удовлетворять граничным условиям (2.6). Поэтому дискретный уровень в непрерывном спектре возникает, если волновая функция, задаваемая выражением (2.54), имеет нули во всех точках возмущения на кольце. Ясно,

что соответствующие положения примеси и второго контакта, при которых происходит коллапс резонанса Фано в окрестности точек E_m^η и возникает дискретный уровень, задаются следующими выражениями

$$\varphi_2 = \frac{n_2}{m + \eta} \pi, \quad \varphi_3 = \frac{n_3}{m + \eta} \pi. \quad (2.55)$$

где n_2 и n_3 – произвольные целые числа. Выражение (2.55) совпадает с условием коллапса резонанса Фано, полученным в предыдущих разделах.

В случае когда $E \neq E_m^\eta$ (в отсутствии вырождения) волновая функция, соответствующая дискретному уровню, должна иметь вид

$$\psi_m^d(\varphi) = A_3 G(\varphi, \varphi_3, E). \quad (2.56)$$

Применяя граничное условие (2.6) к функции (2.56), получим выражение

$$Q_{33}(E) + \frac{2}{v} = 0, \quad (2.57)$$

определяющее энергию дискретного уровня, связанного с примесью. В случае нулевого магнитного поля выражение (2.57) запишется в виде

$$\cot \pi k \rho + \frac{2k\rho}{v} = 0. \quad (2.58)$$

Однако выполнения условия (2.57) не достаточно для появления дискретного уровня в случае когда к кольцу присоединены проводники. В дополнении к условию (2.57) должно выполняться условие (2.51). Это означает, что контакты должны располагаться в нулях функции (2.56). Применяя граничные условия (2.51) к волновой функции (2.56), мы получаем условие появления дискретного уровня

$$Q_{31}(E) = Q_{32}(E) = 0. \quad (2.59)$$

Этот результат справедлив только для особых положений примеси и особых значений энергии. Заметим, что функция (2.56) не имеет нулей при иррациональных значениях потока магнитного поля η . Более того положение нулей зависит от силы потенциала, создаваемого примесью. Поэтому положения контактов должны быть согласованы со значением потенциала примеси. Согласованность не может выполняться для всех уровней одновременно. Поэтому только один дискретный уровень может возникать в непрерывном спектре

при $E \neq E_m^\eta$. Возникновение этого уровня более вероятно, если контакты располагаются на равных расстояниях от примеси вследствие свойств симметрии функции (2.56).

2.4 Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии двух примесей в кольце

В общем случае, когда примеси и контакты расположены на кольце в произвольных точках, на графике зависимости коэффициента прохождения от энергии электрона имеется наложение осцилляций и резонансов различных типов. При этом зависимость коэффициента прохождения оказывается нерегулярной и трудно анализируемой. Поэтому в настоящей работе мы ограничимся подробным рассмотрением случая двух примесей при диаметрально противоположном присоединении проводников. Но даже в этом случае получить явную аналитическую зависимость коэффициента прохождения от волнового числа, магнитного поля и положения рассеивателей, как в предыдущих случаях, не удастся, хотя общая формула (2.19) для $t(E)$ при наличии N примесей получена. Поэтому для получения зависимости T от $k\rho$ использовались численные расчеты, основываясь на формуле (2.19). Для этой цели была разработана программа (**Приложении А**).

Численный анализ с использованием этой программы показал что, если углы, задающие положения примесей, несоизмеримы, то в отсутствие магнитного поля зависимость $T(k\rho)$ содержит резонансы Фано (рис. 2.8 а) вблизи значений $k\rho = m$, где m — целое. Если примеси расположены на равных расстояниях от контактов ($\varphi_4 = 2\pi - \varphi_3$), то это приводит к коллапсу всех резонансов Фано (рис. 2.8b), причем коллапс происходит лишь при одинаковых примесях ($v_1 = v_2$).

В случае двух примесей волновая функция дискретного состояния, соответствующая коллапсу, при $E \neq E_m^\eta$ имеет вид

$$\psi_m^d(\varphi) = A_3 G(\varphi, \varphi_3, E) + A_4 G(\varphi, \varphi_4, E). \quad (2.60)$$

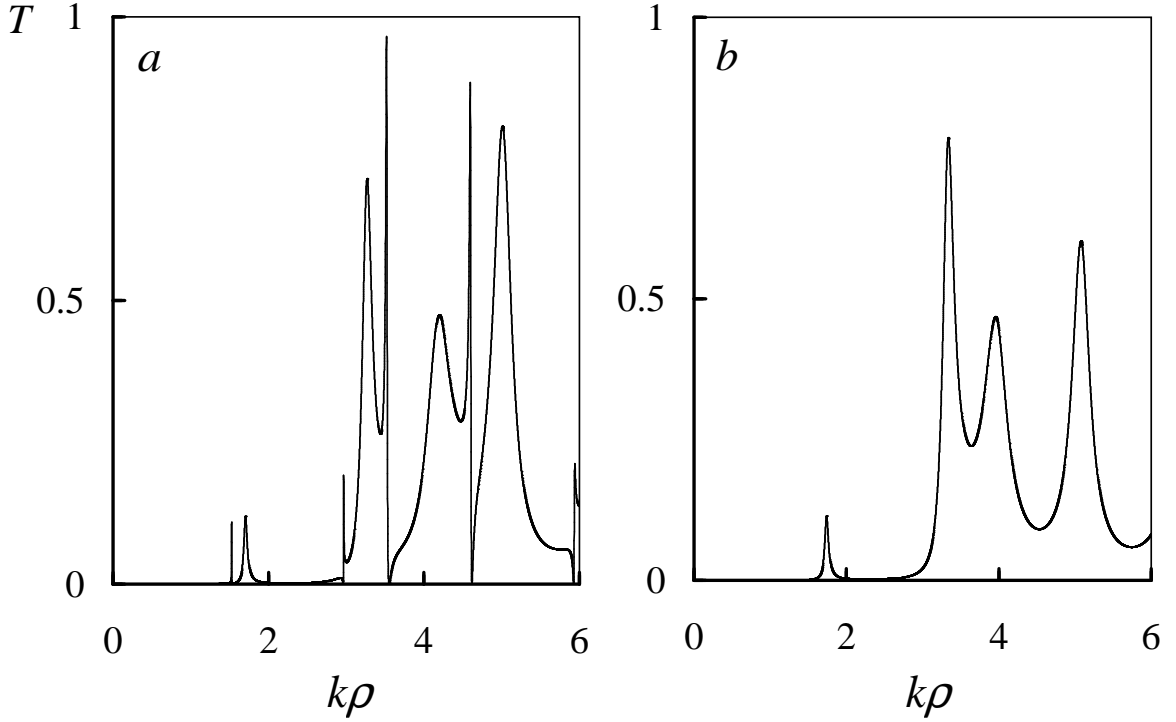


Рис. 2.8. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при диаметрально противоположном подключении проводников в отсутствие магнитного поля при наличии двух рассеивателей, расположенных несимметрично в точках $\varphi_3 = 2.1\pi/3, \varphi_4 = 4\pi/3$ (a). Та же зависимость при расположении примесей на одинаковом расстоянии от каждого контакта $\varphi_3 = 2\pi/3, \varphi_4 = 4\pi/3$ (b). Здесь $u, v_1, v_2 = 10$.

Энергия дискретного уровня определяется из уравнения

$$\begin{vmatrix} Q_{33}(E) + \frac{2}{v} & Q_{34}(E) \\ Q_{43}(E) & Q_{44}(E) + \frac{2}{v} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.61)$$

Условие (2.51) должно удовлетворяться одновременно с уравнением (2.61). При нулевом магнитном поле функция Грина $G(\varphi, \varphi_j, E)$ обладает следующим свойством

$$G(\varphi_j - \Delta\varphi, \varphi_j, E) = G(\varphi_j + \Delta\varphi, \varphi_j, E). \quad (2.62)$$

Принимая во внимание выражение (2.62), можно увидеть, что волновая функция

$$\psi_m^d(\varphi) = A_3[G(\varphi, \varphi_3, E) - G(\varphi, \varphi_4, E)] \quad (2.63)$$

удовлетворяет граничным условиям (2.51) при произвольном значении энергии. Поэтому присутствие зеркальной симметрии в системе приводит к одновременному коллапсу всех резонансов Фано. Если симметрия разрушается путем либо сдвига одной из примесей, либо различием в величинах потенциалов, создаваемых примесями ($v_1 \neq v_2$), то резонансы Фано возникают вновь. В случае особых положений примесей $\varphi_3 = n_3\pi/m$ и $\varphi_4 = n_4\pi/m$ (n_3, n_4, m —

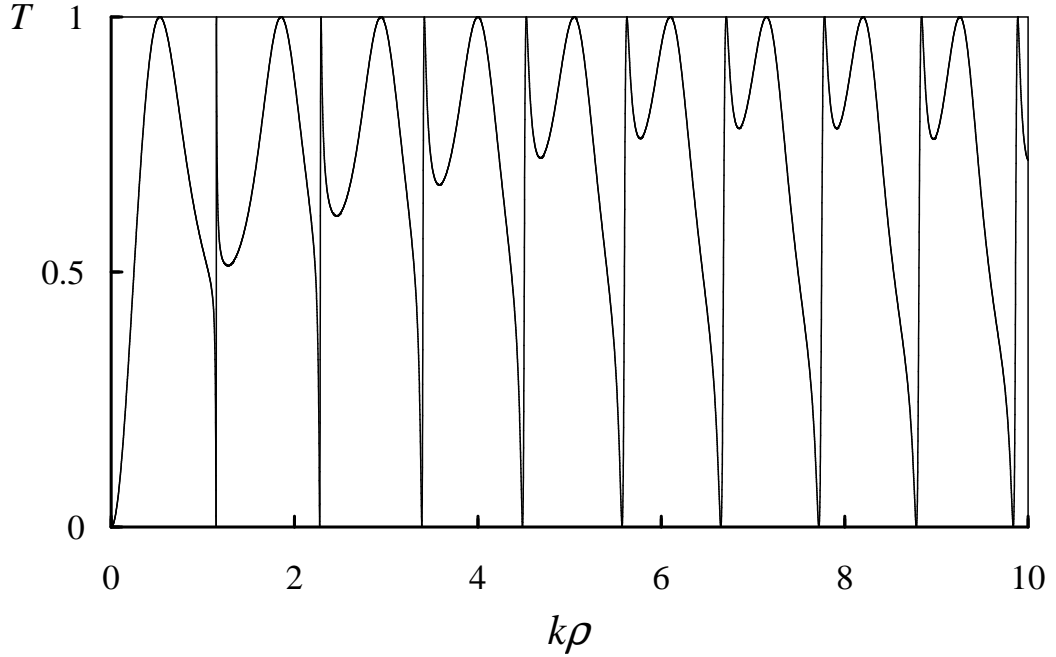


Рис. 2.9. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при диаметрально противоположном подключении проводников в отсутствие магнитного поля при расположении двух примесей в точках $\varphi_3 = \pi/15$ и $\varphi_4 = 16\pi/15$.

целые числа), происходит коллапс некоторых резонансов Фано, расположенных вблизи точек $k\rho$, кратных m . Если примеси расположены диаметрально противоположно ($\varphi_4 = \varphi_3 + \pi$), то максимальные значения пиков коэффициента прохождения достигают единицы (рис. 2.9) в отличие от случая одной примеси (при наличии одной примеси вблизи контакта, как было показано выше, максимумы не достигали единицы). Таким образом, добавление второй примеси, диаметрально противоположно первой, увеличивает кондактанс вследствие конструктивной интерференции.

При расположении примесей в точках $\varphi_3 = \pi/2, \varphi_4 = 3\pi/2$ зависимость

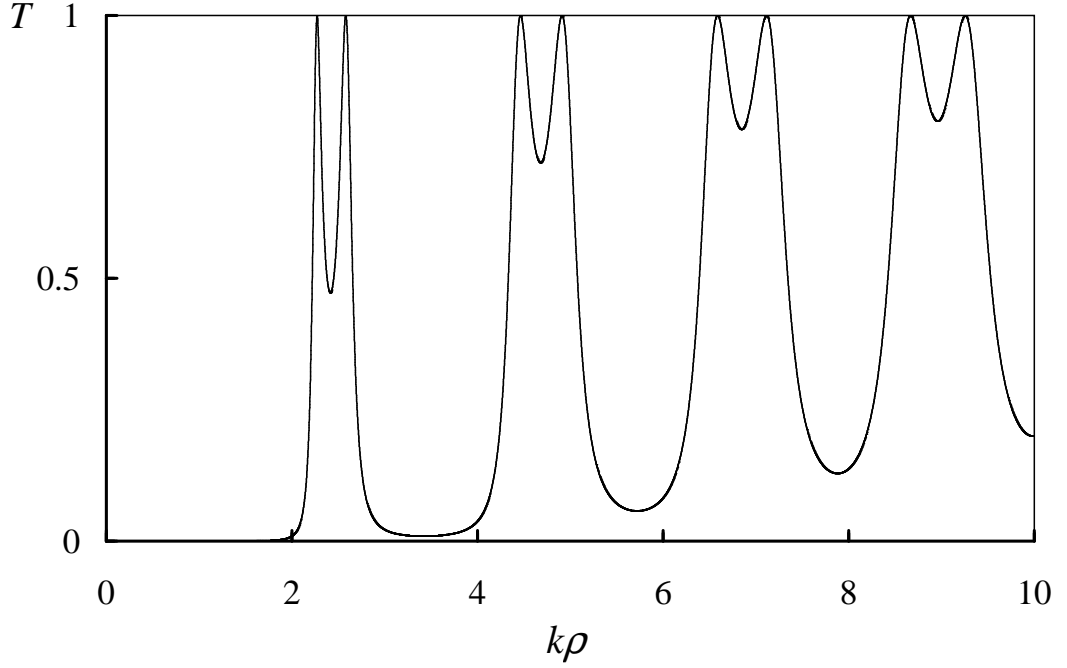


Рис. 2.10. Зависимость коэффициента прохождения T от безразмерной величины $k\rho$ при диаметрально противоположном подключении проводников в отсутствие магнитного поля и при расположении двух рассеивателей в точках $\varphi_3 = \pi/2$ и $\varphi_4 = 3\pi/2$.

$T(k\rho)$ имеет вид осцилляций, аналогичный отсутствию примесей, с той разницей, что частота осцилляций уменьшается вдвое, а все максимумы имеют дублетную структуру (рис. 2.10). Аналогичная структура была получена в [78] на зависимости коэффициента прохождения частицы через одномерное полупроводниковое кольцо от напряжения исток-сток.

Следует упомянуть, что деструктивная интерференция при полуцелом значении потока магнитного поля приводит к полному отражению в системе, имеющей зеркальную или инверсную симметрию. Поэтому коэффициент прохождения стремится к нулю при полуцелом значении потока магнитного поля, если две идентичные примеси расположены в диаметрально противоположных точках ($\varphi_4 = \varphi_3 + \pi$) или на равных расстояниях от контактов ($\varphi_4 = 2\pi - \varphi_3$). Если же примеси не идентичны $v_1 \neq v_2$, то при таких положениях примесей φ_3 и φ_4 коэффициент прохождения является ненулевым.

При наличии магнитного поля с потоком $\eta \neq n/2$, где n — целое, нули коэффициента прохождения исчезают. Подобный эффект был рассмотрен

выше для случая одной примеси и проиллюстрирован на рис. 2.7.

2.5 Основные результаты главы

В настоящей главе исследован электронный транспорт в двухтерминальном квантовом кольце, помещенном в магнитное поле и содержащем несколько короткодействующих примесей. С помощью метода потенциалов нулевого радиуса в работе получены аналитические выражения для коэффициента прохождения электронов и исследована зависимость электронного транспорта от энергии электронов, величины внешнего магнитного поля, положения примесей, а так же от величины потенциалов, создаваемых примесями и контактами. Разработана программа на языке Pascal, позволяющая производить численное исследование зависимости коэффициента прохождения от любого интересующего параметра системы путем проведения численного эксперимента. Показано, что зависимость коэффициента прохождения от энергии электронов носит осцилляционный характер. Осцилляции связаны с интерференцией электронных волн, многократно рассеянных на примесях и контактах. Наличие примесей приводит к изменению режима электронного транспорта, при этом возможно не только уменьшение кондактанса, но и его увеличение вследствие разрушения деструктивной интерференции. В частности, при диаметрально противоположном положении контактов и полуцелом значении магнитного потока через кольцо система без примесей ведет себя как идеальное электронное зеркало. Наличие примесей приводит к появлению ненулевой вероятности прохождения.

Проведенный анализ показывает, что зависимость коэффициента прохождения от энергии электронов содержит вблизи дискретных энергетических уровней квантового кольца резонансы Фано, состоящие из близко расположенных нуля и пика коэффициента прохождения. Необходимым условием существования резонансов является частичное нарушение симметрии системы либо с помощью несимметричного расположения контактов, либо с помощью примесей, либо с помощью магнитного поля. Резонансы возникают в результате взаимодействия распространяющихся электронных волн с лока-

лизованными состояниями дискретного спектра при совпадении их энергий. Найдены аналитические выражения для полуширины резонансной кривой и положения резонансного пика. Ширина резонансов существенно зависит от положения точек контактов и от положения примесей. Показано, что при определенных положениях примесей и значениях магнитного поля возможен коллапс резонансов Фано, который происходит путем уменьшения ширины резонанса до нуля, в то время как его амплитуда остается неизменной. При этом полюс амплитуды рассеяния спускается на комплексной плоскости энергий к нулю амплитуды рассеяния на действительную ось, уменьшая величину своей мнимой части, затем они совпадают и сокращаются. В частности, при диаметрально противоположном положении контактов в отсутствие магнитного поля коллапс резонанса Фано вблизи m -го уровня происходит, когда на кольце имеется единственная примесь, положение которой определяется из уравнения $\sin(m\Delta\varphi) = 0$. При наличии магнитного поля, резонанс Фано вблизи m -го уровня возникает снова, а при приближении потока к целому числу квантов потока происходит коллапс резонансов.

Показано, что в системе возможен другой механизм исчезновения нулей коэффициента прохождения, при котором нуль сдвигается с действительной оси в комплексной плоскости энергии. В этом случае уменьшается не ширина, а глубина соответствующего провала. Отметим, что коллапс резонансов Фано, сопровождается повышением симметрии системы, в то время как, при сдвиге нулей эта симметрия понижается. Таким образом, при изменении магнитного поля, взаимного расположения примесей и контактов на кольце можно получать системы с существенно различными транспортными режимами.

Глава 3

Спектральные и транспортные свойства периодической цепочки квантовых колец

Целью этой главы является получение законов дисперсии одноэлектронного энергетического спектра и теоретическое изучение транспортных характеристик цепочки мезоскопических колец, соединенных проводниками. Моделировать такую систему будем бесконечной периодической цепочкой одинаковых одномерных колец, последовательно соединенных между собой одномерными проводниками равной длины. Предполагается наличие магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости колец. Условие применимости модели к реальным системам остается тем же, что и в **Главе 2**.

Исследовано влияние параметров системы, таких как длина соединяющего кольца проводника, сила связи между кольцами и проводниками, величина магнитного поля на спектр этой системы. Рассмотрена цепочка двух видов: цепочка колец, соединенных между собой проводниками, и цепочка колец, имеющих между собой точечный контакт (рис. 3.1).

В нашей работе предполагается когерентность, что может быть реализовано в системе мезоскопических размеров с высокой подвижностью. Вследствие периодичности системы происходит формирование энергетической зонной структуры в соответствии с основными принципами физики конденсированного состояния. Для исследования свойств цепочки необходимо найти одноэлектронный энергетический спектр.

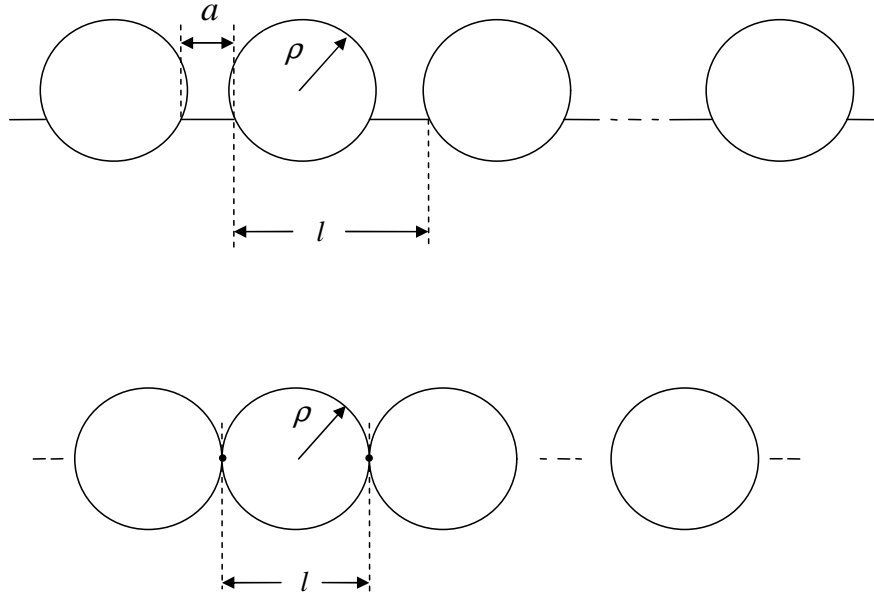


Рис. 3.1. Схематическое изображение цепочек колец радиусом ρ , соединенных между собой проводниками длины a , и имеющих между собой точечный контакт. l — период цепочки.

3.1 Дисперсионные соотношения для цепочки колец, соединенных между собой проводниками

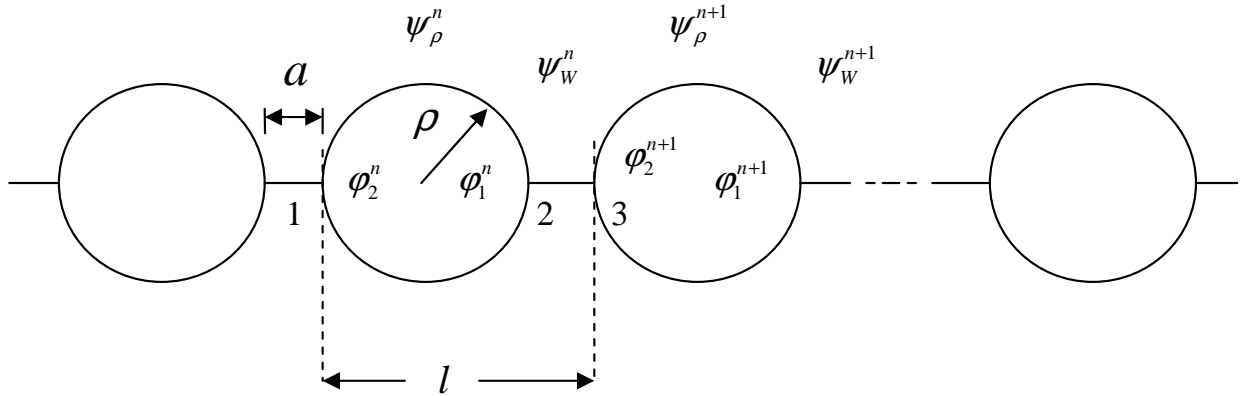


Рис. 3.2. Схематическое изображение цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины a .

Рассмотрим движение электрона в бесконечной цепочке одномерных колец, соединенных одномерными проводниками (рис. 3.2). Точки контакта проводников с кольцами будем моделировать, как и в **Главе 2**, с помощью теории потенциалов нулевого радиуса [9, 14–18]. Радиусы всех колец будем считать одинаковыми и равными ρ , длины всех проводников равными a . Эта система

является периодической с периодом l . Обозначим гамильтониан электрона в каждом кольце через H_ρ

$$H_\rho = \frac{\hbar^2}{2m^*\rho^2} \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2, \quad (3.1)$$

а гамильтониан электрона в проводниках через H_w

$$H_w = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (3.2)$$

где ρ — радиус кольца, m^* — эффективная масса электрона, $\Phi = \pi\rho^2 B$ — поток магнитного поля через кольцо и Φ_0 — квант магнитного потока. Собственные значения гамильтониана H_ρ хорошо известны

$$E_m = \varepsilon (m + \eta)^2, \quad (3.3)$$

где $\varepsilon = \hbar^2/2m^*\rho^2$ и $\eta = \Phi/\Phi_0$. Собственные функции гамильтониана H_w , соответствующие энергии E , в проводнике n -ой ячейки определяются как

$$\psi_w^n(x) = A^n(E)e^{ikx} + B^n(E)e^{-ikx}, \quad (3.4)$$

где $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ — волновое число электрона, A^n , B^n — коэффициенты, определяемые из граничных условий и n — номер ячейки. Так как контакты представляют собой точечные возмущения движения электрона, волновая функция на кольце может быть выражена через функцию Грина $G(\varphi, \varphi_j, E)$ гамильтониана H_ρ [18]

$$\psi_\rho^n = \alpha_1^n G(\varphi, \varphi_1, E) + \alpha_2^n G(\varphi, \varphi_2, E), \quad (3.5)$$

где $\alpha_j(E)$ — некоторые коэффициенты. Функция Грина $G(\varphi, \varphi_j, E)$ гамильтониана H_ρ известна [93] и описывается формулой (2.13).

Каждый контакт между кольцами и проводниками можно описывать с помощью линейных граничных условий для волновой функции и ее производной [93]. Общая форма граничных условий может быть получена из условий сохранения тока [93]. В силу непрерывности волновой функции каждый контакт будет описываться только одним параметром β , имеющим размерность длины. При получении аналитического выражения для дисперсионного соотношения для простоты выберем их одинаковыми для всех контактов.

Рассмотрим один период длины l , состоящий из кольца и проводника. На кольце введем полярную систему координат. Углы, задающие положения контактов обозначим φ_j , $j = 1, 2$. Таким образом, условия непрерывности волновой функции в точках 2 и 3 (рис. 3.2), а так же условия сохранения тока в этих точках в соответствии с [93] запишутся в виде

$$\begin{cases} \psi_w^n(a) = \psi_\rho^{n+1}(\varphi_2) = \beta[\psi_\rho^{n+1}(\varphi_2 + 0) - \psi_\rho^{n+1}(\varphi_2 - 0)] - \beta\psi_w^n(a), \\ \psi_w^n(0) = \psi_\rho^n(\varphi_1) = \beta[\psi_\rho^n(\varphi_1 + 0) - \psi_\rho^n(\varphi_1 - 0)] + \beta\psi_w^n(0), \end{cases} \quad (3.6)$$

где ψ'_ρ обозначает производную ψ_ρ по углу φ , а ψ'_w — производную ψ_w по x . Удобно представить β через безразмерный параметр v , определяющий силу точечных возмущений контактов, посредством выражения $\beta = \rho/v$ (величина v обратно пропорциональна величине связи между кольцом и проводниками).

Общий вид решения уравнения Шредингера в периодической системе, согласно теореме Блоха имеет вид

$$\psi(x) = e^{iqx}u(x), \quad (3.7)$$

где q — квазиимпульс, а $u(x)$ — некоторая периодическая функция с периодом l . Блоховские амплитуды $u(x)$ удовлетворяют условию

$$u(x + l) = u(x). \quad (3.8)$$

Используя условие периодичности функции $u(x)$ (3.8) и ее производной, получим следующие граничные условия

$$\begin{cases} \psi_\rho^{j+1}(\varphi_2^{j+1}) = e^{iq_l}\psi_\rho^j(\varphi_2^j), \\ \psi_\rho^{j+1}(\varphi_2^{j+1} + 0) - \psi_\rho^{j+1}(\varphi_2^{j+1} - 0) = e^{iq_l}[\psi_\rho^j(\varphi_2^j + 0) - \psi_\rho^j(\varphi_2^j - 0)]. \end{cases} \quad (3.9)$$

Подставляя условия (3.9) в (3.6), получим следующую систему четырех уравнений для нахождения коэффициентов A , B и α_j ($j = 1, 2$)

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{2}{v}e^{iq_l} & (1 + \frac{ik\rho}{v})e^{ika} & (1 - \frac{ik\rho}{v})e^{-ika} \\ Q_{21} & (Q_{22} - \frac{2}{v}) & \frac{ik\rho}{v}e^{-iq_l}e^{ika} & -\frac{ik\rho}{v}e^{-iq_l}e^{-ika} \\ -\frac{2}{v} & 0 & (1 - \frac{ik\rho}{v}) & (1 + \frac{ik\rho}{v}) \\ (Q_{11} - \frac{2}{v}) & Q_{12} & -\frac{ik\rho}{v} & \frac{ik\rho}{v} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

где введена $Q_{ij} = \hbar^2 G_\rho(\varphi_i, \varphi_j, E)/m^* \rho$ — безразмерная функция Грина. Для нахождения нетривиального решения приравняем определитель этой матрицы к нулю. После некоторых преобразований найдем дисперсионное соотношение

$$2k\rho(Q_{21}e^{iqL} + Q_{12}e^{-iqL}) + 2k\rho[v \det Q - \text{tr}Q] \cos(ka) + \\ + [\det Q (v^2 - k^2 \rho^2) - 2v \text{tr}Q + 4] \sin(ka) = 0, \quad (3.11)$$

где $\det Q$ и $\text{tr}Q$ — это определитель и след Q - матрицы второго порядка соответственно. Для получения дисперсионных кривых, пригодных для анализа, требуется решить это трансцендентное уравнение не менее десяти тысяч раз для каждого графика. Решить уравнение (3.11) аналитически не представляется возможным, так как при одном и том же значении квазиимпульса имеется несколько корней уравнения, поэтому его решение было найдено численно. С этой целью были разработаны численные методы и создан специальный программный комплекс на языке TurboDelphi, представленный в **Приложении В**. Численные методы описаны в конце этой главы.

С помощью этой программы был проведен численный эксперимент по исследованию влияния параметров модели на ее спектр. С помощью программы Origin по данным, генерируемым программой, были построены спектры цепочки колец при различных параметрах системы. На рис. 3.3 представлена зависимость энергии электрона от квазиимпульса для случая диаметрально противоположного присоединения контактов в нулевом магнитном поле при промежуточной силе связи между кольцом и проводниками.

Исходя из результатов численного анализа, можно видеть, что в общем случае спектр имеет зонную структуру без пересечения зон. Физически это можно интерпретировать следующим образом. В цепочке одинаковых квантовых колец с одинаковой связью с ближайшими кольцами дискретные состояния изолированных колец трансформируются в минизоны. Ширина запрещенной зоны между двумя следующими друг за другом подзонами определяется взаимосвязью между кольцами. Слабая взаимная связь между кольцами приводит к тому, что формируется зонная структура с узкими зонами проводимости и широкими запрещенными зонами, в то время как широкие зоны проводимости и узкие запрещенные зоны являются результатом сильной вза-

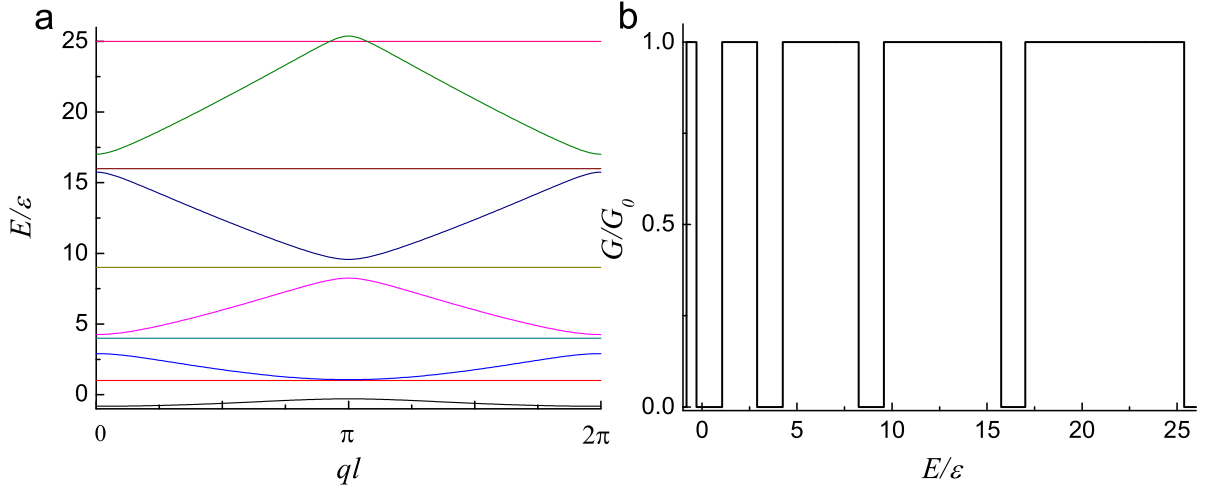


Рис. 3.3. Спектр и кондактанс цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 0.1\rho$. Поток магнитного поля $\eta = 0$, параметр связи $v = 1$. Здесь и далее $\varepsilon = \hbar^2/2m^*\rho^2$, $G_0 = e^2/\pi\hbar$ — квант кондактанса, $\eta = \Phi/\Phi_0$, где $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$ — квант магнитного потока.

имной связи колец.

Кроме этих зон в спектр системы колец входят еще и дискретные уровни изолированного кольца, не дающие вклада в проводимость. Они появляются вследствие того, что изначально уровни изолированных колец в отсутствии магнитного поля являются двукратно вырожденными. Когда у колец появляется взаимосвязь, половина из этих вырожденных уровней трансформируется в минизоны, а половина остается в качестве дискретных уровней, которые соответствуют локализованным в кольцах электронам. Аналитически существование дискретных уровней в спектре можно выявить следующим образом. В **разделе 2.3** говорилось о том, что, если энергия электрона совпадает с собственным значением E_m гамильтониана H_ρ , то волновая функция представляет из себя линейную комбинацию соответствующих собственных функций, и выражение ее через функцию Грина неправомерно. Поэтому волновая функция на кольце, соответствующая дискретному уровню, при целых значениях η задается как

$$\psi_\rho(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-i\eta\varphi) \sin[(m + \eta)\varphi]. \quad (3.12)$$

Дискретные уровни в этом случае получаются из граничных условий (3.9),

если в (3.9) взять волновую функцию в проводнике, равную нулю, разрыв производной волновой функции на кольце в точках контакта также нулевой. Таким условиям будут удовлетворять только уровни изолированного кольца. Следует отметить, что имеется пересечение минизон и дискретных уровней. Это означает, что при одном и том же значении квазиимпульса, существует как локализованные состояния, так и делокализованные. Аналогичная ситуация наблюдалась в двухтерминальном кольце при коллапсе резонансов Фано [43].

В соответствии с формализмом Ландауэра-Бюттикера, зависимость кондактанса при нулевой температуре от химического потенциала полностью определяется электронной энергетической зонной структурой. Кондактанс равен единице, если энергия Ферми локализуется внутри разрешенной зоны, и нулю, если внутри запрещенной. Поскольку в системе нет пересечения минизон, кондактанс не может превышать одного кванта кондактанса.

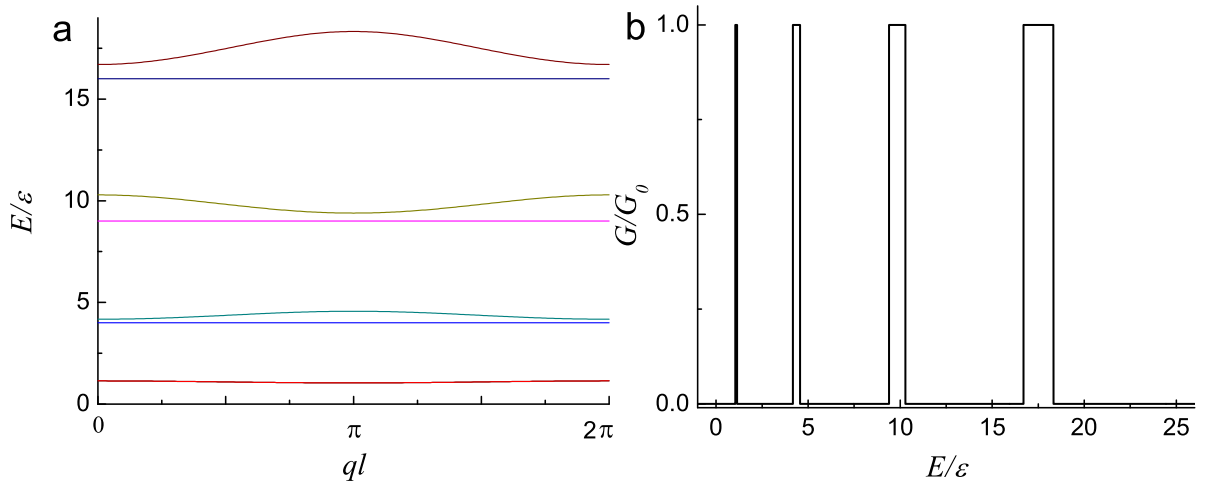


Рис. 3.4. Спектр и кондактанс цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 0.1\rho$. Поток магнитного поля $\eta = 0$, параметр связи $v = 10$. При уменьшении связи между кольцом и проводниками минизоны вырождаются в дискретные уровни.

Изменение величины взаимной связи между кольцами и проводниками не влияет на число подзон, а влияет только на ширину запрещенных зон. Таким образом при ослаблении связи между кольцами и проводниками, то есть с увеличением v , ширина запрещенной зоны растет, а разрешенных умень-

шается и спектр системы соединенных колец становится похож на спектр изолированного кольца (рис. 3.4а). Кондактанс в этом случае будет иметь вид узких прямоугольных пиков единичной высоты (рис. 3.4б). В пределе, соответствующем изолированным кольцам ($v \rightarrow \infty$), разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни изолированного кольца. Таким образом в отсутствии магнитного поля (либо когда $\eta = n$) при $v \rightarrow \infty$ спектр представляет собой двукратно вырожденные дискретные уровни изолированного кольца.

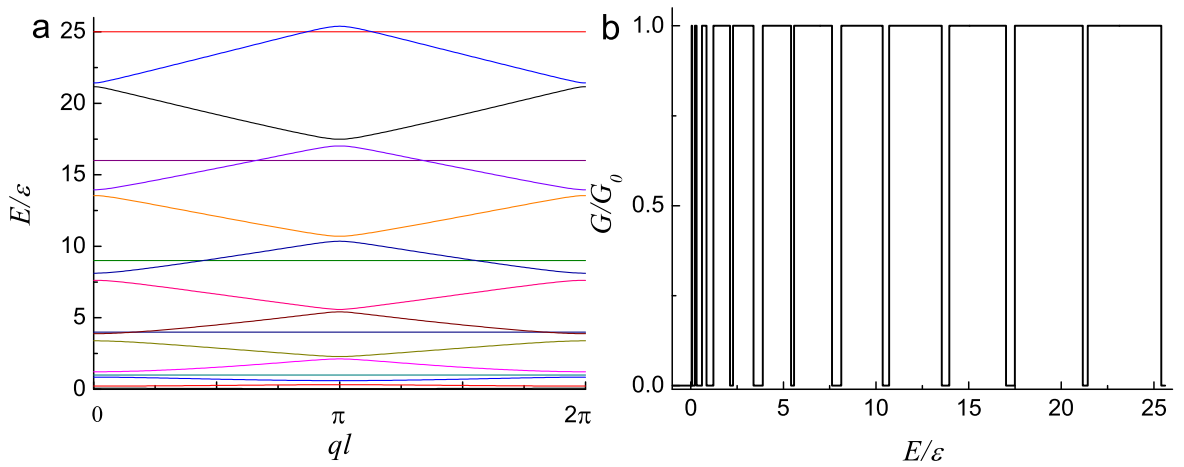


Рис. 3.5. Спектр и кондактанс цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 10\rho$. Поток магнитного поля $\eta = 0$, параметр связи $v = 1$.

Важное влияние оказывает длина проводника a , соединяющего кольца. С увеличением a увеличивается число подзон, приходящихся на фиксированный интервал энергии, вследствие увеличения периода структуры (рис. 3.5). При увеличении длины проводника, увеличивается число стоячих волн (число мод), образующихся в проводнике, за счет того, что на большей длине a может уложиться большее число мод с разной длиной волны. За счет дополнительных состояний в проводнике определенной длины увеличивается общее число состояний в системе.

Остановимся на случае, когда длина проводника равна половине длины окружности. При слабой взаимосвязи ($u = 20$) в отсутствии магнитного поля спектр имеет вид расщепленных зон, которые на краях зоны Бриллюэна слипаются в точках спектра изолированного кольца (рис. 3.6 а). При увеличении

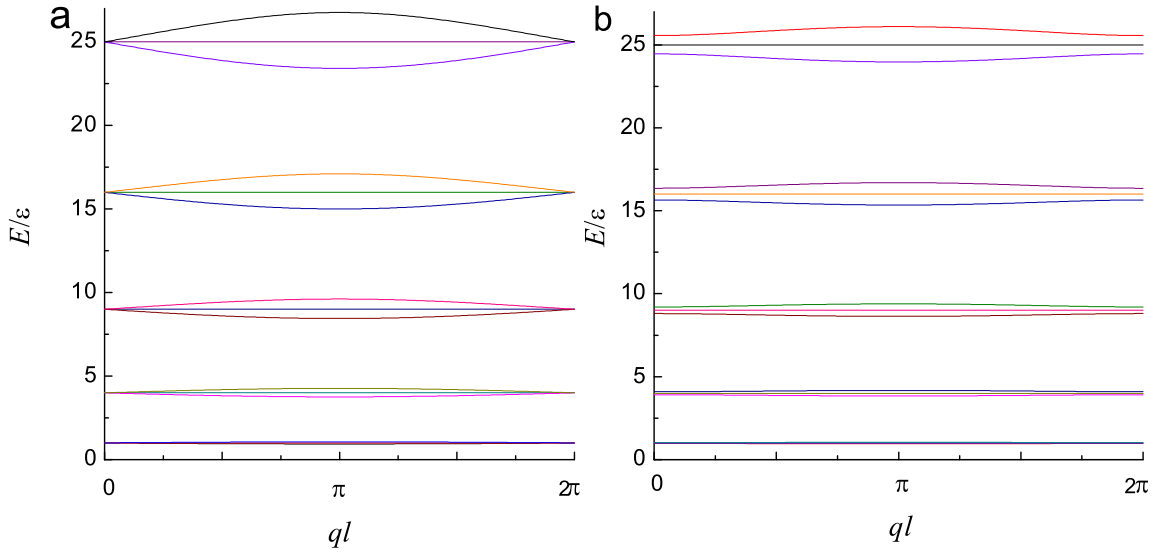


Рис. 3.6. Спектр цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = \pi\rho$, параметр связи $v = 20$. Поток магнитного поля (а): $\eta = 0$; (b): $\eta = 0.4$.

взаимосвязи ($u = 2$) остается лишь одна самая нижняя зона, и кондактанс, соответственно, имеет всего один ненулевой участок. При дальнейшем увеличении величины взаимосвязи и эта зона пропадает и кондактанс становится равным нулю при всех значениях энергии электрона. Последний эффект связан видимо с тем, что при большой величине взаимосвязи рассеяния на контактах практически не происходит, и вследствие этого происходит компенсация волн, проходящих через кольцо и через проводник. При наличии потока магнитного поля $\eta \neq 0; 1/2$ каждая разрешенная зона расщепляются на две (рис. 3.6 b).

При наличии магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости колец, с потоком $\eta \neq n/2$ (n — целое), увеличение потока от 0 до $1/2$ приводит к уширению дискретных уровней изолированного кольца в узкие минизоны (рис. 3.7), дающие дополнительные ненулевые участки кондактанса. Это происходит из-за снятия магнитным полем вырождения уровней изолированного кольца ($E_m = \varepsilon(m + \eta)^2$, состояния с $m = \pm 1$, $m = \pm 2$ и т.д. при $\eta = 0$ вырождены).

Интересный эффект наблюдается при потоке магнитного поля, равном

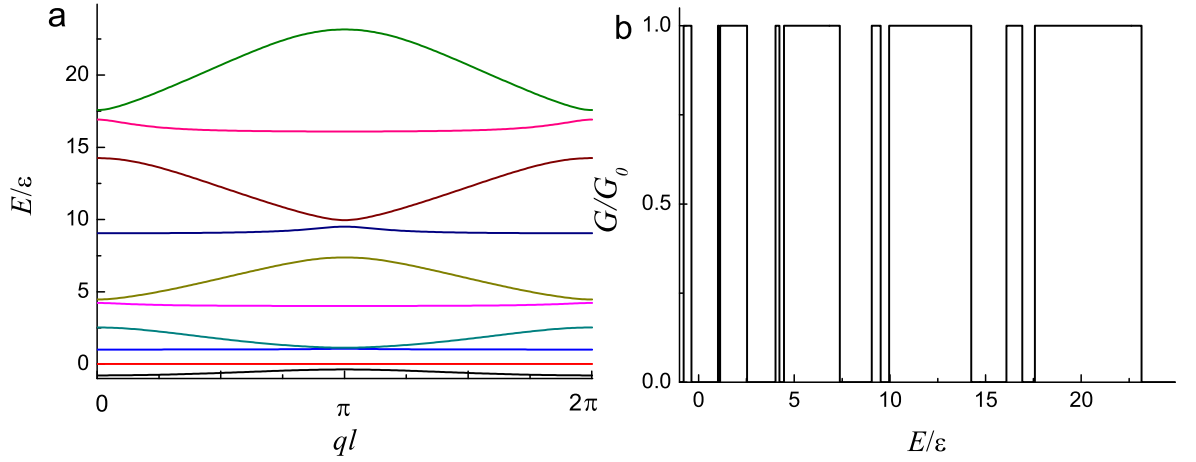


Рис. 3.7. Спектр и кондактанс цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 0.1\rho$. Поток магнитного поля $\eta = 0.2$, параметр связи $v = 1$. Видно, что в магнитном поле дискретные уровни трансформируются в дополнительные минизоны, дающие вклад в проводимость.

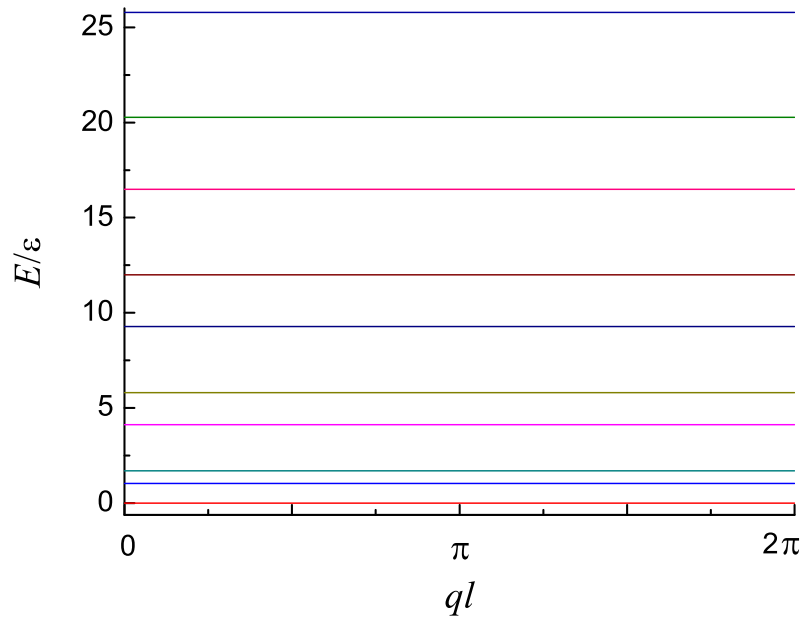


Рис. 3.8. Спектр цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 0.1\rho$. Поток магнитного поля $\eta = 0.5$, параметр связи $v = 1$. В полуцелом потоке все минизоны вырождаются в дискретные уровни.

половине кванта магнитного потока. Все минизоны спектра вырождаются в дискретные уровни (рис. 3.8), которые соответствуют локализованным состояниям электрона. Заметим, что энергии этих локализованных состояний

зависят от длины a проводника, соединяющего кольца. Анализ показал, что в проводниках имеется отличная от нуля волновая функция, но полностью локализоваться она там не может. Это означает, что локализация электронов осуществляется в элементарной ячейке цепочки (кольцо + проводник). Таким образом, образуются такие стоячие волны, что волновая функция обращается в нуль только в одной из точек контактов.

Заметим, что при полуцелом потоке все минизоны спектра вырождаются в дискретные уровни двух видов: невозмущенные уровни системы: кольцо плюс проводник, и дополнительные уровни этой системы, обусловленные возмущениями контактов. Кондактанс цепочки при этом оказывается равным нулю. Таким образом в магнитном поле происходит полная локализация электронов. Уровни невозмущенного гамильтониана изолированного кольца ($k\rho = n$) при $\eta = 1/2$ не являются решениями уравнения (3.11).

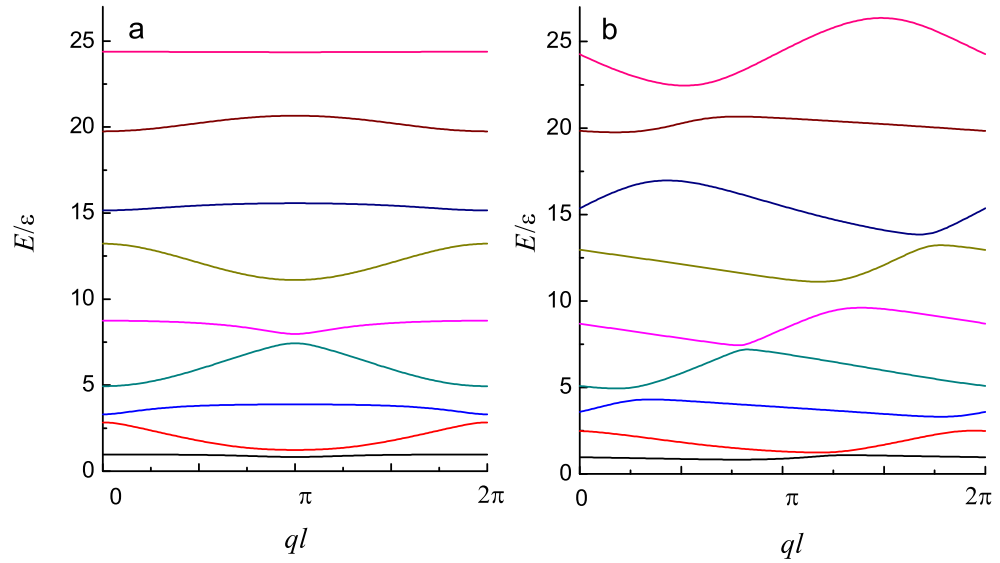


Рис. 3.9. Спектры цепочки колец, соединенных между собой проводниками длины $a = 0.1\rho$. Параметр связи $v = 2$, углы присоединения проводников $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 1.1\pi$. Поток магнитного поля (а): $\eta = 0$, (б): $\eta = 0.2$. В магнитном поле спектр становится асимметричным, появляются непрямые запрещенные зоны.

Зонная структура чувствительна к положению контактов на кольце. В частности, при недиагональном подключении проводников к кольцу (в

элементарной ячейке цепочки) дискретные уровни изолированного кольца трансформируются в минизоны, что дает дополнительные участки кондактанса (рис. 3.9а). О зависимости числа разрешенных минизон в цепочке колец от разности числа точек, составляющих верхнее и нижнее “плечи” колец, составляющих цепочку, (в модели сильной связи) отмечалось в [115].

В магнитном поле зависимость энергии от квазиимпульса становится асимметричной из-за отсутствия в системе центра инверсии (рис. 3.9b). В этом случае минимальное значение энергии зоны проводимости и максимальное значение энергии валентной зоны могут располагаться в разных точках зоны Бриллюэна. Следовательно в системе при наличии магнитного поля могут существовать не прямые запрещенные зоны (рис. 3.9b). О наличии такого вида не прямых запрещенных зон упоминалось в работе [116]. Отметим, что в цепочке квантовых точек такие зоны возникали когда электростатически они делались несимметричными относительно оси канала.

3.2 Дисперсионное соотношение для цепочки колец, имеющих между собой точечный контакт

3.2.1 Случай диаметрально противоположного соединения колец

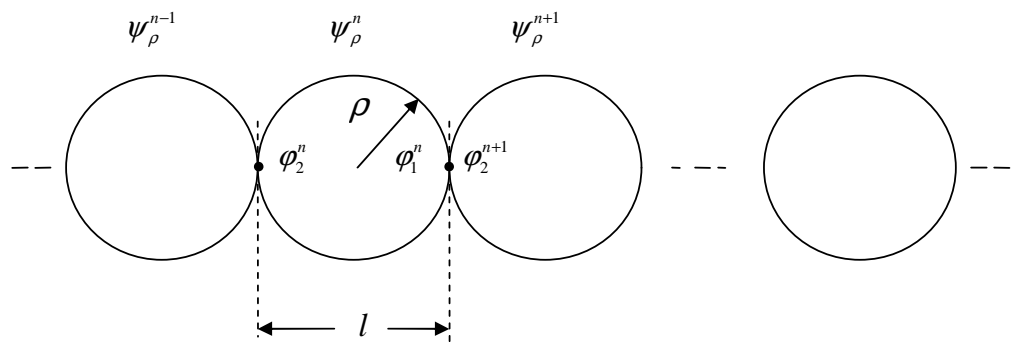


Рис. 3.10. Схематическое изображение цепочки колец, имеющих между собой точечный контакт. Контакты расположены на кольце в диаметрально противоположных точках.

Теперь остановимся на случае, когда кольца в цепочке имеют между собой точечный контакт. Сначала исследуем более простой случай, когда точки

контактов $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = \pi$ (рис. 3.10). Волновая функция электрона в кольце имеет вид

$$\psi_\rho(\varphi) = \alpha_1 Q(\varphi, \varphi_1, E) + \alpha_2 Q(\varphi, \varphi_2, E). \quad (3.13)$$

Так же как и для случая цепочки колец с соединяющими кольцами проводниками, запишем граничные условия

$$\begin{cases} \psi_\rho^{n+1}(\varphi_2^{n+1}) = e^{iql} \psi_\rho^n(\varphi_2^n), \\ \psi_\rho^{'n+1}(\varphi_2^{n+1} + 0) - \psi_\rho^{'n+1}(\varphi_2^{n+1} - 0) = e^{iql} [\psi_\rho^{'n}(\varphi_2^n + 0) - \psi_\rho^{'n}(\varphi_2^n - 0)], \\ \psi_\rho^{n+1}(\varphi_2^{n+1}) = \psi_\rho^n(\varphi_1^n) = \\ = \beta [\psi_\rho^{'n+1}(\varphi_2^{n+1} + 0) - \psi_\rho^{'n+1}(\varphi_2^{n+1} - 0) + \psi_\rho^{'n}(\varphi_1^n + 0) - \psi_\rho^{'n}(\varphi_1^n - 0)]. \end{cases} \quad (3.14)$$

Из этих условий получим следующую систему уравнений для нахождения коэффициентов α_j

$$\begin{pmatrix} Q_{21} - \frac{2}{v} e^{-iql} & Q_{22} - \frac{2}{v} \\ Q_{11} - \frac{2}{v} & Q_{12} - \frac{2}{v} e^{iql} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Приравняв определитель этой матрицы к нулю, с учетом того, что при диаметрально противоположном подключении к кольцу соседних элементов цепочки недиагональные элементы матрицы Крейна равны $Q_{12}(E) = Q_{21}(E)$, получаем следующее дисперсионное соотношение

$$4Q_{12} \cos(ql) + v \det Q - 2\text{tr}Q = 0. \quad (3.16)$$

Следует отметить, что это соотношение можно получить и из более общего случая, то есть из цепочки колец, соединенных проводниками, приравняв длину проводника к нулю и увеличив силу связи в точках контактов в два раза (v заменяем на $v/2$). На рис. 3.11 представлен спектр, полученный из дисперсионного соотношения (3.16), для цепочки колец, имеющих между собой непосредственные контакты, расположенные в диаметрально противоположных точках, при наличии магнитного поля. В общем случае спектр имеет зонную структуру, состоящую из минизон и дискретных уровней изолированного кольца. Влияние величины взаимосвязи между кольцами на спектр остается таким же, как и для цепочки колец, соединенных проводниками. При сильной величине связи образуются широкие минизоны и узкие запрещенные зоны, а при слабой – наоборот.

Магнитное поле с потоком $\eta \neq n/2$ (n — целое) приводит к уменьшению ширины разрешенных зон. Дискретные уровни при этом, в отличие от цепочки колец с проводниками, не трансформируются в минизоны, а остаются при энергиях изолированного кольца.

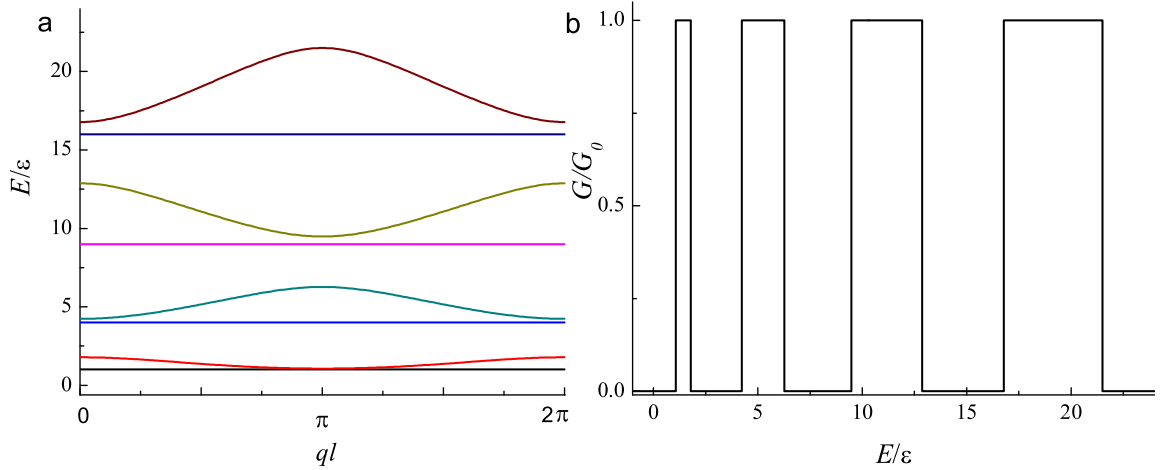


Рис. 3.11. Спектр и кондактанс цепочки колец, имеющих между собой точечный контакт. Поток магнитного поля $\eta = 0.2$, параметр связи $v = 4$.

Эти уровни соответствуют локализованным электронам, которые не вносят вклад в процесс переноса заряда. Для таких энергий волновые функции обращаются в нуль в обеих точках контакта и электроны локализуются на отдельных кольцах. Эти квазистационарные состояния, исходя из (3.16), определяются из системы уравнений

$$\begin{cases} Q_{12}(E) = 0, \\ v \det Q(E) - 2\text{tr}Q(E) = 0, \end{cases} \quad (3.17)$$

(то есть при любом q существует одно и то же решение). При диаметрально противоположном присоединении соседних элементов перенормированные функции Грина имеют вид

$$Q_{11}(E) = Q_{22}(E) = \frac{1}{k\rho} \left[\frac{\sin \pi k\rho \cos \pi\eta}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho} \right], \quad (3.18)$$

$$Q_{12}(E) = Q_{21}(E) = \frac{1}{k\rho} \left[\frac{\sin \pi k\rho \cos \pi k\rho}{\sin^2 \pi\eta - \sin^2 \pi k\rho} \right]. \quad (3.19)$$

Из (3.17)-(3.19) видно, что квазистационарные состояния возникают когда $\sin \pi k \rho = 0$ (при $\eta \neq 0, 0.5$), то есть в точках спектра изолированного кольца в отсутствии магнитного поля ($k\rho = n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Наличие короткого соединяющего кольца проводника приводит к уширению этих уровней в узкие зоны.

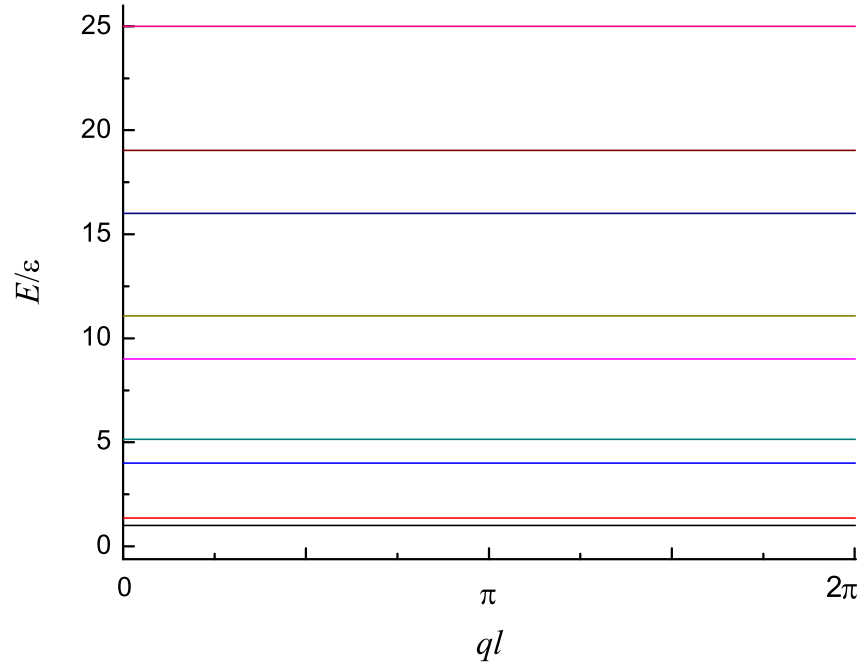


Рис. 3.12. Спектр цепочки колец, имеющих между собой точечный контакт. Поток магнитного поля $\eta = 0.5$, параметр связи $v = 4$. В полуцелом потоке минизоны вырождаются в дискретные уровни невозмущенного и возмущенного изолированного кольца.

С увеличением потока от нуля до полуцелого, минизоны уменьшают свою ширину. При полуцелом значении магнитного потока спектр полностью состоит из дискретных уровней (рис. 3.12), причем они есть при энергиях, равных энергиям спектра изолированного кольца, а также при некоторых энергиях, значения которых можно найти из соотношения для определения спектра, взяв полуцелое значение потока. Если $\eta = 0.5$, то $Q_{12} = 0$ при любом k . Таким образом первое слагаемое обращается в нуль и (3.16) выполняется, если или $Q_{11} = 0$, то есть в точках спектра изолированного кольца в отсутствии поля $E \sim n^2$ (собственные энергии невозмущенного гамильтониана кольца), или $Q_{11} = 4/v$, то есть при значениях k , являющихся решени-

ями трансцендентного уравнения $\operatorname{tg} \pi k \rho = 4k\rho/v$ (дополнительные дискретные уровни, соответствующие собственным значениям энергии возмущенного контактами гамильтониана). При уменьшении взаимосвязи между кольцами уровни невозмущенного изолированного кольца не изменяют своего положения, а уровни возмущенного кольца начинают приближаться к уровням первого рода (невозмущенного изолированного кольца). При отсутствии связи между кольцами ($v \rightarrow \infty$) решениями последнего уравнения будут являться дискретные уровни со значениями $k\rho = n$. Эти же уровни соответствуют уровням изолированного кольца. Отсюда следует, что при $v \rightarrow \infty$ уровни системы становятся дискретными и двукратно вырожденными. Кондактанс системы в этом случае оказывается равным нулю.

3.2.2 Случай не диаметрально противоположного соединения колец

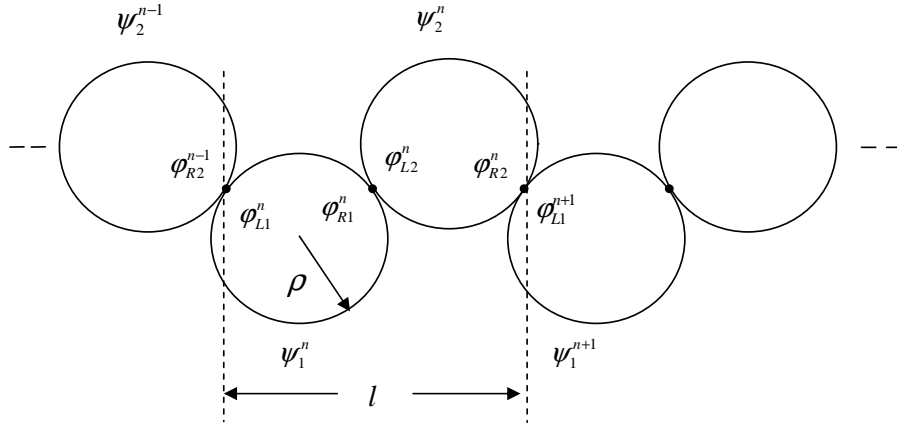


Рис. 3.13. Схематическое изображение зигзагообразного соединения колец в цепочку. Период состоит из двух колец.

Теперь изучим другой случай, когда кольца соединены не в диаметрально противоположных точках (рис. 3.13). Для этого рассмотрим элементарную ячейку, состоящую из двух колец без соединяющих проводников. Выберем начало отсчета так, что $\varphi_{R1}^j = \varphi_{R2}^j = 0$, а $\varphi_{L1}^j \neq \varphi_{L2}^j$, причем $\varphi_{L1}^j < \pi$, а $\varphi_{L2}^j > \pi$. Волновая функция электрона в первом кольце имеет вид

$$\psi_\rho^{(1)}(\varphi) = \alpha_1^{(1)} Q^{(1)}(\varphi, \varphi_1, E) + \alpha_2^{(1)} Q^{(1)}(\varphi, \varphi_2, E), \quad (3.20)$$

а во втором кольце

$$\psi_\rho^{(2)}(\varphi) = \alpha_1^{(2)} Q^{(2)}(\varphi, \varphi_1, E) + \alpha_2^{(2)} Q^{(2)}(\varphi, \varphi_2, E). \quad (3.21)$$

Так же как и предыдущих случаях, запишем граничные условия

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_1^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1}) = e^{iqL} \psi_1^n(\varphi_{L1}^n), \\ \psi_1'^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1} + 0) - \psi_1'^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1} - 0) = e^{iqL} [\psi_1'^n(\varphi_{L1}^n + 0) - \psi_1'^n(\varphi_{L1}^n - 0)], \\ \psi_1^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1}) = \psi_2^n(\varphi_{R2}^n) = \\ \beta [\psi_1'^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1} + 0) - \psi_1'^{n+1}(\varphi_{L1}^{n+1} - 0) + \psi_2'^n(\varphi_{R2}^n + 0) - \psi_2'^n(\varphi_{R2}^n - 0)], \\ \psi_1^n(\varphi_{R1}^n) = \psi_2^n(\varphi_{L2}^n) = \\ \beta [\psi_1'^n(\varphi_{R1}^n + 0) - \psi_1'^n(\varphi_{R1}^n - 0) + \psi_2'^n(\varphi_{L2}^n + 0) - \psi_2'^n(\varphi_{L2}^n - 0)]. \end{array} \right. \quad (3.22)$$

Здесь ψ_1^n — волновая функция $\psi_\rho^{(1)}$ в первом кольце n -ой ячейки, а ψ_2^n — волновая функция $\psi_\rho^{(2)}$ во втором кольце n -ой ячейки, $\beta = \rho/u$ — параметр контакта, имеющий размерность длины (u — соответствующий β безразмерный параметр). Выберем их одинаковыми для обоих контактов. Из этих граничных условий получим систему уравнений на коэффициенты волновых функций

$$\begin{pmatrix} Q_{21}^{(1)} & Q_{22}^{(1)} - \frac{2}{u} & -\frac{2}{u} e^{-iqL} & 0 \\ 0 & -\frac{2}{u} e^{iqL} & Q_{11}^{(2)} - \frac{2}{u} & Q_{12}^{(2)} \\ Q_{11}^{(1)} - \frac{2}{u} & Q_{12}^{(1)} & 0 & -\frac{2}{u} \\ -\frac{2}{u} & 0 & Q_{21}^{(2)} & Q_{22}^{(2)} - \frac{2}{u} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} \\ \alpha_2^{(1)} \\ \alpha_1^{(2)} \\ \alpha_2^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Для нахождения нетривиального решения, как и в предыдущих случаях, приравняем определитель этой системы к нулю и, таким образом, найдем дисперсионное соотношение

$$\begin{aligned} & -\frac{4}{u^2} (Q_{21}^{(1)} Q_{21}^{(2)} e^{iqL} + Q_{12}^{(1)} Q_{12}^{(2)} e^{-iqL}) + [\det Q^{(1)} - \frac{2}{u} \text{tr} Q^{(1)} + \frac{4}{u^2}] \times \\ & \times [\det Q^{(2)} - \frac{2}{u} \text{tr} Q^{(2)} + \frac{4}{u^2}] - \frac{8}{u^2} \left(Q_{11}^{(1)} - \frac{2}{u} \right)^2 + \left(\frac{4}{u^2} \right)^2 = 0, \end{aligned} \quad (3.24)$$

где $Q^{(1)}$ и $Q^{(2)}$ — Q -матрицы второго порядка, элементы которых соответствуют Q -функциям гамильтонианов первого и второго колец соответственно $Q_{ij}^{(l)} = Q^{(l)}(\varphi_i, \varphi_j; E)$, $l, i, j = 1, 2$. Если положить $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = \pi$, то дисперсионное соотношение (3.24) можно представить в виде

$$\left(\det Q - \frac{2}{u} \text{tr} Q - \frac{4}{u} Q_{12} \cos \frac{ql}{2} \right) \left(\det Q - \frac{2}{u} \text{tr} Q + \frac{4}{u} Q_{12} \cos \frac{ql}{2} \right) = 0. \quad (3.25)$$

Отсюда можно получить уравнение для спектра цепочки колец, имеющих непосредственный контакт в диаметрально противоположных точках (3.16), приравняв первый сомножитель к нулю.

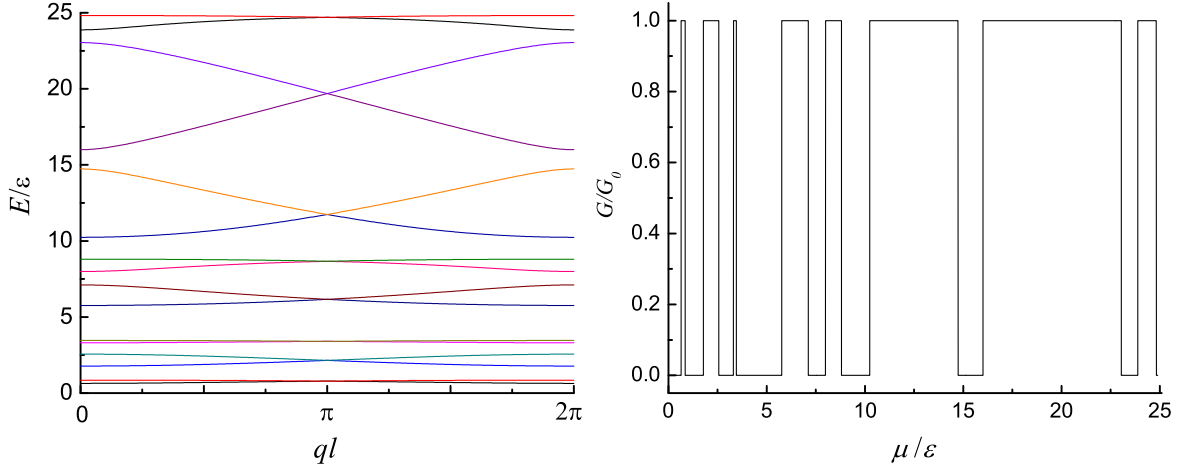


Рис. 3.14. Спектр цепочки колец, имеющих между собой непосредственные контакты в точках $\varphi_{L1} = 3\pi/4$, $\varphi_{L2} = 5\pi/4$. Поток магнитного поля $\eta = 0$, параметр связи $u = 2$. Дискретный уровень при $k = 4$ ($E/\varepsilon = 16$) и примыкающая к нему минизона пропали.

Общая структура спектра (3.24) представляет из себя чередующиеся дискретные уровни изолированного кольца с примыкающими к ним узкими минизонами и широкие минизоны, попарно соприкасающиеся друг с другом в одной точке (в середине зоны Бриллюэна) (рис. 3.14). Две соприкасающиеся зоны в действительности дают одну минизону и, соответственно, один пик кондактанса. С изменением углов присоединения колец друг к другу, спектр изменяется, уменьшая или увеличивая ширину запрещенных минизон, но оставляя неизменным их число (при иррациональных значениях угла φ_{L1}).

При значениях угла $\varphi_{L1} = l\pi/n$ из спектра исчезают дискретные уровни изолированного кольца $E_m = \varepsilon m^2$ со значениями m , кратными n , и прилегающие к ним узкие минизоны (рис. 3.14). Это происходит вследствие компенсации электронных волн, прошедших по верхнему и нижнему “плечам” кольца, имеющих волновое число, кратное n (такую длину волны, что разность фаз на выходе из кольца при таком значении угла φ_{L1} кратна π).

При возрастании значения потока магнитного поля от нулевого до полупуцелого происходит уширение узких минизон (вблизи энергии E_m) и уменьшение ширины широких, количество минизон остается неизменным.

При полупуцелом значении потока магнитного поля, в отличии от случая диаметрально противоположного подключения колец, кондактанс отличен от нуля, так как компенсации электронных волн, прошедших по верхнему и нижнему плечам кольца, не происходит из-за неравенства длин плеч. Отличие спектра при $\eta = 0.5$ в случае $\varphi_{L1}^j \neq \varphi_{L2}^j \neq \pi$ от спектра цепочки колец, соединенных между собой в диаметрально противоположных точках, состоит в том, что дискретные уровни возмущенного кольца (имеется в виду уровни, которые имели место быть при диаметрально противоположном присоединении колец) трансформируются в узкие минизоны, а дискретные уровни, которые соответствовали уровням изолированного кольца, пропадают. Вместо них появляются широкие минизоны, соприкасающиеся друг с другом в середине зоны Бриллюэна в точках E_m .

Полученные в рамках нашей модели эффекты могут наблюдаться и в цепочках конечной длины. В работах [107, 113] показано, что формирование минизон и запрещенных зон в сверхрешетке происходит даже когда одномерная сверхрешетка имеет совсем немного периодов (уже при пяти периодах наблюдаются эффекты, свидетельствующие о формировании минизон). На основе этих выводов можно сказать, что результаты, полученные выше, могут описывать цепочки и конечной длины в случае, когда длина свободного пробега электрона в образце не меньше длины цепочки (а это, исходя из [104], возможно для цепочки длиной порядка нескольких μm). Учитывая, что диаметр кольца в среднем равен 100 нм, число колец в этом случае может достигать нескольких десятков.

3.3 Численные методы решения дисперсионного уравнения

Решить дисперсионные уравнения (3.11), (3.16), (3.24) аналитически не представляется возможным, поэтому их решения нужно искать численно.

Для этого необходимо найти нули левой части дисперсионного уравнения, которая является функцией двух переменных: квазиимпульса и энергии. При фиксации одной из этих переменных функция становится зависимой лишь от одной переменной. При этом заранее известно, что при любом фиксированном значении квазиимпульса имеется несколько корней. Принцип работы созданной программы (**Приложении В**), развернутое описание которого так же представлено в **Приложении В**, состоит в том, что при нескольких фиксированных значениях квазиимпульса q ищется конечное число корней уравнения (3.11) соответствующих различным минизонам (для (3.16) и (3.24) аналогично). Задачу о нахождении корня уравнения можно свести к задаче о нахождении минимума функции, являющейся либо модулем исходной функции, либо квадратом модуля, что более удобно при работе с комплексными числами. Существует несколько хорошо известных численных методов поиска минимума функции одной переменной: метод золотого сечения [153], метод дробления (сканирования) [154], метод парабол [153]. Метод сканирования требует большого количества машинного времени, которое существенно возрастает при увеличении точности. Для решения уравнения (3.11) необходим многократный прогон, так как корни уравнения ищутся при разных значениях квазиимпульса, изменяющегося в интервале от 0 до 2π с малым шагом. Ясно, что при необходимости достижения хорошей точности, использование такого алгоритма не оптимально и счет с помощью такой программы занимает большое количество машинного времени. Для использования метода золотого сечения необходимо заранее знать интервал, на котором имеется единственный корень. В нашем случае данное условие не выполняется, так как корней уравнения несколько, причем точное число корней, а так же приблизительные интервалы, в которых они расположены, заранее не известны. Метод парабол применим, если функция дифференцируема. Дифференцирование функции в нашем случае увеличивает время работы программы. Кроме того, этот метод не дает гарантии, что будут найдены все минимумы функции. В связи с этим, использование одного из вышеперечисленных стандартных методов поиска экстремумов функции было нецелесообразно. Поэтому были разработаны новые численные методы поиска корней урав-

нения, основанные на сочетании метода сканирования с методом золотого сечения. Сначала по графику зависимости левой части дисперсионного уравнения от энергии выбирается начальное значение квазиимпульса, отличное от 0, π и 2π , при котором нули (корни соответствующего дисперсионного соотношения) не располагаются близко друг к другу, так как это может привести к ошибке в поиске корней и к неправильному присвоению корню номера минизоны. При этом начальном значении q производится поиск корней дисперсионного уравнения на нужном интервале энергии. Поиск минимумов основывается на методе сканирования. Берутся последовательно три точки с шагом dx : $x_1 := x_{min}$, $x_2 := x_1 + dx$, $x_3 := x_2 + dx$. Сравниваются значения функций в этих точках: $y_1(x_1)$, $y_2(x_2)$, $y_3(x_3)$. Если значение в середине этого отрезка $y_2(x_2)$ меньше значений на концах — $y_1(x_1)$ и $y_3(x_3)$, то положение минимума с заданной точностью, гораздо меньшей, чем dx , ищется на отрезке $[x_1, x_3]$ методом золотого сечения. Сравниваются значения функции в двух внутренних точках x_{01} и x_{02} и на концах отрезка. Среди этих четырех значений выбирается наименьшее. Пусть наименьшим оказалось $y(x_{01})$. Очевидно, что минимум расположен в одном из прилегающих к нему отрезков. Поэтому отрезок $[x_{02}, x_3]$ отбрасывается и остается отрезок $[x_1, x_{02}]$. Так происходит первый шаг итерационного процесса. Далее на отрезке $[x_1, x_{02}]$ снова выбираются две внутренние точки, вычисляются в них и на концах отрезка значения функции, и делается следующий шаг процесса. Когда корень с заданной точностью на отрезке $[x_1, x_3]$ найден, проверяется равенство нулю значения функции в этой точке и опять запускается процесс прогонки от x_3 и далее.

Если изначально значение функции в середине отрезка $y_2(x_2)$ не является наименьшим по сравнению со значениями функции на концах — $y_1(x_1)$ и $y_3(x_3)$, то отрезок сдвигается на dx , то есть $x_1 := x_2$, $x_2 := x_3$, $x_3 := x_3 + dx$. Снова сравниваются значения функции в этих точках. Если $y_2(x_2)$ — наименьшее, то на этом отрезке запускает метод золотого сечения, если нет, то отрезок опять сдвигается на dx . И так процесс повторяется до тех пор, пока $x_3 \leq x_{max}$.

Такой метод позволяет увеличивать точность лишь там, где это необхо-

димо, что существенно снижает время счета программы.

При следующем значении квазиимпульса, основываясь на непрерывности зависимости энергии от квазиимпульса, нули функции ищутся вблизи нулей, найденных при предыдущем значении q . Так находятся корни уравнения при всех остальных значениях q .

Следует отметить, что поиск нескольких минимумов функции являлся не единственной задачей, решенной при разработке программы. Была решена проблема неправильного присвоения корням уравнения порядкового номера минизоны. Перескоки между минизонами могут происходить при их сближении при некоторых значениях квазиимпульса. Поэтому в программе сначала находится такое значение квазиимпульса, при котором корни уравнения находятся на расстояниях, гораздо больших заданной точности корней. При этом значении q ищутся и фиксируются все нули функции. При следующем значении q ищется уже каждый корень в отдельности, то есть первый корень ищется вблизи корня с первым порядковым номером, найденного при предыдущем значении квазиимпульса. Во-первых, это позволяет экономить машинное время. Во-вторых, такой метод позволяет не пропускать корни при их приближении друг к другу, так как число корней становится известно при первой итерации. Более подробное описание метода устранения перескоков описано непосредственно в программе.

Полное описание работы программы имеется в виде комментариев в **Приложении В**.

3.4 Основные результаты главы

Разработана математическая модель описания цепочки мезоскопических колец, включающая в себя как моделирование рассматриваемой системы, так и описание этой модели с помощью математического аппарата. На основе этой модели получены дисперсионные соотношения для цепочки квантовых колец двух видов: когда кольца соединены между собой проводниками и когда кольца имеют непосредственный контакт. Разработаны численные методы расчета и построения электронных спектров цепочек колец на ос-

нове найденных дисперсионных соотношений. Создана программа на языке TurboDelphi, позволяющая проводить численный эксперимент по исследованию влияния параметров модели на спектры. С помощью этой программы также определена зависимость кондактанса от энергии электрона.

Показано, что в общем случае спектры имеют зонную структуру. Перекрытия зон не происходит. Кондактанс равен единице, если энергия электрона, попадает в разрешенную зону и нулю, если в запрещенную. При диаметрально противоположном соединении колец, как при наличии соединяющих проводников, так и при их отсутствии, имеются дискретные уровни при энергиях, соответствующих уровням изолированного кольца. Они соответствуют локализованным на кольцах электронам.

Показано, что при уменьшении параметра связи между кольцами ширина запрещенных зон растет и в пределе разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни изолированного кольца.

При увеличении длины проводника, соединяющего кольца, растет число подзон, приходящихся на фиксированный интервал энергии, ширина запрещенных зон при этом уменьшается.

Зонная структура чувствительная к положению контактов на кольце. В частности, при недиагональном подключении проводников к кольцу дискретные уровни изолированного кольца трансформируются в минизоны, что дает дополнительные участки кондактанса. Зависимость энергии от квазиимпульса становится асимметричной в магнитном поле из-за отсутствия в системе инверсной симметрии. В этом случае минимальное значение энергии зоны проводимости и максимальное значение энергии валентной зоны могут располагаться в разных точках зоны Бриллюэна. Таким образом в системе при наличии магнитного поля могут существовать не прямые запрещенные зоны.

Показано, что при наличии магнитного поля в цепочке колец, соединенных в диаметрально противоположных точках проводниками, дискретные уровни трансформируются в узкие минизоны, дающие вклад в проводимость. Если кольца имеют точечный контакт, но соединены так же в диаметрально противоположных точках, то дискретные уровни остаются. Если же

кольца, имеющие непосредственный контакт, соединены в не диаметрально противоположных точках, то в отсутствии поля вблизи дискретных уровней появляются примыкающие к ним узкие минизоны, которые пропадают при включении магнитного поля.

В магнитном поле с потоком $\eta = n/2$, где n — нечетное целое число, для цепочки колец, соединенных между собой в диаметрально противоположных точках, спектр полностью состоит из дискретных уровней. Для цепочки колец, соединенных между собой проводниками, имеются дискретные уровни двух видов: невозмущенные уровни системы — кольцо плюс проводник, и дополнительные уровни этой системы, возмущенной контактами. Кондактанс цепочки при этом оказывается равным нулю. Таким образом в магнитном поле $\eta = n/2$ происходит полная локализация электронов. Для цепочки колец, имеющих между собой непосредственный контакт, дискретные уровни так же будут двух видов: собственные энергии невозмущенного гамильтониана кольца и уровни, соответствующие собственным значениям энергии возмущенного контактами гамильтониана кольца. Если кольца соединены в произвольных точках, кондактанс системы при $\eta = n/2$ отличен от нуля.

На основе полученных результатов можно сделать вывод о возможном применении цепочки колец в качестве датчика электромагнитного исключения, включая терагерцевый диапазон. Для настройки устройства на нужный диапазон необходимо подобрать параметры решетки так, чтобы ширина запрещенной зоны соответствовала оптическому переходу с поглощением излучения заданной частоты. На настоящий момент уже имеется возможность создания фотодетекторов, работающих в околоинфракрасном диапазоне, на основе межзонных переходов в AlN/GaN сверхрешетке [155].

Глава 4

Моделирование электронного транспорта в квантовом цилиндре при наличии нескольких точечных примесей на его поверхности

Целью этой главы является математическое моделирование электронного транспорта в тонкой полупроводниковой нанотрубке, находящейся в продольном магнитном поле, при наличии нескольких короткодействующих рассеивателей на ее поверхности, а так же получение явного аналитического выражения для кондактанса системы как функции химического потенциала электронов и теоретическое изучение транспортных характеристик системы. Моделировать такую систему будем тонким квантовым цилиндром [145, 156] при наличии магнитного поля, приложенного вдоль оси цилиндра. Такая модель тонкого цилиндра может быть применима в том случае, если ширина стенки много меньше радиуса цилиндра и длины волны электрона, а отражением от концов цилиндра можно пренебречь. С помощью этой модели можно описывать электронный газ в свернутых напряженных слоях GaAs/AlGaAs и углеродных нанотрубках, так как в таких системах движение электронов происходит только на поверхности трубки. Для описания рассеяния на примесях используется точечная модель примесей. Исследовано влияние ряда параметров системы, таких как величина магнитного поля, положение примесей, длина рассеяния примесей на кондактанс этой системы. Показано, что наличие одиночной примеси приводит к появлению провалов на зависимо-

сти кондактанса от химического потенциала, а наличие нескольких примесей приводит к появлению интерференционных эффектов в электронном транспорте, проявляющихся в осцилляциях кондактанса.

4.1 Постановка задачи и метод решения

Исследуем влияние короткодействующих примесей на кондактанс нанотрубки при наличии продольного магнитного поля. Рассмотрим наноцилиндр радиуса r , помещенный в продольное магнитное поле B . Для исследования транспортной задачи получим гамильтониан электрона на поверхности цилиндра при наличии точечных возмущений, а затем решим уравнение Шредингера и найдем коэффициенты прохождения электрона и кондактанс.

Рассмотрим сначала гамильтониан H_0 электрона на цилиндре при отсутствии примесей. В цилиндрической системе координат гамильтониан H_0 может быть записан в виде [145]

$$H_0 = \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*r^2} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2, \quad (4.1)$$

где m^* – эффективная электронная масса, p_z – оператор проекции импульса на ось цилиндра, $\Phi = \pi r^2 B$ – магнитный поток через сечение цилиндра, $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$ – квант магнитного потока.

Электронный энергетический спектр гамильтониана H_0 представляет собой сумму из дискретной составляющей и энергии свободного движения вдоль оси z [145, 157]

$$E_{mp_z} = \varepsilon \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m^*}. \quad (4.2)$$

Здесь $\varepsilon = \hbar^2/(2m^*r^2)$. Для цилиндра радиусом 30 нм при $m^* = 0.1m_e$ величина ε имеет порядок 0.4 meV. Гамильтониан H наноцилиндра при наличии примесей в точках $\mathbf{q}_j = (z_j, \varphi_j)$ является точечным возмущением оператора H_0 , который определяется граничными условиями.

Согласно формуле Ландауэра-Бьюттикера кондактанс $G(\mu)$ при нулевой температуре выражается через коэффициенты прохождения электрона

$T_{m'm}$ из состояния с магнитным числом m в состояние с m'

$$G/G_0 = \sum_{m'm} T_{m'm} = \sum_{m'm} \frac{k_{m'}}{k_m} |t_{m'm}|^2, \quad (4.3)$$

где $G_0 = e^2/\pi\hbar$ – квант кондактанса, $T_{m'm}$ – коэффициент прохождения электрона, $k_m = \sqrt{2m^*(E - E_m)}/\hbar$ – волновое число, $t_{m'm}$ – амплитудный коэффициент прохождения. Сумма берется по всем состояниям, энергия которых не превышает энергию Ферми.

Моделировать точечные примеси будем с помощью линейных граничных условий, накладываемых на волновую функцию. Для получения явного вида граничных значений волновой функции в работе используется подход, основанный на теории потенциалов нулевого радиуса [19], развитый в работах [17, 158]. Как следует из теории потенциалов нулевого радиуса, при наличии точечного возмущения в точке \mathbf{q}_j волновая функция электрона $\psi(\mathbf{x})$ имеет логарифмическую сингулярность в окрестности этой точки [19]

$$\psi(\mathbf{x}) = -u_j \ln \rho(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j) + v_j + R(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j), \quad (4.4)$$

где $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j)$ расстояние между точками \mathbf{x} и \mathbf{q}_j по поверхности цилиндра, $R(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j) \rightarrow 0$ при $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}_j$, а комплексные коэффициенты u_j и v_j играют роль граничных параметров для волновой функции в точке контакта \mathbf{q}_j , которые необходимо найти.

Ясно, что граничные условия должны представлять собой линейные соотношения между параметрами u_j и v_j , а поскольку гамильтониан H всей системы должен быть самосопряженным оператором, коэффициенты этих соотношений должны быть действительными числами. С учетом этого в работе граничные условия выбраны в виде

$$v_j = P_j u_j. \quad (4.5)$$

Параметр P_j описывает силу точечного потенциала в точке \mathbf{q}_j . Как следует из теории потенциалов нулевого радиуса [19], P_j может быть выражен через длину рассеяния λ_j по формуле $P_j = 2 \ln \lambda_j$. Отметим, что с увеличением λ_j сила точечного возмущения уменьшается, а предел $\lambda_j \rightarrow \infty$ соответствует отсутствию возмущения в точке \mathbf{q}_j .

Перейдем к решению уравнения Шредингера для гамильтониана H . Наличие примесей на цилиндре приводит к появлению в выражении для волновой функции рассеянных волн, которые описываются с помощью функции Грина гамильтониана H_0 . В результате волновая функция электрона принимает следующий вид

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_m(\mathbf{x}, E) + \sum_{j=1}^{N_p} \xi_j G(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j; E). \quad (4.6)$$

Здесь $\psi_m(\mathbf{x}, E) = \exp(ik_m z + im\varphi)$ – электронная волна, которая распространялась бы в цилиндре, если бы примеси отсутствовали, N_p – число примесей, ξ_j – коэффициенты, определяемые из граничных условий, а $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ – функция Грина оператора H_0 , имеющая вид [158]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \frac{im^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik_m|z - z'| + im(\varphi - \varphi'))}{k_m r}. \quad (4.7)$$

Учитывая асимптотику функции Грина $G(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j; E)$ при $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}_j$, получим

$$u_j = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \xi_j, \quad v_j = \psi_m(\mathbf{q}_j) + \sum_{i=1}^{N_p} Q_{ji} \xi_i, \quad (4.8)$$

где $Q_{ij}(E)$ – Q-матрица Крейна, то есть перенормированная функция Грина гамильтониана H_0 , недиагональные элементы которой равны $Q_{ij}(E) = G(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j; E)$, а диагональные определяются выражением [158]

$$Q_{jj}(E) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}_j} \left[G(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j; E) + \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \ln \rho(\mathbf{x}, \mathbf{q}_j) \right]. \quad (4.9)$$

Обозначим $\tilde{Q}_{ij}(E) = \frac{\pi\hbar^2}{m^*} Q_{ij}(E) - P_j \delta_{ij}$. Как показано в [158], $Q(E)$ имеет вид

$$\tilde{Q}_{jj}(E) = \frac{i}{2rk_0} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{i}{rk_m} + \frac{i}{rk_{-m}} - \frac{1}{m} \right) + \ln \frac{r}{\lambda_j}. \quad (4.10)$$

Здесь квадратный корень выбрана таким образом, что $\text{Re} k_m > 0$ при $E > E_m$ и $\text{Im} k_m > 0$ при $E < E_m$.

Подставляя волновую функцию (4.6) в граничные условия (4.5), найдем уравнения для определения коэффициентов u_j

$$\sum_{i=1}^{N_p} \tilde{Q}_{ji} u_i = -\psi_m(\mathbf{q}_j). \quad (4.11)$$

Как видно из формул (4.6) и (4.7), после рассеяния на примеси волновая функция электрона при $z \rightarrow \infty$ имеет асимптотику

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \sum_{m'=m_{\min}}^{m_{\max}} t_{mm'} e^{im'\varphi} e^{ik_{m'}z}, \quad (4.12)$$

где $t_{mm'}$ — амплитудный коэффициент прохождения. Используя уравнения (4.6), (4.7), (4.11) и (4.12), получим формулу для амплитудного коэффициента прохождения $t_{m'm}$ при наличии N_p примесей

$$t_{m'm} = \delta_{m'm} - \frac{i}{2rk_{m'}} \sum_{j,l=1}^{N_p} \tilde{Q}_{jl}^{-1} e^{ik_m z_l + im\varphi_l - ik_{m'} z_j - im'\varphi_j}. \quad (4.13)$$

Тогда формула для $G(\mu)$ примет вид

$$\frac{G(\mu)}{G_0} = M(\mu) - 2\text{ReTr} [i\tilde{Q}^{-1}A] + \text{Tr} \left[\tilde{Q}^{-1}A \left(\tilde{Q}^{-1} \right)^+ A \right]. \quad (4.14)$$

Здесь $M(\mu) = m_{\max} - m_{\min} + 1$ — число состояний электрона с энергией ниже μ , а матрица A определяется выражением

$$A_{lj} = \sum_{m=m_{\min}}^{m_{\max}} \frac{\exp[ik_m(z_l - z_j) + im(\varphi_l - \varphi_j)]}{2k_m r}. \quad (4.15)$$

4.2 Моделирование рассеяния электронов в цилиндре при наличии одиночной примеси

Рассмотрим более подробно случай одиночной примеси. Из выражений (4.5) и (4.8) получим уравнение на коэффициент ξ в виде

$$\psi_m(\mathbf{q}) + \xi Q(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} P \xi. \quad (4.16)$$

Откуда

$$\xi = -\frac{\psi_m(\mathbf{q})}{\tilde{Q}(E)}, \quad (4.17)$$

где $\tilde{Q}(E) = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} Q_{11}(E) - P$ (так как примесь одна, параметр, характеризующий примесь тоже один, а вместо матрицы Q всего один элемент). В соответствии с формулой (4.6) волновая функция будет определяться выражением

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_m(\mathbf{x}, E) - \frac{\psi_m(\mathbf{q})}{\tilde{Q}(E)} G(\mathbf{x}, \mathbf{q}; E). \quad (4.18)$$

Отметим, что аналогичная формула для волновой функции электрона в квантовой проволоке с точечным возмущением была получена в работе [31]. Начало координат поместим в точку, в которой находится возмущение. Тогда

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_m(\mathbf{x}, E) - \frac{\psi_m(\mathbf{0})}{\tilde{Q}(E)} G(\mathbf{x}, \mathbf{0}; E). \quad (4.19)$$

В выражении (4.19) $\psi_m(\mathbf{x}, E)$ — описывает падающую волну, которая распространялась бы в цилиндре при отсутствии возмущения, а второе слагаемое представляет собой суперпозицию рассеянных точечным возмущением волн с разными значениями магнитного квантового числа.

Используя формулы (4.7), (4.10), (4.12) и (4.19) и, формально меняя местами в (4.12) m' и m , получим выражение для амплитудного коэффициента прохождения при наличии одной примеси

$$t_{mm'}(E) = \delta_{mm'} - \frac{i}{2\pi k_m r \tilde{Q}(E)}. \quad (4.20)$$

Тогда формула для коэффициента прохождения $T_{mm'}(E)$ примет вид

$$T_{mm'}(E) = \frac{k_m}{k_{m'}} \left\{ \delta_{mm'} - \delta_{mm'} \frac{\text{Im} \tilde{Q}}{\pi k_m r |\tilde{Q}(E)|^2} + \frac{1}{4\pi^2 k_m^2 r^2 |\tilde{Q}(E)|^2} \right\}. \quad (4.21)$$

Найдем полную вероятность прохождения электрона $T_m(E)$ электрона, начальное состояние которого описывалось магнитным квантовым числом m

$$T_m(E) = \sum_{m'=m_{\min}}^{m_{\max}} T_{mm'}(E) = 1 - \frac{\text{Im} \tilde{Q}(E)}{2\pi k_m r |\tilde{Q}(E)|^2}. \quad (4.22)$$

Здесь учтено, что

$$\text{Im} \tilde{Q}(E) = \sum_{m'=m_{\min}}^{m_{\max}} \frac{1}{2\pi k_{m'} r}. \quad (4.23)$$

Согласно формуле (4.3), просуммируем (4.22) по всем разрешенным m и, таким образом, получим формулу для кондактанса нанопроволоки с одиночной точечной примесью

$$\frac{G(\mu)}{G_0} = M(\mu) - \frac{(\text{Im} \tilde{Q})^2}{|\tilde{Q}|^2}. \quad (4.24)$$

Q -функция Крейна, входящая в выражение (4.24), представляет собой медленно сходящийся ряд, поэтому для вычисления значения кондактанса

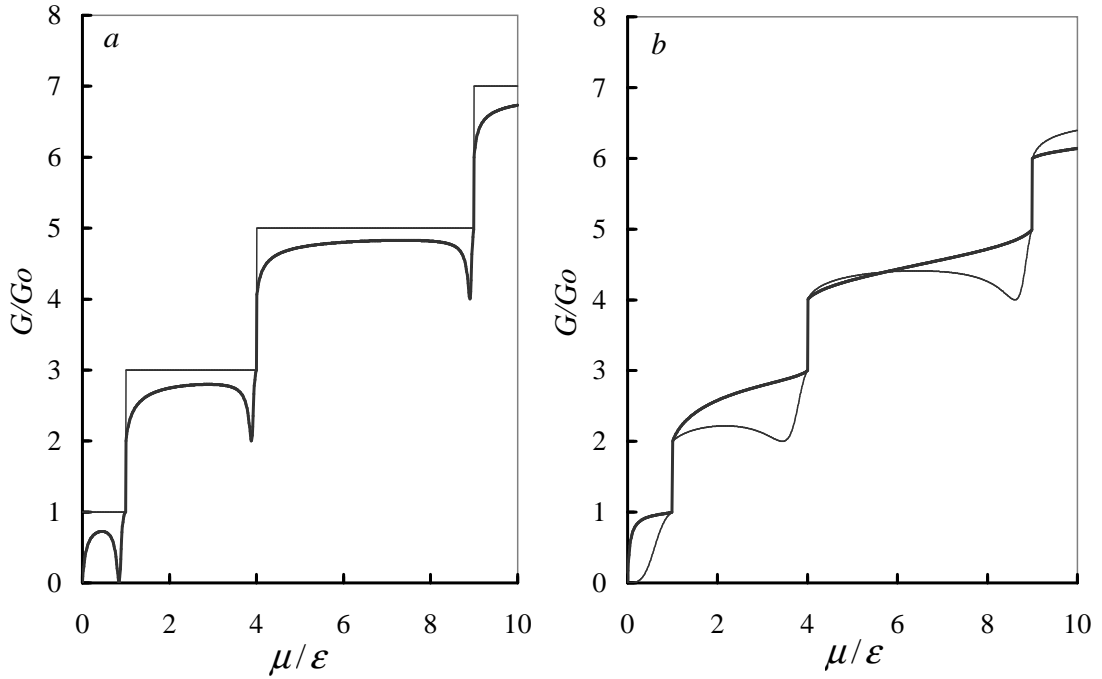


Рис. 4.1. Кондактанс G как функция химического потенциала μ . (а): тонкая линия – примесь отсутствует; толстая линия – при наличии примеси с длиной рассеяния $\lambda = 5r$. (б): тонкая линия – $\lambda = r$; толстая линия – $\lambda = 0.1r$. Здесь $\varepsilon = \hbar^2/2m^*r^2$.

при заданных параметрах системы необходимо использовать численный расчет. Для построения достаточно точного графика зависимости $G(\mu)$ по формуле (4.24) требуется вычислить большое количество значений кондактанса, как функции химического потенциала. Для этой цели на языке Pascal была разработана программа, представленная в **Приложении С**. По файлу с данными, который создается программой (**Приложении С**), в программе Origin были построены графики зависимости $G(\mu)$.

При отсутствии примеси на цилиндре формула (4.24) состоит только из первого слагаемого и зависимость $G(\mu)$ имеет ступенчатый характер (рис. 4.1 а). Второе слагаемое в формуле (4.24) появляется при наличии примеси и описывает уменьшение кондактанса за счет резонансного рассеяния на виртуальном энергетическом уровне, который создается точечным потенциалом ниже границы подзоны с номером m . Взаимодействие этого уровня с состояниями непрерывного спектра в нижележащей подзоне увеличивает вероятность рассеяния электрона и приводит к появлению резонансов в амплитудах

отражения и, соответственно, к появлению провалов на зависимости $G(\mu)$ (рис. 4.1).

Как видно из формулы (4.24), максимальная глубина провалов равна G_0 . Положение минимумов кондактанса определяется уравнением $\text{Re}Q_{11} - P = 0$ и зависит от силы точечного потенциала. При $\lambda \gg r$ провалы на графике зависимости $G(\mu)$ располагаются вблизи порогов ступеней слева (рис. 4.1a). С уменьшением λ провал смещается в область меньших энергий и, дойдя до нижней границы подзоны ($\mu = E_m$), исчезает (рис. 4.1b). В этом случае зависимость $G(\mu)$ носит монотонный характер.

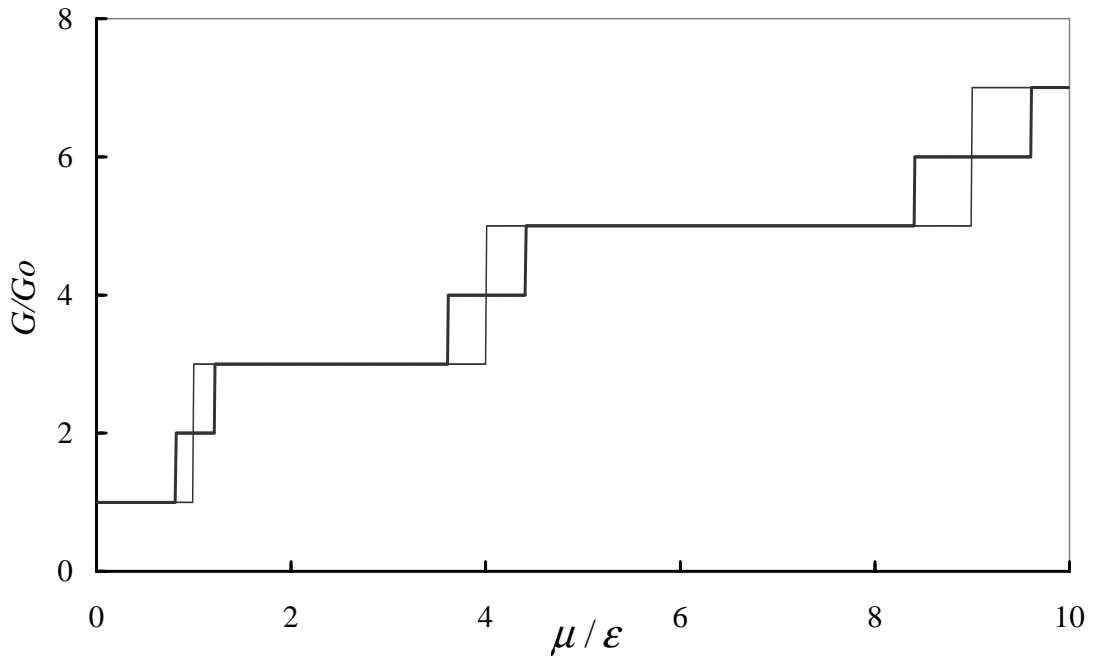


Рис. 4.2. Тонкая линия – зависимость кондактанса от химического потенциала в отсутствии магнитного поля, толстая линия – кондактанс при наличии поля с потоком $\eta = 0.2$.

В магнитном поле при нецелых и неполуцелых значениях потока η каждая ступенька расщепляется на две (рис. 4.2), а при полуцелом значении η вырождение возникает снова. Влияние одиночной примеси в этом случае остается таким же, как и при отсутствии поля.

4.3 Моделирование рассеяния электронов в системе при наличии двух точечных примесей

Рассмотрим случай, когда на цилиндре имеется два возмущения. В этом случае волновая функция записывается в виде

$$\psi(\mathbf{x}, E) = \psi_m(\mathbf{x}, E) + \xi_1 G(\mathbf{x}, \mathbf{q}_1; E) + \xi_2 G(\mathbf{x}, \mathbf{q}_2; E), \quad (4.25)$$

где коэффициенты ξ_i определяются из системы уравнений

$$\begin{cases} u_1 = m^* \xi_1 / \pi \hbar^2, \\ v_1 = \psi_m(\mathbf{q}_1) + \xi_1 Q_{11} + \xi_2 Q_{12}, \\ u_2 = m^* \xi_2 / \pi \hbar^2, \\ v_2 = \psi_m(\mathbf{q}_2) + \xi_1 Q_{21} + \xi_2 Q_{22}. \end{cases} \quad (4.26)$$

Принимая во внимание граничные условия (4.5), из уравнений (4.26) получим

$$\begin{cases} \xi_1 \tilde{Q}_{11} + \xi_2 \tilde{Q}_{12} = -\psi_m(\mathbf{q}_1), \\ \xi_1 \tilde{Q}_{21} + \xi_2 \tilde{Q}_{22} = -\psi_m(\mathbf{q}_2). \end{cases} \quad (4.27)$$

Здесь $\tilde{Q}_{ij}(E) = Q_{ij}(E) \pi \hbar^2 / m^* - P_j \delta_{ij}$. Решая систему (4.27), получим явные выражения для коэффициентов ξ_i

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -\frac{\psi_m(\mathbf{q}_1) \tilde{Q}_{11} - \psi_m(\mathbf{q}_2) \tilde{Q}_{12}}{\tilde{Q}_{11}^2 - \tilde{Q}_{12} \tilde{Q}_{21}}, \\ \xi_2 &= -\frac{\psi_m(\mathbf{q}_2) \tilde{Q}_{11} - \psi_m(\mathbf{q}_1) \tilde{Q}_{21}}{\tilde{Q}_{11}^2 - \tilde{Q}_{12} \tilde{Q}_{21}}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Как следует из формул (4.12) и (4.25), амплитудный коэффициент прохождения из состояния, характеризующегося магнитным квантовым числом m в состояние с магнитным квантовым числом m' для случая двух примесей определяются следующим образом

$$t_{mm'} = \delta_{mm'} + \frac{i}{2\pi k_m r} (\xi_1 e^{-ik_m z_1 - im\varphi_1} + \xi_2 e^{-ik_m z_2 - im\varphi_2}). \quad (4.29)$$

Перенесем начало координат в точку нахождения первой примеси. Тогда координаты возмущений будут $\mathbf{q}_1 = (0, 0)$ и $\mathbf{q}_2 = (\Delta z, \Delta\varphi)$, где $\Delta z = z_2 - z_1$ и

$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$. С помощью амплитудных коэффициентов найдем коэффициенты прохождения $T_{mm'}$

$$T_{mm'} = \frac{k_m}{k_{m'}} \left\{ \delta_{mm'} + \frac{1}{4\pi^2 k_m^2 r^2} [|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 - 2i\xi_1\bar{\xi}_2 \sin(k_m\Delta z + m\Delta\varphi) + 2(\text{Re}\xi_1\text{Re}\xi_2 + \text{Im}\xi_1\text{Im}\xi_2)e^{ik_m\Delta z + im\Delta\varphi}] \right\}. \quad (4.30)$$

Как видно из формулы (4.30), $T_{mm'}$ зависит только от разности координат примесей Δz и $\Delta\varphi$, то есть кондактанс определяется только взаимным расположением примесей, а не координатами каждой примеси в отдельности. Таким образом, поведение кондактанса определяется следующими параметрами системы: расстоянием Δz между примесями вдоль оси цилиндра, углом $\Delta\varphi$ между образующими, на которых расположены примеси, величиной длин рассеяния возмущений λ_j и потоком магнитного поля $\eta = \Phi/\Phi_0$ через поперечное сечение цилиндра. Отметим, что, как следует из формул (4.28) и (4.30), электронные волны, которые имеют узел в точках расположения обеих примесей, не рассеиваются. Поэтому следует ожидать, что при высокой симметрии в расположении примесей кондактанс системы будет большим, чем при остальных положениях.

Для того, чтобы найти кондактанс цилиндра с двумя примесями, необходимо просуммировать коэффициенты прохождения по всем разрешенным магнитным квантовым числам m и m' . Так как формула (4.30) уже имеет достаточно громоздкий вид, получение выражения для кондактанса в аналитическом виде не имеет смысла, так как из-за громоздкости оно не является информативным и его трудно использовать. Поэтому были использованы численные методы для получения зависимости кондактанса от химического потенциала μ (соответствующая программа представлена в **Приложении С**). С ее помощью для каждого значения μ численно рассчитывалось значение G путем суммирования $T_{mm'}$ по всем разрешенным для заданного μ значениям m и m' . Универсальность программы состоит в том, что с ее помощью можно строить графики зависимости $G(\mu)$ как для случая одной примеси, так и для случая двух примесей, а так же для цилиндра без примесей. С помощью этой программы были построены графики $G(\mu)$ при актуальных значениях параметров системы.

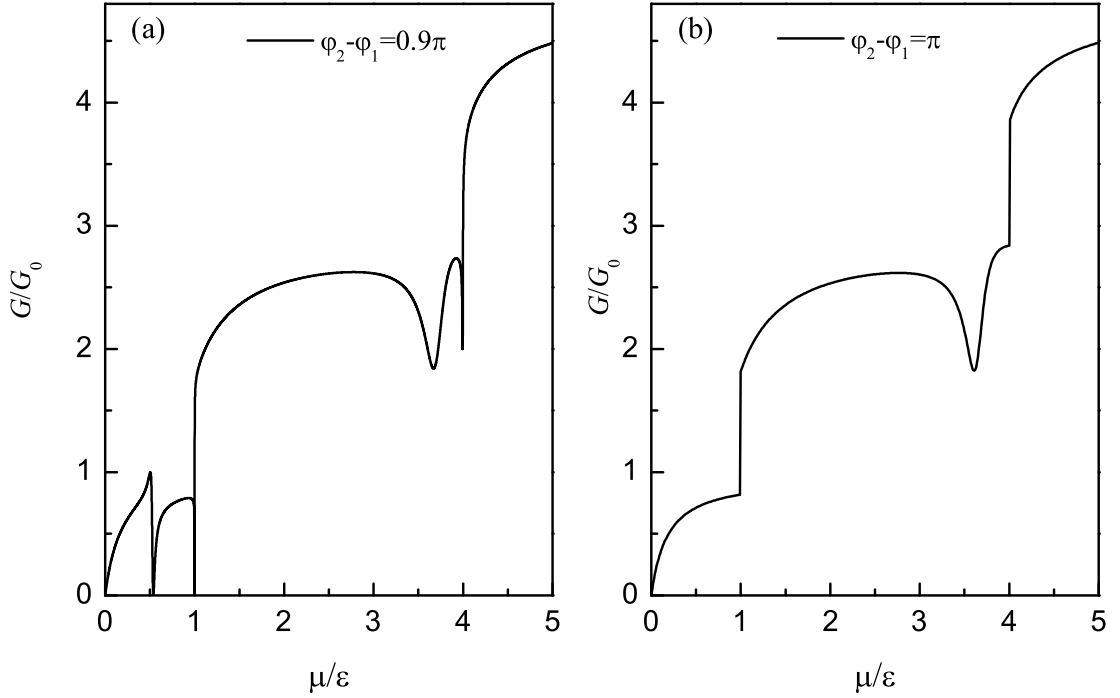


Рис. 4.3. Кондактанс G как функция химического потенциала μ при наличии двух примесей с одинаковыми длинами рассеяния $\lambda = 5r$, $\eta = 0$, $\Delta z = 0$, (a): $\Delta\varphi = 0.9\pi$, (b): $\Delta\varphi = \pi$.

Следует отметить, что построение графика зависимости кондактанса при наличии трех и более примесей возможно с помощью аналогичной программы. Отличие будет лишь в увеличении порядка определителя на единицу при увеличении числа примесей на единицу.

При наличии двух одинаковых примесей ($\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$) на графике зависимости кондактанса от химического потенциала могут появляться дополнительные провалы, а также асимметричные резонансы Фано (рис. 4.3a). Глубина провалов в этом случае может превышать квант кондактанса. При особых положениях примесей, может происходить исчезновение дополнительных провалов и коллапс резонансов Фано (рис. 4.3b). Например, при нахождении примесей на противоположных образующих цилиндра $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi$ в отсутствие поля исчезают дополнительные провалы в окрестности порогов ступеней.

Остановимся более подробно на нескольких вариантах расположения

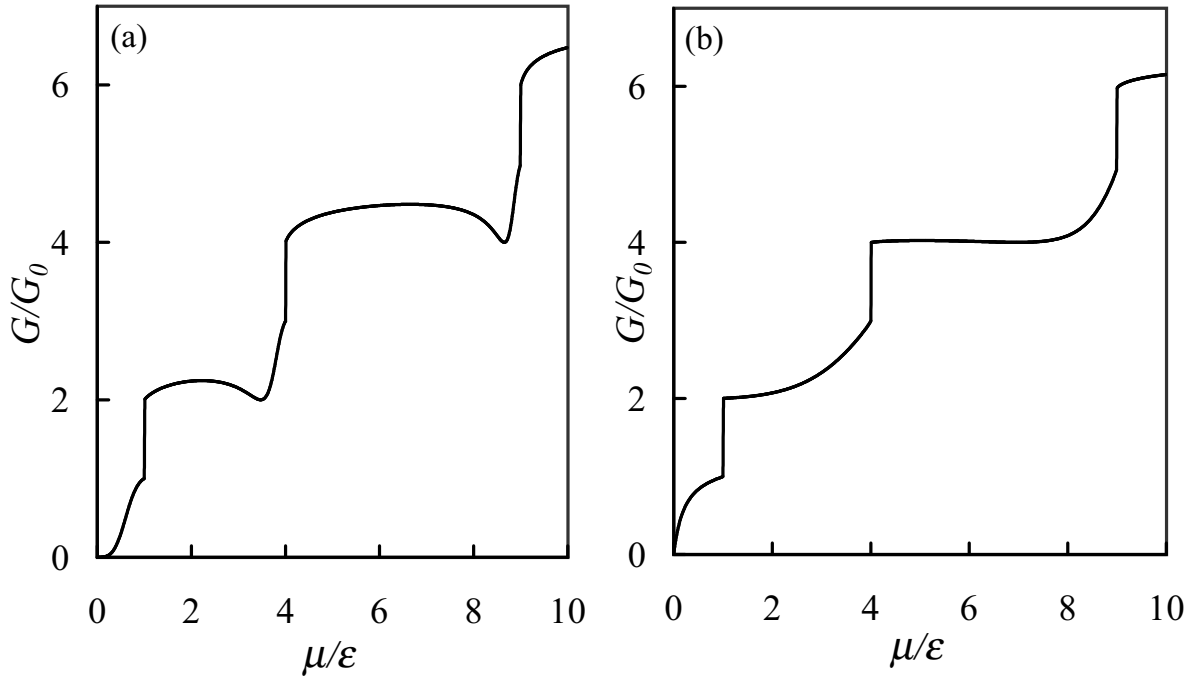


Рис. 4.4. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей, расположенных так, что $\Delta\varphi = 0$, $\Delta z = 0.2r$, в отсутствии магнитного поля. Примеси имеют разные длины рассеяния (а): $\lambda = 5r$, (б): $\lambda = 0.5r$.

примесей. Рассмотрим сначала зависимость кондактанса от энергии Ферми, когда примеси расположены очень близко друг к другу, т.е. они расположены на одной образующей и расстояние между ними много меньше радиуса цилиндра ($\Delta z \ll r$). В этом случае зависимость кондактанса от химического потенциала (рис. 4.4) имеет вид, аналогичный зависимости в случае одной примеси (рис. 4.1). При больших значениях длины рассеяния на графике $G(\mu)$ имеются провалы, которые при уменьшении длины рассеяния смещаются в область меньших энергий, а затем исчезают (рис. 4.4). Следовательно, две примеси ведут себя, как одна, если расстояние между ними мало. Это происходит вследствие того, что при малом расстоянии между примесями длина волны электрона, имеющего небольшую энергию, становится больше этого расстояния и электрон, рассеиваясь на паре примесей, воспринимает их как одну.

Если же примеси расположены хотя и на малом расстоянии друг от друга вдоль оси z ($\Delta z \ll r$), но не на одной образующей, то ситуация меня-

ется. Рассмотрим зависимость кондактанса от угла $\Delta\varphi$. При произвольном значении $\Delta\varphi$, отличном от $0, \pi, \pi/2$ на каждой ступени графика зависимости $G(\mu)$ имеется по два провала, отвечающих за рассеяние электронов на двух примесях, а на первой ступени имеется резонанс Фано (рис. 4.5). В слу-

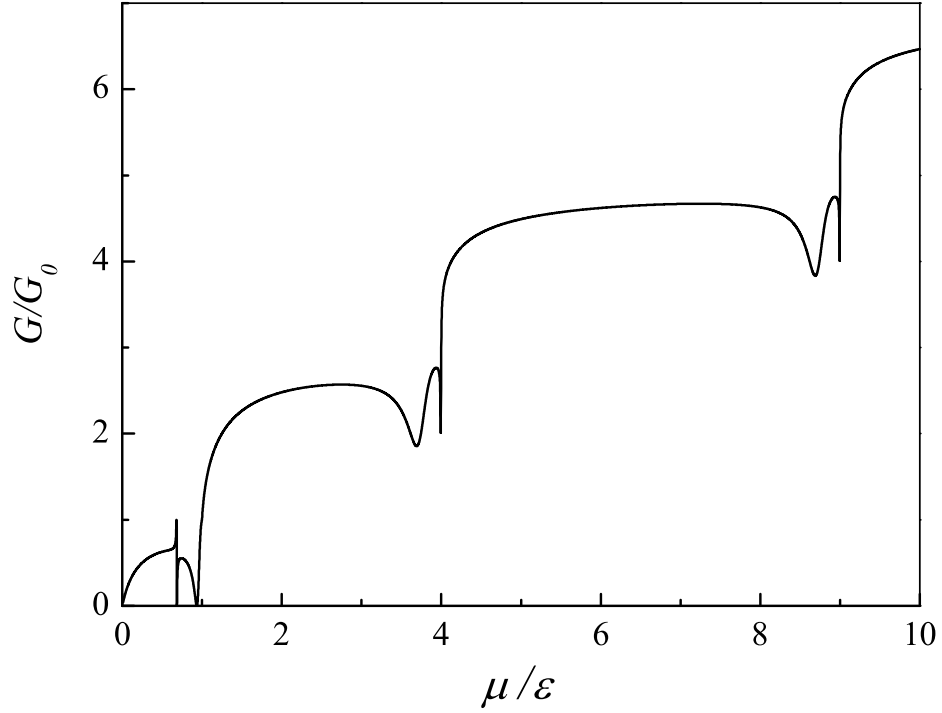


Рис. 4.5. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при $\lambda = 5r$, $\Delta z = 0.2r$, $\Delta\varphi = 0.6\pi$, $\eta = 0$.

чае, когда примеси расположены на одной образующей цилиндра ($\Delta\varphi = 0$) на каждой ступени зависимости остается лишь один провал, и происходит коллапс резонанса Фано на первой ступени (рис. 4.6a). При этом амплитуда резонанса остается неизменной, а ширина уменьшается с уменьшением $\Delta\varphi$. При расположении примесей на диаметрально противоположных образующих ($\Delta\varphi = \pi$) коллапса резонанса уже не происходит, но так же имеет место исчезновение второго провала на каждой ступени зависимости $G(\mu)$ (рис. 4.6b). При $\Delta\varphi = \pi$ глубина провалов оказывается большей, чем при $\Delta\varphi = 0$ (рис. 4.6).

Следует отметить, что возникновение резонанса связано именно с близким расположением примесей вдоль z . При увеличении Δz от 0 до r про-

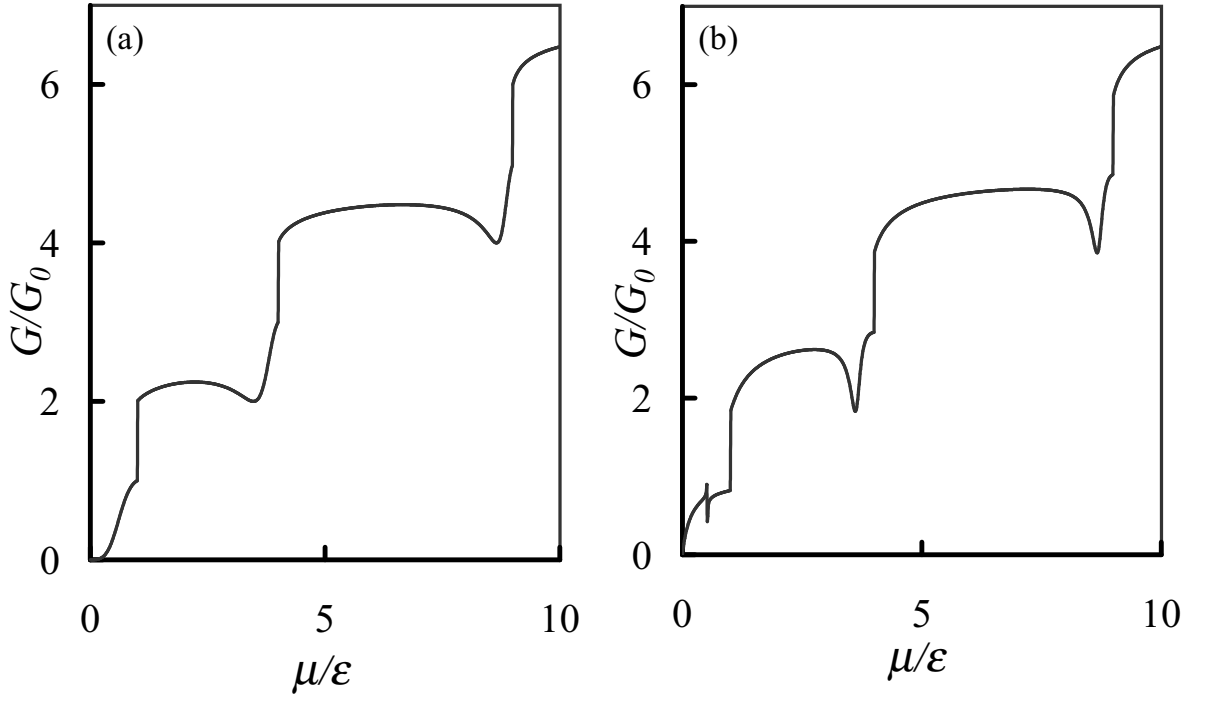


Рис. 4.6. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при $\lambda = 5r$, $\Delta z = 0.2r$, (a): $\Delta\varphi = 0$, (b): $\Delta\varphi = \pi$.

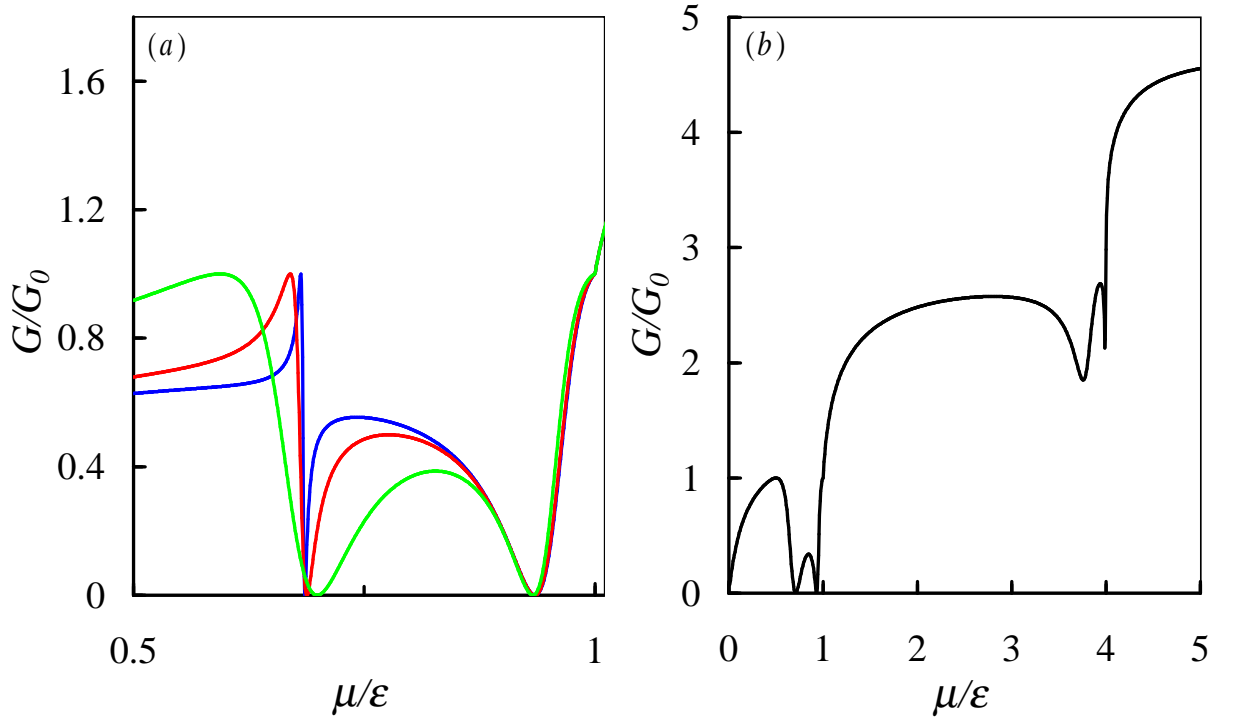


Рис. 4.7. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при $\eta = 0$, $\lambda = 5r$, $\Delta\varphi = 0.6\pi$. (a): синяя линия соответствует $\Delta z = 0.2r$, красная – $\Delta z = 0.4r$, зеленая – $\Delta z = 0.9r$. При увеличении Δz от $0.2r$ до r происходит сглаживание резонанса Фано. (b): $\Delta z = 1.2r$.

исходит трансформация резонанса в провал путем сглаживания максимумов резонанса Фано (рис. 4.7а). Из рис. 4.7а видно, что если расстояние между примесями превышает радиус цилиндра и они находятся не на одной и не на противоположных образующих, то вместо резонанса на первой ступени квантования кондактанса имеется провал. Таким образом при $\Delta z > r$ и $\Delta\varphi \neq 0, \pi$, что является случаем общего положения, на каждой ступеньке зависимости кондактанса имеется по два провала, соответствующих рассеянию на двух примесях (рис. 4.7b).

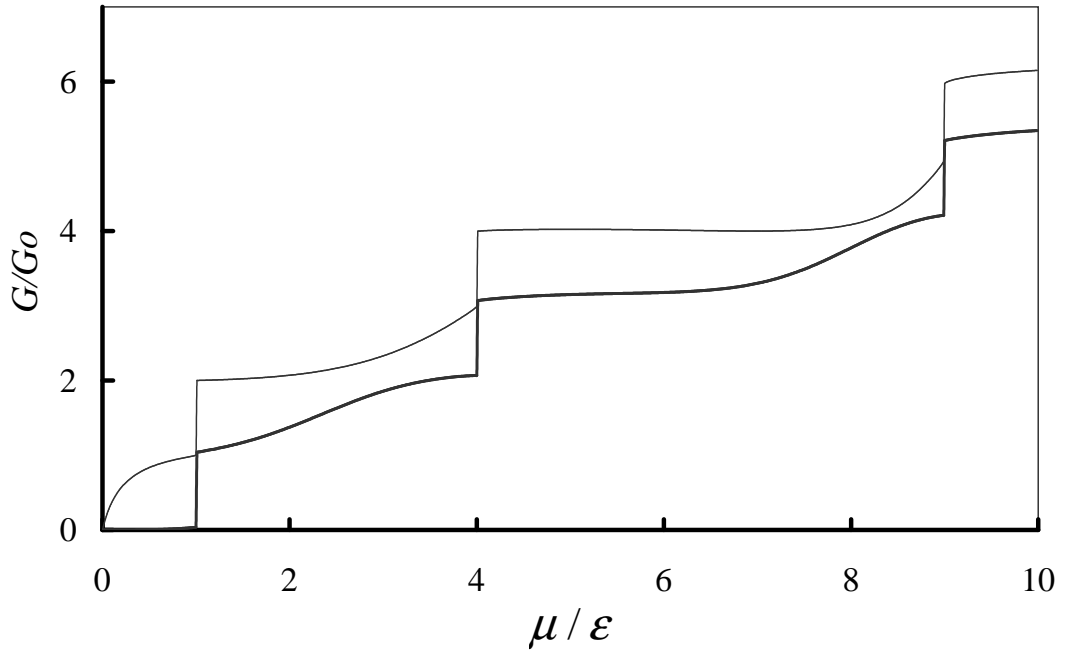


Рис. 4.8. Тонкая линия – зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при $\lambda = 0.5r$, $\Delta z = 0.2r$, $\eta = 0$, $\Delta\varphi = 0$, толстая линия – при $\Delta\varphi = \pi$.

Описанное поведение характерно для больших λ . При малых значениях λ ($\lambda < r$) зависимость $G(\mu)$ становится монотонной. На рис. 4.8 показаны зависимости кондактанса при $\Delta\varphi = 0$ и при $\Delta\varphi = \pi$ при малой величине λ . Как видно из графика, при $\Delta\varphi = \pi$ величина кондактанса при любых значениях химического потенциала меньше, чем при $\Delta\varphi = 0$. То есть, при расположении примесей на одной образующей влияние примесей оказывается менее значительным, чем при расположении на противоположных образующих. Такое поведение кондактанса может объясняться тем, что расположенные на од-

ной образующей примеси не рассеивают электронные волны, имеющие узел на этой образующей. Следовательно, уменьшение кондактанса при $\Delta\varphi = 0$ должно быть менее существенно, чем при $\Delta\varphi = \pi$. Следует отметить, что при больших λ ($\lambda > r$) уменьшения кондактанса при $\Delta\varphi = \pi$ по сравнению с $\Delta\varphi = 0$ при всех значениях μ уже не происходит.

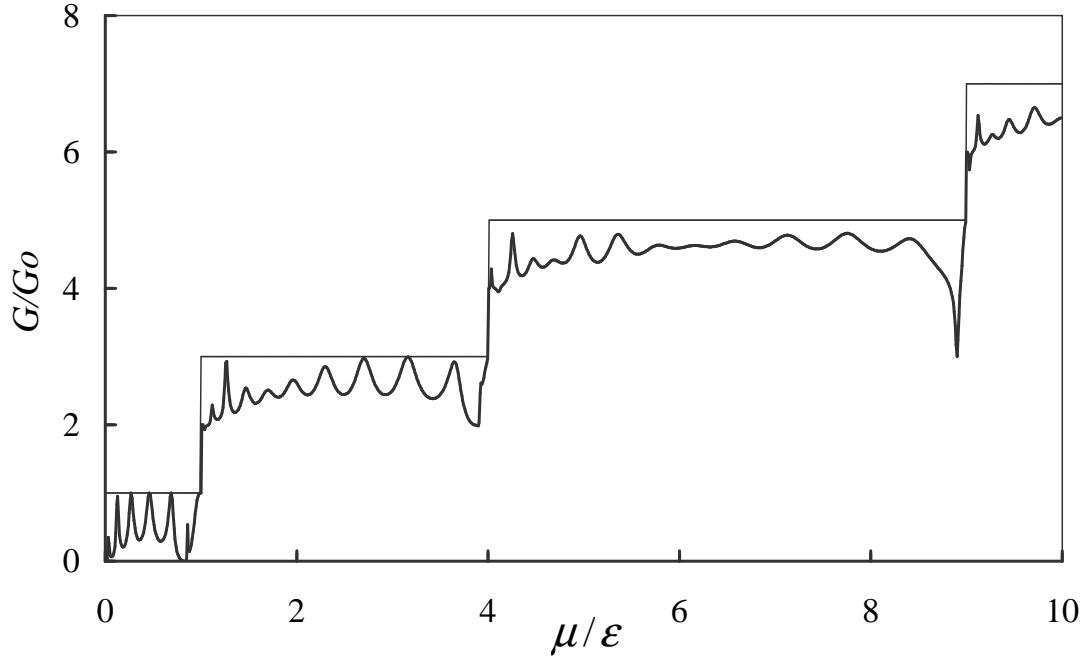


Рис. 4.9. Кондактанс G как функция химического потенциала μ . Тонкая линия – примесь отсутствует; толстая линия – $\lambda = 5r$, $z_2 - z_1 = 20r$, $\varphi_2 = \varphi_1$, $B = 0$.

Если расстояние между примесями значительно превышает радиус цилиндра, на зависимости $G(\mu)$ наблюдаются осцилляции, связанные с интерференцией электронных волн, рассеянных на разных примесях (рис. 4.9).

4.4 Основные результаты главы

С помощью математической модели тонкого цилиндра было проведено теоретическое исследование кондактанса нанотрубки, на поверхности которой имеются примеси, моделируемые потенциалами нулевого радиуса. Получена явная формула для кондактанса системы при нулевой температуре. Разработана программа на языке Pascal, позволяющая проводить численное исследование зависимости кондактанса от параметров модели.

Подробно рассмотрены случаи одной и двух примесей. Показано, что наличие точечных возмущений приводит к появлению на зависимости кондуктанса от химического потенциала провалов, связанных с резонансным рассеянием электронов. Из полученной аналитической формулы видно, что в случае одной примеси глубина провала равна G_0 , а его положение зависит от силы точечного потенциала. С увеличением силы потенциала провал смещается в область меньших энергий и, дойдя до нижней границы подзоны, исчезает.

В случае нескольких примесей максимальная глубина провалов превышает G_0 . Наличие двух и более примесей может приводить к появлению резонансов Фано в дополнение к провалам. При особых положениях примесей, отличающихся высокой симметрией, возможно исчезновение провалов и коллапс резонансов Фано. В частности, коллапс резонансов Фано наблюдается при расположении примесей на одной образующей. Кроме коллапса может происходить трансформация резонанса Фано в провал при увеличении расстояния между примесями вдоль оси цилиндра.

Если две примеси расположены на одной образующей цилиндра на достаточно близком расстоянии друг от друга (расстояние между примесями меньше длины волны электрона), то ситуация подобна случаю одной примеси. Если расстояние между примесями много больше радиуса цилиндра ($\Delta z \gg r$), то интерференция электронных волн, рассеянных на разных примесях, приводит к появлению осцилляций на зависимости $G(\mu)$.

Заключение

В работе проведены теоретические исследования влияния короткодействующих примесей, моделируемых потенциалами нулевого радиуса, на электронный транспорт квазиодномерных наноструктур таких как однослойная нанотрубка, двухтерминальное кольцо Ааронова-Бома и цепочка колец. Для этого были использованы математические модели тонкого цилиндра и одномерного кольца. Получены явные аналитические выражения, удобные для анализа, для кондактанса квантового цилиндра и кольца, и дисперсионные соотношения для цепочек колец. Разработаны программы для численного исследования зависимостей кондактанса квантового цилиндра и кольца Ааронова-Бома от параметров систем при различном числе примесей, а так же программный комплекс и специальные численные методы для построения одноэлектронного энергетического спектра цепочки одномерных колец с различным типом соединения.

Основные результаты исследований:

1. Показано, что зависимость коэффициента прохождения от энергии электронов для двухтерминального кольца носит осцилляционный характер. В присутствии примесей эта зависимость содержит вблизи дискретных энергетических уровней квантового кольца резонансы Фано. Необходимым условием существования резонансов является частичное нарушение симметрии системы либо с помощью несимметричного расположения контактов, либо с помощью примесей, либо с помощью магнитного поля. Резонансы возникают в результате взаимодействия распространяющихся электронных волн с локализованными состояниями дискретного спектра при совпадении их энергий. Найдено выражение для ширины резонансов, которое показывает, что она существенно зависит от поло-

жения точек контактов и примесей.

2. Установлено, что возможны два механизма исчезновения нулей кондактанса. Первый механизм — это коллапс резонансов Фано при определенных положениях примесей и значениях магнитного поля. При этом полюс амплитуды рассеяния спускается с комплексной плоскости энергий на действительную ось в точку нахождения нуля коэффициента прохождения. При этом мнимая часть комплексной энергии, определяющая ширину резонанса, стремится к нулю. В этом случае уменьшается ширина резонансов Фано, а их глубина остается неизменной.
3. Установлено, что в системе возможен другой механизм исчезновения нулей коэффициента прохождения, при котором нуль сдвигается с действительной оси в комплексную плоскость энергий. В этом случае уменьшается не ширина, а глубина соответствующего провала. Отметим, что коллапс резонансов Фано, сопровождается повышением симметрии системы, в то время как, при сдвиге нулей в комплексную плоскость симметрия понижается.
4. Исследована зонная структура цепочки одномерных колец при наличии магнитного поля, перпендикулярного плоскости колец. В общем случае спектр цепочки колец имеет зонную структуру, перекрытия зон не происходит. В системе имеются дискретные уровни вблизи уровней изолированного кольца. Они соответствуют локализованным на кольцах электронам. При уменьшении параметра связи между кольцами ширина запрещенных зон растет и в пределе разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни изолированного кольца. При этом они становятся двукратно вырожденными.
5. Показано, что зонная структура чувствительная к положению контактов на кольцах. Если кольца имеют между собой непосредственный контакт в диаметрально противоположных точках, то дискретные уровни существуют вне зависимости от магнитного поля. При зигзагообразном соединении колец в цепочку без проводников дискретные уровни есть,

но часть из них может пропадать при соединении колец в определенных точках. Если кольца соединены в диаметрально противоположных точках проводниками, то дискретные уровни в присутствии магнитного поля трансформируются в узкие минизоны.

При недиагональном подключении проводников к кольцу (в элементарной ячейке цепочки колец, соединенных между собой проводниками) дискретные уровни изолированного кольца трансформируются в минизоны и в отсутствии магнитного поля. При наличии магнитного поля в такой цепочке из-за отсутствия в системе инверсной симметрии зависимость энергии от квазиимпульса становится асимметричной, появляются дополнительные не прямые запрещенные зоны.

6. Показано, что зависимость кондактанса квантового цилиндра от химического потенциала имеет ступенчатый характер. Примесь приводит к появлению провалов, связанных с резонансным рассеянием на виртуальном уровне. Глубина провалов зависит от длины рассеяния примеси. При наличии двух и более примесей на зависимости кондактанса от химического потенциала имеются резонансы Фано. Коллапс резонансов в коэффициенте прохождения электрона происходит при нахождении примесей на противоположных образующих цилиндра в одном сечении в отсутствие магнитного поля. Кроме коллапса существует второй механизм исчезновения резонанса — трансформация резонанса в провал путем сглаживания его экстремумов при увеличении расстояния между примесями вдоль оси цилиндра.
7. Установлено, что при наличии двух примесей на одной образующей цилиндра на малом расстоянии друг от друга, зависимость кондактанса от химического потенциала подобна случаю одной примеси. Если расстояние между примесями много больше радиуса цилиндра, то интерференция электронных волн, рассеянных на разных примесях, приводит к появлению осцилляций на зависимости $G(\mu)$.

Приложение А

Листинг программы для численного исследования зависимости кондактанса двухтерминального квантового кольца от параметров системы при наличии одной или двух примесей

Программа, написанная на языке Pascal, предназначена для построения графика зависимости G от параметров системы, изменяющихся с заданным шагом, с помощью численного расчета значений кондактанса (коэффициента прохождения). В основной части программы сначала задаются все параметры, характеризующие структуру. Процедура **procedure Det**(var M:Cmas; var DetM:Complex) вычисляет определитель Q —матрицы третьего порядка, элементами которой являются комплексные числа. С помощью разработанной программы возможен счет значения кондактанса, как для кольца с одной примесью, так и для кольца с двумя примесями. Функция **function fy1point**(k:Real):Real считает значение кондактанса квантового кольца при заданном значении переменной при наличии одной примеси, а функция **function fy2point**(k:Real):Real — при наличии двух. Путем выбора соответствующей функции **fy1point** или **fy2point**, значение которой присваивается функции **function fy**(k:Real):Real, строятся графики зависимостей G при нужном числе примесей. Процедура **procedure MakeFile** записывает в файл в виде двух столбцов значение переменной (энергии электрона) через определенный шаг и соответствующие значения функции fy (кондактанса).

Модули **graphics** и **graph** используются для построения графика в Pascal. Так как они не имеют отношения к расчетам, а созданы лишь для визуализации графиков, не выходя из Pascal, их листинг не представлен в диссертации.

Следует отметить, что построение графика зависимости кондактанса

при наличии трех и более примесей возможно с помощью аналогичной программы. Отличие будет лишь в увеличении порядка определителя на единицу при увеличении числа примесей на единицу.

```
program FileMaker;
```

```
uses crt , graphics , graph;
```

```
type
```

```
    complex=record
```

```
        Re, Im: Extended
```

```
    end;
```

```
    Cmas=array [ 1..3 , 1..3] of Complex;
```

```
    Dmas=array [ 1..4 , 1..4] of Complex;
```

```
    mas1=array [ 1..3] of Complex;
```

```
    mas=array [ 1..4] of Complex;
```

```
var name: string;
```

```
    tf: text;
```

```
    a1 , a2 , b1 , b2 , Y1 , Y2 , ksi , ksi1 , ksi2 , fi1 ,
```

```
    fi2 , fi0 , fi01 , fi02 , r , F , k: Real;
```

```
    y , x , dX , Xmin , Xmax , dy , l , Nul: Real;
```

```
    N: integer;
```

```
function sign(x: Real): integer;
```

```
    begin
```

```
        if x >= 0 then sign := 1
```

```
            else sign := -1;
```

```
    end;
```

```
procedure Det(var M: Cmas; var DetM: Complex);
```

```
var
```

```
    MIN1 , MIN2 , MIN3 , D , K , L , N: Complex;
```

```
begin
```

```

MIN1.Re:=M[ 2 , 2 ].Re*M[ 3 , 3 ].Re-M[ 2 , 2 ].Im*M[ 3 , 3 ].Im-
M[ 3 , 2 ].Re*M[ 2 , 3 ].Re+M[ 3 , 2 ].Im*M[ 2 , 3 ].Im;
MIN1.Im:=M[ 2 , 2 ].Im*M[ 3 , 3 ].Re+M[ 2 , 2 ].Re*M[ 3 , 3 ].Im-
M[ 3 , 2 ].Im*M[ 2 , 3 ].Re-M[ 3 , 2 ].Re*M[ 2 , 3 ].Im;
MIN2.Re:=M[ 2 , 1 ].Re*M[ 3 , 3 ].Re-M[ 2 , 1 ].Im*M[ 3 , 3 ].Im-
M[ 3 , 1 ].Re*M[ 2 , 3 ].Re+M[ 3 , 1 ].Im*M[ 2 , 3 ].Im;
MIN2.Im:=M[ 2 , 1 ].Im*M[ 3 , 3 ].Re+M[ 2 , 1 ].Re*M[ 3 , 3 ].Im-
M[ 3 , 1 ].Im*M[ 2 , 3 ].Re-M[ 3 , 1 ].Re*M[ 2 , 3 ].Im;
MIN3.Re:=M[ 2 , 1 ].Re*M[ 3 , 2 ].Re-M[ 2 , 1 ].Im*M[ 3 , 2 ].Im-
M[ 3 , 1 ].Re*M[ 2 , 2 ].Re+M[ 3 , 1 ].Im*M[ 2 , 2 ].Im;
MIN3.Im:=M[ 2 , 1 ].Im*M[ 3 , 2 ].Re+M[ 2 , 1 ].Re*M[ 3 , 2 ].Im-
M[ 3 , 1 ].Im*M[ 2 , 2 ].Re-M[ 3 , 1 ].Re*M[ 2 , 2 ].Im;
K.Re:=M[ 1 , 1 ].Re*MIN1.Re-M[ 1 , 1 ].Im*MIN1.Im;
K.Im:=M[ 1 , 1 ].Im*MIN1.Re+M[ 1 , 1 ].Re*MIN1.Im;
L.Re:=M[ 1 , 2 ].Re*MIN2.Re-M[ 1 , 2 ].Im*MIN2.Im;
L.Im:=M[ 1 , 2 ].Im*MIN2.Re+M[ 1 , 2 ].Re*MIN2.Im;
N.Re:=M[ 1 , 3 ].Re*MIN3.Re-M[ 1 , 3 ].Im*MIN3.Im;
N.Im:=M[ 1 , 3 ].Im*MIN3.Re+M[ 1 , 3 ].Re*MIN3.Im;
D.Re:=K.Re-L.Re+N.Re;
D.Im:=K.Im-L.Im+N.Im;
DetM:=D;

```

end;

function fy(x:Real):Real;

begin

fy:=fy2point(x);

end;

function fy1point(k:Real):Real;

var

H: Complex;

G,Q,P:Cmas;

```

C:mas1;
i , j :byte;
T,s:Extended;
DetP ,DetQ:Complex;
begin
G[1 , 1].Re:=(( cos ( pi *(F-k*r)) / sin ( pi *(F-k*r))) -
( cos ( pi *(F+k*r)) / sin ( pi *(F+k*r)))) / (2*k);
G[2 , 2].Re:=G[1 , 1].Re;
G[3 , 3].Re:=G[1 , 1].Re;
G[1 , 1].Im:=0;
G[2 , 2].Im:=0;
G[3 , 3].Im:=0;

G[1 , 2].Re:=( cos (( fi2-fi1 )*(F-k*r))*( cos ( pi *(F-k*r)) /
sin ( pi *(F-k*r))))+ sin (( fi2-fi1 )*(F-k*r))-
cos (( fi2-fi1 )*(F+k*r))*( cos ( pi *(F+k*r)) / sin ( pi *(F+k*r))))-
sin (( fi2-fi1 )*(F+k*r))) / (2*k);
G[1 , 2].Im:=( sin (( fi2-fi1 )*(F-k*r))*( cos ( pi *(F-k*r)) /
sin ( pi *(F-k*r))))- cos (( fi2-fi1 )*(F-k*r))-
sin (( fi2-fi1 )*(F+k*r))*( cos ( pi *(F+k*r)) / sin ( pi *(F+k*r))))+
cos (( fi2-fi1 )*(F+k*r))) / (2*k);
G[2 , 1].Re:=G[1 , 2].Re;
G[2 , 1].Im:=-G[1 , 2].Im;

G[1 , 3].Re:=( cos (( fi0-fi1 )*(F-k*r))*( cos ( pi *(F-k*r)) /
sin ( pi *(F-k*r))))+ sin (( fi0-fi1 )*(F-k*r))-
cos (( fi0-fi1 )*(F+k*r))*( cos ( pi *(F+k*r)) / sin ( pi *(F+k*r))))-
sin (( fi0-fi1 )*(F+k*r))) / (2*k);
G[1 , 3].Im:=( sin (( fi0-fi1 )*(F-k*r))*( cos ( pi *(F-k*r)) /
sin ( pi *(F-k*r))))- cos (( fi0-fi1 )*(F-k*r))-
sin (( fi0-fi1 )*(F+k*r))*( cos ( pi *(F+k*r)) / sin ( pi *(F+k*r))))+
cos (( fi0-fi1 )*(F+k*r))) / (2*k);

```

$G[3, 1].\text{Re} := G[1, 3].\text{Re};$

$G[3, 1].\text{Im} := -G[1, 3].\text{Im};$

$G[2, 3].\text{Re} := (\cos((fi0 - fi2) * (F - k * r)) * (\cos(pi * (F - k * r)) / \sin(pi * (F - k * r))) + \sin((fi0 - fi2) * (F - k * r)) - \cos((fi0 - fi2) * (F + k * r)) * (\cos(pi * (F + k * r)) / \sin(pi * (F + k * r))) - \sin((fi0 - fi2) * (F + k * r))) / (2 * k);$

$G[2, 3].\text{Im} := (\sin((fi0 - fi2) * (F - k * r)) * (\cos(pi * (F - k * r)) / \sin(pi * (F - k * r))) - \cos((fi0 - fi2) * (F - k * r)) - \sin((fi0 - fi2) * (F + k * r)) * (\cos(pi * (F + k * r)) / \sin(pi * (F + k * r))) + \cos((fi0 - fi2) * (F + k * r))) / (2 * k);$

$G[3, 2].\text{Re} := G[2, 3].\text{Re};$

$G[3, 2].\text{Im} := -G[2, 3].\text{Im};$

$H.\text{Re} := 2 * a1 * \text{sqr}(k) * Y1 / (1 + \text{sqr}(k * Y1));$

$H.\text{Im} := -2 * a1 * k / (1 + \text{sqr}(k * Y1));$

$C[1].\text{Re} := 2 * (b1 - ((\text{sqr}(k * a1) * Y1) / (1 + \text{sqr}(k * Y1))));$

$C[1].\text{Im} := 2 * k * \text{sqr}(a1) / (1 + \text{sqr}(k * Y1));$

$C[2].\text{Re} := 2 * (b2 - ((\text{sqr}(k * a2) * Y2) / (1 + \text{sqr}(k * Y2))));$

$C[2].\text{Im} := 2 * k * \text{sqr}(a2) / (1 + \text{sqr}(k * Y2));$

$C[3].\text{Re} := 2 * k * si;$

$C[3].\text{Im} := 0;$

for $i := 1$ **to** 3 **do**

for $j := 1$ **to** 3 **do**

begin

if $i = j$ **then**

begin

$Q[i, j].\text{Re} := G[i, j].\text{Re} - C[i].\text{Re};$

$Q[i, j].\text{Im} := G[i, j].\text{Im} - C[i].\text{Im};$

end

else

begin

$Q[i, j].\text{Re} := G[i, j].\text{Re};$

```

        Q[ i , j ] . Im:=G[ i , j ] . Im;
    end;
end;
for i:=1 to 3 do
    for j:=1 to 3 do
        begin
            if j=2 then
                if i=1 then
                    begin
                        P[ i , j ] . Re:=H. Re;
                        P[ i , j ] . Im:=H. Im;
                    end
                else
                    begin
                        P[ i , j ] . Re:=0;
                        P[ i , j ] . Im:=0;
                    end
                else
                    begin
                        P[ i , j ] . Re:=Q[ i , j ] . Re;
                        P[ i , j ] . Im:=Q[ i , j ] . Im;
                    end;
                end;
            end;
        Det (P, DetP );
        Det (Q, DetQ );
        s:=sqr ( DetQ . Re)+sqr ( DetQ . Im );
        if s=0 then s:=Nul;
        T:=4*sqr ( a2 )*( sqr ( DetP . Re)+sqr ( DetP . Im ))/((1+sqr ( k*Y2))*s );
        fY1point:=T;
    end;

function fy2point (k:Real):Real;

```

```

var
H, V1, V2, V3, V4: Complex;
G, Q, P: Dmas;
Q1, Q2, Q3, Q4, P1: Cmas;
C: mas;
i, j: byte;
signz1, signz2: integer;
T, s, z1, z2, AA1, AA2, BB1, BB2, A3, A4, B3, B4: Extended;
DetP, DetQ, DetP1, DetQ1, DetQ3, DetQ2, DetQ4: Complex;
begin
G[1, 1].Re:=((cos(pi*(F-k*r))/sin(pi*(F-k*r)))-
(cos(pi*(F+k*r))/sin(pi*(F+k*r))))/(2*k);
G[2, 2].Re:=G[1, 1].Re;
G[3, 3].Re:=G[1, 1].Re;
G[4, 4].Re:=G[1, 1].Re;
G[1, 1].Im:=0;
G[2, 2].Im:=0;
G[3, 3].Im:=0;
G[4, 4].Im:=0;

z1:=fi2-fi02;
z2:=fi01-fi02;
signz1:=sign(z1);
signz2:=sign(z2);

G[1, 2].Re:=(cos((fi2-fi1)*(F-k*r))*(cos(pi*(F-k*r))/
sin(pi*(F-k*r)))+sin((fi2-fi1)*(F-k*r))-
cos((fi2-fi1)*(F+k*r))*(cos(pi*(F+k*r))/
sin(pi*(F+k*r)))-sin((fi2-fi1)*(F+k*r)))/(2*k);
G[1, 2].Im:=(sin((fi2-fi1)*(F-k*r))*(cos(pi*(F-k*r))/
sin(pi*(F-k*r)))-cos((fi2-fi1)*(F-k*r))-
sin((fi2-fi1)*(F+k*r))*(cos(pi*(F+k*r))/

```

$$\begin{aligned} & \sin(\pi * (F + k * r)) + \cos((fi2 - fi1) * (F + k * r)) / (2 * k); \\ G[2, 1].Re &:= G[1, 2].Re; \\ G[2, 1].Im &:= -G[1, 2].Im; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G[1, 3].Re &:= (\cos((fi01 - fi1) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) + \sin((fi01 - fi1) * (F - k * r)) - \\ & \cos((fi01 - fi1) * (F + k * r)) * (\cos(\pi * (F + k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F + k * r))) - \sin((fi01 - fi1) * (F + k * r))) / (2 * k); \\ G[1, 3].Im &:= (\sin((fi01 - fi1) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) - \cos((fi01 - fi1) * (F - k * r)) - \\ & \sin((fi01 - fi1) * (F + k * r)) * (\cos(\pi * (F + k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F + k * r))) + \cos((fi01 - fi1) * (F + k * r))) / (2 * k); \\ G[3, 1].Re &:= G[1, 3].Re; \\ G[3, 1].Im &:= -G[1, 3].Im; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G[1, 4].Re &:= (\cos((fi02 - fi1) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) + \sin((fi02 - fi1) * (F - k * r)) - \\ & \cos((fi02 - fi1) * (F + k * r)) * (\cos(\pi * (F + k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F + k * r))) - \sin((fi02 - fi1) * (F + k * r))) / (2 * k); \\ G[1, 4].Im &:= (\sin((fi02 - fi1) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) - \cos((fi02 - fi1) * (F - k * r)) - \\ & \sin((fi02 - fi1) * (F + k * r)) * (\cos(\pi * (F + k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F + k * r))) + \cos((fi02 - fi1) * (F + k * r))) / (2 * k); \\ G[4, 1].Re &:= G[1, 4].Re; \\ G[4, 1].Im &:= -G[1, 4].Im; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G[2, 3].Re &:= (\cos((fi01 - fi2) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) + \sin((fi01 - fi2) * (F - k * r)) - \\ & \cos((fi01 - fi2) * (F + k * r)) * (\cos(\pi * (F + k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F + k * r))) - \sin((fi01 - fi2) * (F + k * r))) / (2 * k); \\ G[2, 3].Im &:= (\sin((fi01 - fi2) * (F - k * r)) * (\cos(\pi * (F - k * r)) / \\ & \sin(\pi * (F - k * r))) - \cos((fi01 - fi2) * (F - k * r)) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sin((fi01-fi2)*(F+k*r))*\cos(pi*(F+k*r))/ \\ & \sin(pi*(F+k*r))+\cos((fi01-fi2)*(F+k*r))/(2*k); \\ G[3,2].Re:=G[2,3].Re; \\ G[3,2].Im:=-G[2,3].Im; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} AA1:=&(\cos((fi02-fi2)*(F-k*r))*\cos(pi*(F-k*r))- \\ & \text{signz1}*\sin((fi02-fi2)*(F-k*r))*\sin(pi*(F-k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F-k*r))); \\ BB1:=&(\cos((fi02-fi2)*(F+k*r))*\cos(pi*(F+k*r))- \\ & \text{signz1}*\sin((fi02-fi2)*(F+k*r))*\sin(pi*(F+k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F+k*r))); \\ G[2,4].Re:=&AA1-BB1; \\ AA2:=&(\sin((fi02-fi2)*(F-k*r))*\cos(pi*(F-k*r))+ \\ & \text{signz1}*\cos((fi02-fi2)*(F-k*r))*\sin(pi*(F-k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F-k*r))); \\ BB2:=&(\sin((fi02-fi2)*(F+k*r))*\cos(pi*(F+k*r))+ \\ & \text{signz1}*\cos((fi02-fi2)*(F+k*r))*\sin(pi*(F+k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F+k*r))); \\ G[2,4].Im:=&AA2-BB2; \\ G[4,2].Re:=&G[2,4].Re; \\ G[4,2].Im:=&-G[2,4].Im; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A3:=&(\cos((fi02-fi01)*(F-k*r))*\cos(pi*(F-k*r))- \\ & \text{signz2}*\sin((fi02-fi01)*(F-k*r))*\sin(pi*(F-k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F-k*r))); \\ B3:=&(\cos((fi02-fi01)*(F+k*r))*\cos(pi*(F+k*r))- \\ & \text{signz2}*\sin((fi02-fi01)*(F+k*r))*\sin(pi*(F+k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F+k*r))); \\ G[3,4].Re:=&A3-B3; \\ A4:=&(\sin((fi02-fi01)*(F-k*r))*\cos(pi*(F-k*r))+ \\ & \text{signz2}*\cos((fi02-fi01)*(F-k*r))*\sin(pi*(F-k*r)))/ \\ & (2*k*\sin(pi*(F-k*r))); \end{aligned}$$


```

B4:=( sin (( fi02-fi01 )*(F+k*r))*cos ( pi *(F+k*r))+
signz2*cos (( fi02-fi01 )*(F+k*r))*sin ( pi *(F+k*r)))/
(2*k*sin ( pi *(F+k*r)));
G[3,4].Im:=A4-B4;
G[4,3].Re:=G[3,4].Re;
G[4,3].Im:=-G[3,4].Im;

H.Re:=2*a1*sqr(k)*Y1/(1+sqr(k*Y1));
H.Im:=-2*a1*k/(1+sqr(k*Y1));
C[1].Re:=2*(b1-((sqr(k*a1)*Y1)/(1+sqr(k*Y1))));
C[1].Im:=2*k*sqr(a1)/(1+sqr(k*Y1));
C[2].Re:=2*(b2-((sqr(k*a2)*Y2)/(1+sqr(k*Y2))));
C[2].Im:=2*k*sqr(a2)/(1+sqr(k*Y2));
C[3].Re:=2*ksi1;
C[3].Im:=0;
C[4].Re:=2*ksi2;
C[4].Im:=0;
for i:=1 to 3 do
  for j:=1 to 3 do
    begin
      if i=j then
        begin
          Q1[i,j].Re:=G[i+1,j+1].Re-C[i+1].Re;
          Q1[i,j].Im:=G[i+1,j+1].Im-C[i+1].Im;
        end
      else
        begin
          Q1[i,j].Re:=G[i+1,j+1].Re;
          Q1[i,j].Im:=G[i+1,j+1].Im;
        end;
      end;
    end;
  end;

```

```

for i:=1 to 3 do
  for j:=1 to 3 do
    begin
      if (i=j) and (i>1) and (j>1) then
        begin
          Q2[i , j] . Re:=G[i+1,j+1].Re-C[i+1].Re;
          Q2[i , j] . Im:=G[i+1,j+1].Im-C[i+1].Im;
        end
      else
        begin
          if j>1 then
            begin
              Q2[i , j] . Re:=G[i+1,j+1].Re;
              Q2[i , j] . Im:=G[i+1,j+1].Im;
            end
          else
            begin
              Q2[i , j] . Re:=G[i+1,j] . Re;
              Q2[i , j] . Im:=G[i+1,j] . Im;
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;

for i:=1 to 3 do
  for j:=1 to 3 do
    begin
      if j>2 then
        begin
          if i=j then
            begin
              Q3[i , j] . Re:=G[i+1,j+1].Re-C[i+1].Re;
              Q3[i , j] . Im:=G[i+1,j+1].Im-C[i+1].Im;
            end
          end
        end
      end
    end
  end
end

```

```

        end
    else
        begin
            Q3[ i , j ]. Re:=G[ i +1, j +1]. Re;
            Q3[ i , j ]. Im:=G[ i +1, j +1]. Im;
        end;
    end
else
    begin
        if ( i=1) and ( j=2) then
            begin
                Q3[ i , j ]. Re:=G[ i +1, j ]. Re-C[ i +1]. Re;
                Q3[ i , j ]. Im:=G[ i +1, j ]. Im-C[ i +1]. Im;
            end
        else
            begin
                Q3[ i , j ]. Re:=G[ i +1, j ]. Re;
                Q3[ i , j ]. Im:=G[ i +1, j ]. Im;
            end;
        end;
    end;
end;

for i:=1 to 3 do
    for j:=1 to 3 do
        begin
            if i+1=j then
                begin
                    Q4[ i , j ]. Re:=G[ i +1, j ]. Re-C[ i +1]. Re;
                    Q4[ i , j ]. Im:=G[ i +1, j ]. Im-C[ i +1]. Im;
                end
            else
                begin

```

```

    Q4[ i , j ] . Re:=G[ i +1, j ] . Re;
    Q4[ i , j ] . Im:=G[ i +1, j ] . Im;
  end;
end;
Det ( Q1 , DetQ1 );
Det ( Q2 , DetQ2 );
Det ( Q3 , DetQ3 );
Det ( Q4 , DetQ4 );
V1 . Re:=(G[ 1 , 1 ] . Re-C[ 1 ] . Re)*DetQ1 . Re-
(G[ 1 , 1 ] . Im-C[ 1 ] . Im)*DetQ1 . Im;
V1 . Im:=(G[ 1 , 1 ] . Im-C[ 1 ] . Im)*DetQ1 . Re+
(G[ 1 , 1 ] . Re-C[ 1 ] . Re)*DetQ1 . Im;
V2 . Re:=G[ 1 , 2 ] . Re*DetQ2 . Re-G[ 1 , 2 ] . Im*DetQ2 . Im;
V2 . Im:=G[ 1 , 2 ] . Im*DetQ2 . Re+G[ 1 , 2 ] . Re*DetQ2 . Im;
V3 . Re:=G[ 1 , 3 ] . Re*DetQ3 . Re-G[ 1 , 3 ] . Im*DetQ3 . Im;
V3 . Im:=G[ 1 , 3 ] . Im*DetQ3 . Re+G[ 1 , 3 ] . Re*DetQ3 . Im;
V4 . Re:=G[ 1 , 4 ] . Re*DetQ4 . Re-G[ 1 , 4 ] . Im*DetQ4 . Im;
V4 . Im:=G[ 1 , 4 ] . Im*DetQ4 . Re+G[ 1 , 4 ] . Re*DetQ4 . Im;
DetQ . Re:=V1 . Re-V2 . Re+V3 . Re-V4 . Re;
DetQ . Im:=V1 . Im-V2 . Im+V3 . Im-V4 . Im;
DetP . Re:=-H . Re*DetQ2 . Re+H . Im*DetQ2 . Im;
DetP . Im:=-H . Im*DetQ2 . Re-H . Re*DetQ2 . Im;
s:=sqr ( DetQ . Re)+sqr ( DetQ . Im );
if s=0 then s:=Nul;
T:=4*sqr ( a2 )*( sqr ( DetP . Re)+sqr ( DetP . Im ))/((1+sqr ( k*Y2 ))*s );
fY2point:=T;
end;

procedure MakeFile;
begin
  assign ( tf , name );
  rewrite ( tf );

```

```

x:=Xmin;
while x<=Xmax do
  begin
    y:=fy(x);
    write(tf,x:10:5,'␣',y:12:6);
    writeln(tf);
    writeln(x/xmax);
    x:=x+dx;
  end;
close(tf);
end;

```

Begin

```

clrscr;
N:=100;
Nul:=0.00001;
r:=1;
l:=1*r;
a1:=0.1*l;
a2:=0.1*l;
b1:=0.1*l;
b2:=0.1*l;
Y1:=0.1*l;
Y2:=0.1*l;
ksi:=0.1*l;
ksi1:=0.2*l;
ksi2:=0.2*l;
F:=0.0;
Xmin:=0.01; Xmax:=6.1;
dx:=(Xmax-Xmin)/10000;
fi1:=0*pi/4;
fi2:=pi;

```

```

fi0:=1.1*pi;
fi01:=1.15*pi;
fi02:=0.8*pi;
name:='fig7b.txt';
MakeFile;
writeln( 'Program_complete' );
{repeat until KeyPressed;}

(*****)

InitGraphics(Xmin,Xmax,0,1);
draw(name,13);
repeat until keypressed;
closeGraph;
End.

```

Приложение В

Листинг программы для численного расчета электронного спектра цепочки колец

Программный комплекс, написанный на языке TurboDelphi, состоит из основной части **unit gr** и вспомогательных модулей **unit values**, **unit unit1**, **unit ring**, **unit spectrum**, **unit calgebra** и **unit global**. В **unit gr** подключаются все используемые модули, создается интерфейс программы, определяются основные параметры через переменные вспомогательных модулей. В диссертации приводится та часть блока основной программы, которая непосредственно используется для расчетов. В модуле **unit values** задаются все фундаментальные константы, начальные значения всех переменных и параметры системы. В **unit unit1** производится запись в файл значений квазиимпульса и соответствующих им значений его функции — левой части уравнения соответствующего дисперсионного соотношения, нули которого необходимо найти. В зависимости от типа соединения колец выбирается соответствующее дисперсионное соотношение. Уравнение (3.11) соответствует соединению колец посредством проводников, (3.16) соответствует кольцам, имеющим между собой непосредственный контакт в диаметрально противоположных точках, (3.24) — зигзагообразное соединение колец без проводников. Построение зависимости левой части дисперсионного уравнения от квазиимпульса дает возможность оценить по графику этой зависимости число корней уравнения при определенном значении q , расстояние между ними, что нужно для правильного выбора первого значения q (FirstQ), с которого начинается поиск корней уравнения (нулей уравнения, являющегося левой частью соответствующего дисперсионного соотношения) в модуле **unit spectrum**. В **unit ring** задаются значения элементов Q -матрицы. Вычисляются определитель и след этой мат-

рицы. Построение спектра и запись в файл значений кондактанса от энергии электрона идет в модуле **unit spectrum**. Во вспомогательном модуле **unit calgebra** определена комплексная алгебра, а в **unit global** дополнительные типы для переменных и значения некоторых констант.

Часть блока основной программы

В этой часть основного блока определяются основные параметры модели через переменные вспомогательных модулей и устанавливается тип соединения колец путем выбора FuncType (FSimple соответствует соединению колец в диаметрально противоположных точках без соединительных проводников, FZigZag — зигзагообразному соединению колец без проводников, FWire — соединение колец с проводниками).

```
unit gr;
```

```
(***** Data settings block *****)
```

```
procedure TForm1.InitData;
```

```
begin
```

```
  FuncType:=FSimple;
```

```
  FirstQ:=VFirstQ;
```

```
  rho:=Vrho;
```

```
  a:=Va;
```

```
  eta:=Veta;
```

```
  phi_left1:=Vphi_left1;
```

```
  phi_right:=Vphi_right;
```

```
  phi_left2:=Vphi_left2;
```

```
  P:=VP;
```

```
  Qmin:=VQmin;
```

```
  Qmax:=VQmax;
```

```
  CurrentBand:=1;
```

```
  Spectr.QNumber:=VQNumber;
```



```

Steps:=Vsteps;
Precision:=VPrecision;
BaseName:=VBaseName;
DataToForm;
end;

```

Вспомогательный модуль values

В этом модуле водятся значения всех констант и начальные значения всех переменных.

```
unit values;
```

```
interface
```

```
const
```

```
//fundamental constants
```

```
hbar=1.055e-27;           //Plank constant
```

```
emass=9.11e-28;          //free electron mass
```

```
eCharge=4.803e-10;       //electron charge SGSE
```

```
SleCharge=1.601e-19;     //electron charge in SI
```

```
lightspeed=2.998e10;     //light speed in vacuum
```

```
kb=1.38e-16;             //Boltzman constant erg/K
```

```
VPrecision=1e-7;
```

```
VFirstQ=1.61;
```

```
Vrho=1;
```

```
Va=1;
```

```
Veta=0;
```

```
Vphi_left1=pi;
```

```
Vphi_left2=pi;
```

```
Vphi_right=0;
```

```

VP=1;
VQmin=0;
VQmax=2*pi;
VXmin=0;      // Minimal value of X on the graph
VXmax=24.9;    // Maximal value of X on the graph
VYmin=-0.1;    // Minimal value of Y on the graph(not used)
VYmax=1.1;    // Maximal value of Y on the graph(not used)
MaxPointNumber=64000;
Mmin=-30;
Mmax=30;
VPointsNumber=30000;    // Number of points on the graph
MaxBandNumber=20;
VSteps=50;
MaxQNumber=1000;
VQNumber=200;
VBaseName='ncr08';      // File name without extension

```

implementation

end.

Вспомогательный модуль Unit1

В этом модуле производится запись в файл двух столбцов. Первый столбец: значения переменной (квазиимпульса) через определенный интервал, второй столбец: соответствующее ему значение функции — квадрата действительного значения левой части дисперсионного уравнения, нули которого необходимо найти. В зависимости от типа соединения колец выбирается соответствующее дисперсионное соотношение (или (3.11), или (3.16), или (3.24)).

```
unit Unit1;
```

```
interface
```

uses

Classes , SysUtils , global , values , calgebra , spectrum ;

type

TMyThread = class (TThread)

public

private

{ Private declarations }

DataFileName : tFileName ;

df : **text** ;

protected

procedure Execute ; override ;

end ;

implementation

procedure TMyThread.Execute ;

var E : tReal ;

begin

percent := 0 ;

BegTime := Now ;

Status := StFileCreating ;

DataFileName := BaseName + ' . txt ' ;

System.Assign (df , DataFileName) ;

ReWrite (df) ;

dx := (Xmax - Xmin) / PointsNumber ;

x := Xmin ;

while (x < Xmax) **and not** stop **do**

begin

E := x ;

Write (df , x) ;

```

y:=SQR( RealLHS(E) );
Write( df , ' _ ' ,y );
Writeln( df );
x:=x+dx;
percent:=round (( x-xMin ) / ( XMax-XMin ) * 100 );
end;
system . close ( df );  Status:=StComplete;
end;

end.

```

Вспомогательный модуль ring

Задаются значения элементов Q -матрицы. Вычисляются определитель и след этой матрицы.

```

unit ring;

interface

uses global , calgebra , values;

type tQMatrix=array [ 1..2 , 1..2 ] of tComplex;

var
    rho , eta , a , phi_left1 , phi_right , phi_left2 , P : tReal;
    QM,GM: tQMatrix;

function fQ(E, phi1 , phi2 : tReal) : tComplex;
function DetQM: tComplex;
function TrQM: tComplex;
function DetGM: tComplex;
function TrGM: tComplex;

```

```

procedure GetQMAtrix(E, phi1 , phi2 : tReal );
procedure GetGMAtrix(E, phi1 , phi2 : tReal );

```

implementation

```

function fQ(E, phi1 , phi2 : tReal ) : tComplex;
var
    ex1 , ex2 , s1 , s2 , fr1 : tComplex;
    pmpi , k , denom1 , denom2 , Em : tReal;
    m : integer ;
begin
    If E > 0 then
        begin
            if phi1 >= phi2 then pmpi := pi else pmpi := -pi ;
            k := sqrt (E);
            ex1 := CExpPhi ( ( phi2 - phi1 + pmpi ) * ( eta - k * rho ) );
            denom1 := k * sin ( pi * ( eta - k * rho ) );
            if denom1 = 0 then denom1 := Infinitesimal ;
            ex2 := CExpPhi ( ( phi2 - phi1 + pmpi ) * ( eta + k * rho ) );
            denom2 := k * sin ( pi * ( eta + k * rho ) );
            if denom2 = 0 then denom2 := Infinitesimal ;
            s1 := RCProduct ( 1 / denom1 , ex1 );
            s2 := RCProduct ( 1 / denom2 , ex2 );
            result := CSubstract ( s1 , s2 );
        end
    else
        begin
            s1 := Cnul ;
            for m := Mmin to Mmax do
                begin
                    Em := ( m + eta ) * ( m + eta ) ;
                    ex1 := CExpPhi ( ( phi2 - phi1 ) * m );

```

```

denom1:=Em-E;
if denom1=0 then denom1:=infinitesimal;
fr1:=RCProduct(1/denom1,ex1);
s1:=Csum(s1,fr1);
end;
result:=RCProduct(1/(2),s1);
end;
end;

function DetQM:tComplex;
begin
  result:=CSubtract(CProduct(QM[1,1],QM[2,2]),
                    CProduct(QM[1,2],QM[2,1]));
end;

function TrQM:tComplex;
begin
  result:=Csum(QM[1,1],QM[2,2]);
end;

function DetGM:tComplex;
begin
  result:=CSubtract(CProduct(GM[1,1],GM[2,2]),
                    CProduct(GM[1,2],GM[2,1]));
end;

function TrGM:tComplex;
begin
  result:=Csum(GM[1,1],GM[2,2]);
end;

procedure GetQMArix(E,phi1,phi2:tReal);

```

begin

QM[1,1]:=fQ(E, phi1, phi1);

QM[1,2]:=fQ(E, phi1, phi2);

QM[2,1]:=fQ(E, phi2, phi1);

QM[2,2]:=QM[1,1];

end;

procedure GetGMAtrix(E, phi1, phi2:tReal);

begin

GM[1,1]:=fQ(E, phi1, phi1);

GM[1,2]:=fQ(E, phi1, phi2);

GM[2,1]:=fQ(E, phi2, phi1);

GM[2,2]:=GM[1,1];

end;

end.

Вспомогательный модуль **spectrum**

В этом модуле идет построение спектра следующим образом. Сначала в процедуре **procedure FindSpectr** квазиимпульсу присваивается начальное значение, отличное от 0, π и 2π , определяемое исходя из графика зависимости левой части дисперсионного уравнения от энергии, построенного с помощью модуля **unit unit1**, таким образом, что при этом значении q нули (корни соответствующего дисперсионного соотношения) не располагаются близко друг к другу, так как это может привести к ошибке в поиске корней и к неверному присвоению корню номера минизоны. Затем с помощью процедуры **procedure GetFirstPoint** методом прогонки сканируется отрезок $[x_{min}, x_{max}]$ — нужный интервал энергии на наличие минимумов (являющихся одновременно нулями второго порядка) функции **function RealLHS**(E:tReal): tComplex, которая в зависимости от заданного типа соединения колец, выбирает и обчисляет значение нужного дисперсионного

уравнения при заданных параметрах. Берутся последовательно три точки с шагом dx : $x_1 := x_{min}$, $x_2 := x_1 + dx$, $x_3 := x_2 + dx$. Сравниваются значения функций в этих точках: $y_1(x_1)$, $y_2(x_2)$, $y_3(x_3)$. Если значение в середине этого отрезка $y_2(x_2)$ меньше значений на концах — $y_1(x_1)$ и $y_3(x_3)$, то с помощью функции **function FindMin**(XLeft,XRight,Precision: tReal):tReal ищется положение минимума с заданной точностью на отрезке $[x_1, x_3]$ путем деления отрезка на три равные части. Если значение функции в этом минимуме меньше заданной точности нуля, то объявляется первая минizona, а этот корень записывается как первая точка этой минизоны. Если этот минимум не является нулем, то он объявляется локальным минимумом. Далее отрезок смещается на dx , то есть $x_1 := x_2$, $x_2 := x_3$, $x_3 := x_3 + dx$, ищется минимум, если он является нулем, то объявляется вторая минizona, а этот корень записывается как первая точка этой минизоны. Затем процесс повторяется до тех пор, пока $x_3 \leq x_{max}$ и число зон не превышает заданного значения. Таким образом находятся первые точки заданного количества минизон. Видно, что этот процесс оптимизирован, так как позволяет увеличивать точность лишь там, где это необходимо, что ускоряет процесс счета программы. Далее в процедуре **procedure FindSpectr** максимальному числу зон присваивается найденное число зон и запускается процедура **procedure ImproveSpectr**. Эта процедура сначала записывает первые найденные корни в массив спектра, значения которого определяются двумя индексами: номер зоны и порядковый номер значения квазиимпульса. Затем прогоняет процедуру поиска корней **procedure FinalScanForMin**(nb,nq,PrevNQ:integer) при разных значениях квазиимпульса, изменяющихся с определенным шагом сначала от порядкового номера первого значения квазиимпульса плюс один до максимального, затем от порядкового номера первого значения квазиимпульса до нуля, охватывая таким образом весь интервал значений квазиимпульса. Процедура **procedure FinalScanForMin**(nb,nq,PrevNQ:integer) ищет нули так, что при заданном значении q она проверяет сначала наличие нуля вблизи нуля первой зоны, найденного при предыдущем значении q . Найдя и присвоив ему соответствующие индексы при записи в спектр, начинает искать корень уравнения уже для второй зоны опять же вблизи нуля для второй зоны,

найденного при предыдущем значении q , и так далее. Делается это для того, чтобы минизоны между собой не перепутались, например, чтобы нуль из второй зоны не получил индекс третьей зоны, иначе невозможно правильное построение графика спектра.

Процедура **procedure SaveSpectr** записывает спектр в файл с нужным названием. Первый столбец: значения квазиимпульса. Последующие столбцы последовательно соответствуют энергиям минизон.

Процедура **procedure SaveConductance** записывает в файл с нужным названием значения энергии и соответствующие значения кондактанса в два столбца. Как отмечено в диссертации (**Глава 3**) кондактанс равен единице, если энергия электрона расположена внутри минизоны, и нулю, если в запрещенной зоне. Для того, чтобы построить график зависимости кондактанса от энергии сначала находятся максимальные и минимальные значения x для каждой минизоны. Эта процедура выполняется в **procedure GetBandExtremums** стандартным способом. Затем в процедуре **procedure SaveConductance** при прогонке x от минимального значения до максимального проверяется лежит ли текущее значение x внутри какой-либо зоны с помощью функции **function InBand(x:tReal):boolean**. Если да, то кондактансу присваивается значение, равное единице. В противном случае, равное нулю.

После выполнения всех процедур этого модуля получим текстовые файлы со спектром и кондактансом.

```
unit spectrum;
```

```
interface
```

```
uses global , calgebra , values , ring;
```

```
type tEnb=array [1..MaxBandNumber] of tReal;
```

```
    tEnq=array [1..MaxBandNumber, 0..MaxQNumber] of tReal;
```

```
    tSpectr=record
```

```
        Enq:tEnq;
```

```

        QNumber, Largest : integer ;
        BandNumber : array [ 0 .. MaxQNumber ] of integer ;
    end ;

var  precision , dE, q , Qmin, Qmax, FirstQ : tReal ;
      CurrentBand , Steps , MaxSpBandNumber , FirstNq ,
      BandsFound : integer ;
      Spectr : tSpectr ;
      SFile , F : text ;
      SFileName : string ;
      FuncType , NumberOfErrors , LocalMin : integer ;
      MaxEnb , MinEnb , FirstPoint , SpecialPoint : tEnb ;
      BadQ , FirstPointFound : Boolean ;

function  LHS(E: tReal ) : tComplex ;
function  RealLHS(E: tReal ) : tReal ;
function  FindMin( XLeft , XRight , Precision : tReal ) : tReal ;
procedure  GetFirstPoint ;
procedure  FinalScanForMin( nb , nq , PrevNQ : integer ) ;
procedure  FindSpectr ;
procedure  ImproveSpectr ;
procedure  SaveSpectr ;
procedure  GetBandExtremums ;
procedure  SaveConductance ;

const  fSimple=0;
        fZigZag=1;
        fWire=2;

implementation

function  LHS_Simple(E: tReal ) : tComplex ;

```

```
// for rings without connecting wires
```

```
var
```

```
  z:tComplex;
```

```
begin
```

```
  GetQMatrix(E, phi_left1 , phi_right );
```

```
  //GetGMatrix(E, phi_left2 , phi_right );
```

```
  z:=CSum( CProduct (QM[1 ,2] , CExpPhi(-q)) ,
```

```
  CProduct (QM[2 ,1] , CExpPhi(q)) );
```

```
  result:=Csum(DetQM, RCProduct(P, Csubtract(z, TrQM)) );
```

```
end;
```

```
function LHS_ZigZag(E:tReal):tComplex;
```

```
// for zig-zag rings without connecting wires
```

```
var
```

```
  z, z1, z2:tComplex;
```

```
begin
```

```
  GetQMatrix(E, phi_left1 , phi_right );
```

```
  GetGMatrix(E, phi_left2 , phi_right );
```

```
  z:=RCProduct(-sqr(P), CSum( CProduct( CProduct(QM[1 ,2] ,
GM[1 ,2]) , CExpPhi(-q)) , CProduct( CProduct(QM[2 ,1] , GM[2 ,1]) ,
CExpPhi(q)) ));
```

```
  z1:=CProduct( Csubtract(RCSum(sqr(P), DetQM) ,
RCProduct(P, TrQM)) ,
```

```
  Csubtract(RCSum(sqr(P), DetGM) , RCProduct(P, TrGM)) );
```

```
  z2:=RCSum(sqr(sqr(P)) , CMinus(RCProduct(2*sqr(p) ,
CProduct(RCSum(-P, QM[1 ,1]) , RCSum(-P, QM[1 ,1]))));
```

```
  result:=Csum(z, Csum(z1, z2));
```

```
end;
```

```
function LHS_Wire(E:tReal):tComplex;
```

```
// for rings with connecting wires
```

```
var
```

```

    z , z1 , z2 : tComplex ;
    k , kp : tReal ;
begin
  GetQMatrix(E, phi_left1 , phi_right ) ;
  if E<0 then
    begin
      kp:=sqrt(-E) ;
      z:=RCProduct(P,Csum(CProduct(QM[1,2],CExpPhi(-q)),
        CProduct(QM[2,1],CExpPhi(q)))) ;
      z1:=RCProduct(exp(-kp*a)+exp(kp*a),
        Csubtract(DetQM,RCProduct(P,QM[2,2])));
      z2:=RCProduct((exp(-kp*a)-exp(kp*a))/2,
        RCSum(sqr(P),Csubtract(RCProduct(1+sqr(P*kp*rho/2),
        DetQM),RCProduct(P,TrQM)))));
      result:=Csubtract(z2,RCProduct(P*kp*rho/2,Csum(z,z1)));
    end
  else
    begin
      if E=0
      then k:=0
      else k:=sqrt(E);
      z:=RCProduct(P,Csum(CProduct(QM[1,2],CExpPhi(-q)),
        CProduct(QM[2,1],CExpPhi(q)))) ;
      z1:=RCProduct(2*cos(k*a),
        Csubtract(DetQM,RCProduct(P,QM[2,2])));
      z2:=RCProduct(sin(k*a),RCSum(sqr(P),
        Csubtract(RCProduct(1-sqr(P*k*rho/2),DetQM),
        RCProduct(P,TrQM)))));
      result:=Csum(z2,RCProduct(P*k*rho/2,Csum(z,z1)));
    end;
  end;
end;

```

```

function LHS(E:tReal):tComplex;
begin
  case functype of
    fSimple: // for rings without connected conductors
              result:=LHS_Simple(E);
    fZigZag: // for zig-zag rings without connected conductors
              result:=LHS_ZigZag(E);
    fWire: // for rings with connected wires
            result:=LHS_Wire(E);
  end;
end;

function RealLHS(E:tReal):tReal;
var
  z:tComplex;
begin
  Z:=LHS(E);
  result:=Z.Re/(1+abs(z.re));
end;

procedure FindSpectr;
begin
  Q:=FirstQ;
  GetFirstPoint;
  MaxSpBandNumber:=BandsFound;
  ImproveSpectr;
end;

procedure GetBandExtremums;
var
  nb,nq:integer;
begin

```

```

with Spectr do
  begin
    for nb:=1 to MaxSpBandNumber do
      begin
        MaxEnb[nb]:=Enq[nb,0];
        MinEnb[nb]:=Enq[nb,0];
        for nq:=1 to QNumber do
          begin
            if MaxEnb[nb]<Enq[nb,nq] then MaxEnb[nb]:=Enq[nb,nq];
            if MinEnb[nb]>Enq[nb,nq] then MinEnb[nb]:=Enq[nb,nq];
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;

```

```

procedure GetFirstPoint;
var x1,x2,x3,y1,y2,y3,xm,ym: real;
    nb: integer;
begin
  LocalMin:=0;
  dx:=(Xmax-Xmin)/PointsNumber;
  x1:=Xmin;
  y1:=Sqr(RealLHS(x1));
  x2:=x1+dx; y2:=Sqr(RealLHS(x2));
  x3:=x2+dx;
  nb:=0; while (x3<Xmax) and (nb<MaxBandNumber) do
    begin
      y3:=Sqr(RealLHS(x3));
      If (y2<y1) and (y2<y3) then
        begin
          xm:=FindMin(x1,x3,precision);
          ym:=Sqr(RealLHS(xm));

```

```

    if ym<0.01 then
    begin
        nb:=nb+1;
        FirstPoint[nb]:=xm;
    end
    else LocalMin:=LocalMin+1;
end;
x1:=x2;
x2:=x3;
x3:=x3+dx;
y1:=y2;
y2:=y3;
end;
BandsFound:=nb;
end;

function FindMin(XLeft,XRight,Precision:tReal):tReal;
var
    xl,xr,xlc,xrc,ylc,ycr:tReal;
begin
    xl:=XLeft;
    xr:=XRight;
    while abs(xr-xl)>precision do
    begin
        xlc:=(2*xl+xr)/3;
        xrc:=(xl+2*xr)/3;
        ylc:=SQR(RealLHS(xlc));
        yrc:=SQR(RealLHS(xrc));
        if ylc<yrc then xr:=xrc
            else xl:=xlc;
        end;
    end;
    result:=(xl+xr)/2;
end;

```

```

end;

procedure ImproveSpectr;
var
  nb, nq: integer;
begin
  NumberOfErrors:=0;
with Spectr do
    begin
      FirstNq:=round( QNumber*( FirstQ-Qmin ) / ( Qmax-Qmin ) );
      for nb:=1 to MaxSpBandNumber do
        Spectr.Enq[nb, FirstNq]:=FirstPoint[nb];
        for nq:=FirstNq+1 to QNumber do
          begin
            FirstPointFound:=False;
            q:=Qmin+(Qmax-Qmin)*nq/QNumber;
            BandNumber[nq]:=MaxSpBandNumber;
            for nb:=1 to MaxSpBandNumber do
              begin
                FinalScanForMin(nb, nq, nq-1)
              end;
            end;
          end;
        for nq:=FirstNq downto 0 do
          begin
            FirstPointFound:=False;
            q:=Qmin+(Qmax-Qmin)*nq/QNumber;
            BandNumber[nq]:=MaxSpBandNumber;
            for nb:=1 to MaxSpBandNumber do
              begin
                FinalScanForMin(nb, nq, nq+1);
              end;
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;

```



```

    end;
end;

procedure FinalScanForMin (nb , nq , PrevNQ : integer ) ;
var
    dx , x1 , x2 , xc , yc , y1 , y2 , LYmin , RYMin , xm , ym : real ;
    RMinFound , LMinFound , ZeroFound : boolean ;
begin
    LMinFound := False ;
    RMinFound := False ;
    ZeroFound := False ;
    xc := Spectr . Enq [ nb , PrevNQ ] ;
    yc := SQR ( RealLHS ( xc ) ) ;
    dx := precision ;
    LYmin := SQR ( RealLHS ( xc - dx ) ) ;
    RYmin := SQR ( RealLHS ( xc + dx ) ) ;
while
    ( dx < 0.5 ) and not ZeroFound do
    begin
        if not LMinFound then
        begin
            x1 := xc - dx ;
            y1 := SQR ( RealLHS ( x1 ) ) ;
            if ( LYmin < yc ) and ( LYmin < y1 ) then
            begin
                LMinFound := True ;
                xm := FindMin ( x1 , xc , precision ) ;
                ym := Sqr ( RealLHS ( xm ) ) ;
                if ym < 0.01 then
                begin
                    ZeroFound := True ;
                    Spectr . Enq [ nb , nq ] := xm ;

```

```

        end
    end;
    if y1<Lymin then Lymin:=y1;
end;
if not RMinFound then
begin
    x2:=xc+dx;
    y2:=SQR( RealLHS( x2 ) );
    if (RYmin<yc) and (RYmin<y2) then
        begin
            RMinFound:=True;
            xm:=FindMin( xc , x2 , precision );
            ym:=Sqr( RealLHS( xm ) );
            if ym<0.01 then
                begin
                    ZeroFound:=True;
                    Spectr.Enq[nb,nq]:=xm;
                end
            end;
            if y2<RYmin then RYmin:=y2;
        end;
        dx:=dx*1.4;
    end;
If not ZeroFound then
begin
    if not FirstPointFound then
        begin;
            GetFirstPoint;
            FirstPointFound:=True;
        end;
    If BandsFound=MaxSpBandNumber then
        begin

```

```

    Spectr.Enq[nb,nq]:=FirstPoint[nb];
  end
else
  begin
    Inc(NumberOfErrors);
    Spectr.Enq[nb,nq]:=Spectr.Enq[nb,PrevNq];
  end;
end;
end;
end;

procedure SaveSpectr;
var
  nb,nq:integer;
begin
  SFileName:=Basename+'-sp.txt';
  System.Assign(SFile,SFileName);
  Rewrite(SFile);
  with Spectr do
    begin
      for nq:=0 to QNumber do
        begin
          q:=Qmin+(Qmax-Qmin)*nq/QNumber;
          write(Sfile , q);
          for nb:=1 to BandNumber[nq] do
            begin
              write(SFile , '┐',Enq[nb,nq]);
            end;
            Writeln(SFile);
          end;
        end;
      end;
    end;
  System.Close(SFile);
end;

```

```

function InBand(x:tReal):boolean;
var
  nb:integer;
begin
  InBand:=false;
  for nb:=1 to MaxSpBandNumber do
    if (x>MinEnb[nb]+precision) and (x<MaxEnb[nb]-precision)
      then InBand:=true;
  end;

```

```

procedure SaveConductance;
var
  T:integer;
  x:tReal;
begin
  GetBandExtremums;
  SFileName:=Basename+'-cn.txt';
  System.Assign(F,SFileName);
  Rewrite(F);
  x:=Xmin;
  dx:=(Xmax-Xmin)/PointsNumber;
  while (x<=Xmax) do
    begin
      write(f, x);
      if InBand(x) then T:=1
        else T:=0;
      write(F, '␣',T);
      Writeln(F);
      x:=x+dx;
    end;
  System.Close(F);

```

end;

end.

Вспомогательный модуль calgebra

В этом модуле прописаны все алгебраические действия с комплексными числами. Функция **function CModul**(C:tComplex):tReal и **function CModul2**(C:tComplex):tReal считает модуль и квадрат модуля комплексного числа соответственно. Процедура **function CArg** (z:tComplex):tReal определяет аргумент комплексного числа, а **procedure CMinus** (z1:tComplex; var z:tComplex) заменяет знак у действительной и мнимой части числа z1 на противоположный. Процедуры **procedure CSum**(z1,z2:tComplex; var z:tComplex), **procedure CSubtract** (z1,z2:tComplex; var z:tComplex), **procedure CProduct** (z1,z2: tComplex; var z:tComplex) и **procedure CFraction**(num,denom:tComplex; var z:tComplex) считают сумму, разность, произведение и отношение комплексных чисел соответственно. Процедура **procedure CInvert**(z1:tComplex; var z:tComplex) определяет число, обратное данному комплексному числу z1. Процедура **procedure CExpPhi**(phi:tReal; var ez:tComplex) ставит в соответствие углу φ комплексное число с действительной частью, равной $\cos \varphi$, и мнимой, равной $\sin \varphi$. Функции **function RCSum**(r:tReal; z:tComplex): tComplex, **function RCProduct** (r:tReal; z:tComplex):tComplex и **function RCFrac**(r:tReal;z:tComplex):tComplex прописывают соответственно сумму, произведение и отношение действительного и комплексного чисел.

$\{N+\}$

unit calgebra;

interface

uses global;

const CNul:tComplex=(Re:0;Im:0);

CI:tComplex=(Re:0;Im:1);

CR:tComplex=(Re:1;Im:0);

function CModul2(C:tComplex):tReal;

function CModul(C:tComplex):tReal;

function CArg(z:tComplex):tReal;

function CMinus(z1:tComplex):tComplex;

function CSum(z1,z2:tComplex):tComplex;

function CSubstract(z1,z2:tComplex):tComplex;

function CProduct(z1,z2:tComplex):tComplex;

function CFraction(num,denom:tComplex):tComplex;

function CInvert(z1:tComplex):tComplex;

function CExp(z:tComplex):tComplex;

function CExpPhi(phi:tReal):tComplex;

function RCProduct(r:tReal;z:tComplex):tComplex;

function RCSum(r:tReal;z:tComplex):tComplex;

function RCFrac(r:tReal;z:tComplex):tComplex;

implementation

function RCFrac(r:tReal;z:tComplex):tComplex;

begin

RCFrac:=RCProduct(r,CInvert(z));

end;

function RCProduct(r:tReal;z:tComplex):tComplex;

begin

RCProduct.Re:=z.Re*r;

RCProduct.Im:=z.Im*r;

end;

```

function RCSum(r:tReal; z:tComplex):tComplex;
begin
  RCSum.Re:=z.Re+r;
  RCSum.Im:=z.Im;
end;

```

```

function CArg(z:tComplex):tReal; {0<Arg<2*Pi}
begin
  If Z.Re=0 then
    if Z.Im<0 then CArg:=-pi/2
      else CArg:=pi/2
    else
      begin
        if (Z.Im>=0)and(Z.Re>0) then Carg:=ArcTan(Z.Im/Z.Re);
        if (Z.Im<0)and(Z.Re>0) then Carg:=2*pi+ArcTan(Z.Im/Z.Re);
        if (Z.Im>=0)and(Z.Re<0) then Carg:=Pi+ArcTan(Z.Im/Z.Re);
        if (Z.Im<0)and(Z.Re<0) then Carg:=Pi+ArcTan(Z.Im/Z.Re);
      end;
    end;
end;

```

```

function CMinus(z1:tComplex):tComplex;
begin
  CMinus.Re:=-z1.Re;
  CMinus.Im:=-z1.Im;
end;

```

```

function CSum(z1,z2:tComplex):tComplex;
begin
  CSum.Re:=z1.Re+z2.Re;
  CSum.Im:=z1.Im+z2.Im;
end;

```

```

function CSubtract ( z1 , z2 : tComplex ) : tComplex ;
begin
  CSubtract . Re := z1 . Re - z2 . Re ;
  CSubtract . Im := z1 . Im - z2 . Im ;
end ;

```

```

function CExp ( z : tComplex ) : tComplex ;
begin
  CExp . Re := exp ( z . Re ) * cos ( z . Im ) ;
  CExp . Im := exp ( z . Re ) * sin ( z . Im ) ;
end ;

```

```

function CExpPhi ( phi : tReal ) : tComplex ;
begin
  CExpPhi . Re := cos ( phi ) ;
  CExpPhi . Im := sin ( phi ) ;
end ;

```

```

function CInvert ( z1 : tComplex ) : tComplex ;
var
  d : tReal ;
begin
  d := Cmodul2 ( z1 ) ;
  CInvert . Re := z1 . Re / d ;
  CInvert . Im := - z1 . Im / d ;
end ;

```

```

function CProduct ( z1 , z2 : tComplex ) : tComplex ;
begin
  CProduct . Re := z1 . Re * z2 . Re - z1 . Im * z2 . Im ;
  CProduct . Im := z1 . Im * z2 . Re + z1 . Re * z2 . Im ;
end ;

```



```

function CFraction (num, denom : tComplex) : tComplex ;
var
  d : tReal ;
begin
  d := Cmodul2 (Denom) ;
  if d = 0 then
    begin
      d := Infinitesimal ;
    end ;
  CFraction.Re := (Num.Re * Denom.Re + Num.Im * Denom.Im) / d ;
  CFraction.Im := (Num.Im * Denom.Re - Num.Re * Denom.Im) / d ;
end ;

```

```

function CModul2 (C : tComplex) : tReal ;
begin
  CModul2 := Sqr (C.Re) + Sqr (C.Im) ;
end ;

```

```

function CModul (C : tComplex) : tReal ;
begin
  CModul := Sqrt (CModul2 (C)) ;
end ;

```

End.

Вспомогательный модуль global

```

unit global ;

```

```

interface

```

```

const MaxPointsNumber=64000;

type tReal=double;
      tComplex=record
          Re,Im:tReal
      end;
      tRealPoint=record
          x,y:tReal
      end;
      tBuffer=array [1..MaxPointsNumber] of tRealPoint;

var Xmin,Xmax,Ymin,Ymax,x,y,dx:tReal;
     percent,Status:Integer;
     PointsNumber,FunctionType:Integer;
     stop:boolean;
     BaseName:String;
     CurrentTime,BegTime,EndTime:tDateTime;

const fCurrent=1;
       fConductance=2;
       StIdle=0;
       StFileCreating=1;
       StComplete=2;
       Infinitesimal:tReal=1e-10;

implementation
end.

```

Приложение С

Листинг программы для численного исследования зависимости кондактанса квантового цилиндра от параметров системы при наличии одного или двух рассеивателей

Программа, написанная на языке Pascal, предназначена для построения графика зависимости G от определенной переменной и состоит из блока основной программы **program FileMaker** и вспомогательных модулей **graphics**, **graph**, **cp_unit**, **calgebra**. В основном блоке подключаются модули, задаются значения постоянных величин, идет запись в файл значений переменной и ее функции (кондактанса). Во вспомогательном модуле **cp_unit** идет непосредственный подсчет значения кондактанса квантового цилиндра при определенном числе примесей и заданном значении переменной. Модуль **specfunc** создан для определения основных алгебраических операций с комплексными числами. Модули **graphics** и **graph** те же, что и в **Приложении А**. Листинг модуля **calgebra** представлен в **Приложении В**.

Принцип действия программы следующий. Для каждого значения переменной, изменяющегося с заданным шагом, при фиксации остальных параметров системы, численно рассчитывается значение G путем суммирования $T_{mm'}$ по всем разрешенным для заданного μ значениям m и m' . Путем выбора соответствующей функции **Gpoint_new**, **G2point** или **G0**, значение которой присваивается функции fy в блоке основной программы, строятся графики зависимостей G от параметров системы, как для цилиндра с одной примесью, так и для цилиндра с двумя примесями и без примесей вообще.

Блок основной программы

```

program FileMaker ;

uses crt , graphics , graph , cp_unit , specfunc ;

var name : string ;
    tf : text ;
    y , x , dX , Xmin , Xmax , dy : tReal ;
    i : tInteger ;
    Q : tComplex ;
    E0 , Eeffect , mass , r0 , me , hbar , meV , delta : tReal ;

function fy ( x : tReal ) : tReal ;
begin
    fY := G2point ( x , delta ) ;
end ;

procedure MakeFile ;
begin
    assign ( tf , name ) ;
    rewrite ( tf ) ;
    x := Xmin ;
    while x <= Xmax do
        begin
            y := fy ( x ) ;
            write ( tf , x , ' _ ' , y ) ;
            writeln ( tf ) ;
            x := x + dx ;
            if frac ( ( x - xMin ) / ( XMax - XMin ) * 10 ) < dx * 10 / ( XMax - XMin ) then
                showtime1 ( round ( ( x - xMin ) / ( XMax - XMin ) * 100 ) ) ;
            end ;
        end ;

```

```

    close ( tf );
end;

```

Begin

```

    clrscr ;
    delta:=1-3;
    hbar:=1.055e-34;
    me:=9.109e-31;
    r0:=30*1e-9;
    meV:=1.602e-22;
    E0:=sqr ( hbar ) / ( 2*me*sqr ( r0 ) ) / meV;
    eta:=0.5;
    R:=1;
    l:=5*r;
    z:=0.5*r;
    phi:=1*pi;
    Xmin:=0.25; Xmax:=10;
    dx:=(Xmax-Xmin)/1e3;
    name:='2toch1.txt';
    MakeFile;
    (*****)
    InitGraphics (Xmin,Xmax,0,10);
    for i:=0 to 0 do
        begin
            name:='2toch'+fstr ( i ) + '.txt';
            draw_all ( name, 1+i );
        end;
    repeat until keypressed;
    closeGraph;
End.

```

Вспомогательный модуль `cp_unit`

В этом модуле идет непосредственный подсчет значения кондактанса квантового цилиндра при наличии одной или двух примесей при заданных параметрах. Функция **function Gpoint_new** (mu,delta:tReal):tReal считает значение кондактанса при наличии одной примеси, используя выражение (4.24). Функция **function G2point** (mu,delta:tReal):tReal считает значение кондактанса при наличии двух примесей, как сумму коэффициентов прохождения (они в свою очередь считаются с помощью функции **Function T2point** (m1,m2:tInteger; mu,delta: tReal):tReal по формуле $T_{mm'} = k_m/k_{m'}|t_{mm'}|^2$, используя выражения (4.29) и (4.28)). Эти функции в свою очередь используют процедуры **procedure GetQ**(E,delta:tReal) и **procedure GetDet**(A:tCMatrix; var D:tComplex), считающие значения элементов Q - матрицы Крейна и ее определителя соответственно. Функция **function G0**(mu:tReal):tReal дает значение кондактанса в отсутствии примесей на цилиндре.

```
{ $N+ } unit cp_unit ;

interface
uses specfunc ;

const   Modes=30;

type tMatrix=array [ 1..2 , 1..2 ] of tReal ;
      tCMatrix=array [ 1..2 , 1..2 ] of tComplex ;
      tMassiv=array [ -Modes .. Modes ] of tReal ;

const  Nul:tReal=1e-6;
        Big: Longint=100;

var
  r , l , eps , z , phi , eta : tReal ;
  Q:tCmatrix ;
```

```

Function T2point(m1,m2:tInteger;mu,delta:tReal):tReal;
function Gpoint_new(mu,delta:tReal):tReal;
function G2point(mu,delta:tReal):tReal;
function G0(mu:tReal):tReal;
procedure GetQ(E,delta:tReal);
procedure GetDet(A:tCMatrix; var D:tComplex);
procedure InvMatrix(A:tCMatrix; var B:tCMatrix);

```

implementation

```

procedure GetDet(A:tCMatrix; var D:tComplex);
begin
  D.Re:=A[1,1].Re*A[2,2].Re-A[1,2].Re*A[2,1].Re
  -A[1,1].Im*A[2,2].Im+A[1,2].Im*A[2,1].Im;
  D.Im:=A[1,1].Re*A[2,2].Im-A[1,2].Re*A[2,1].Im
  +A[1,1].Im*A[2,2].Re-A[1,2].Im*A[2,1].Re;
end;

```

```

procedure InvMatrix(A:tCMatrix; var B:tCMatrix);
var
  d,md:tComplex;
begin
  GetDet(A,D);
  MD.Re:=-D.Re;
  MD.Im:=-D.Im;
  Fraction(A[2,2],D,B[1,1]);
  Fraction(A[1,2],MD,B[1,2]);
  Fraction(A[1,1],D,B[2,2]);
  Fraction(A[2,1],MD,B[2,1]);
end;

```

```

Function T2point (m1,m2: tInteger ;mu, delta : tReal ) : tReal ; {Tm1m2}
var
    km1 , km2 : tReal ;
    a1 , a2 , ex1 , ex2 , alpha1 , alpha2 ,
    n1 , n2 , num , d1 , denom , t : tComplex ;
    detQ : tComplex ;
begin
    eps := 1 / sqrt ( r ) ;
    km1 := sqrt ( mu / eps - sqrt ( m1 + eta ) ) / R ;      if km1 = 0 then km1 := Nul ;
    km2 := sqrt ( mu / eps - sqrt ( m2 + eta ) ) / R ;      if km2 = 0 then km2 := Nul ;
    GetQ ( mu , delta ) ;
    CExpPhi ( 0 , ex1 ) ;
    CExpPhi ( km2 * z + m2 * phi , ex2 ) ;

    Product ( Q [ 2 , 2 ] , ex1 , a1 ) ;
    Product ( Q [ 1 , 2 ] , ex2 , a2 ) ;
    Subtract ( a1 , a2 , alpha1 ) ;

    Product ( Q [ 1 , 1 ] , ex2 , a1 ) ;
    Product ( Q [ 2 , 1 ] , ex1 , a2 ) ;
    Subtract ( a1 , a2 , alpha2 ) ;

    CExpPhi ( 0 , ex1 ) ;
    CExpPhi ( -km1 * z - m1 * phi , ex2 ) ;
    Product ( alpha1 , ex1 , n1 ) ;
    Product ( alpha2 , ex2 , n2 ) ;
    Sum ( n1 , n2 , num ) ;

    GetDet ( Q , detQ ) ;
    d1 . Re := 0 ; d1 . Im := -km1 * r ;
    Product ( d1 , DetQ , Denom ) ;
    Fraction ( Num , Denom , t ) ;

```



```

Cminus(t, t);
if m1=m2 then t.Re:=1+t.Re;
T2point:=km1/km2*modul2(t);
end;

```

```

procedure GetQ(E, delta:tReal);
var k:tReal;
begin
  k:=sqrt(E);
  GetQjjH(k, delta);
  GetQijH(k, delta);
end;

```

```

procedure GetQjjH(k, delta:treal);
var Qjj:tComplex;
    m,MPlus,MMinus,N:longint;
    km,kappam:tReal;
begin
  N:=Big;
  MPlus:=trunc(k*r-eta);
  If (k*r-eta)<0 then MPlus:=Mplus-1;
  MMinus:=trunc(k*r+eta);
  Qjj.Re:=2*ln(r/l);  Qjj.Im:=0;
  For m:=-MMinus to MPlus do
    begin
      km:=Sqrt(sqr(k)-sqr((m+eta)/r));
      if km=0 then km:=Nul;
      Qjj.Im:=Qjj.Im+1/(km*r);
    end;
  For m:=MPlus+1 to MPlus+N do
    begin
      KappaM:=Sqrt(sqr((m+eta)/r)-sqr(k));

```

```

    if KappaM=0 then   KappaM:=Nul;
    Qjj.Re:=Qjj.Re+1/(KappaM*r);
end;
For m:=MMinus+1 to MMinus+N do
    begin
        KappaM:=Sqrt (sqr ((m-eta)/r)-sqr (k));
        if KappaM=0 then   KappaM:=Nul;
        Qjj.Re:=Qjj.Re+1/(KappaM*r);
    end;
For m:=1 to MMinus+N do
    begin
        Qjj.Re:=Qjj.Re-2/m;
    end;
    Q[1,1]:=Qjj;
    Q[2,2]:=Qjj;
end;

```

```

procedure GetQijH(k,delta:treal);
var m,MPlus,MMinus,N:longint;
    km,KappaM:tReal;
    Q12,Q21:tComplex;
begin
    If z=0 then N:=10*Big
        else N:=trunc(10*r/z)+10;
    MPlus:=trunc(k*r-eta);
    If (k*r-eta)<0 then MPlus:=Mplus-1;
    MMinus:=trunc(k*r+eta);
    Q12.Re:=0;    Q12.Im:=0;
    Q21.Re:=0;    Q21.Im:=0;
    For m=-Mminus to MPlus do
        begin
            km:=Sqrt (sqr (k)-sqr ((m+eta)/r));

```

```

if km=0 then km:=Nul;
Q12.Re:=Q12.Re-Sin(km*z+m*phi)/(km*r);
Q12.Im:=Q12.Im+Cos(km*z+m*phi)/(km*r);
Q21.Re:=Q21.Re-Sin(km*z-m*phi)/(km*r);
Q21.Im:=Q21.Im+Cos(km*z-m*phi)/(km*r);
end;

For m:=MPlus+1 to MPlus+N do
  begin
    KappaM:=Sqrt(sqr((m+eta)/r)-sqr(k));
    if KappaM=0 then KappaM:=Nul;
    Q12.Re:=Q12.Re+exp(-KappaM*z)*cos(m*phi)/(KappaM*r);
    Q12.Im:=Q12.Im+exp(-KappaM*z)*sin(m*phi)/(KappaM*r);
    Q21.Re:=Q21.Re+exp(-KappaM*z)*cos(m*phi)/(KappaM*r);
    Q21.Im:=Q21.Im-exp(-KappaM*z)*sin(m*phi)/(KappaM*r);
  end;

For m:=MMinus+1 to MMinus+N do
  begin
    KappaM:=Sqrt(sqr((m-eta)/r)-sqr(k));
    if KappaM=0 then KappaM:=Nul;
    Q12.Re:=Q12.Re+exp(-KappaM*z)*cos(m*phi)/(KappaM*r);
    Q12.Im:=Q12.Im-exp(-KappaM*z)*sin(m*phi)/(KappaM*r);
    Q21.Re:=Q21.Re+exp(-KappaM*z)*cos(m*phi)/(KappaM*r);
    Q21.Im:=Q21.Im+exp(-KappaM*z)*sin(m*phi)/(KappaM*r);
  end;
Q[2,1]:=Q12;
Q[1,2]:=Q21;
end;

function G2point(mu,delta:tReal):tReal;
var
  m,mmax,mmin,n:tInteger;
  summ:tReal;

```

begin

summ:=0;

eps:=1/sqr(r);

mmax:=trunc(sqrt(mu)*r-eta);

If (sqrt(mu)*r-eta)<0 **then** Mmax:=Mmax-1;

mmin:=-trunc(sqrt(mu)*r+eta);

for m:=mmin **to** mmax **do**

begin

for n:=mmin **to** mmax **do**

begin

summ:=summ+T2point(m,n,mu,delta);

end;

end;

G2point:=Summ;

end;

function Gpoint_new(mu,delta:tReal):tReal;

var

m,mmax,mmin,n:tInteger;

summ:tReal;

begin

summ:=0;

eps:=1/sqr(r);

mmax:=trunc(sqrt(mu)*r-eta);

If (sqrt(mu)*r-eta)<0 **then** Mmax:=Mmax-1;

mmin:=-trunc(sqrt(mu)*r+eta);

GetQ(mu,delta);

Gpoint_new:=Mmax-Mmin+1-sqr(Q[1,1].Im)/modul2(Q[1,1]);

end;

function G0(mu:tReal):tReal;

var

```

m,mmax,mmin,n:tInteger;
begin
  eps:=1/sqr(r);
  mmax:=trunc(sqrt(mu/eps)-eta);
  If (sqrt(mu/eps)-eta)<0 then Mmax:=Mmax-1;
  mmin:=-trunc(sqrt(mu/eps)+eta);
  G0:=1+mmax-mmin;
end;

End.

```

Список литературы

- [1] von Klitzing K. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance / K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper // Phys. Rev. Lett. — 1980. — V. 45. — P. 494.
- [2] Tsui D. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit / D. C. Tsui, H. L. Stormer, A. C. Gossard // Phys. Rev. Lett. — 1982. — V. 48. — P. 1559.
- [3] Aharonov Y. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory / Y. Aharonov, D. Bohm // Phys. Rev. — 1959. — V. 115. — P. 485.
- [4] van Wees B. J. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas / B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenaker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon // Phys. Rev. Lett. — 1988. — V. 60. — P. 848.
- [5] Ким Ч. С. Туннелирование через дискретные уровни в континууме / Ч. С. Ким, А. М. Сатанин // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 115. — С. 211.
- [6] Göres J. Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor / J. Göres, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer, M. A. Kastner, H. Shtrikman, D. Mahalu, U. Meirav // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 62. — P. 2188.
- [7] Zacharia I. G. Temperature dependence of Fano line shapes in a weakly coupled single-electron transistor / I. G. Zacharia, D. Goldhaber-Gordon, G. Granger, M. A. Kastner, Y. B. Khavin, H. Shtrikman, D. Mahalu, U. Meirav // Phys. Rev. B. — 2001. — V. 64. — P. 155311.

- [8] Гейлер В. А. Квантовое кольцо в магнитном поле и выпрямитель, основанный на квантовой интерференции / В. А. Гейлер, И. Ю. Попов // Письма в ЖЭТФ. — 2001. — Т. 27. — С. 7.
- [9] Pavlov B. S. Possible construction of a quantum multiplexer / B. S. Pavlov, I. Y. Popov, V. A. Geyler, O. S. Pershenko // Europhys. Lett. — 2000. — V. 52. — P. 196.
- [10] Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems / S. Datta. — Cambridge, United Kingdom: Cambridge Univ. Press, 1995. — 377 pp.
- [11] Davidovich M. A. Bohm-Aharonov and Kondo effects on tunneling currents in a mesoscopic ring / M. A. Davidovich, E. V. Anda, J. R. Iglesias, G. Chiappe // Phys. Rev. B. — 1997. — V. 55.
- [12] Ким Ч. С. Коллапс резонансов в квазиодномерных квантовых каналах / Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, Ю. С. Джо, Р. М. Косби // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 116. — С. 263.
- [13] Ким Ч. С. Интерференция квантовых состояний в электронных волноводах с примесями / Ч. С. Ким, О. Н. Рознова, А. М. Сатанин, В. Б. Штенберг // ЖЭТФ. — 2002. — Т. 121. — С. 1157.
- [14] Гейлер В. А. Баллистический транспорт в наноструктурах: явнорешаемые модели / В. А. Гейлер, И. Ю. Попов // ТМФ. — 1996. — Т. 107. — С. 12.
- [15] Geiler V. A. Localization in a periodic system of the Aharonov-Bohm rings / V. A. Geiler, A. V. Popov // Reps. Math. Phys. — 1998. — V. 42. — P. 347.
- [16] Exner P. A single-mode quantum transport in serial-structure geometric scattering / P. Exner, M. Tater, D. Vaněk // J. Math. Phys. — 2001. — V. 42. — P. 4050.
- [17] Гейлер В. А. Резонансное туннелирование через двумерную наноструктуру с присоединенными проводниками / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев // ЖЭТФ. — 2003. — Т. 124. — С. 851.

- [18] Brüning J. Scattering on compact manifolds with infinitely thin horns / J. Brüning, V. A. Geyler // J. Math. Phys. — 2003. — V. 44. — P. 371.
- [19] Демков Ю. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике / Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. — Ленинград: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975. — 240 с.
- [20] Базь А. И. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А. И. Базь, . Б. Зельдович, А. М. Переломов. — М.: Наука, 1966. — 340 с.
- [21] Альбеверио С. Решаемые задачи в квантовой механике / С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хёгг-Крон, Х. Холден. — М.: Мир, 1991. — 568 с.
- [22] Bachtold A. Scanned probe microscopy of electronic transport in carbon nanotubes / A. Bachtold, M. S. Fuhrer, S. Plyasunov, M. Forero, E. H. Anderson, A. Zettl, P. L. McEuen // Phys. Rev. Lett. — 2000. — V. 84. — P. 6082.
- [23] Yaish Y. Electrical nanoprobng of semiconducting carbon nanotubes using an atomic force microscope / Y. Yaish, J. Y. Park, S. Rosenblatt, V. Sazonova, M. Brink, P. L. McEuen // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 92. — P. 046401.
- [24] Гейлер В. А. Баллистический кондактанс квазиодномерной микроструктуры в параллельном магнитном поле / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис // ЖЭТФ. — 1997. — Т. 111. — С. 2215.
- [25] Галкин Н. Г. Квазibalлистический электронный транспорт в трехмерном микросужении / Н. Г. Галкин, В. А. Гейлер, В. А. Маргулис // ЖЭТФ. — 2000. — Т. 118. — С. 223.
- [26] Левинсон М. Б. Impurity-assisted tunneling in a quantum ballistic microconstriction / М. Б. Левинсон, М. И. Любин, Е. В. Сухоруков // Письма в ЖЭТФ. — 1991. — Т. 54. — С. 405.

- [27] Levinson Y. B. Short-range impurity in a saddle-point potential: Conductance of a microjunction / Y. B. Levinson, M. B. Lubin, E. V. Sukhorukov // Phys. Rev. B. — 1992. — V. 45. — P. 11936.
- [28] Гейлер В. А. Рассеяние на одиночной примеси в квантовом канале, помещенном в магнитном поле / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, И. И. Чучаев // Письма в ЖЭТФ. — 1993. — Т. 58. — С. 668.
- [29] Sukhorukov E. V. Short-range impurity in a magnetic field: The conductance of a narrow channel / E. V. Sukhorukov, M. I. Lubin, C. Kunze, Y. Levinson // Phys. Rev. B. — 1994. — V. 49. — P. 17191.
- [30] Гейлер В. Плотность состояний для углеродных нанотрубок в однородном магнитном поле / В. Гейлер, О. Костров, В. Маргулис // ФТТ. — 2002. — Т. 44. — С. 449.
- [31] Гейлер В. А. Проводимость квантовой проволоки в продольном магнитном поле / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, Л. И. Филина // ЖЭТФ. — 1998. — Т. 113. — С. 1376.
- [32] Гейлер В. А. Плотность состояний $2D$ электронов при наличии магнитного поля и случайного потенциала в точно решаемых моделях / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис // ЖЭТФ. — 1989. — Т. 95. — С. 1134.
- [33] Гейлер В. А. Спектр магнитно-блоховского электрона в двумерной решетке / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис // ТМФ. — 1984. — Т. 58. — С. 461.
- [34] Гейлер В. А. Структура спектра магнитно-блоховского электрона в двумерной решетке / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис // ТМФ. — 1984. — Т. 61. — С. 140.
- [35] Гейлер В. А. Рассеяние носителей заряда на точечных дефектах в полупроводниковых структурах / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, И. И. Чучаев // ФТТ. — 1995. — Т. 37. — С. 837.
- [36] Гейлер В. А. Проводимость электронного газа в квантующем магнитном поле при рассеянии на точечных дефектах / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, И. В. Чудаев, И. И. Чучаев // ЖЭТФ. — 1995. — Т. 107. — С. 187.

- [37] Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нрелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Наука, 1989. — 768 с.
- [38] Laundauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction / R. Laundauer // IBM J. Res. Dev. — 1957. — V. 1. — P. 223.
- [39] Шарвин Ю. В. Об одном возможном методе исследования поверхности Ферми / Ю. В. Шарвин // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 48. — С. 984.
- [40] Laundauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices / R. Laundauer // Philos. Mag. — 1970. — V. 21. — P. 863.
- [41] Laundauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction / R. Laundauer // IBM J. Res. Dev. — 1988. — V. 32. — P. 306.
- [42] Büttiker M. Four-terminal phase-coherent conductance / M. Büttiker // Phys. Rev. Lett. — 1986. — V. 57. — P. 1761.
- [43] Kokoreva M. A. Electron transport in a two-terminal Aharonov–Bohm ring with impurities / M. A. Kokoreva, V. A. Margulis, M. A. Pyataev // Physica E. — 2011. — V. 43. — P. 1610.
- [44] Кокорева М. А. Электронный транспорт в квантовом цилиндре при наличии точечных примесей на его поверхности / М. А. Кокорева, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев // “Известия ВУЗов. Поволжский регион. Физико-математические науки”. — 2011. — № 1(17). — С. 87.
- [45] Кокорева М. А. Резонансы Фано в электронном транспорте через квантовое кольцо с примесями / М. А. Кокорева, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев // “Известия ВУЗов. Поволжский регион. Физико-математические науки”. — 2010. — № 1(13). — С. 109–125.
- [46] Pyataev M. A. Spectral and transport properties of periodic arrays of nanorings and nanospheres / M. A. Pyataev, M. A. Kokoreva // Advanced

Research Workshop “Fundamentals of Electronic Nanosystem” NanoPeter-2010. Abstracts. — St. Petersburg, Russia: June 26-July 2, 2010. — P. 68.

- [47] Маргулис В. А. Электронный транспорт в наноцилиндре при наличии точечных примесей / В. А. Маргулис, М. А. Пятаев, М. А. Кокорева // VIII Российская конференция по физике полупроводников. Тезисы докладов. — Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН: 30 сентября–5 октября 2007. — С. 274.
- [48] Маргулис В. А. Электронный транспорт в двутерминальном кольце Ааронова–Бома с точечной примесью / В. А. Маргулис, М. А. Кокорева // Девятая всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто– и наноэлектронике: Тезисы докладов. — Санкт-Петербург: 3–7 декабря 2007. — С. 48.
- [49] Пятаев М. А. Электронный транспорт в наноцилиндре с точечными возмущениями / М. А. Пятаев, М. А. Кокорева // Восьмая всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто– и наноэлектронике: Тезисы докладов. — Санкт-Петербург: 4–8 декабря 2006. — С. 73.
- [50] Пятаев М. А. Кондактанс наноцилиндра с точечным возмущением / М. А. Пятаев, М. А. Кокорева // “Материалы нано–, микро–, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение”: Сборник трудов 5-й всероссийской молодежной научной школы. — Саранск: 3–6 октября 2006. — С. 27.
- [51] Пятаев М. А. Электронный транспорт в наноцилиндре с несколькими короткодействующими примесями / М. А. Пятаев, М. А. Кокорева // “Материалы нано–, микро–, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение”: Сборник трудов 6-й всероссийской молодежной научной школы. — Саранск: 2–5 октября 2007. — С. 36.
- [52] Кокорева М. А. Электронный транспорт в кольце Ааронова–Бома с несколькими примесями / М. А. Кокорева // “Материалы нано–, микро–

, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение”: Сборник трудов 7-й всероссийской молодежной научной школы. — Саранск: 7–10 октября 2008. — С. 34.

- [53] Кокорева М. А. Электронный транспорт в цепочке квантовых колец / М. А. Кокорева, М. А. Пятаев // “Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение”: Сборник трудов 8-й всероссийской молодежной научной школы. — Саранск: 5–8 октября 2009. — С. 25.
- [54] Пятаев М. А. Влияние точечного возмущения на электронный транспорт в нанотрубке / М. А. Пятаев, М. А. Кокорева // Материалы XI научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов мордовского государственного университета имени Н.П. Огарева. — Саранск: 17–21 апреля 2006. — С. 141–142.
- [55] Демиховский В. Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В. Я. Демиховский, Г. А. Вугалтер. — М.: Логос, 2000. — 248 с.
- [56] Wharam D. A. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance / D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, G. A. C. Jones // J.Phys.C. — 1988. — V. 21. — P. L209.
- [57] Fertig H. A. Transmission coefficient of an electron through a saddle-point potential in a magnetic field / H. A. Fertig, B. I. Halperin // Phys. Rev. B. — 1987. — V. 36. — P. 7969.
- [58] Büttiker M. Quantized transmission of a saddle-point constriction / M. Büttiker // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 41. — P. 7906.
- [59] Bogachek E. N. Magnetocohesion of nanowires / E. N. Bogachek, A. G. Scherbakov, U. Landman // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 62. — P. 10467.

- [60] Kim C. S. Tunneling through a quantum channel with impurities: An exactly solvable model / C. S. Kim, A. M. Satanin // *Physica E.* — 1999. — V. 4. — P. 211.
- [61] Ким Ч. С. Резонансы Фано и локализация электронов в гетеробарьерах / Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, В. Б. Штенберг // *ЖЭТФ.* — 2000. — Т. 118. — С. 413.
- [62] Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts / U. Fano // *Phys. Rev. B.* — 1961. — V. 104. — P. 1866.
- [63] Nöckel J. U. Resonances in quantum-dot transport / J. U. Nöckel // *Phys. Rev. B.* — 1992. — V. 46. — P. 15348.
- [64] Clerk A. A. Fano resonances as a probe of phase coherence in quantum dots / A. A. Clerk, X. Waintal, P. W. Brouwer // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — V. 86. — P. 4636.
- [65] Mailly D. Experimental observation of persistent currents in a *GaAs* — *AlGaAs* single loop / D. Mailly, C. Chapelier, A. Benoit // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — V. 70. — P. 2020.
- [66] Pedersen S. Observation of quantum asymmetry in an Aharonov-Bohm ring / S. Pedersen, A. E. Hansen, A. Kristensen, C. B. Sørensen, P. E. Lindelof // *Phys. Rev. B.* — 2000. — V. 61. — P. 5457.
- [67] Liu J. Correlations between Aharonov-Bohm effects and one-dimensional subband populations in *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* / J. Liu, W. X. Gao, K. Ismail, K. Y. Lee, J. M. Hong, S. Washburn // *Phys. Rev. B.* — 1993. — V. 48. — P. 15148.
- [68] Быков А. А. Транспортные свойства кольцевого *GaAs/AlGaAs* интерферометра в туннельном режиме / А. А. Быков, Д. Г. Бакшеев, Л. В. Литвин, и др. // *Письма в ЖЭТФ.* — 2000. — Т. 71. — С. 631.
- [69] Chandrasekhar V. Magnetic response of a single, isolated gold loop / V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen,

- W. J. Gallagher, A. Kleinsasser // Phys. Rev. Lett. — 1991. — V. 67. — P. 3578.
- [70] Liu J. Cyclotron trapping, mode spectroscopy, and mass enhancement in small $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ rings / J. Liu, K. Ismail, K. Y. Loe, J. M. Hong, S. Washburn // Phys. Rev. B. — 1993. — V. 47. — P. 13039.
- [71] Kobayashi K. Tuning of the Fano effect through a quantum dot in an Aharonov-Bohm interferometer / K. Kobayashi, H. Aikawa, S. Katsumoto, Y. Iye // Phys. Rev. Lett. — 2002. — V. 88. — P. 256806.
- [72] Kobayashi K. Fano resonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot / K. Kobayashi, H. Aikawa, A. Sano, S. Katsumoto, Y. Iye // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70. — P. 035319.
- [73] Yang J. Phase evolution in a Kondo-correlated system / J. Yang, M. Heiblum, D. Sprinzak, D. Mahalu, H. Shtrikman // Science. — 2000. — V. 290. — P. 779.
- [74] van der Wiel W. G. The Kondo effect in the unitary limit / W. G. van der Wiel, S. D. Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, L. P. Kouwenhoven // Science. — 2000. — V. 289. — P. 2105.
- [75] Быков А. А. Магнетотранспортные свойства кольцевого баллистического интерферометра на основе GaAs квантового колодца с высокой концентрацией двумерного электронного газа / А. А. Быков, А. К. Бакаров, Л. В. Литвин, А. И. Торопов // Письма в ЖЭТФ. — 2000. — Т. 72. — С. 300.
- [76] Yacoby A. Coherence and phase sensitive measurements in a quantum dot / A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu, H. Shtrikman // Phys. Rev. Lett. — 1995. — V. 74. — P. 4047.
- [77] Ryu C. Phase evolution of the transmission coefficient in an Aharonov-Bohm ring with Fano resonance / C. Ryu, S. Y. Cho // Phys. Rev. B. — 1998. — V. 58. — P. 3572.

- [78] Баграев Н. Т. Интерференция носителей тока в одномерных полупроводниковых кольцах / Н. Т. Баграев, А. Д. Буравлев, В. К. Иванов, и др. // ФТП. — 2000. — Т. 34. — С. 846.
- [79] Meir V. Magnetic-field and spin-orbit interaction in restricted geometries: Solvable models / V. Meir, O. Entin-Wolfman, Y. Gefen // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 42. — P. 8351.
- [80] Margulis V. A. Magnetic response of an electron gas in a quantum ring of non-zero width / V. A. Margulis, A. V. Shorokhov, M. P. Trushin // Physica E. — 2001. — V. 10. — P. 518.
- [81] Chakraborty T. Interacting-electron states and the persistent currents in a quantum ring / T. Chakraborty, P. Pietiläinen // Solid State Commun. — 1993. — V. 87. — P. 809.
- [82] Tan W.-C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots / W.-C. Tan, J. Inkson // Phys. Rev. B. — 1999. — V. 60. — P. 5626.
- [83] Chakraborty T. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring / T. Chakraborty, P. Pietiläinen // Phys. Rev. B. — 1994. — V. 50. — P. 8460.
- [84] Simonin J. Single-particle electronic spectra of quantum rings: A comparative study / J. Simonin, C. R. Proetto, Z. Barticevic, G. Fuster // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70. — P. 205305.
- [85] Kim N. Electronic structure of a magnetic quantum ring / N. Kim, G. Ihm, H.-S. Sim, K. J. Chang // Phys. Rev. B. — 1999. — V. 60. — P. 8767.
- [86] Feng J. S. Spin-orbital splitting in semiconductor quantum dots with a two-dimensional ring model / J. S. Feng, Z. Liu // Chin. Phys. Lett. — 2009. — V. 26. — P. 080305.
- [87] Avishai Y. Persistent currents and edge states in a magnetic field / Y. Avishai, Y. Hatsngai, M. Kohmoto // Phys. Rev. B. — 1993. — V. 47. — P. 9501.

- [88] Ткаченко О. А. Электростатический потенциал, энергетический спектр и резонансы Фано в кольцевом баллистическом интерферометре на основе гетеропереходе $AlGaAs/GaAs$ / О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, и др. // Письма в ЖЭТФ. — 2000. — Т. 71. — С. 366.
- [89] Pichugin K. N. Aharonov-Bohm oscillations of conductance in two-dimensional rings / K. N. Pichugin, A. F. Sadreev // Phys. Rev. B. — 1997. — V. 56. — P. 9662.
- [90] Gefen Y. Quantum oscillations and the Aharonov-Bohm effect for parallel resistors / Y. Gefen, Y. Imry, M. Y. Azbel // Phys. Rev. Lett. — 1984. — V. 52. — P. 129.
- [91] Büttiker M. Quantum oscillations in one-dimensional normal-metal rings / M. Büttiker, Y. Imry, M. Y. Azbel // Phys. Rev. A. — 1984. — V. 30. — P. 1982.
- [92] Xia J. B. Quantum waveguide theory for mesoscopic structures / J. B. Xia // Phys. Rev. B. — 1992. — V. 45. — P. 3593.
- [93] Гейлер В. А. Транспорт в двухтерминальном кольце Ааронова-Бома / В. А. Гейлер, В. В. Демидов, В. А. Маргулис // ЖТФ. — 2003. — Т. 73. — С. 1.
- [94] Брюнинг Й. Транспортные свойства двухарочных интерферометров Ааронова-Бома с центрами рассеяния / Й. Брюнинг, В. А. Гейлер, В. В. Демидов, Л. А. Чернозатонский // Russian Journal of Mathematical Physics. — 2007. — Т. 14. — С. 417.
- [95] Li J. Resonant transport properties of tight-binding mesoscopic rings / J. Li, Z. Q. Zhang, Y. Liu // Phys. Rev. B. — 1997. — V. 55. — P. 5337.
- [96] Voo K. K. Fano resonance in transport through a mesoscopic two-lead ring / K. K. Voo, C. S. Chu // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 72. — P. 165307.
- [97] Vargiamidis V. Fano resonance and persistent current in mesoscopic open rings: Influence of coupling and Aharonov-Bohm flux / V. Vargiamidis, H. M. Polatoglou // Phys. Rev. B. — 2006. — V. 74. — P. 235323.

- [98] D'Amato J. L. Half-integer and integer quantum-flux periods in the magnetoresistance of one-dimensional rings / J. L. D'Amato, H. M. Pastawski, J. F. Weisz // Phys. Rev. B. — 1989. — V. 39. — P. 3554.
- [99] Orellana P. A. Conductance and persistent current of a quantum ring coupled to a quantum wire under external fields / P. A. Orellana, M. L. L. de Guevara, M. Pacheco, A. Latge // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — P. 195321.
- [100] Jana S. Bohm-Aharonov ring with a side-coupled atomic cluster: Magnetotransport and the selective switching effect / S. Jana, A. Chakrabarti // Phys. Rev. B. — 2008. — V. 77. — P. 155310.
- [101] Nakanishi T. Theory of Fano effects in an Aharonov-Bohm ring with a quantum dot / T. Nakanishi, K. Terakura, T. Ando // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69. — P. 115307.
- [102] Chakraborty T. Persistent currents in a quantum ring: Effects of impurities and interactions / T. Chakraborty, P. Pietiläinen // Phys. Rev. B. — 1995. — V. 52. — P. 1932.
- [103] Павлов Б. С. Теория расширений и явно решаемые модели / Б. С. Павлов // УМН. — 1987. — Т. 42. — С. 99.
- [104] Kouwenhoven L. P. Transport through a finite one-dimensional crystal / L. P. Kouwenhoven, F. W. Hekking, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, C. E. Timmering, C. T. Foxon // Phys. Rev. Lett. — 1990. — V. 65. — P. 361.
- [105] Umbach C. P. Direct observation of ensemble averaging of the Aharonov-Bohm effect in normal-metal loops / C. P. Umbach, C. V. Haesendonck, R. B. Laibowitz, S. Washburn, R. A. Webb // Phys. Rev. Lett. — 1986. — V. 56. — P. 386.
- [106] Rabaud W. Persistent currents in mesoscopic connected rings / W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Etienne // Phys. Rev. Lett. — 2001. — V. 86. — P. 3124.

- [107] Ulloa S. E. Ballistic transport in a novel one-dimensional superlattice / S. E. Ulloa, E. C. no, G. Kirczenow // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 41. — P. 12350.
- [108] Park W. Analysis of coherent current flows in the multiply connected open Aharonov-Bohm rings / W. Park, J. Hong // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69. — P. 035319.
- [109] Yi J. Giant persistent currents in the open Aharonov-Bohm rings / J. Yi, J. H. Wei, J. Hong, S.-I. Lee // Phys. Rev. B. — 2001. — V. 65. — P. 033305.
- [110] Shin D. Momentum filtering by photon-assisted tunneling in a connected Aharonov-Bohm ring / D. Shin, J. Hong // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 72. — P. 113307.
- [111] Takai D. Quantum oscillation in multiply connected mesoscopic rings at finite temperature / D. Takai, K. Ohta // Phys. Rev. B. — 1994. — V. 50. — P. 2685.
- [112] Takai D. Quantum oscillation and the Aharonov-Bohm effect in a multiply connected normal-conductor loop / D. Takai, K. Ohta // Phys. Rev. B. — 1994. — V. 50. — P. 18250.
- [113] Deo P. S. Quantum waveguide transport in serial stub and loop structures / P. S. Deo, A. M. Jayannavar // Phys. Rev. B. — 1994. — V. 50. — P. 11629.
- [114] Gao Y. F. Effect of connected multi-ring impurity scattering on quantum transport / Y. F. Gao, Y. P. Zhang // Chin. Phys. Lett. — 2005. — V. 22. — P. 1045.
- [115] Xue H. B. Electronic transport through a periodic array of quantum-dot rings / H. B. Xue, H. Y. Zhang, Y. H. Nie, Z. J. Li, J. Q. Liang // Chin. Phys. B. — 2010. — V. 19. — P. 047303.
- [116] Brum J. A. Electronic properties of quantum-dot superlattices / J. A. Brum // Phys. Rev. B. — 1991. — V. 43. — P. 12082.

- [117] Stehr D. Resonant impurity bands in semiconductor superlattices / D. Stehr, C. Metzner, M. Helm, T. Roch, G. Strasser // Phys. Rev. Lett. — 2005. — V. 95. — P. 257401.
- [118] Chakrabarti A. Magnetotransport in a periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings / A. Chakrabarti, R. A. Römer, M. Schreiber // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — P. 195417.
- [119] Магари́лл Л. И. Баллистический транспорт и спин-орбитальное взаимодействие двумерных электронов на цилиндрической поверхности / Л. И. Магари́лл, Д. А. Романов, А. В. Чаплик // ЖЭТФ. — 1998. — Т. 113. — С. 1411.
- [120] Chaplik A. V. Ballistic transport and spin-orbit interaction of $2D$ electrons on cylindrical surface / A. V. Chaplik, L. I. Magarill, D. A. Romanov // Physica B. — 1998. — V. 249. — P. 377.
- [121] Prinz V. Y. Free-standing and overgrown *InGaAs/GaAs* nanotubes, nanohelices and their arrays / V. Y. Prinz, V. A. Seleznev, A. K. Gutakovsky, A. V. Chehovskiy, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, T. A. Gavrilova // Physica E. — 2000. — V. 6. — P. 828.
- [122] Prinz V. Y. A new technique for fabricating three-dimensional micro- and nanostructures of various shapes / V. Y. Prinz, D. Grutzmacher, A. Beyer, C. David, B. Ketterer, E. Deccard // Proceedings of 9th International Symposium, “Nanostructures: Physics and Technology”. — St. Petersburg, Russia: June 18–22 2001. — P. 13.
- [123] Prinz V. Y. Precise semiconductor nanotubes and nanocorrugated quantum system / V. Y. Prinz // Physica E. — 2004. — V. 24. — P. 54.
- [124] Vorob'ev A. B. Magnetotransport properties of two-dimensional electron gas on cylindrical surface / A. B. Vorob'ev, V. Y. Prinz, Y. S. Yykecheva, A. I. Toropov // Physica E. — 2004. — V. 23. — P. 171.
- [125] Frank S. Carbon nanotube quantum resistors / S. Frank, P. Poncharal, Z. L. Wang, W. A. de Heer // Science. — 1998. — V. 280. — P. 1744.

- [126] Kim J. Fano Resonance in Crossed Carbon Nanotubes / J. Kim, J. R. Kim, L. Jeong-O., J. W. Park, H. M. So, N. Kim, K. Kang, K. H. Yoo, J. J. Kim // Phys. Rev. Lett. — 2003. — V. 90. — P. 166403.
- [127] Babič B. Observation of Fano resonances in single-wall B. Babič, C. Schönenberger // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70. — P. 195408.
- [128] Kasumov A. Quantum transport through carbon nanotubes: Proximity-induced and intrinsic superconductivity. / A. Kasumov, M. Kociak, M. Ferrier, R. Deblock, S. Gueron, B. Reulet, I. Khodos, O. Stephan, H. Bouchiat // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — P. 214521.
- [129] Fuhrer M. S. Crossed Nanotube Junction / M. S. Fuhrer, J. N. rd, L. Shih, M. Forero, Y.-G. Yoon, M. S. C. Mazzoni, H. J. Choi, J. Ihm, S. G. Louie, A. Zettl, P. L. McEuen // Science. — 2000. — V. 288. — P. 494.
- [130] Zhou C. Modulated Chemical Doping of Individual Carbon Nanotubes / C. Zhou, J. Kong, E. Yenilmez, H. Dai // Science. — 2000. — V. 290. — P. 1552.
- [131] Tans S. J. Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube / S. J. Tans, A. R. M. Verschueren, C. Dekker // Nature. — 1998. — V. 393. — P. 49.
- [132] Appenzeller J. Multimode Transport in Schottky-Barrier Carbon-Nanotube Field-Effect Transistors / J. Appenzeller, J. Knoch, M. Radosavljević, P. Avouris // Phys. Rev. Lett. — 2004. — V. 92. — P. 226802.
- [133] Nardelli M. B. Electronic transport in extended systems: Application to carbon nanotubes / M. B. Nardelli // Phys. Rev. B. — 1999. — V. 60. — P. 7828.
- [134] Choi H. J. Exact solutions to the tight-binding model for the conductance of carbon nanotubes / H. J. Choi, J. Ihm // Solid State Commun. — 1999. — V. 111. — P. 385.

- [135] Anantram M. P. Transmission through carbon nanotubes with polyhedral caps / M. P. Anantram, T. R. Govindan // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 61. — P. 5020.
- [136] Dag S. Theoretical study of crossed and parallel carbon nanotube junctions, three-dimensional grid structures / S. Dag, R. T. Senger, S. Ciraci // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70. — P. 205407.
- [137] Sanvito S. Fractional Quantum Conductance in Carbon Nanotubes / S. Sanvito, Y. K. Kwon, D. Tomanek, C. J. Lambert // Phys. Rev. Lett. — 2000. — V. 84. — P. 1974.
- [138] Uryu S. Electronic states and quantum transport in double-wall carbon nanotubes / S. Uryu // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 69. — P. 075402.
- [139] Chibotaru L. F. Electron transmission through atom-contacted carbon nanotubes / L. F. Chibotaru, S. Compernelle, A. Ceulemans // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — P. 125412.
- [140] Ando T. Theory of transport in carbon nanotubes / T. Ando // Semicond. Sci. Technol. — 2000. — V. 15. — P. R13.
- [141] Kong J. Quantum Interference and Ballistic Transmission in Nanotube Electron Waveguides / J. Kong, E. Yenilmez, T. W. Tombler, W. Kim, H. Dai, R. B. Laughlin, L. Liu, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu // Phys. Rev. Lett. — 2001. — V. 87. — P. 106801.
- [142] Wakabayashi K. Electronic transport properties of nanographite ribbon junctions / K. Wakabayashi // Phys. Rev. B. — 2001. — V. 64. — P. 125428.
- [143] Roche S. Aharonov-Bohm spectral features and coherence lengths in carbon nanotubes / S. Roche, G. Drasselhaus, M. S. Drasselhaus, R. Saito // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 62. — P. 16092.
- [144] Lin M. F. Magnetization of graphene tubules / M. F. Lin, K. W. K. Shung // Phys. Rev. B. — 1995. — V. 52. — P. 8423.

- [145] Galkin N. G. Thermopower of Carbon Nanotubes in a Magnetic Field / N. G. Galkin, V. A. Margulis, A. V. Shorokhov // Fullerenes, nanotubes, and carbon nanostructures. — 2004. — V. 12. — P. 129.
- [146] Альтшулер Б. Л. Эффект Ааронова-Бома в неупорядоченных проводниках / Б. Л. Альтшулер, А. Г. Ааронов, Б. З. Спивак // Письма в ЖЭТФ. — 1981. — Т. 33. — С. 101.
- [147] Альтшулер Б. Л. Наблюдение эффект Ааронова-Бома в полых металлических цилиндрах / Б. Л. Альтшулер, А. Г. Ааронов, Б. З. Спивак, Д. Ю. Шарвин, Ю. В. Шарвин // Письма в ЖЭТФ. — 1982. — Т. 35. — С. 476.
- [148] de L. Kronig R. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices / R. de L. Kronig, W. G. Penney // Proc. Roy. Soc.(London). — 1931. — V. 130A. — P. 499.
- [149] Goldberger M. L. Theory of the refraction and the diffraction of neutrons by crystals / M. L. Goldberger, F. Seitz // Phys. Rev. — 1947. — V. 71. — P. 294.
- [150] Березин Ф. А. Замечание об уравнении Шредингера с сингулярным потенциалом / Ф. А. Березин, Л. Д. Фаддеев // ДАН СССР. — 1961. — Т. 137. — С. 1011.
- [151] Смирнов Б. М. О взаимодействии отрицательных ионов с атомами. / Б. М. Смирнов, О. Б. Фирсов // ЖЭТФ. — 1964. — Т. 47. — С. 232.
- [152] Демков Ю. Н. Отрыв электрона при медленном столкновении отрицательного иона с атомами. / Ю. Н. Демков // ЖЭТФ. — 1964. — Т. 46. — С. 1126.
- [153] Калиткин Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин. — М.: Наука, 1978. — 512 с.
- [154] Мудров А. Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль / А. Е. Мудров. — Томск: МП "РАСКО", 1991. — 272 с.

- [155] Hofstetter D. Photodetectors based on intersubband transmissions using *III*-nitride superlattice structures / D. Hofstetter, E. Baumann, F. R. Giorgetta, R. Thóron, H. Wu, W. J. Schaff, J. Dawlaty, P. A. George, L. F. Eastman, F. Rana, P. K. Kandaswamy, S. Leconte, E. Monroy // J. Phys.: Condens. Matter. — 2009. — V. 21. — P. 174208.
- [156] Margulis V. A. Ballistic conductance of a quantum cylinder in a parallel magnetic field / V. A. Margulis, A. V. Shorokhov, M. P. Trushin // Physics Letters A. — 2000. — V. 276. — P. 180.
- [157] Гейлер В. А. Магнитный отклик двумерного вырожденного электронного газа в наноструктурах с цилиндрической симметрией / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, А. В. Шорохов // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 115. — С. 1450.
- [158] Margulis V. A. Electron transport on a cylindrical surface with one-dimensional leads / V. A. Margulis, M. A. Pyataev // Phys. Rev. B. — 2005. — V. 72. — P. 075312.