

基于格林函数的多终端量子链状体系 电子输运性质的研究*

戴振宏¹⁾²⁾ 倪 军^{1)†}

¹⁾清华大学物理系, 北京 100084)

²⁾烟台大学物理系, 烟台 264005)

(2004 年 9 月 27 日收到, 2004 年 12 月 9 日收到修改稿)

利用递推格林函数技术计算了多终端量子体系的电子输运特性, 首先运用递归方法给出介观或量子体系的格林函数, 然后利用散射矩阵和输运方程给出体系的电导方程, 可以将多终端的输运简化为双终端的输运方程, 以便得到体系电子输运的谱结构. 计算结果表明, 由于中间节点的存在, 使器件的传输谱偏离一维链的对称性, 在低能量端出现一个新的电导峰值. 此外, 本方法可以被应用到各种复杂的带有吸附结构量子体系输运的研究中.

关键词: 格林函数, 散射矩阵, 量子体系

PACC: 7335, 0365

1. 引 言

近年来, 随着微加工技术的发展, 使某些电子器件和人工微结构制作工艺进入了介观和量子物理领域, 人们可以刻蚀出许多低维的量子结构, 这些新型的介观和量子器件显示了许多独特的光学和电学磁性^[1-4], 由于这种体系的尺度主要处于纳米量级范围内, 因此通常的固体物理中的电导公式已经无法完全描述此类结构的电学特性^[4, 5], Landauer-Büttiker 公式在描述介观或量子小体系平衡态电子输运性质中起了重要的作用^[6, 7], 很多介观和纳米小体系的电导特性都遵循这个公式. 对于双终端电子器件, 在自旋兼并的条件下, 电导可以表示为 $G = (2e^2/h)T$, 这里 T 是传输概率系数, e 是电子电荷, h 是普朗克常数. 目前已经有了各种各样的数值方法研究传输系数 T , 包括模匹配方法^[8, 9], 传输矩阵方法^[10-12]和实空间格林函数方法^[13]. 目前多终端器件以及夹杂量子点的介观器件以及量子点的链状结构成为研究的热点^[14, 15], 人们往往在实验和理论上构造各种结构的介观器件^[16-20], 研究其在电场和磁场下的输运特性, 因为此种结构是将来大规模集

成电路的基本元件, 因此人们迫切需要了解它的各种新的电学特性. 由于无规形状和多终端器件结构的复杂性, 使用以上介绍的理论方法有其局限性. 尽管实空间格林函数方法可以用于研究此类结构, 但是它需要很大的计算机时, 本文采用了递归的格林函数方法, 计算特定体系的格林函数, 然后用格林函数得到体系的散射矩阵, 进而计算出体系的传输系数和反射系数. 虽然本文只研究了两终端和三终端器件, 但可以很方便地推广到多终端器件, 也可以用此方法研究各种形状的量子点和空腔结构, 研究其电子输运和磁输运特性, 同时可以利用获得的平衡态的格林函数来构造非平衡态的格林函数, 进而研究各种处于非线性和非平衡态介观器件的输运特性.

2. 理论模型和计算方法

我们可以将一维的介观或量子器件离散化, 分成网格段, 模型如图 1 所示.

我们假定了有很多小段构成的介观器件, 其中 A 段和 B 段的格林函数分别为 G^A, G^B , 此两段的总格林函数为 G^{A+B} .

* 国家重点基础发展规划项目(批准号: G2000067107)资助的课题.

† E-mail: junni@mail.tsinghua.edu.cn

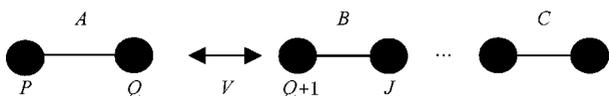


图1 一维介观器件的离散化示意图

在忽略内部相互作用(如电子-电子,电子-声子相互作用等)格林函数的递推公式为

$$G_{jp}^{A+B} = G_{j,q+1}^B V_{q+1,q} (1 - G_{qq}^A S_q^B)^{-1} G_{qp}^A, \quad (1)$$

$$G_{pp}^{A+B} = G_{pp}^1 + G_{pq}^A S_q^B (1 - G_{qq}^A S_q^B)^{-1} G_{qp}^A, \quad (2)$$

其中类散射项

$$S_q^B = V_{q,q+1} G_{q+1,q+1}^B V_{q+1,q}, \quad (3)$$

能量

$$V_{q,q+1} = V_{q+1,q} \quad (4)$$

是离散点 Q 和 $Q+1$ 之间的跨越能。

通过上述格林函数的递推式子,就把 A 段的格林函数 G_{qp} 递推到 J 端变为 G_{jp} 。这样将 $(A+B)$ 视为新的 A 段,与随后的分段重新组合再次形成新的 A 段,这样依次向下做,所需要的仅仅是每段离散的格林函数,最终可以得到整个体系的格林函数。

对于如图 2 所示的有限尺度的格子链体系,图 1 所示的 A 段的格林函数就退化为一个格点的格林函数,其值可以由格林函数的定义得到

$$G_n = \frac{1}{E - \epsilon_n + i\eta} \equiv \frac{1}{E - 2T}, \quad (5)$$

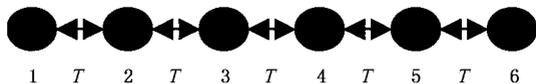


图2 格子链体系模型示意图

其中 T 是离散点和两边相邻点的跨越能,在计算中,由于是计算机浮点运算,编程当中可以不考虑格林函数中的无穷小量 η 。对于终端可以理解为一个半无限的引线,对于半无限引线的格林函数,其值是可以解析求解,为

$$G_m^{\text{semi}} = \frac{\exp(i\theta)}{T}, \quad \cos\theta = \frac{E - 2T}{2T}, \quad (6)$$

同时对于有限长的均匀链的格林函数也可以得到解析表达式

$$G_{11} = \frac{\text{si}(\theta)}{T \text{si}((M+1)\theta)}, \quad G_{1M} = \frac{\text{si}(\theta)}{T \text{si}((M+1)\theta)} \quad (7)$$

角度的定义和半无限长引线中一致,此格林函数的解析形式的详细推导过程见文献 [21]。

得到体系平衡态的格林函数,可以构造出推迟和超前格林函数,就可以利用它们来计算传输系数,传输系数的计算公式为

$$T_{pq} = \text{Tr} [\Gamma_p G^R \Gamma_q G^A], \quad (8)$$

其中 Tr 表示求迹, Γ_p, Γ_q 为 p 端和 q 端引线的能量展宽系数,其值均为

$$\Gamma_p = \frac{\hbar\nu}{a} = 2T \text{si}(ka). \quad (9)$$

它的计算可以使用一维体系的能量表达式来求得,因为能量色散关系为

$$E(k) = U_0 + 2T(1 - \cos(ka)), \quad (10)$$

a 表示相邻格点的距离,传输系数公式中的 G^R 和 G^A 表示推迟和超前格林函数。

3. 数值结果和分析

首先利用推迟格林函数研究了两终端量子链体系,两个引线对称地放在有限维的量子链两端,并被假定为半无限长的结构,针对此种模型,我们使用了递推格林函数的方法研究了不同引线情况下的电子传输概率,结果如图 3 所示。

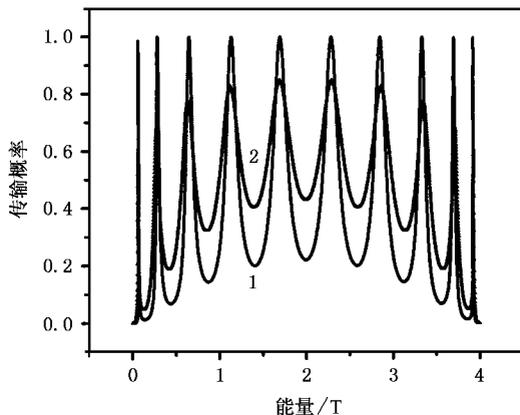


图3 双终端量子体系的传输概率,器件离散为 10 个格点(曲线 1 是一种引线接触对称的结构,接触点的跨越能是 $0.5T$,曲线 2 表示一种非对称的引线接触点,其中左边的引线跨越能是 $0.75T$,右边的是 $0.5T$,计算中设定所有格点的势能参考值为零)

从图 3 可以看出,对于双终端的结构,电子传输峰值的个数等于量子链中量子点的个数,在两边点接触对称结构下,传输峰值等于 1,但是随着引线接头对称性的破坏,传输系数峰值降低并出现了展宽,并且这种现象在低能端和高能端尤为明显,我们使用递推格林函数技术得到的结果与文献 [13] 的结果是一致的。我们的方法可以用来研究各种含有吸

附点或者分权结构的介观器件,图 4 给出此种双终端量子点链状结构的反射概率系数.

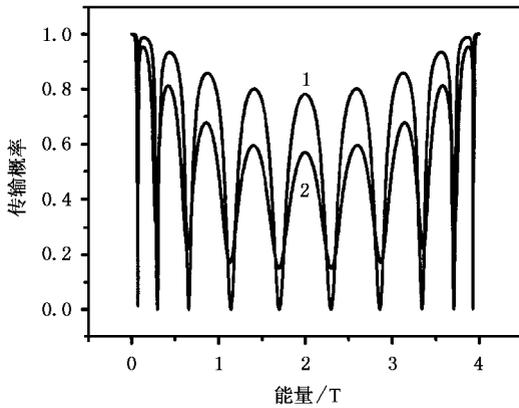


图 4 双终端量子体系的反射概率,器件离散成 10 个格点(曲线 1 是一种引线接触的对称结构,接触点的跨越能是 $0.5T$,曲线 2 表示一种非对称的引线接触点,其中左边的引线跨越能是 $0.75T$,右边的是 $0.5T$,计算中我们设定所有格点的势能参考值为零)

对于这种结构的反射系数,也呈现了一样的规律.随着引线接头对称性的破坏,反射系数的峰值也出现明显的下降,峰值和谷值的差也减少.这样一维链状结构两端引线的对称性,对量子链的电子传输会产生很大的影响.通过以上的计算表明,递推格林函数方法可以较为方便地应用到介观量子体系输运性质的研究中,随后我们使用此方法研究了三终端体系的输运特性,结构模型如图 5 所示.

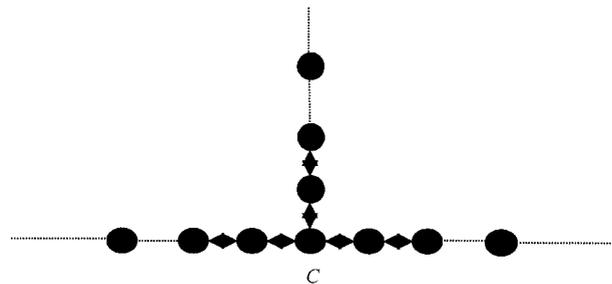


图 5 三终端介观器件的格子点模型

我们对于器件中的每一个格点,构造了其独立格林函数,在本文研究的体系中,对于量子链上的格点,其分立格林函数为

$$G_s = \frac{1}{E - \epsilon_n + i\eta} \equiv \frac{1}{E - 2T}$$

器件的中间格点有三个最近邻,根据紧束缚模型,其分立格林函数应该表示为

$$G_s = \frac{1}{E - \epsilon_n + i\eta} \equiv \frac{1}{E - 3T}. \quad (11)$$

我们在计算中发现,在三终端的结构中,与文献 [13] 相比,我们发现了一个新的电导峰值,由于中间增加了无线长的链状接头,使中间格点的分立格林函数出现了变化,器件整体的格林函数将出现明显的变化,传输系数相对于能量的对称性结构出现了一定的偏离,计算结果如图 6 所示.

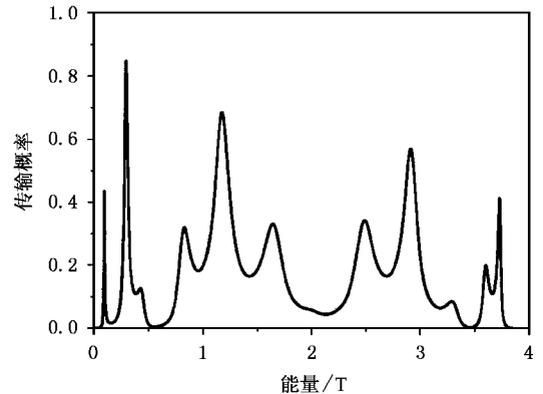


图 6 三终端量子体系的传输概率系数随能量的变化曲线(接触点的跨越能是 $0.5T$,计算中设定所有格点的势能参考值为零)

通过以上的计算表明,对于三终端结构,由于中间的节点,导致了电子传输的非对称结构,中间节点的存在改变了通道内的电子态密度的分布,在低能端出现了一个新的电导峰值.根据我们的计算可以推断,在一个一维的量子链结构中,中间特殊节点的存在会很大地影响了电导传输特性.根据(11)式也可以得到一个重要的结论,如果在一维链中的某个格点吸附了杂质和缺陷,将对两终端的量子器件的传输特性产生很大影响,我们将在随后的研究中,重点研究这种吸附结构的电子输运特性.

4. 结论与讨论

我们利用了递推格林函数方法计算得到了链状和三终端量子体系的电子传输系数和反射系数,研究了此类体系的输运特性.结果表明,格林函数方法在处理量子器件的输运方面有很大的优越性,相对于模匹配和转移矩阵方法,它具有很大的灵活性,可以用来研究复杂体系结构的输运性质,包括一些磁输运特性,可以较为方便的将磁场加到格林函数中.我们的研究表明,对于量子体系中存在缺陷,杂质以及形状的起伏,都可以方便的处理.利用此种方法

可以研究目前实验上遇到的各种平衡态的结构器件 , 同时也可以利用得到的平衡态格林函数来构造非平衡态格林函数 , 进而研究各种非线性和非平衡

态的特性 , 这在量子领域和介观领域中是非常重要的。我们会在今后的工作中进一步研究各种低维量子空腔器件以及耦合器件的电输运特性。

- [1] Dai Z H *et al* 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2577
- [2] Yacoby A *et al* 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 4612
- [3] Wang S D *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **65** 125307-1
- [4] Guo Y *et al* 2001 *Phys. Lett. A* **284** 205
- [5] Ryu C M and Cho S Y 1998 *Phys. Rev. B* **58** 3572
- [6] Kirzenow G 1989 *Phys. Rev. B* **47** 10452
- [7] Ramsak A , Rejec T and Jefferson J H 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4014
- [8] Dai Z H , Sun J Z and Yu Y B 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 1406 (in Chinese) [戴振宏、孙金祚、余亚宾 1997 物理学报 **46** 1406]
- [9] Xia J B 1992 *Phys. Rev. B* **45** 3593
- [10] Dai Z H , Sun J Z and Yang F M 2000 *Research & Progress of SSE* **20** 363 (in Chinese) [戴振宏、孙金祚、杨富民 2000 固体电子学研究进展 **20** 363]
- [11] Dai Z H , Sun J Z and Yang F M 1999 *Comm. Theo. Phys.* **32** 27
- [12] Xu H Q and Sheng W D 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11903
- [13] Xu H Q 2002 *Phys. Rev. B* **66** 165305-1
- [14] Wang S D *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **65** 125307-1
- [15] Ryu C M and Cho S Y 1998 *Phys. Rev. B* **60** 3572
- [16] Gong S Q , Wang Z Y , Feng X L and Xu Z Z 2000 *Chin. Phys.* **9** 94
- [17] Wang C K , Gao T J and Xun C S 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2033 (in Chinese) [王传奎、高铁军、薛成山 2000 物理学报 **49** 2033]
- [18] Wang J S , Liu T K and Zhan M S 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2271 (in Chinese) [王继锁、刘堂昆、詹明生 2000 物理学报 **49** 2271]
- [19] Yu Y B *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **63** 205314
- [20] Yu Y B *et al* 2002 *J. Phys. Condens. Matter.* **14** 703
- [21] Datta S 1995 *In Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press , Cambridge)

Electron transport in multi-terminal quantum chain systems based on the Green 's functions *

Dai Zhen-Hong^{1,2)} Ni Jun¹⁾*

¹⁾(Department of Physics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

²⁾(Department of Physics , Yantai University Yantai 264005 , China)

(Received 27 September 2004 ; revised manuscript received 9 December 2004)

Abstract

We have introduced a method for the calculation of electron transport in a multi-terminal quantum system based on the recursive Green 's function technique. The corresponding transport equation is presented by scattering matrix , which is expressed by Green 's function. Using this method , the multi-terminal device can be simplified as a standard two-terminal device , which is convenient in treating the mesoscopic device. It is found that the transmission and reflection probabilities of the two multi-terminal quantum systems show complex spectra. The results show that the special node can destroy the symmetrical conductance spectra , and there is a new conductance peak in the low-energy region. This method can also be applied to the study of electron transport of complex mesoscopic structures.

Keywords : Green 's function , scattering matrix , quantum system

PACC : 7335 , 0365

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. G2000067107).

†E-mail : junni@mail.tsinghua.edu.cn