

量子点接触中的电导与热功率:磁场与温度的影响*

李玉现^{1)†} 刘建军²⁾ 李伯臧¹⁾

¹⁾ 中国科学院物理研究所, 北京 100080)

²⁾ 河北师范大学物理学院, 石家庄 050016)

(2004 年 6 月 21 日收到, 2004 年 7 月 25 日收到修改稿)

在有限温度和不同磁场下, 精确计算了各种鞍形量子点接触中的量子化电导和热功率. 量子点接触的形状影响体系的量子化特征. 随磁场的增加, 量子化电导的台阶加宽, 热功率共振峰之间的距离加长, 共振峰的数量减少. 当温度升高时, 电导的量子化被破坏, 热功率的峰状结构也逐渐消失.

关键词: 量子点接触, 量子化电导, 热功率, 磁场

PACC: 7340G, 7430E

1. 引言

近年来, 量子点接触中的电子输运问题在理论和实验上都受到广泛关注^[1-6]. 由于该结构的长度小于电子的平均自由程, 横向的尺度接近费米波长, 所以量子效应非常明显. 横向约束导致能带的不连续性, 所以电子在输运过程中是通过不同的传输模式(通道)进行的. 实验上^[7]已经发现量子点接触的电导是量子化的, 其量子化单位是 $2e^2/h$. 理论上 Büttiker^[8]设计了一种鞍形的量子点接触, 精确计算了在二维情况下电导的变化趋势以及外加磁场对电导的影响, 发现磁场越大, 电导的台阶就越宽, 而当点接触的横向尺度远大于纵向尺度时, 电导的量子化台阶就会消失. 随后 Scherbakov 等人^[9]研究了三维情况下, 不同方向的磁场对电导的影响.

除了量子化电导外, 热功率也是量子点接触的一个重要的物理性质. Streda 等人^[10]首先计算了二维电子气的热功率. 他们发现在电导值跳跃的地方, 热功率出现了一个峰值. 随后的一些理论也对点接触的热功率进行了讨论. 研究结果表明, 当体系的结构发生变化时, 就会影响电导的变化趋势, 相应的热功率也发生改变. Chu 和 Chou^[11]研究了杂质对电导和热功率的影响, 观察到在杂质的影响下, 电导出现了斜坡、峰值, 以及打结等结构. 在化学势较小时, 电

导的峰值处, 热功率产生了双峰值结构, 而在电导线打结的地方, 热功率甚至出现了负值. 所有这些有趣的现象吸引了许多物理工作者对量子点接触进行更广泛和深入的研究.

本文分别计算了不同结构的量子点接触在不同温度和磁场下的量子化电导和热功率的变化趋势. 计算结果表明, 电导的量子化和热功率的峰状结构受到点接触形状的制约. 当温度和磁场变化时, 这种量子化效应也相应变化, 甚至消失.

2. 计算方法

采用 Büttiker 的马鞍形量子点接触结构^[8], 体系的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} \cdot (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + V(x, z), \quad (1)$$

其中 m^* 为电子的有效质量, e 为电子的电荷. A 为外加磁场势, 约束势 $V(x, z)$ 为光滑的、缓慢变化的. 沿着约束的轴方向为 z 轴, 横向为 x 轴, 在鞍点最细的地方约束势为 V_0 . 点接触的形状由 ω_x 和 ω_z 决定. 整个约束势可以表示成

$$V(x, z) = V_0 - \frac{1}{2} m^* \omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_x^2 x^2, \quad (2)$$

垂直于 x - z 平面方向加磁场 B , 回旋频率为 $\omega_c = |eB/mc|$. 由于方程(1)的 x 和 z 坐标是独立的, 可以采用分离变量法解薛定谔方程. 设波函数为

* 国家自然科学基金(批准号:10074075)资助的课题.

† E-mail: yxli@aphy.iphy.ac.cn

$$\Psi(x, z) = R(x)Z(z), \quad (3)$$

其中 z 分量可以写成

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + V_n^{\text{eff}}(z)Z = EZ, \quad (4)$$

V_n^{eff} 为有效势,

$$V_n^{\text{eff}}(z) = V_0 + \frac{1}{2} m^* \left(\frac{E_2}{\hbar} \right)^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) - 2m^* \left(\frac{E_1}{\hbar} \right)^2 z^2, \quad (5)$$

E_1, E_2 分别为^[8]

$$E_1 = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2}} [(\Omega^4 + 4\omega_z^2\omega_x^2)^{1/2} - \Omega^2]^{1/2}, \quad (6)$$

$$E_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} [(\Omega^4 + 4\omega_z^2\omega_x^2)^{1/2} + \Omega^2]^{1/2}, \quad (7)$$

我们利用了定义式 $\Omega^2 = \omega_c^2 + \omega_x^2 - \omega_z^2$.

在弹道输运过程中, 没有通道之间的相互隧穿, 只有在入射和透射通道相同时, 电子的透射系数才不为零. 所以电子的透射系数表示为

$$T_{m'm'} = \delta_{m'm'} \frac{1}{1 + \exp(-\pi\epsilon_n)}, \quad (8)$$

其中

$$\epsilon_n = \frac{E - E_2(n + \frac{1}{2}) - V_0}{E_1}. \quad (9)$$

知道了透射系数后, 就可以计算电导和热功率. 根据 Landauer-Büttiker 公式^[12], 电导的计算公式为

$$G = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f(E, \mu, T)}{\partial E} \right) \sum_{m'm'} T_{m'm'}, \quad (10)$$

热功率的表达式为^[10, 11]

$$S = \frac{k_B}{e} \frac{\int dE \left(-\frac{\partial f(E, \mu, T)}{\partial E} \right) \frac{E - \mu}{k_B T} \sum_{m'm'} T_{m'm'}}{\int dE \left(-\frac{\partial f(E, \mu, T)}{\partial E} \right) \sum_{m'm'} T_{m'm'}} \quad (11)$$

其中 $f(E, \mu, T)$ 为费米-狄拉克分布, T 为温度, k_B 为玻尔兹曼常数, μ 为化学势.

3. 计算结果与讨论

首先计算了不同横向约束情况下, 电导和热功率随化学势的变化关系, 如图 1 所示. 由图 1(a) 可以看出, 当 ω_x/ω_z 较大时, 点接触的孔径较小, 量子化电导的台阶非常明显. 随 ω_x/ω_z 的减小, 点接触的横向约束减弱, 电导的台阶逐渐变窄. 当 ω_x/ω_z 小于 1.5 时, 电导的台阶状结构基本上消失. 图 1(b) 为与图 1(a) 对应的热功率的变化曲线. 在电导突变的地方, 热功率有一个尖峰. ω_x/ω_z 减小, 这种峰状结构

发生偏移, 峰的个数增加, 这与电导的台阶变窄, 在相同的化学势范围内电导的台阶数增加相对应, 而且热功率振荡峰的振幅减小, 共振减弱. 当 $\omega_x/\omega_z = 1.0$ 时, 热功率曲线变成了振幅很小的波纹线. 这里虽然只计算了二维的情况, 但三维的结构有类似的结果.

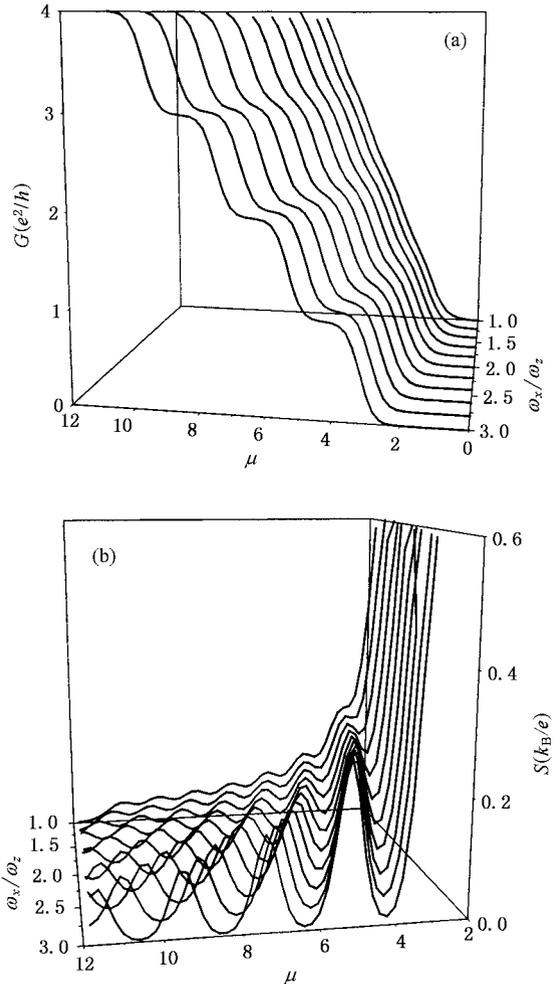


图 1 没有外加磁场时 (a) 电导和 (b) 热功率随化学势以及点接触形状的变化曲线 $k_B T = 0.1$

Landman 等人^[3]用分子动力学模拟方法, 研究了点接触的形状对电导的影响. 这些理论都很好地解释了点接触在拉伸过程中, 横向面积的减小导致电子的通道减小, 电导呈台阶状下降的现象. 实验上, Pascual 等人^[13]在拉伸金纳米线时, 测量了点接触的电导, 证实了电导的台阶结构. 该理论同样也可以解释热功率的变化. 由于热功率与电导的微商有关, 电导突变必然导致热功率的共振.

也计算了外加磁场时电导和热功率随化学势的变化关系, 结果见图 2. 磁场增加时, 回旋频率加强了

点接触的横向约束,电导的台阶加宽,所以在相同的化学势时,电导的台阶数较少,对应的热功率的共振峰也少.比如在化学势为 12.0 时,零磁场的电导对应 4 个台阶,热功率有三个共振峰.而磁场为 3.0 附近,电导只有三个台阶,热功率有两个峰值.

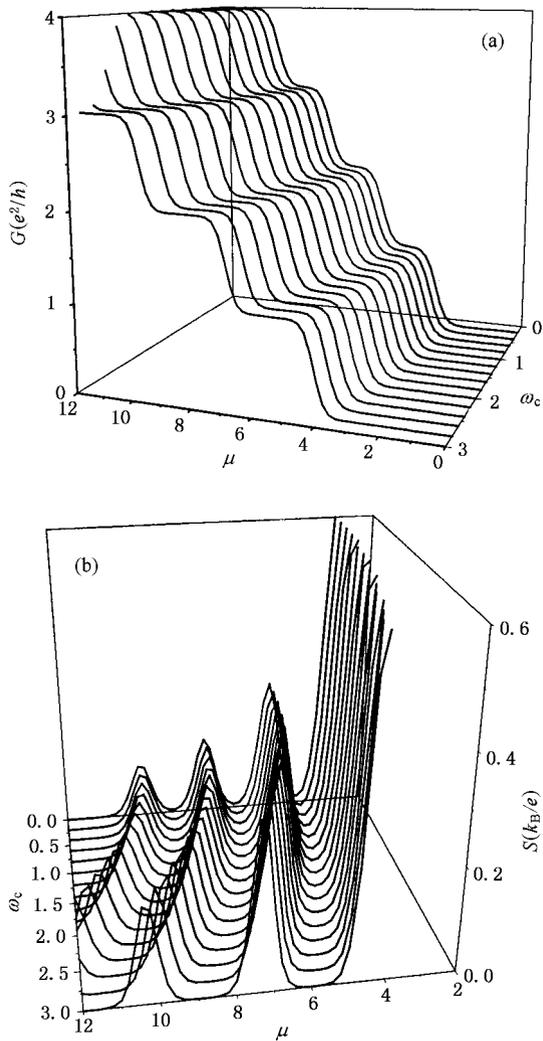


图 2 (a)电导和(b)热功率随化学势以及磁场的变化曲线 $\omega_x/\omega_z = 3, k_B T = 0.1$

最后计算了不同温度情况下的电导和热功率,结果如图 3 所示.由图 3 可以清楚地看到,温度升高后,由于电子的热运动急剧增加,电子的分布不再仅仅局限于费米面内,点接触的各个通道之间不再独立.电子可以从一个通道隧穿到另一个通道,破坏了量子化结构,电导的台阶结构消失,热功率也没有了峰状结构.当 $k_B T$ 大于 0.7 时,电导和热功率都变成了单调变化的曲线.由于弹道输运公式是建立在通道没有互相隧穿的基础上,所以当温度升高到一

定值时,系统处于非平衡态,弹道公式不再适用,需要用非平衡态统计理论做进一步的研究.

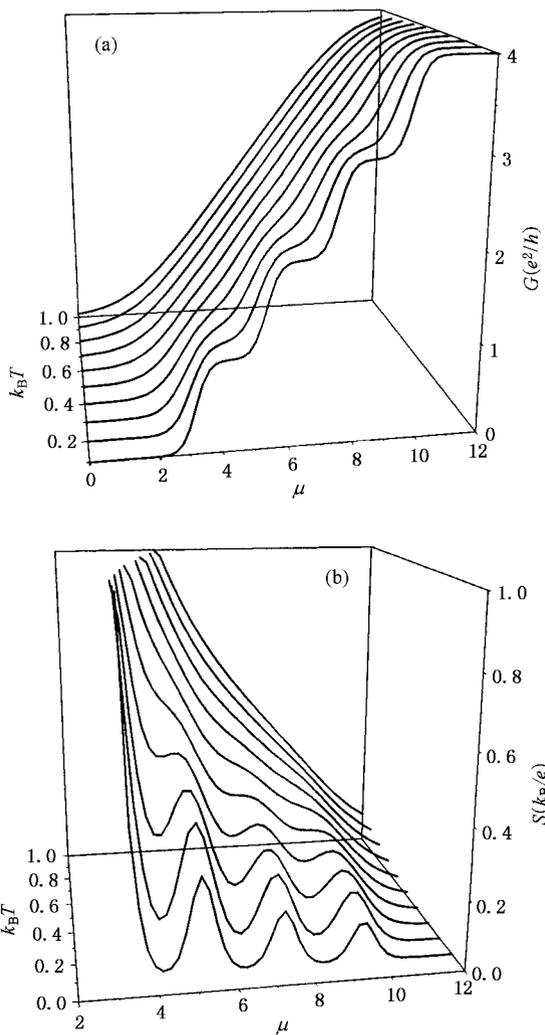


图 3 (a)电导和(b)热功率随化学势以及温度的变化曲线 $\omega_x/\omega_z = 3, \omega_c = 0$

4. 结 论

分别在不同点接触形状、外加磁场以及不同温度下,计算了电子电导和热功率随化学势的变化关系.从计算结果可以看出,无论是点接触的形状还是外加的磁场和温度,都对电导和热功率有很大影响.外磁场的增加会加强电导的量子化和热功率的峰状结构,而温度升高则破坏了这种结构,电导的台阶消失,热功率也不再随化学势的变化而振荡.

诚挚地感谢王鼎盛教授对本工作的支持与帮助.

- [1] Houten H , van Beenakker C W J and van Wees B J 1991 in *Quantum Point Contact in Semiconductors and Semimetals* ed by M A Reed (New York : Academic)
- [2] Kulik I O *et al* 1977 *Fiz. Nizk. Temp.* **3** 1543
- [3] Landman U *et al* 1990 *Science* **248** 454
- [4] Cleland A N , Aldridge J S , Driscoll D C and Gossard A C 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1699
- [5] Sprinzak D , Buks E , Heiblum M and Shtrikman H 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 5820
- [6] Xie Z W , Li B Z and Li Y X 2002 *Chin. Phys.* **11** 1060
- [7] van Wees B J *et al* 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 848
- [8] Büttiker M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7906
- [9] Scherbakov A G , Bogachek E N and Landman U 1996 *Phys. Rev. B* **53** 4054
- [10] Streda P 1989 *J. Phys. : Condens. Matter* **1** 1025
- [11] Chu C S and Chou M H 1994 *Phys. Rev. B* **50** 14212
- [12] Landauer R 1970 *Phil. Mag.* **21** 863
- [13] Pascual J I *et al* 1995 *Science* **267** 1793

Conductance and thermopower in quantum point contact : effect of magnetic field and temperature *

Li Yu-Xian^{1,2)†} Liu Jian-Jun²⁾ Li Bo-Zang¹⁾

¹⁾(Institute of Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 , China)

²⁾(College of Physics , Hebei Normal University , Shijiazhuang 050016 , China)

(Received 21 June 2004 ; revised manuscript received 25 July 2004)

Abstract

We calculate the conductance and thermopower in saddle quantum point contact under a finite temperature and different magnetic fields. The step-like conductance becomes flatter and the length between the peaks of the thermopower becomes longer with increasing magnetic field. The quantization of the conductance is destroyed and the peak structure of the thermopower disappears when the temperature becomes higher.

Keywords : quantum point contact , quantization conductance , thermopower , magnetic field

PACC : 7340G , 7430E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10074075).

† E-mail : yxli@aphy.iphy.ac.cn