

相干介观系统中散粒噪声的 Monte Carlo 模拟方法研究*

陈 华^{1)†} 杜 磊¹⁾ 庄奕琪²⁾

1) 西安电子科技大学技术物理学院, 西安 710071)

2) 西安电子科技大学微电子学院, 西安 710071)

(2007 年 9 月 17 日收到, 2007 年 11 月 16 日收到修改稿)

根据电荷通过低温量子导体时具有的二项分布导致散粒噪声这一结论, 结合 Landauer 电流公式的物理内涵建立了相干介观系统中的散粒噪声模型, 并通过 Monte Carlo 模拟方法产生了散粒噪声时间序列. 介观系统中散粒噪声的抑制来源于电子输运时的相关性, 传输本征值双峰分布导致量子混沌腔和无序金属中的散粒噪声抑制. 根据这两个结论, 通过 Monte Carlo 模拟定性分析了传输本征值分布与电子输运相关性之间的关系.

关键词: 散粒噪声, Landauer 公式, 介观系统

PACC: 7270, 7210

1. 引 言

散粒噪声来源于电子的离散本征特性^[1]和运动的随机性^[2]. 1918 年, 肖特基发现真空管中的散粒噪声正比于平均电流, 并给出了 $S = 2e\bar{I}$, 其中 S 为散粒噪声功率谱密度, \bar{I} 为平均电流, e 为电子电量. 最近的十几年, 无论从实验上还是从理论上, 人们对低维系统和介观系统中散粒噪声的关注与日俱增^[2-5]. 散粒噪声及其抑制现象即 $S < 2e\bar{I}$ 广泛地存在于介观系统的电流涨落中, 电子在系统中输运时的相关性能导致散粒噪声的抑制. 例如, 遵守费米统计的简并电子系统中的 Pauli 原理, 短程库仑相互作用即电子-电子间的散射, 在扩散导体中产生 $\sqrt{3}/4$ 的散粒噪声抑制; 另外, 长程库仑作用(通过自洽电势)也使载流子之间产生相关性^[2-4, 6].

由于散粒噪声比直流特性(即低频电导)能够提供更多的系统内部信息, 散粒噪声测试与分析已经成为研究低维和介观器件中电子传输的一项基本工具. 例如, 散粒噪声检测可以用于确定准粒子的分数电荷值、Luttinger 参数、有效超导电荷值、原子点接

触的量子传输模型以及隧穿机制等等^[2, 3, 6]. 为了理解介观结构散粒噪声产生与抑制的机理, 本文在 Landauer 公式的基础上, 采用 Monte Carlo 方法模拟电子通过特定纳米结构中势垒的电子输运. 所采用的模拟方法可直接得到相干介观系统中电流噪声的时间序列, 其平均值为平均电流, 自相关函数的傅里叶变换为噪声功率谱密度. 将该方法应用于量子混沌腔电子输运模拟, 对比模拟结果与解析理论结果, 以验证模拟方法的正确性. 应用该模拟方法还研究了相干介观系统中散粒噪声的产生与抑制机理.

2. 基本模型

Landauer 公式的特点是用系统的散射特性来表示电导, 适用于不同材料或不同几何形状的导体连接组成系统时的电导^[7],

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (1)$$

式中 T_n 为传输本征值, 其物理意义为某个通道的透射概率, h 为普朗克常数, 自旋兼并度为 2. Landauer 公式的适用条件是线性响应区^[7, 8]. 电子相

* 国家自然科学基金(批准号: 60676053)资助的课题.

† E-mail: addal@163.com

互独立地在根据能量划分的各个通道中输运. Landauer 公式不仅是极为有用的计算工具,而且可以合理地解释普适电导涨落和量子化电导等诸多介观物理现象,并且预测出电导平台处散粒噪声为零等一些有趣的物理现象.

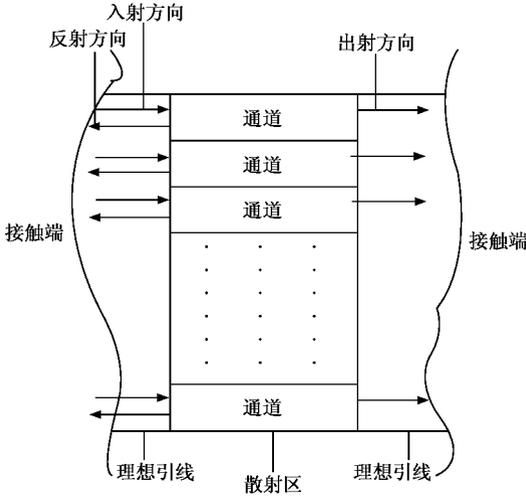


图 1 电子在多通道中传输示意图

如图 1 所示,左右接触部分是处于热平衡的电子库,其化学势分别为 μ_L 和 μ_R ,且 $0 < \mu_L - \mu_R \ll \mu_L$ (以保证系统处于 Landauer 公式成立的线性响应区).电子在散射部分的通道中是相干输运,而在接触端电子的相位是随机化的,接触端的电子可以通过一维理想引线的通道注入到散射部分^[7].此处考虑的是散射部分的尺寸小于相位相干长度,只考虑相干输运.在偏压作用下,少数电子通过散射区域的输运不影响电子库中的热平衡.为了抑制热噪声对散粒噪声的干扰,实验总是在极低的温度下测量散粒噪声.在低温环境中,介观系统中的热涨落远远小于散粒噪声涨落.图 1 所示的通道具有确定的横向模式,考虑电子只在能量最低的一个电子通道内运动的情况^[8],流经通道的电流为

$$\begin{aligned} I &= nev \\ &= \frac{dn}{dE} \Delta\mu ev(k) T(E) \\ &= \frac{e^2}{h} TV, \end{aligned} \quad (2)$$

式中 n 是电子浓度, $\frac{dn}{dE}$ 是电子的态密度, e 是电子电荷, v 为电子速度, $\Delta\mu$ 为化学势之差, V 为偏压. 对于一维运动的电子态,有

$$\frac{dn}{dE} = \frac{1}{2\pi} \frac{dk}{dE},$$

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk},$$

$$\Delta\mu = eV.$$

系统处于线性响应区,透射概率 $T(E)$ 对于能量的依赖关系可以忽略.由此可见电流大小与电子运动速度无关,这正是一维运动的特点.如果考虑自旋简并度,则

$$I = \frac{2e^2}{h} TV.$$

这就是单通道的 Landauer 电流公式.推导过程中虽然忽略了电子在散射区另一端反向传输的影响,但是在低温下该式是正确的.低温时对于这样一个理想的一维系统,总电流是两边注入电流的代数和,总电流可表示为

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{2\pi} \left[\int_0^{\mu_L} dE \frac{dk}{dE} v(k) T(E) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^{\mu_R} dE \frac{dk'}{dE} v(k') T(E) \right] \\ &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E) \\ &= \frac{2e^2}{h} TV. \end{aligned} \quad (3)$$

在短程库仑排斥作用可以忽略的情况下,很容易观察到单通道量子输运的电流涨落^[7].不妨假设参与输运的电子具有相同的自旋方向(即自旋极化输运),从而每个通道每次只能输运一个电子.这种单通道的情况可以通过耗尽异质结中的二维电子气来实现.能量高于费米能级 E_F 而低于 $E_F + eV$ 的电子以频率 eV/\hbar 试图穿越散射区,在时间段 t 内,试图穿越的次数为 teV/\hbar ^[3,7].在零温度下电子占据能量低的状态,根据 Pauli 原理,这些被电子填充的状态只包含一个电子,因而试图穿越次数不会发生涨落^[3].成功传输电荷的透射概率 $T \in (0, 1)$, T 导致传输电荷 Q 的涨落,电荷电量涨落的均方值为^[3,9]

$$\delta Q^2 = e^2 \frac{teV}{\hbar} T(1-T), \quad (4)$$

式中 \cdot 表示对时间的平均.电流涨落的均方值和传输电荷涨落的关系为

$$S = (2/t) \delta Q^2.$$

由此得到

$$\begin{aligned} S &= 2e \frac{e^2}{\hbar} VT(1-T) \\ &= 2eI. \end{aligned} \quad (5)$$

此处不考虑自旋简并,

$$I = \frac{e^2}{h} TV.$$

从单通道模型可以看出,与真空中散粒噪声功率谱密度 $S = 2eI$ 相比,二项分布的确在电子输运过程中产生涨落并导致散粒噪声的抑制.低温下,费米能级处有 N 个通道被占据,它们都对电流有贡献.电子在各个通道中的输运相互独立,从而其涨落也相互独立^[3,7],多通道的噪声功率谱密度只需对各通道简单求和,即

$$S = 2e \frac{e^2}{h} V \sum_{n=1}^N T_n (1 - T_n). \quad (6)$$

3. Monte Carlo 模拟方法与结果验证

3.1. Monte Carlo 模拟

某一通道上的电子输运在一个短时间段上满足 0,1 分布,则在较长的时间段上满足二项分布.电子在单位时间内利用一个通道试图穿越散射区域的次数为 $h\kappa(qV)$,则每次尝试穿越所用时间 τ 为 $h\kappa(qV)$.散射区域两端的电压 V 越大,电子运动的频率越高,这就要求在功率谱密度分析时采用更高的采样频率.为了简化此处的考虑,不妨认为此处电压的增加不开启新的通道,也不改变每个通道的透射概率.具体分析散粒噪声时,偏压 V 与采样频率成正比,定性用采样频率的增加来表示 V 的增加.

下面给出 Monte Carlo 模拟步骤.

步骤 I 假设通道数为 N ,利用第 i 个通道($i = 1, 2, 3$)成功穿越散射区的概率为 T_i .用 Monte Carlo 方法产生以 T_i 为概率的 0,1 分布的随机数.结果为“1”表示电子成功穿越后到达收集接触端,结果为“0”表示电子由于散射而发生反射,回到源接触端.

步骤 II 对这 N 个通道产生的结果求和,记为 $n(t_i)$,则该时间点的电流为

$$I(t_i) = \frac{en(t_i)}{\tau}.$$

步骤 III 重复步骤 I 和步骤 II m 次,产生 $I(t_i)$ ($i = 1, 2, 3, \dots, m$) 时间序列,分析时间序列得到平均电流和噪声功率谱密度.

步骤 IV 改变电压 V ,得到不同偏置条件下的噪声功率谱密度和平均电流.

综上所述,模拟的主要参数有通道个数 N 、时间序列长度 m 、 T_i 的分布以及施加的偏压 V (即采样频率).

3.2. 模拟结果

按照以上的模拟方法,对量子混沌腔中的情况进行模拟.在量子混沌腔中,传输本征值满足的分布(图 2)为

$$\rho(T) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{T(1-T)}},$$

将其代入 Fano 因子的表达式

$$F = \frac{S}{2eI} = \frac{\sum_{n=1}^N T_n(1 - T_n)}{\sum_{n=1}^N T_n}, \quad (7)$$

得到 $F = 1/4$.

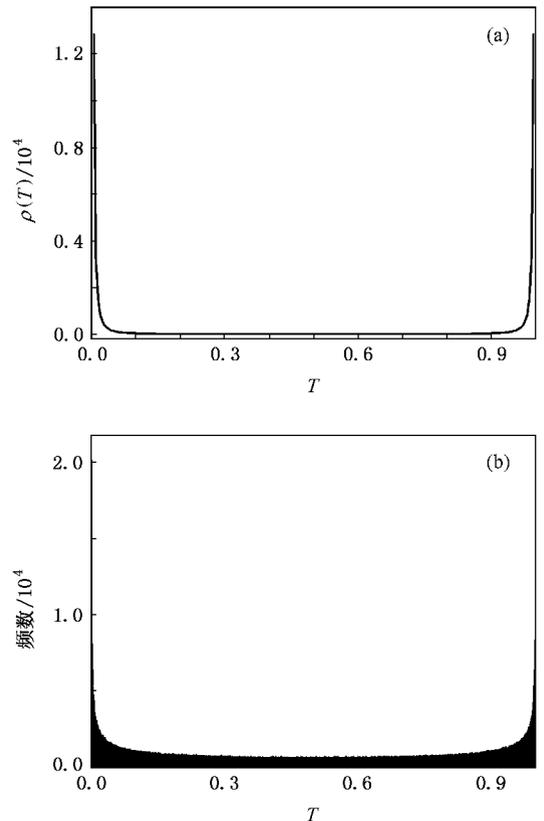


图 2 量子混沌腔中传输本征值的分布 (a)解析图 (b)频数直方图

图 2(b)为用 Monte Carlo 方法产生的随机数的频数直方图,共产生了 10^6 个点,分成 1000 段.在 $N = 1000$, $m = 10000$,采样频率 $f = 200$ Hz 的条件下产生时间序列,得到图 3 所示的电子流噪声功率谱密度.电子流 j 与电流 I 的关系为

$$j = \frac{I}{e}.$$

电子流噪声功率谱密度 P 与电流噪声功率谱密度 S 的关系为

$$P = \frac{S}{e^2}.$$

将这两个关系式代入(7)式后得到

$$F = \frac{P}{2j}.$$

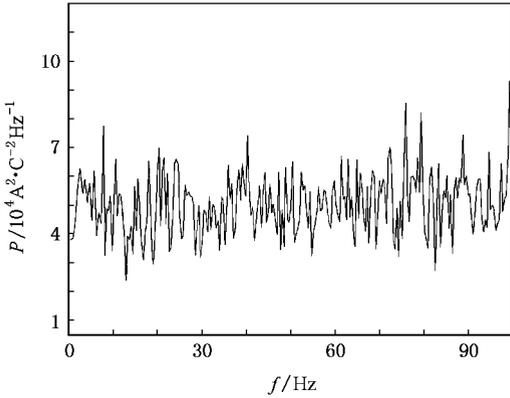


图3 量子混沌腔体中的噪声

从噪声功率谱密度中可以看出所产生的噪声为白噪声,又由于所使用的模型是基于载流子的离散特性和传输时的随机特性,符合散粒噪声的定义,因此产生的噪声确为散粒噪声.为了进一步验证该方法的有效性,采用改变偏置电压即相应地改变采样频谱的方法,得到如图4所示的量子混沌腔中电子流噪声功率谱密度与电子流的关系.图4中的采样频率为100 200 250 300 350 Hz,经最小二乘法拟合得到 $F = 1/4$.

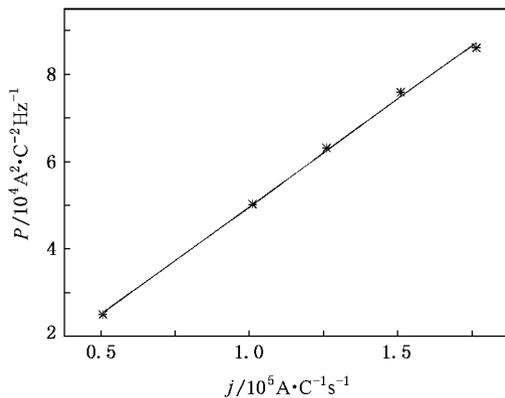


图4 量子混沌腔中散粒噪声功率谱密度与电流的关系

本文的模型不考虑电子自旋,电导量子为 e^2/h ,此时 Landauer 公式具体形式为

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_n T_n. \quad (8)$$

将模拟产生的数据代入(8)式,得到 $G = 0.0196 S$.平均电流与电导分别为

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{\tau} n \\ &= \frac{e}{h} n eV \\ &= e^2 \frac{V}{h} n, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} G &= \frac{I}{V} \\ &= \frac{e^2}{h} n. \end{aligned} \quad (10)$$

如果取采样频率为350 Hz,模拟得到 $n = 506.714$,则 $G = 0.0196 S$.由此可知,通过模拟所得的电导也验证了该方法的正确性.

4. 讨 论

为了得到散粒噪声与介观输运更多的细节关系,构造出图5(a)和图5(b)两种传输本征值的分

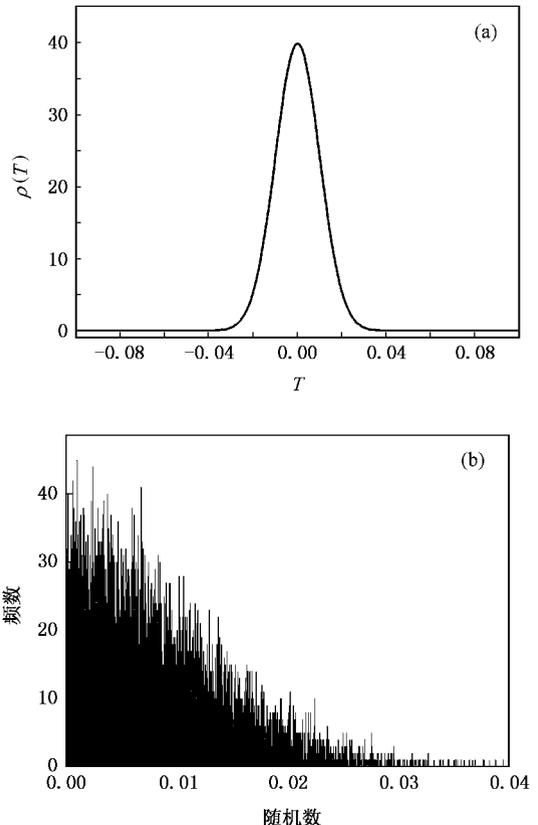


图5 传输本征值单峰分布 (a)均值为零,方差为0.0001的正态分布 (b)构造出的单峰分布

布.使用 Matlab 中的函数 Normpdf 产生均值为零,方差为 0.0001 的正态分布,如图 5(a)所示;先用函数 Normrnd(0,0.01,1,10000)产生随机数,对小于零的随机数取绝对值,对称到相应大于零的位置,如图 5(b)所示.用函数 Normpdf 产生均值为零,方差为 0.01 的正态分布,如图 6(a)所示;先用函数 Normrnd(0,0.1,1,10000)产生随机数,将小于零的随机数加 1,构造出双峰分布,如图 6(b)所示.

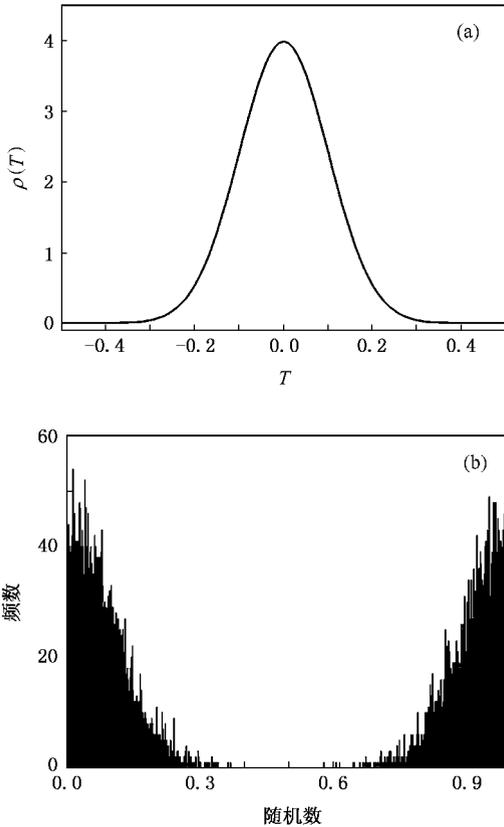


图 6 传输本征值双峰分布 (a)均值为零,方差为 0.01 的正态分布 (b)构造出的双峰分布

真空管中电子从阴极到阳极的输运过程为泊松过程,不相重叠的时间段上电子的到达是相互独立的,满足肖特基公式 $S = 2e\bar{i}$.真空管和一些结型器件(如 p-n 结)中的电子输运过程的确如此.这是由于这些结构中电子能态的占据数很小,费米统计与玻尔兹曼统计不可区分,呈现出非简并性.然而在更多的场合,尤其在介观输运中电子呈现出相关性.介观系统中电子输运时的相关性使噪声功率谱密度大于或小于 $2e\bar{i}$,通常用 Fano 因子来表示散粒噪声的增强和抑制.电子输运不相关时, $F = 1$;正相关时, $F > 1$;负相关时, $F < 1$ ^[26].从图 5(b)可以看出,传输本征值绝大多数都小于 0.025.在 $N = 1000, m =$

5000 $f = 100, 200, 250, 300, 350$ Hz 时产生的电子流噪声功率谱密度与电子流的关系如图 7 所示,经最小二乘法拟合得到的 $F = 0.99$.从图 7 的分析结果可以发现 Fano 因子接近于 1,意味着电子在这种情况下输运为泊松过程,传输本征值的单峰分布与电子输运的不相关性密切相关.与文献[10]中报道的“当所有的透射概率都很小时,回归泊松散粒噪声,对应高势垒的情况”相一致.

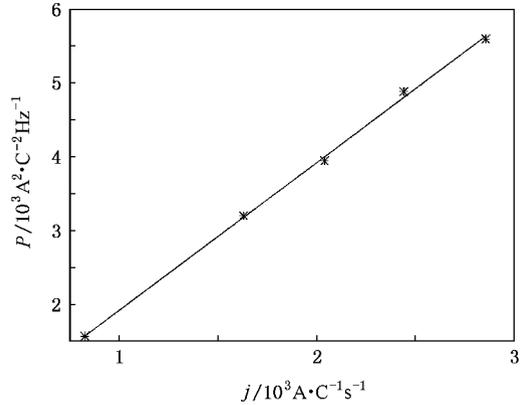


图 7 传输本征值单峰分布时,散粒噪声电子流功率谱密度与电子流的关系

在 $N = 1000, m = 10000, f = 100, 200, 250, 300, 350$ Hz 时产生图 8 所示的电子流噪声功率谱密度与电子流的关系.经最小二乘法拟合得到的 $F = 0.28$,所以这种分布呈现出散粒噪声的抑制.广泛存在于无序与相干金属($F = 1/3$)和量子混沌腔($F = 1/4$)中的双峰分布,导致了散粒噪声的抑制.由此可见,传输本征值的双峰分布是一种抑制的来源. $F < 1$ 标志着电子传输时序上的负相关性,即一个电子的成功传输会阻碍其他电子的成功传输.这是符合 Pauli 原理的,因此也提示我们将 Pauli 原理导致的电子输

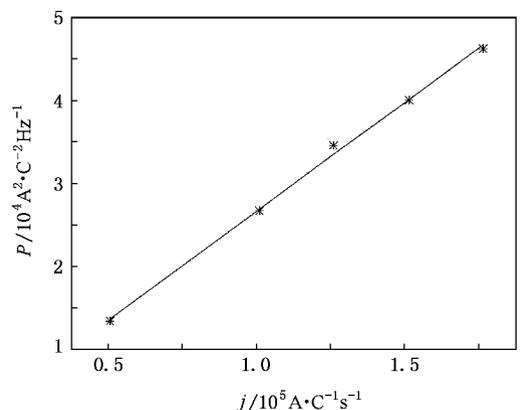


图 8 传输本征值双峰分布时,散粒噪声电子流功率谱密度与电子流的关系

运的负相关与传输本征值的双峰分布相联系. 为了计算快捷, 模拟采用的通道数的数量级为 10^3 , 然而无序金属等多通道情况的通道数往往大于 10^3 , 通道数与导体的横截面积正相关, 表 1 中的模拟结果表明通道数的增加不改变抑制的大小. 同样的双峰分布具有普适的 Fano 因子, 这一点可以与概率论中“总体的简单随机样本应该具有相同的统计量”相类比. 这与文献报道的无序金属和量子混沌腔中散粒噪声的抑制具有普适性相一致^[3, 4, 10].

表 1 仅改变通道数 N 得到 $S(2eI)$ 的结果

通道数 N	1000	2000	2500	3000	3500
F	0.2800	0.2769	0.3000	0.3000	0.3000

5. 结 论

将在介观物理中占有重要地位的散粒噪声与 Landauer 公式相结合, 产生了相干介观系统中散粒噪声的时间序列. 通过对纯量子混沌腔的验证, 证实了散粒噪声时间序列产生方法的正确性, 为散粒噪声的时间序列分析以及进一步从散粒噪声中提取更多的介观结构输运信息提供了有利条件. 另外, 还定量地研究了散粒噪声抑制程度与传输本征值分布的关系, 定性地分析了传输本征值分布与电子输运相关性的关系.

- [1] Schottky W 1918 *Ann. Phys.* **57** 541
- [2] Gonzalez T, Mateos J, Pardo D, Bulashenko O M, Reggiani L 1998 *Semicond. Sci. Technol.* **13** 714
- [3] Beenakker C, Schonenberger C 2003 *Phys. Today* **56** 37
- [4] Blanter Y M, Büttiker M 2000 *Phys. Rep.* **336** 1
- [5] An X T, Li Y X, Liu J J 2007 *Acta Phy. Sin.* **56** 4105 (in Chinese) [安兴涛、李玉观、刘建军 2007 物理学报 **56** 4105]
- [6] Zhang Z Y, Wang T H 2004 *Acta Phy. Sin.* **53** 942 (in Chinese) [张志勇、王太宏 2004 物理学报 **53** 942]
- [7] Levitov L S, Lesovik G B 1993 *JETP Lett.* **58** 230
- [8] Du L, Zhuang Y Q 2004 *Nanoelectronics* (Beijing: Electronics Industry Press) [in Chinese] [杜 磊、庄奕琪 2004 纳米电子学 (北京: 电子工业出版社)]
- [9] Xia J B 2000 *Current Semiconductor Physics* (Beijing: Peking University Press) [in Chinese] [夏建白 2000 现代半导体物理 (北京: 北京大学出版社)]
- [10] De Jong M J M, Beenakker C W J 1996 *Physica A* **230** 219

Monte Carlo simulation of shot noise in the coherent and mesoscopic system^{*}

Chen Hua^{1)†} Du Lei¹⁾ Zhuang Yi-Qi²⁾

¹⁾ *School of Technical Physics, Xidian University, Xi'an 710071, China*

²⁾ *School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China*

(Received 17 September 2007; revised manuscript 16 November 2007)

Abstract

According to the conclusion that the charge which passes through a low-temperature quantum conductor over fixed time has a binomial distribution, a shot noise model based on the physical implication of Landauer formula in the coherent and mesoscopic system is built, and time sequences of shot noise are produced by the Monte Carlo methods. It is well known that shot noise suppression in mesoscopic systems originates from the correlation in electron transport, and the bimodal probability distribution of the transmission eigenvalues in quantum chaos cavity and disordered metal leads to shot noise suppression, from which it is possible to correlate the distribution of the transmission eigenvalues and the correlation in electron transport.

Keywords : shot noise, Landauer formula, mesoscopic system

PACC : 7270, 7210

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60676053).

[†] E-mail: haddal@163.com