

三维量子输运的空域平均非平衡格林函数方法

Vahid Mosallanejad ^{1,*}, Kuei-Lin Chiu ^{2,*} and Wenjie Dou ^{1,*}.

¹ School of Science, Westlake University, Hangzhou, Zhejiang 310024, China & Institute of Natural Sciences, Westlake Institute for Advanced Study, Hangzhou, Zhejiang 310024, China

² Department of Physics, National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung 80424, Taiwan

E-mail: vahid@ustc.edu.cn, eins0728@gmail.com and douwenjie@westlake.edu.cn

Apr 2025

摘要. 非平衡格林函数 (NEGF) 方法提供一种用于模拟介观系统中各种现象的实际框架。随着电子设备的尺寸缩小到仅几纳米, 需要新的基于有效质量的 NEGF 三维实现方法变得越来越明显。本工作扩展了我们之前的有限体积实现—最初开发用于在二维中自洽求解薛定谔方程和泊松方程—转变为一个完整的三维 NEGF 框架。我们的实现始于探讨 NEGF 的常见教科书有限差分实现中的几个问题。我们简洁地展示了有限体积离散化如何解决几个关键的 implementation 挑战。重要的是, 我们解释了这种类型的离散化如何使计算自能成为可能, 这些自能考虑了储层的影响。通过 two 个示例说明了这种方法的潜在应用。我们预计这一实现将广泛适用于开放量子系统, 特别是在三维域至关重要的情况下。

关键词: 非平衡格林函数, 有效质量, 有限体积, 三维域。

1. 介绍

非平衡格林函数 (NEGF) 形式主义在固态物理和化学中被广泛使用, 然而它并不总是对应于单一的、明确定义的数学程序 [1, 2, 3, 4, 5]. 其灵活性使其可应用于广泛的系统, 包括超小型晶体管 [6, 7], 自旋电子学 [8, 9], 热电材料 [10, 11, 12], 以及分子电子学 [13, 14], 二维材料 [15, 16], 无序系统 [17, 18, 19], 和光电器件 [20]. 格林函数应根据系统的方法论和具体方面进行定义, 例如模型哈密顿量。一身体 NEGF 方法在 20 世纪晚期的介观系统中获得了流行, 起源于 Caroli 在 20 世纪 70 年代的工作 [21] 并后来由 Datta、Meir、Wingreen 和 Jauho 等人推进。[22, 23, 24]. 这里, 我们特别指的是介观系统中的空间和能量分辨 NEGF [25]. 更为基础的 (双时或轮廓排序) NEGF 形式主义根植于多体微扰理论, 通过 Martin、Schwinger、Keldysh、Kadanoff、Baym 等人的工作建立起来 [26, 27, 28]. 获得能量分辨的 NEGF—例如, 从 Kadanoff-Baym 公式中—涉及对双时间格林函数 [29, 30] 进行傅里叶变换。空间-能量分辨的 NEGF 主要针对稳态量子输运特性, 如传输概率, 这对于解释低维器件 (例如分子接头) 中的传输现象至关重要。NEGF 的一个关键优势在于其通过接触自能概念处理开放量子系统的方式。NEGF 被广泛认为是在量子输运中最强大和最准确的方法之一, 并在科学和工业领域中得到广泛应用 [31, 32, 33]. NEGF 技术在更高维度上变得计算成本高昂, 以至于需要额外的数学技巧, 如耦合模式空间方法 [34, 35], 才能实际进行三维系统中的量子输运研究像量子线一样。此外, 当材料性质 (如有效质量、电子亲和力或其他性质) 在器件几何结构中变化时, 实现 NEGF 变得越来越复杂。在现实系统中, 理想的弹道输运会被局部缺陷 (晶格无序、掺杂不均匀或界面应变) 破坏。为了准确地模拟这些效应在大型 3D 系统中的表现, 一个稳健的 NEGF 形式主义必须包含空间解析材料属性, 从而允许局部性质的自我调整。本函旨在介绍与基于单元中心的有限体积 (FV) 离散化方法相关的空间平均格林函数的概念。尽管有一些出版物报告了 Voronoi FV-NEGF 方法的存在 [36], 但在过去十年中它并未得到进一步发展。例如, 在一

项研究中, 作者使用有限体积法求解泊松方程, 但没有求解传输方程 [37]. 我们 propose 平均的格林函数形式可以改进有效质量 NEGF 在一个三维域中的实现过程。所提出的方法可以被看作是在一个二维域 [38] 中求解薛定谔-泊松方程组的我们先前工作的扩展。我们证明了这种方法可以克服有限差分 (FD) NEGF 方法的几个局限性 overcome。虽然目前的工作没有为了简洁起见探讨完整耦合自治泊松-NEGF 模拟, 但我们认为 FV 方案可以充分发挥其在实际泊松-NEGF 应用中的潜力。注意现有的有限元 (FE) NEGF 需要使用形函数的概念, 这使得实现更加复杂或不直观 [39, 40].

2. 方法

2.1. 运动方程对于 NEGF: FD NEGF 的问题

在中观量子输运的背景下, 迟延格林函数 G^R 被 often 视为最基本的格林函数, 因此 plays 扮演了核心角色。一种直接的方法是推导描述介观系统中延迟格林函数的运动方程, 从不含时间的薛定谔方程开始, 使用哈密顿算符 \hat{H} , 适用于无限的物理域。然后, 我们将波 (包络) 函数转换为延迟格林函数 ($\hat{\psi} \rightarrow \hat{G}$)。同时, 我们将一个正的虚构单点能量 (以下用 $i\eta$ 表示) 添加到哈密顿量中, 并将狄拉克 δ 函数 (作为脉冲源) 添加到方程的右侧。这一简单的证明不包括粒子间的相互作用, 仅包含接触点与约化量子系统之间的考虑到了粒子交换。粒子相互作用可以在遵守守恒定律的前提下, 以现象学模型的形式被纳入这个版本的 NEGF 中。 \hat{G}^R 的运动方程如下:

$$((E + i\eta)\hat{S} - \hat{H})\hat{G}^R(E; \hat{r}, \hat{r}') = \delta(\hat{r} - \hat{r}'), \quad (1)$$

其中 \hat{S} 是重叠算符, 能量 E 被视为连续变量。此后, 我们在迟滞格林函数 $G^R(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 的符号中省略上标 R 和对能量变量 E 的隐含依赖, 简化后续关系的表述。然后, 应从左到右作用 $\langle \mathbf{r} |$ 和 $| \mathbf{r}' \rangle$, 使得 $\hat{H} \rightarrow H$, $\hat{S} \rightarrow S$ 和 $\hat{G} \rightarrow G$ 。这相当于用一组选定的轨道 (基组) 来定义一个模型哈密顿量。例如, 在紧束缚 (TB) 模型中, H 和 S 是由局域轨道能量和轨道间的跃迁项定义的已知矩阵, 其中一组轨道形成基底。在 TB 框架

内，用单位矩阵 I 替换 $\langle \mathbf{r} | \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}') | \mathbf{r}' \rangle$ 是合理的。该过程涉及划分物理系统，并应用矩阵代数将形式上无限的运动方程简化为描述简化的量子系统的有限大小方程。对于一个简单的单带有效质量哈密顿量，需要根据有效质量 $\hat{S} \rightarrow I$ 来识别出抛物线型的哈密顿量，并对公式 (1) 在无限域内进行离散化。为了更精确地表示，通常使用由 $H(\mathbf{r}) = (\hbar^2/2m^*(\mathbf{r}))\nabla^2 + U(\mathbf{r})$ 给定的哈密顿量，在这里 $U(\mathbf{r}) = -eV(\mathbf{r})$ 代表平均场势能。然后，拉普拉斯算子常常使用 FD 方案来进行近似。例如，对于一个一维区域 in，拉普拉斯算子可以表示为： $\nabla^2 u \approx (u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1})/\Delta x^2$ 。接下来，狄拉克 δ 函数被单位矩阵替代。通过离散化该区域，将其划分为半无限接触和一个简化系统，并应用矩阵代数，我们可以得到有限大小的矩阵关系： $([A] - [\Sigma])[G] = \mathbf{1}$ 。这里， Σ 表示联系总数自能，而 $[A] = (E + i\eta)[I] - [H_C]$ 中，下标 C 表示简化的系统（信道/中心）。虽然上述程序在实践中可行，但它忽略了狄拉克 δ 函数 function 的概念性质。具体来说，Dirac delta function 不是传统意义上的数学函数，不能用近似值来替代。特别是，Dirac delta function 必须满足性质： $\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r} = 1$ 。

这个问题看似无关紧要，但却导致了基于关系 $n(\mathbf{r}) = (1/2\pi) \int \text{Tr}(-iG^<(\mathbf{r}, \mathbf{r})) dE$ 计算电子密度时出现单位问题。也就是说，在传统的 FD-NEGF 方法中，缩放因子 $\hbar^2/2m_e\Delta x^2$ (m_e 是裸电子质量) 的单位是能量，因此格林函数只有逆能量的单位。然而，正确的单位应该是逆能量乘以逆长度（或在三维中的逆体积）。正因为如此，直接近似狄拉克 δ 函数 function 并不完全合适。对于一维离散网格中这一不足之处的解释可以通过以下狄拉克 δ 函数的定义来提供：

$$\delta(x - x') = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0^+} \begin{cases} \frac{1}{\Delta x_i} & \text{if } x_i = x'_j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (2)$$

这里， $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ 指的是中点之间的距离。在三维几何中，我们必须提取所有中间点的坐标以获得每个网格周围的体积， ΔV_i 。然后通过 $[A - \Sigma]^{-1}[\Delta V]$ 正确地得到格林函数，其中 $[\Delta V]$ 指的是由这些体积构成的对角矩阵。然而，这样的 redemption 使得正确实现变得繁琐，因为它需要涉及到中点网格。

此外，当对包含多个表示不同材料的域的复杂电子设备进行建模时，最方便的网格划分方法是独立地为每个域进行网格划分。这确保了离散点正好位于材料界面处。然而，使用 FD 方案时，处理材料属性不连续性的方式尚不清楚。具体来说，在我们近似两个材料界面处

的 $(\hbar^2/2m^*(\mathbf{r}))\nabla^2$ 时应采用哪种有效质量？相比之下，正如将要澄清的那样，FV 方法为解决此类问题提供了一个明确且定义良好的协议。在这里，需要强调的是，界面上材料属性的不连续性或突然变化是量子限制效应的起源，并必须谨慎处理。

2.2. 有限体积 NEGF 的实现

此实现问题的正确解决方案可以通过使用基于单元中心的 FV 离散化方案来找到。首先，可以采用更合适的单带有效质量哈密顿量为写为：

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \nabla \right) + U(\mathbf{r}). \quad (3)$$

幸运的是，上述形式使我们可以应用散度定理 which 将在稍后进行解释。此外，这个 formula 保持了两种不同材料界面处的电流连续性 [41]。FV 方法的第一步是对方程 (1) 的两边进行积分，over 为中心单元格，如图 1(a) 所示的单元格 P 。单元格 P ，体积为 $\Delta V_P = \Delta x \Delta y \Delta z$ ，在计算流体动力学中被称为控制体积。取积分后，方程 (1) 的左右两边 (LHS, RHS) 可以分别表示为

$$\int_{V_P} ((E + i\eta)I + \nabla \cdot (\mathbf{\Gamma}^*(\mathbf{r})\nabla) - U(\mathbf{r}))G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV, \quad (4)$$

$$\int_{V_P} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{\Gamma}^*(\mathbf{r}) = \hbar^2/2m^*(\mathbf{r})$ 。请注意， $\mathbf{\Gamma}^*(\mathbf{r})$ 指的是与非

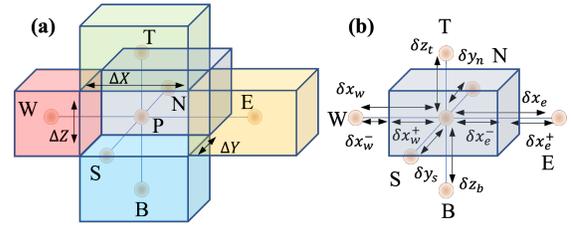


图 1: (a) 中心单元格， P ，及其五个邻近的控制体积单元格。虽然南部单元格的中心由小球表示，但该南部单元格本身并未绘制。(b) P 与其他邻近单元格之间的相对距离。

各向同性有效质量相关的非各向同性量。然后我们希望将 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ，作为 \mathbf{r} 和 \mathbf{r}' 的连续函数，减少到一个与 (P, P') 相关的矩阵值，当我们对无限域中的所有控制体积运行离散方程时。这样，RHS 的定义就正确地简化为在 P 和 P' 离散空间上的单位矩阵。

$$\int_{V_P} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV = \begin{cases} 1 & \text{if } P = P' \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (6)$$

势能项通过以下近似来逼近 piecewise 近似

$$\int_{V_P} U(\mathbf{r})G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV \approx \bar{U}(P)\bar{G}(P, P')\Delta V_P, \quad (7)$$

这意味着我们将迟滞格林函数的平均值 \bar{G} 和势能 $\bar{U}(P)$ 与它们在单元中心的值 P 关联起来。相同的 piecewise 近似值将用于以下对角线项

$$\int_{V_P} (E + i\eta)I G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV \approx (E + i\eta)I \bar{G}(P, P')\Delta V_P. \quad (8)$$

动能项的积分利用散度定理简化为:

$$\iiint_{V_P} \nabla \cdot (\mathbf{\Gamma}^*(\mathbf{r})\nabla)GdV = \iint_{S_P} \mathbf{\Gamma}^*(\mathbf{r})\nabla G \cdot \hat{\mathbf{n}}dS, \quad (9)$$

其中, S_P 指的是单元格 P 的所有六个面, 而 $\hat{\mathbf{n}}$ 是这些每个面上的法向量。剩下的是要通过 closest 单元中心的 G 值来近似方程 (9) 的右侧。在此步骤中, 必须谨慎保持单元之间界面处通量的连续性。在单元中心的 FV 方法中, 该要求通过使用调和平均数近似评估六个界面处的 $\mathbf{\Gamma}^* \equiv \{\Gamma_x^*, \Gamma_y^*, \Gamma_z^*\}$ 来满足被强制执行。具体而言, 东部界面的 Γ_x^* 由被给定通过

$$\Gamma_{x_e}^* = \frac{\Gamma_E^* \Gamma_P^*}{\beta \Gamma_E^* + (1 - \beta) \Gamma_P^*}, \quad (10)$$

给出, 其中 $\beta = \delta x_{e-} / \delta x_e$ 和 $1 - \beta = \delta x_{e+} / \delta x_e$, 参见图 1(b) 的几何距离。 Γ_x^* 在西部界面上, $\Gamma_{x_w}^*$, 被评估通过相同的关联关系, 除了 $\Gamma_E^* \rightarrow \Gamma_W^*$, $\beta = \delta x_{w+} / \delta x_w$ 和 $1 - \beta = \delta x_{w-} / \delta x_w$ 。 Γ_y^* 在南部和北部界面, 以及顶面和底面界面的 Γ_z^* 必须以相同的方式进行评估。关于界面上通量连续性的细节可以在参考文献 [38] 中找到。FV 方法的一个关键优势在于, 在界面处使用相邻单元中心的值来评估 $\mathbf{\Gamma}^*$, 解决了如前所述的 FD 离散化方案的主要限制。然后, 方程 (9) 的右侧可以用

$$\begin{aligned} & (\Gamma_{x_e} \frac{\bar{G}_E - \bar{G}_P}{\delta x_e} - \Gamma_{x_w} \frac{\bar{G}_P - \bar{G}_W}{\delta x_w}) \Delta A_{yz} + (\Gamma_{y_n} \frac{\bar{G}_N - \bar{G}_P}{\delta y_n} - \\ & \Gamma_{y_s} \frac{\bar{G}_P - \bar{G}_S}{\delta y_s}) \Delta A_{xz} + (\Gamma_{z_t} \frac{\bar{G}_T - \bar{G}_P}{\delta z_t} - \Gamma_{z_b} \frac{\bar{G}_P - \bar{G}_B}{\delta z_b}) \Delta A_{xy}, \end{aligned} \quad (11)$$

进行近似, 其中 $A_{yz} = \Delta y \Delta z$, 和 A_{xz} 以及 A_{xy} 代表相应的区域。将方程组 (6) - (8) 和方程 (11) 中的近似值代入方程 (4) 和 (5), 使它们相等, 并将所有项除以 ΔV_P , 方程 (1) 简化为

$$\begin{aligned} & -a_W \bar{G}_W - a_B \bar{G}_B - a_S \bar{G}_S + ((E + i\eta) + a_P - \bar{U}_P) \bar{G}_P \\ & - a_N \bar{G}_N - a_T \bar{G}_T - a_E \bar{G}_E = \Delta V_P^{-1}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$a_P = a_W + a_B + a_S + a_N + a_T + a_E,$$

其中, 材料和几何系数被合并为与六个相邻单元格相关的系数序列, 由

$$a_{W,E} = \frac{\Gamma_{x_{w,e}}}{\delta x_{w,e} \Delta X}, a_{S,N} = \frac{\Gamma_{y_{s,n}}}{\delta y_{s,n} \Delta Y}, a_{B,T} = \frac{\Gamma_{z_{b,t}}}{\delta z_{b,t} \Delta Z}. \quad (13)$$

式 (12) 很有趣, 因为 ΔV_P^{-1} 出现在右边。这意味着格林函数表示空间平均变量, 并且具有正确的单位来评估电子密度。我们将这些系数称为 a 系数, 当我们遍历所有单元时, 它们形成六个向量。值得一提的是 a -系数与紧束缚参数之间的类比: 中心系数 a_P 对应于现场, 而其他的 a -系数代表跳跃能量。方程 (12) 必须遍历所有单元格, 最终导致一个矩阵方程 $[A][\bar{G}] = [\Delta V]^{-1}$, 该方程具有形式上无限的七对角矩阵 $[A]$ 。此后, 我们将此实现称为有限体积 NEGF (FV-NEGF)。

2.3. 应用边界条件并将 FV-NEGF 约减到传输域

图 2 展示了一个纳米线的示意图, 我们使用它作为工具来说明不同边界条件的实现。南、北、顶和底面必须采用零 Dirichlet 边界条件, 而西和东面必须采用开放边界条件。在将 $[A]$ 约简为约简域的有限大小矩阵之前, 我们需要对非开放边界面施加狄利克雷边界条件。

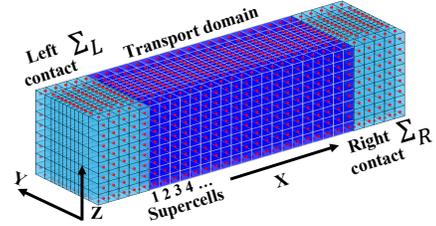


图 2: 类似纳米线的 3D 域的示意图, 该域被离散化为非均匀矩形控制体积。西方和东方面上最外层的单元必须施加开放边界条件, 而其余由红点指示的最外层单元则必须施加 Dirichlet 边界条件。

零 Dirichlet 边界条件分两步应用于方程 (12): (I) 通过从非对角线中消除与具有 Dirichlet 边界条件的面相关的集合 $\{a_S, a_N, a_B, a_T\}$ 中的任何项, (II) 通过对角线项 (a_P) 内的相同项进行修改, 使用 $a_{S,N} = \Gamma_{s,n} / (\delta y_{s,n}^+ \Delta Y)$ 和 $a_{B,T} = \Gamma_{b,t} / (\delta z_{b,t}^+ \Delta Z)$ 。这里, 狄利克雷边界 ($\Gamma_{s,n,b,t}$) 上的 $\mathbf{\Gamma}^*$ 的值是已知的, 因此无需通过调和平均来评估它们。关于细节的实现狄利克雷边界条件可以在参考文献 [38] 中找到。因此, handling 封闭边界条件实质上归结为校正六个 a 系数向量。我们强调上述方程仍然是针对半无限域的。为了处理西部和东部面上的开放边界条件, 总域应被划分为半无限左接触区和右接触区, 以及减缩传输域 (即通道)。然后无限矩阵方程 $[A][\bar{G}] = [\Delta V]^{-1}$ can 可以重写为以下分块

方程:

$$\begin{bmatrix} A_L & A_{LC} & O \\ A_{CL} & A_C & A_{CR} \\ O & A_{RC} & A_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{G}_L & \bar{G}_{LC} & \bar{G}_{CR} \\ \bar{G}_{CL} & \bar{G}_C & \bar{G}_{CR} \\ \bar{G}_{RL} & \bar{G}_{RC} & \bar{G}_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta V_L & O & O \\ O & \Delta V_C & O \\ O & O & \Delta V_R \end{bmatrix}^{-1}. \quad (14)$$

集中于 \bar{G} 的中央列, 我们可以得到 \bar{G}_{LC} 、 \bar{G}_C 和 \bar{G}_{RC} 的三个方程。使用矩阵代数, 第一个和第三个矩阵方程可以合并为第二个方程作为

$$[A_C - A_{CL}A_L^{-1}A_{LC} - A_{CR}A_R^{-1}A_{RC}] \bar{G}_C = [\Delta V_C]^{-1}. \quad (15)$$

通常定义左和右自能为 $\Sigma_L = A_{CL}A_L^{-1}A_{LC}$ 和 $\Sigma_R = A_{CR}A_R^{-1}A_{RC}$ 分别地, 使得上述关系可以写成

$$[A_C - \Sigma_L - \Sigma_R][\bar{G}_C][\Delta V_C] = [1]. \quad (16)$$

将我们指的是 A_L^{-1} 作为接触格林函数。注意 ΔV_L 和 ΔV_R 没有出现在方程 (16) 中。计算完整的接触格林函数是不可行的, 因为接触哈密顿量可能非常大。

我们可以进一步将传输域划分为一组超元胞, 如图 2 中标记的整数所示。此处, 超元胞定义为共享相同 x 坐标的全部控制体积的集合, x_P 。同样地, 我们可以将接触域划分为一组超元胞, 尽管在图 2 中未显示它们是。这个额外的划分使我们能够充分利用接触表面格林函数 $g_{L,R}$ 的概念来评估 $\Sigma_{L,R}$ 。表面格林函数实际上意味着只需要几个块的接触格林函数就可以计算自能矩阵。然后, 非零自能块的方程可以表示为: $[\Sigma_L]_{11} = A_{1,0} g_L A_{0,1}$ 和 $[\Sigma_R]_{NN} = A_{N,N+1} g_R A_{N+1,N}$ 。这里, $A_{01}[A_{N+1,N}]$ 表示左侧 [right] 接触的最后一个 [first] 超晶格和通道的第一个 [last] 超晶格之间的耦合哈密顿量。FV-NEGF 的超晶胞排列还有两个主要优势: (I) 它允许实现 Sancho-Rubio 方法 [42] 以加速计算 g_L 和 g_R , (II) 它启用应用直接递归算法 [43, 44], 这应该被实现来使完整的三维量子传输模拟在计算上是可行的。如果我们定义 $[G_C] = [\bar{G}_C][\Delta V_C]$, 则最终的迟延格林函数矩阵形式将与传统的 FD-NEGF 或 TB-NEGF 公式相同。虽然这可能看起来很平凡, 但通过 FV 方法构建 $[A_C - \Sigma_L - \Sigma_R]$ 并不平凡, 因为需要在所有局部网格接口处强制执行守恒定律。量子输运理论的其余部分——包括用进位 G^R 、退位 G^A 和较小 ($G^<$) 格林函数来评估传输函数 (终端电流) 和局部态密度 (电荷分布) 等可观测量——保持不变。因此, 我们在此省略进一步的理论细节, 因为它们可以在其他地方找到 [45]。

3. 代表性应用实例对于 FV-NEGF

为了验证我们的 FV-NEGF 方法的能力, 我们考虑了通过 3D 芯壳纳米线的电子输运。纳米线由一个横截面积

为 $2 \times 2 \text{ nm}^2$ 的硅 (Si) 芯组成, 在 yz 平面中, 嵌入一层厚度为 2 nm 的二氧化硅 (SiO_2) 包层中。这里, 电线从 0 延伸到 12 nm 沿着 x 轴。Si 的 [100] 晶体取向沿 z 轴排列。因此, Si 核中的有效质量定义为 $m_z^* = 0.9$ (纵向) 和 $m_{x,y}^* = 0.2$ (横向)。对于 SiO_2 包层, 我们设定 $m_{x,y,z}^* = 0.5$ (各向同性)。Si 与 SiO_2 之间的导带偏移 U 设定为 3.1 eV 。在图 3(a) 和 (b) 中, 我们展示了我们的横截面 FV 网格和 3D 域中的 m_z^* 分布。这里, 在 yz 平

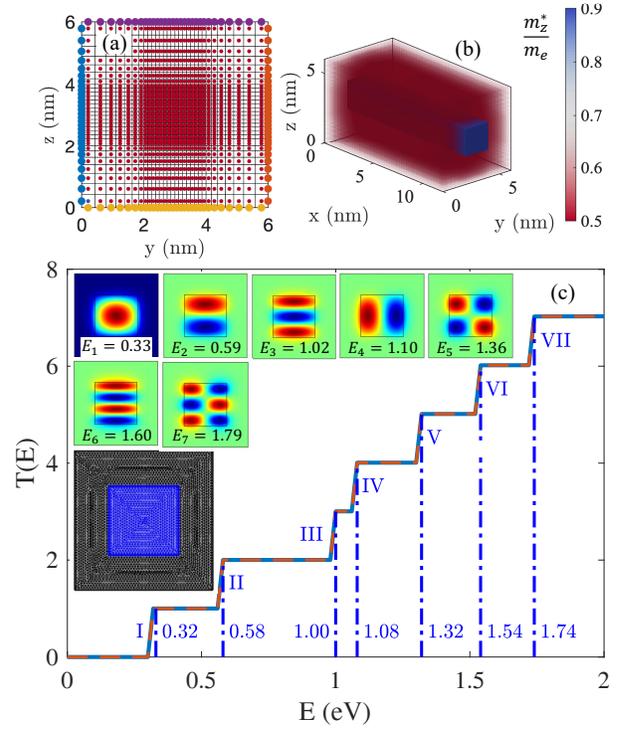


图 3: (a) 横截面 FV 网格。圆周上的点是边界点。(b) 三维空间中非各向同性材料属性的示例比例 m_z^*/m_e 。(c) 通过 FV-NEGF 评估的传输函数。使用二维 FE 方法计算横截面模式, 如插图彩色图所示。FE 网格也作为插图绘制。

面上的二维单元数量为 900, 沿 x 轴有 40 个网格空间。量子输运研究是通过一个自制的递归 NEGF 代码进行的。在图 3(c) 中, 我们绘制了传输函数 $T(E)$ 。对于有限的能量范围, 使得包含七个步骤。我们提醒读者, 低温下量子线的电流-电压特性遵循 $T(E)$, 这显示出随着电子能量 (E) (偏置电压) 增加而典型的阶梯式增长 (电导率阶跃)。每个电导率阶跃对应传输中引入了一个新的横截面模式。可以通过求解二维横截面区域内的薛定谔方程 (封闭系统) 来评估传输模式, 使用相同的输入参数。此外, 七个横截面模式和相应的本征能量通过有限元方

法计算, 并绘制为图 3(c) 的内插图。显然, 步骤的开始与由 E_i 表示的本征能量对齐, 从而确认了方法论及其数值实现的正确性。LDOS(E) 在截面 yz 平面中的分布类似于图 3(c) 中所示的模式分布 (为简洁起见未显示数据)。在这里, 我们避免量化电子密度, 因为我们的分

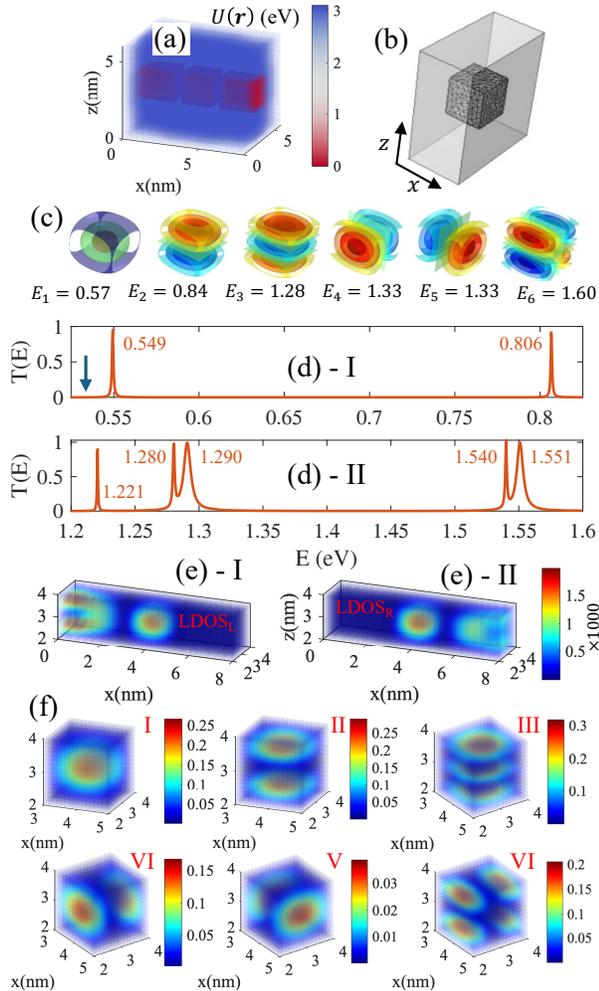


图 4: (a) 在三维域中的 $U(\mathbf{r})$ (电子亲和力)。 (b) 在 0DEG 域中的有限元网格。 (c) 通过有限元方法计算的六个束缚态及其对应的本征能量。 (d) 通过 FV-NEGF 计算的传输函数。 (e)-I 从左 ($LDOS_L$) [右 ($LDOS_R$)] 到右 [left] 在 (d) 中箭头所指的能量处的局部态密度 $LDOS$ [II]。 (f) 在 (d) 中的六个共振峰处的局部态密度 $LDOS_L$ 。

析不涉及扫描源-漏电化学势。对于第二个示例, 我们在 yz 平面引入了两层 0.5 nm thick SiO_2 分离层 (屏障)。在此配置中, 左侧和右侧的 1D 线 (每条长度为 2 nm) 连接到中心一个隔离的量子点 (2 nm) (0DEG), 形成了

一个 1DEG-0DEG-1DEG 系统, 图如所示于 Fig. 4(a)。在这里, 我们修改了沿 x 轴的网格样式, 使得在两个势垒之间的区域网格间距变得非常精细 (0.125 nm)。该系统的传输特性可以如下理解: (I) 电子从左侧 1DEG 的横截面模式隧穿到 0DEG (一个完全受限区域) 的束缚态, 然后进入 向右的 1DEG (或反之), 遵循平行隧穿机制。 (II) $T(E)$ 中的峰值预计会在 0DEG 的本征能量附近出现, 但它们的展宽和能量偏移取决于 1DEG 导线与 0DEG (量子点) 之间的势垒特性, 遵循共振隧穿机制。在这里, 由于势垒很高, 展宽可能非常小, 需要一个精细的能量网格 (dE) 来准确解析共振峰。为了解决这一问题, 我们使用了三维的有限元方法, 并数值计算了 0DEG 的前六个束缚态, 见图如所示在 Fig. 4(b) 和 (c)。然后我们在这些能量附近采用了更加精细的 dEs 。实际上, 我们故意选择较薄的分隔器 (0.5 nm) 来引起共振峰轻微展宽。在图 4(d)(I) 和 (II) 中, 以高分辨率描绘了 $T(E)$ 中的共振峰。通过从图 4(d)(I) 和 (II) 所示的共振能量中减去图 4(c) 显示的本征能量, 可以得到共振能量位移。这些位移在几十毫电子伏特的数量级。此外, 当 0DEG 连接到右侧和左侧的 1DEGs 时, 在 $E_4 = E_5$ 和 $E_6 = E_7$ 处的双重简并能级分裂。局部态密度 (LDOS) 呈现了另一个关键结果的在图 4(e) (I) 和 (II) 中, 我们绘制了来自左侧和右侧接触的局域态密度 ($LDOS_L$ 和 $LDOS_R$), 其能量略低于第一个共振峰 [箭头见图 4(d)-I], 揭示了 1DEGs 的模式 2 与 0DEG 的第一束缚态之间的耦合。这些三维图表明来自右侧和左侧接触的局域态密度泄漏如何贡献于总电子密度 $n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in L, R} \int LDOS_{\alpha} f(\mu_{\alpha}) (dE/2\pi)$, 其中 f 是费米函数, μ 是与接触相关的电化学势。图 4(f) 显示了 0DEG 区域共振峰值处的 $LDOS_L$ 。三维分布与有限元计算的束缚态 (图 4(c)) 相匹配, 但存在能量位移。展宽效应变得更加明显 [峰 5 在图 4(d) 中], 当束缚态与 1DEG 的横截面模式不对齐时 (图. 4(f)-V)。

4. 结论

总结来说, 我们提出了一种基于单元中心有限体积法实现的 NEGF 方法 (FV-NEGF), 用于建模低维器件中的量子输运现象。FV-NEGF 方法最显著的优势在于其在应用于三维域中量子输运问题时表现出的非凡简单性在于。我们的方法自然支持非均匀网格, 特别适合于介观系统。此外, 我们建立了介观 FV-NEGF 框架与微观紧束缚 NEGF (TB-NEGF) 方法之间的联系。这

一新实现对于建模无序系统尤其具有前景,因为它通过将材料常数分配给 FV 单元的中心,并严格遵守局部守恒定律,将材料特性纳入量子输运中。我们通过两个代表性例子验证了 FV-NEGF 方法,这些例子使用传统的 FD/FE-NEGF 方法会比较难实现。尽管我们在本工作中没有探讨完全耦合自洽 Poisson-NEGF 模拟,但我们相信 FV-NEGF 方法在这样的场景下能够成功执行。可能的自洽方法允许使用统一网格处理 NEGF 和泊松方程,使得数值处理一致。

利益冲突

没有需要声明的利益冲突。

数据可用性声明

支持本研究发现的数据可在合理要求下从作者处获得。

致谢

我们感谢魏朱和昆杨非常有用的讨论。V.M. 感谢国际青年科学家暑期学院项目(资助号 GZWZ[2022]019)的资助。W.D. 感谢西湖大学的启动资金。

参考文献

- [1] Odashima M M, Prado B G and Vernek E 2016 *Revista Brasileira de Ensino de Física* **39**
- [2] Peskin U 2010 *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43** 153001
- [3] Perfetto E, Uimonen A M, Van Leeuwen R and Stefanucci G 2015 *Physical Review A* **92** 033419
- [4] Cohen G and Galperin M 2020 *The Journal of chemical physics* **152**
- [5] Mosallanejad V, Wang Y and Dou W 2024 *The Journal of Chemical Physics* **160**
- [6] Luisier M 2014 *Chemical Society Reviews* **43** 4357–4367
- [7] Ahn P H and Hong S M 2025 *Journal of Applied Physics* **137**
- [8] Chen S H, Chang C R, Xiao J Q and Nikolić B K 2009 *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **79** 054424
- [9] Vadde V, Muralidharan B and Sharma A 2023 *IEEE Transactions on Electron Devices* **70** 3943–3950
- [10] Neophytou N and Thesberg M 2016 *Journal of Computational Electronics* **15** 16–26
- [11] Foster S and Neophytou N 2019 *Computational Materials Science* **164** 91–98
- [12] Polanco C A 2021 *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering* **25** 1–24
- [13] Evers F, Weigend F and Koentopp M 2004 *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **69** 235411
- [14] Sand A M, Malme J T and Hoy E P 2021 *The Journal of Chemical Physics* **155**
- [15] Shah N A, Mosallanejad V, Chiu K L and Guo G p 2019 *Physical Review B* **100** 125412
- [16] Zhang J, Qin Y, Zhou W, Hu Y, Chen C, Yang J, Qu H and Hu X 2023 *ACS Applied Electronic Materials* **5** 5598–5605
- [17] Zhou C, Chen X and Guo H 2016 *Physical Review B* **94** 075426
- [18] Shah N A, Li L, Mosallanejad V, Peeters F and Guo G P 2019 *Nanotechnology* **30** 455705
- [19] Zhang Q, Tang M, Wang L, Xia K and Ke Y 2024 *Physical Review B* **110** 155430
- [20] Aeberhard U 2011 *Journal of computational electronics* **10** 394–413
- [21] Caroli C, Combescot R, Nozieres P and Saint-James D 1971 *Journal of Physics C: Solid State Physics* **4** 916
- [22] Datta S 1992 *Physical Review B* **45** 1347
- [23] Wingreen N S, Jauho A P and Meir Y 1993 *Physical Review B* **48** 8487
- [24] Jauho A P, Wingreen N S and Meir Y 1994 *Physical Review B* **50** 5528
- [25] Datta S 2005 *Quantum transport: atom to transistor* (Cambridge university press)
- [26] Martin P C and Schwinger J 1959 *Physical Review* **115** 1342
- [27] Keldysh L V 2024 Diagram technique for nonequilibrium processes *Selected Papers of Leonid V Keldysh* (World Scientific) pp 47–55
- [28] Kadanoff L P 2018 *Quantum statistical mechanics* (CRC Press)
- [29] Pourfath M 2014 *The non-equilibrium Green's function method for nanoscale device simulation* vol 3 (Springer)
- [30] Ryndyk D A et al. 2016 *Springer Series in Solid-State Sciences* **184** 9
- [31] Shao Y, Pala M, Tang H, Wang B, Li J, Esseni D and del Alamo J A 2025 *Nature Electronics* **8** 157–167
- [32] Li Z, Smeu M, Rives A, Maraval V, Chauvin R, Ratner M A and Borguet E 2015 *Nature communications* **6** 6321
- [33] Pal A, Chavan T, Jabbour J, Cao W and Banerjee K 2024 *Nature Electronics* **7** 1147–1157
- [34] Venugopal R, Ren Z, Datta S, Lundstrom M S and Jovanovic D 2002 *Journal of Applied physics* **92** 3730–3739
- [35] Luisier M, Schenk A and Fichtner W 2006 *Journal of Applied physics* **100**
- [36] Baumgartner O, Stanojevic Z, Schnass K, Karner M and Kosina H 2013 *Journal of Computational Electronics* **12** 701–721
- [37] Berrada S, Carrillo-Nunez H, Lee J, Medina-Bailon C,

- Dutta T, Badami O, Adamu-Lema F, Thirunavukkarasu V, Georgiev V and Asenov A 2020 *Journal of Computational Electronics* **19** 1031–1046
- [38] Mosallanejad V, Li H, Cao G, Chiu K L, Dou W and Guo G p 2023 *Journal of Physics: Condensed Matter* **35** 475301
- [39] Polizzi E and Datta S 2003 Multidimensional nanoscale device modeling: the finite element method applied to the non-equilibrium green's function formalism 2003 *Third IEEE Conference on Nanotechnology, 2003. IEEE-NANO 2003*. vol 1 (IEEE) pp 40–43
- [40] Lee E, Dorligjav U, James R, Kim B, Cho H U and Baek S 2025 *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 108638
- [41] Burt M 1992 *Journal of Physics: Condensed Matter* **4** 6651
- [42] Sancho M L, Sancho J L, Sancho J L and Rubio J 1985 *Journal of Physics F: Metal Physics* **15** 851
- [43] Thorgilsson G and Viktorsson G 2014 *Journal of Computational Physics* **261** 256–266
- [44] Nguyen V H and Charlier J C 2023 *Journal of Computational Electronics* **22** 1215–1230
- [45] Thakur A and Sarkar N 2023 *The European Physical Journal B* **96** 113