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 підгрунтя
– значні чисельні ресурси
– невизначена адекватність

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

$$\underbrace{f(x,k,t)}_{\text{функція Вігнера}} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y;t)\underbrace{\psi(x-y;t)}_{\text{хвильова функція}} e^{2iky}\,dy \Rightarrow \underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hat{L}}{i\hbar} f + \hat{C} f}_{\text{рівняння Ліувілля, квантово-механічний аналог рівняння Больцмана}}$$

$\hat{L}$ – оператор Ліувілля

$\hat{C}$ – оператор розсіювання

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:

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

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

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

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

власні енергії

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

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

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

Метод огинаючої хвильових функцій

+ ефективне 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