

# ВИБІР КВАНТОВО-МЕХАНІЧНОГО ФОРМАЛІЗМУ

## □ Метод функцій Вігнера

- + аналог КРБ, однак функція Вігнера не має фізичного сенсу;
- + концептуально проста можливість врахування розсіювання
- + якісне передбачення ділянки «плато» на ВАХ
- сумнівне теоретичне підґрунтя
- значні чисельні ресурси
- невизначена адекватність

Функція Вігнера - центральне поняття квантової механіки, сформульованої в фазовому просторі.  
Визначення:

$$f(x, k, t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y; t) \psi(x-y; t) e^{2iky} dy \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}}{i\hbar} f + \hat{C} f$$

функція Вігнера  
хвильова функція

оператор Ліувілля  
оператор розсіювання

рівняння Ліувілля, квантово-механічний аналог рівняння Больцмана

## □ Метод функцій Гріна

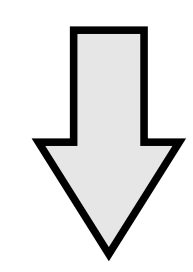
- + струнка теоретична основа;
- + концептуальна простота врахування усіх механізмів розсіювання та можливість багатозонного моделювання;
- + задовільна адекватність за виключенням певних ділянок ВАХ та механізмів розсіювання;
- розвиток теорії вдається провести лише в припущеннях, що нівелюють переваги методу;
- реальне врахування розсіювання можливе лише в рамках наближення часу релаксації;
- метод в кращих своїх реалізаціях не передбачає ділянку «плато» на падаючій гілці ВАХ, потребує «припасувальних» параметрів;
- чисельні ресурси для розкриття переваг методу грандіозні.

Центральне рівняння - рівняння Дайсона, з якого виводяться рівняння формалізму:

$$[E - H_0(\mathbf{r})] G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - \int \Sigma^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G^R(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'; E) d\mathbf{r}_1 = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$G^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; E) \Sigma^<(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E) G^{R*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2; E) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

усі мікроскопічні та макроскопічні величини виражаються через функції Гріна  $G^R, G^A, G^>, G^<$



наприклад, так густина струму виражається через функцію Гріна  $G^<$ :

$$J(\mathbf{r}, E) = -\frac{e\hbar}{4\pi m^*} \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} [(\nabla - \nabla') G^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)]$$

$H_0$  - одноелектронний гамільтоніан  
 $\mathbf{r}$  - координата

$$\Sigma^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - i \frac{\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{2}$$

$\frac{\Sigma^R + \Sigma^A}{2}$  власні енергії  $\frac{\Sigma^R - \Sigma^A}{2}$

## □ Метод огиначаючої хвильових функцій

- + ефективно використання чисельних ресурсів;
- + інтуїтивна зрозумілість (використовується Шредінгерівське формулювання квантової механіки);
- + розробленість підходів до врахування основних квантово-розмірних ефектів та механізмів транспорту;
- теор. основа менш струнка, багато ефектів можна включити лише *ad-hoc*;

- + не використаний весь потенціал візуалізації мікро- і макроскопічних величин;
- + адекватні способи врахування квантово-розмірних ефектів не зібрано в єдину модель;
- + не розроблено механізми врахування важливих механізмів транспорту та ефектів.

метод стане оптимальним, якщо усунути ці недоліки

