

相干输运中的接点问题*

张 丽 余亚斌[†] 蔡孟秋[‡] 刘一星 全 军

(湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082)

(2007 年 9 月 21 日收到, 2007 年 10 月 22 日收到修改稿)

为了研究介观体系的相干输运中接点的重要作用, 采用一简单的纳米单势垒² 二维-一维-二维 (2D-1D-2D) 模型, 应用散射矩阵方法和托马斯-费米近似, 计算了体系透射率和在直流电压下电势分布. 结果表明: 1) 接点对其透射率有显著的影响; 2) 电势降落表现的电导性质违背了与经典串联电路中等价的基尔霍夫定律. 因此介观体系中各器件与接点间是量子相干的, 考虑接点问题有利于对介观体系相干输运更为深入的研究.

关键词: 相干输运, 接点, 介观体系

PACC: 7210, 7320D, 7340C, 6110D

1. 引 言

随着电子技术的高度发展, 超大规模集成电路中单位面积上电子元件数量不断增加, 单个电子元件的尺度已能达到介观尺度, 全新的量子器件将在未来电子技术中占重要地位, 因此这一领域有重要的基础研究价值, 以及广阔的应用背景.

随着人们对量子器件的深入研究, 许多重要的结论表明, 载流子的输运特性除受外场和碰撞散射的影响外, 与系统的尺寸也有密切联系. 粒子的相干输运是物体量子本性的必然表现. 介观体系中的相干输运特性引起了人们的浓厚兴趣, 许多研究者对此做了大量的研究^[1-7]. 在经典串联电路中电阻遵守基尔霍夫定律, 但在介观体系的相干输运中却可能违背这一规律. Gabelli 及其研究小组就一外加交流电场的 RC 相干量子输运电路进行了研究^[8]. 他们在实验上观察到由于相干性介观 RC 电路不再满足基尔霍夫定律, 并实现了通过调节介观电容器一极上隧道节处的门电压来改变电容的大小. 这一研究结果说明, 相干器件相连接时, 器件与器件、接点与器件之间不再相互独立, 而由于量子相干性相互影响. 不仅是如上的交流输运中会发生这种现象, 即使在直流情况下也会有这种相干现象.

众所周知, 计算直流电导的 Landauer-Büttike 公

式^[9,10]已经广泛应用于介观体系相干输运中, 特别在多端体系中能很好地解释一些实验现象^[9,11]. 对简单的二端体系, 该公式可以写为 $G = \frac{2e^2}{h} MT$ (M 为通道数, T 为透射率). 在许多文献中由电导得到电阻, 并且把它看成接触电阻与样品或器件电阻之和, 得到

$$G^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \frac{1}{T} \rightarrow G^{-1} = G_c^{-1} + G_s^{-1}, \quad (1)$$

其中接触电阻 $G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2 M}$, 器件电阻 $G_s^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \times \frac{1-T}{T}$. 因此在直流外场下与电阻有关的电势降落分别发生在样品及左右两端接点上. 这事实上是假定接点与器件相连接依然满足基尔霍夫定律, 但是这在介观输运情况下并不合理, 因为接点和散射体系(器件)不能分开, 它们是相干的. 本文将以一个简单的介观单势垒结构的直流输运为例, 说明对接点对输运性质的影响. 我们采用一个常用的“2D-1D-2D”模型^[12,13]进行研究, 推导出直流外场下系统的电子透射率, 然后利用托马斯-费米近似得到系统的电势变化. 计算结果表明输运体系必须考虑接点, 而且接点的出现使体系的电势降出现了新的特征, 其所表现的电阻也违背基尔霍夫定律, 从而体现出接点问题在整个介观体系相干电子输运中的重要性. 因此接点问题对介观体系具有进一步的研究

* 国家自然科学基金(批准号:10774041)资助的课题.

[†] E-mail: apybyu@hnu.edu.cn

[‡] E-mail: mqcai@hnu.cn

价值.

2. 模型与公式计算

研究中采用的模型为一个简单的“2D-1D-2D”单势垒体系(如图 1 所示). 它包括一个纳米单势垒且两端通过连线与电子库相连,同时外接一恒定直流电源. 其中势垒的长度为 $2b$,与势垒连接的引线长度为 c ,电子库的宽为 w ,一维结构的宽为 a . 假定一包含一维体系和部分电子库的区域(如虚线),它足够大包含系统中所有的电场线和电荷.

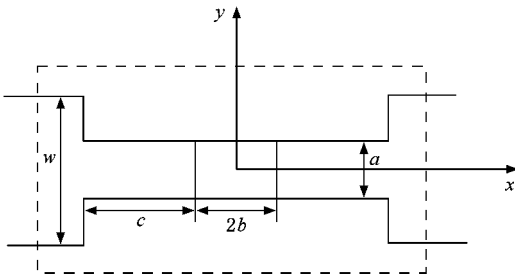


图 1 2D-1D-2D 纳米单势垒模型

在模型中两端电子库电子波函数为

$$\Psi_l^I(x, y) = \sum_r \left[\delta_{r,l} e^{ik_r^x x} + \left(\frac{v_l}{v_r} \right)^{1/2} s_{11,l,l} e^{-ik_r^x x} \right] \times \phi_r^{2D}(y), \quad x < -(b+c), \quad (2)$$

$$\Psi_l^R(x, y) = \sum_r \left(\frac{v_l}{v_r} \right)^{1/2} s_{21,l,l} e^{ik_r^x x} \phi_r^{2D}(y), \quad x > (b+c), \quad (3)$$

其中 $\phi_r^{2D}(y)$ 为电子库横向本征函数, v_l 为电子沿传播方向的入射波速, $k_l^x = [2m^* E/\hbar^2 - (l\pi/w)^2]^{1/2}$ 是量子化的入射波矢, k_r^x 为瞬时波矢, l, l' 和 k_r^x 可以为实数也可以为虚数, m^* 为电子有效质量, E 为电子的入射能.

在一维单势垒和左右引线组成的一维系统中,波函数为

$$\Psi_l^C(x, y) = \sum_n (A_{nl}^{(l)} e^{ik_n^{(l)} x} + B_{nl}^{(l)} e^{-ik_n^{(l)} x}) \phi_n^{1D}(y), \quad (4)$$

这里 $l=1, 2, 3$, 分别代表一维系统中的不同区域. $\phi_n^{1D}(y)$ 表示一维体系电子的本征函数,

$k_n^{(l)} = [2m^*(E - U_l)/\hbar^2 - (n\pi/a)^2]^{1/2}$, U_l 表示势垒势能, 势垒内为 U , 其他区域为 0. 由模式匹配方法^[12-15]知, 势垒两端波函数满足边界条

件, 即波函数 Ψ 与 $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ 是连续的, 得到

$$\sum_n (A_{nl}^{(l)} e^{ik_n^{(l)} x_l} + B_{nl}^{(l)} e^{-ik_n^{(l)} x_l}) \phi_n^{1D}(y) = \sum_n (A_{nl}^{(l+1)} e^{ik_n^{(l+1)} x_l} + B_{nl}^{(l+1)} e^{-ik_n^{(l+1)} x_l}) \phi_n^{1D}(y) \quad (5)$$

以及

$$\sum_n k_n^{(l)} (A_{nl}^{(l)} e^{ik_n^{(l)} x_l} - B_{nl}^{(l)} e^{-ik_n^{(l)} x_l}) \phi_n^{1D}(y) = \sum_n k_n^{(l+1)} (A_{nl}^{(l+1)} e^{ik_n^{(l+1)} x_l} - B_{nl}^{(l+1)} e^{-ik_n^{(l+1)} x_l}) \phi_n^{1D}(y), \quad (6)$$

式中 x_l 表示区域 l 和 $l+1$ 之间的交界处, 由此得到如下转换关系:

$$\begin{bmatrix} A^{(l)}(x) \\ B^{(l)}(x) \end{bmatrix} = \prod_{j=l}^{l-1} M_j \begin{bmatrix} A^{(j)}(x) \\ B^{(j)}(x) \end{bmatrix}, \quad (7)$$

M_j 为区域 j 和 $j+1$ 之间的输运矩阵元.

同样在与电子库的界面处, 即 $x = -(b+c)$ 和 $x = (b+c)$ 时, 波函数 Ψ 与 $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ 同样也是连续的, 由边界条件关系式可得如下线性关系式:

$$\sum_n [(T_{mn} + \delta_{mn} k_n^{(1)}) A_{nl}^{(1)} e^{-ik_n^{(1)}(b+c)} + (T_{mn} - \delta_{mn} k_n^{(1)}) B_{nl}^{(1)} e^{ik_n^{(1)}(b+c)}] = 2k_l^x M_{ml} e^{-ik_l^x(b+c)}, \quad (8)$$

$$\sum_n [(T_{mn} - \delta_{mn} k_n^{(3)}) A_{nl}^{(3)} e^{ik_n^{(3)}(b+c)} + (T_{mn} + \delta_{mn} k_n^{(3)}) B_{nl}^{(3)} e^{-ik_n^{(3)}(b+c)}] = 0, \quad (9)$$

和

$$s_{11,l,l} = -\delta_{r,l} \left(\frac{v_r}{v_l} \right)^{1/2} e^{-i(k_r^x + k_l^x)(b+c)} + \sum_n \left(\frac{v_r}{v_l} \right)^{1/2} M_{rn} \times (A_{nl}^{(1)} e^{-i(k_r^x + k_n^{(1)})(b+c)} + B_{nl}^{(1)} e^{i(k_n^{(1)} - k_r^x)(b+c)}), \quad (10)$$

$$s_{21,l,l} = \sum_n \left(\frac{v_r}{v_l} \right)^{1/2} M_{rn} (A_{nl}^{(3)} e^{i(k_n^{(3)} - k_r^x)(b+c)} + B_{nl}^{(3)} e^{-i(k_n^{(3)} + k_r^x)(b+c)}), \quad (11)$$

其中 $M_{rn} = \int [\phi_r^{2D}(y)]^* \phi_n^{1D}(y) dy$, $k_n^{(1)} = k_n^{(3)} = [2m^* E/\hbar^2 - (n\pi/a)^2]^{1/2}$, $T_{mn} = \sum_r k_r^x (M_{rn})^* M_{rn}$.

综合(8)–(11)式得散射矩阵元 $s_{11}, s_{12}, s_{21}, s_{22}$, 从而得到系统的透射率

$$T = \text{Tr} [s_{21}^+ s_{12}] \tag{12}$$

入射到体系中的载波密度即入射率^[12,16]

$$\frac{dn_\alpha(x)}{dE} = \sum_l \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \int dy \frac{1}{\hbar v_\alpha} | \Psi_l(x, y) |^2, \tag{13}$$

式中 $\alpha = L$ 表示从左端入射, $\alpha = R$ 表示从右端入射. 得到局域态密度(LDOS)^[17,18] $dn(r)dE =$

$\sum_\alpha dn_\alpha(r)dE$, 只考虑沿 x 方向传播的电子波, 对 y 方向积分便得到模型所需要的入射率和局域态密度(LDOS), 即 $dn_\alpha(x)dE = \int [dn_\alpha(r)dE] dy$ 和

$dn(x)dE = \int [dn(r)dE] dy$. 我们研究的为一对称系统, 于是有 $\frac{dn_R(x)}{dE} = \frac{dn_L(-x)}{dE}$. 二端体系的局域态密度(LDOS) $\frac{dn(x)}{dE} = \frac{dn_L(x)}{dE} + \frac{dn_R(x)}{dE}$. 当一恒定电压 v_0 作用于电子库时, 内部电势为 $U(x) = u_\alpha(x)v_0$, u_α 为特征势函数, 由托马斯-费米近似得 u_α 满足泊松方程

$$\nabla^2 u_\alpha(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \left(\frac{dn_\alpha(\mathbf{r})}{dE} - \frac{dn(\mathbf{r})}{dE} u_\alpha(\mathbf{r}) \right) \tag{14}$$

忽略电势在横向上的变化, 通过对 y 方向积分便得到以 x 为函数的特征势函数式

$$-\frac{d^2 u_\alpha(x)}{dx^2} + \frac{e^2}{\epsilon_0 A(x)} \frac{dn(x)}{dE} u_\alpha(x) = \frac{e^2}{\epsilon_0 A} \frac{dn_\alpha(x)}{dE}, \tag{15}$$

式中 $A(x)$ 表示交界面面积. 一维体系 $A = ad$, 电子库 $A = wd$, d 为系统的厚度. 由中性边界条件得到 u_α 的边界值, 进而由(15)式得到特征势函数的分布.

3. 结果与分析

按照上节给出的公式, 本节对该体系的透射率和特征势函数进行数值计算. 计算中以一维系统的宽度 a 为长度单位, $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2}$ 为能量单位.

首先, 我们在图(2)中给出透射率 T 在取不同费米能 E_F 下随引线长度 c 的变化关系. T_0 为不考虑接点时的透射率, 图中势垒的势能为 $U = 8$, 势垒长度 $b = 0.1$, 电子库宽度 $w = 40$, 图 2(a) 费米能 E_F

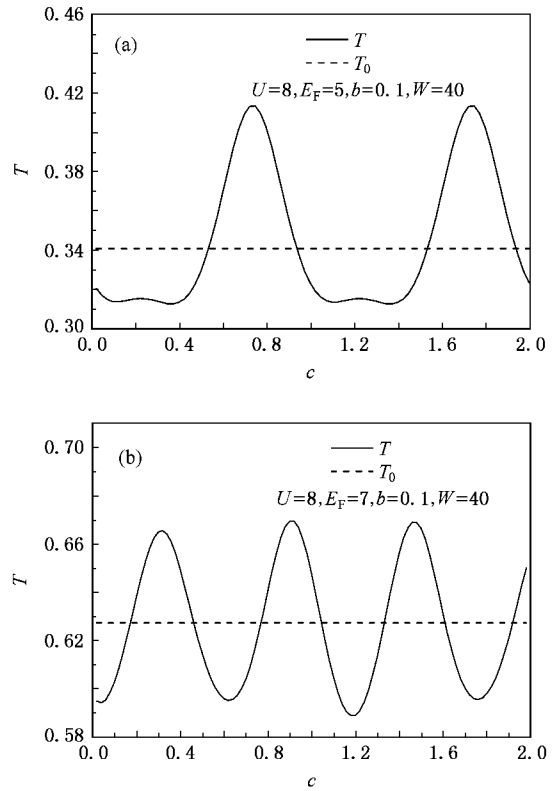


图 2 透射率随引线长度 c 的变化

$= 5$ 图 2(b) $E_F = 7$. 由图可得考虑接点时的透射率 T_0 为一确定值, 呈一不变化直线, $E_F = 5$ 时 T_0 为 0.34, 而 $E_F = 7$ 时 T_0 为 0.627. 但是当考虑接点时, 从图中可看出由于相干性透射率随引线长度增加在 T_0 附近做周期性振荡. 二图对比可知当费米能较大时透射率明显偏大, 且振荡频率也随着费米能的增大而增大, 但振幅随其反而减小. 这里值得强调的是, 势垒与电子库之间是完全无散射的理想弹道量子线, 按经典观点, 应该不影响体系的电导. 按照(1)式, 电阻为接点电阻与散射电阻值之和, 电阻也不应当随 c 的变化而变化. 但是由于量子相干性, 我们看到体系的电导却随 c 呈周期变化.

图 3 给出了渗透率 $(T - T_0)/T_0$ 在取不同势垒势能 U 下随费米能 E_F 的变化关系图. 这里 U 分别为 8 和 5, 其他参数 $b = 0.1, c = 2, w = 40$, 随费米能的增大, 二者渗透率曲线基本趋向一致. 从曲线可看出当费米势 E_F 较小, 从 1 到 1.5 时, 渗透率曲线呈非常陡峭的下降趋势, 随后随费米能的增大渗透率基本在零附近做一定的小振动. 从而表明 E_F 较小时, 由于接点与器件的相干性导致 T 与 T_0 存在很大的差异, 但 E_F 增大到一定值时, 透射率 T 基本

不受接点的影响。因此,我们说在费米能较小时量子相干效应非常显著,而随着费米能的增加这种效应逐渐减弱并接近经典结论。

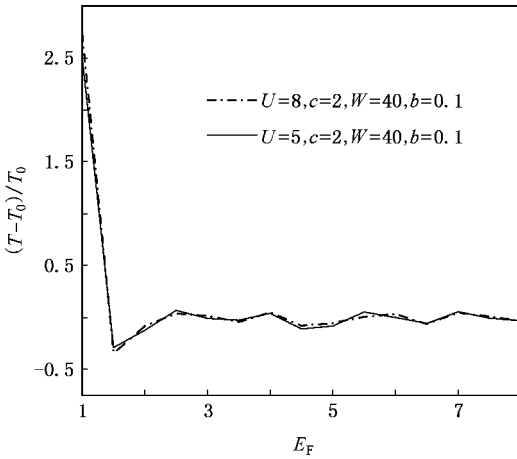


图3 渗透率随费米能 E_F 的变化

图4给出了透射率 T 在取不同引线长 c 下随电子库宽度 w 的变化关系,这里 $U = 8, E_F = 5, b = 0.1$,实线和虚线分别表示引线长 $c = 1.7$ 和 $c = 1$ 时的图形。不考虑接点时的透射率 T_0 仍为一确定值,当电子库宽度 w ($0-5$ 之间)较小时,系统中由于量子相干性导致 T 变化较大,引线的变大,引线短的变小,但当宽度 ($w \geq 5$) 大到一定值时,透射率基本保持一定。图2,3和4所表现的 T 与 T_0 的差异以及 T 随其他器件参数的变化表明:介观体系相干输运中在一定条件下接点及器件间存在着非常明显的相干性,这种相干性在介观输运问题中是非常重要的。

系统内部特征势函数是内部电势分布的反映,在图5中给出系统的内部特征势函数。为了比较我们在图中画出在几种不同模型参数下的系统特征势函数。其中 $U = 0, E_F = 3, b = 0.2, c = 2, w = 40$ 即为无势垒的情况,而 $U = 8, E_F = 3, b = 0.2, c = 2, w = 40$ 为基本不能隧穿的情况。计算中系统的厚度 $d = 0.5$ 。此外为确定(15)式中的系数,我们取 a 为 10 nm 。从图中可看出在无势垒情况下,特征势函数(内部电势)在电子库中为常数,但当穿过接点时产生下降,在一维体系中保持 $u(x) = 1/2$,直到穿过右端接点时下降为零,从而表明电阻均等地出现在两端接点区域;而在基本不能隧穿情况下,二维电子库及两端引线中电势基本无变化,电势降出现在势垒中,即表明两端对接点电阻没有影响,电阻主要存在于势

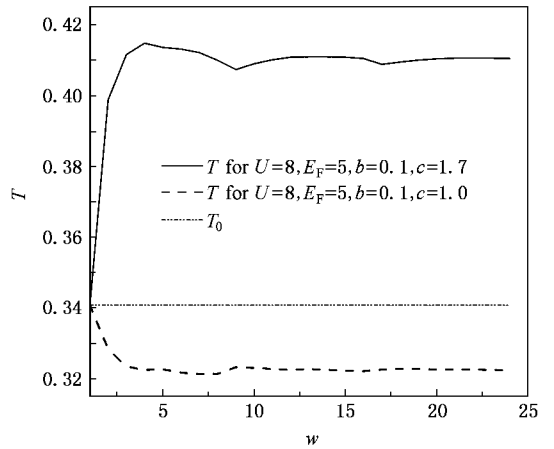


图4 不同引线长度下透射率随电子库宽度 w 的变化

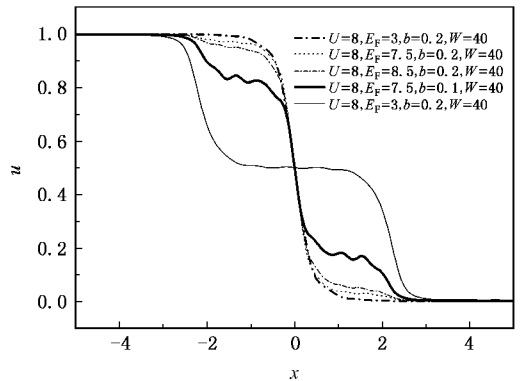


图5 不同模型参数下的系统内部电势分布

垒中。增大费米能分别到 $E_F = 7.5$ 和 $E_F = 8.5$,这时电子以一定的穿透率穿透势垒,其电势如图所示。从图形可看出随 E_F 的增大,电子库与势垒之间的电势降落增大。值得注意的是该电势降落不只发生在接点处,而是在弹道型的引线上也出现了电势降落,而且引线中电势分布出现一定的震荡。这就是说引线也存在着电阻。因此在这种情况下并不能把电阻区分为接点电阻和散射电阻。在 $E_F = 7.5$ 时,把势垒宽度变窄得到 $b = 0.1$ 的电势分布曲线(如图所示)。将 $b = 0.1$ 和 $b = 0.2$ 的曲线对比可以发现:随势垒宽度的减小势垒电阻减小,则引线中的电势降落增大。综合图5可看出介观系统内的电势降落除出现在接点处和势垒中之外,还出现在接点和势垒之间的引线中。这进一步说明由于接点与器件间的量子相干性,并不能像经典情况那样,把系统电阻分为接点电阻和散射电阻。

4. 结 论

本文运用散射矩阵方法和托马斯-费米近似研究了在一恒定直流外场下的与两电子库相连的纳米单势垒系统相干输运特性,计算了系统中的透射率与电势分布. 研究结果显示:系统的透射率明显与接点存在很大的关系,且与系统器件其他一些参数相关,系统内部电势的变化与传统的观点有所不同,

不只出现在势垒中和左右两端接点区域,在势垒与两个电子库相连的引线上也产生了一定的波动,且电势也随系统器件其他一些参数的变化而变化,其表现出的电导性表明介观体系在直流外场下与交流外场下同样违背了基尔霍夫定律. 这些结果表明体系在一定条件下器件和接点间都是量子相干的,考虑到介观体系这一领域的重要基础研究价值,接点问题的研究有非常重要的意义.

- [1] Deng Y X , Yan X H , Tang N S 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2027 (in Chinese) [邓宇翔、颜晓红、唐娜斯 2006 物理学报 **55** 2027]
- [2] Chen J W , Yang L F 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2183 (in Chinese) [陈将伟、杨林峰 2005 物理学报 **54** 2183]
- [3] Wu Z J , Zhu K D , Yuan X Z , Zheng H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3346 (in Chinese) [吴卓杰、朱卡的、袁晓忠、郑 杭 2005 物理学报 **54** 3346]
- [4] Sasseti M , Napoli F 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11213
- [5] Graf D , Molitor F , Ihn T , Ensslin K 2007 *Phys. Rev. B* **75** 245429
- [6] Kashiwaya H , Kurosawa I , Kashiwaya S , Sawa A , Tanaka Y 2003 *Phys. Rev. B* **68** 54527
- [7] Tao Y C , Hu J G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 165329
- [8] Gabelli J , Fève G , Berroir J M 2006 *Science* **313** 499
- [9] Büttiker M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1761
- [10] Tamura H , Ando T 1991 *Phys. Rev. B* **44** 1792
- [11] Laikhtman B 1994 *Phys. Rev. B* **24** 17177
- [12] Yu Y B , Yeung T C A , Shangguan W Z 2002 *Phys. Rev. B* **66** 235315
- [13] Quan J , Yu Y B , Tang Y H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195314
- [14] Kirczenow G 1989 *Phys. Rev. B* **39** R10452
- [15] Xu H Q 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8878
- [16] Gasparian V , Christen T , Buttiker M 1996 *Phys. Rev. A* **54** 4022
- [17] Sablikovand V A , Shchamkhalova B S 1998 *Phys. Rev. B* **58** 13847
- [18] Lal S , Rao S , Sen D 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 26801

Role of contacts in the coherent transport^{*}

Zhang Li Yu Ya-Bin[†] Cai Meng-Qiu[‡] Liu Yi-Xing Quan Jun

(School of Physics and Microelectronics Science , Hunan University , Changsha 410082 , China)

(Received 21 September 2007 ; revised manuscript received 22 October 2007)

Abstract

In order to study the role of contacts in the coherent transport of mesoscopic structure systems , a 2D-1D-2D model of nano-sized single-barrier system is considered , which includes a single-barrier structure conductor with two reservoirs . Basing on the scattering-matrix method and the Thomas-Fermi approximation , we have calculated the transmission probability and the distribution of internal potential when a dc voltage is applied to the system . The results show that : (1) the contacts can produce significant effects on the transmission probability ; (2) the behaviors of conductance and the distribution of internal potential differ from the usual transport conductance give by the Kirchhoff 's laws . Therefore we conclude that since contacts and the mesoscopic systems are quantum coherent , the role of contacts is important for in-depth investigation of the transport in mesoscopic systems .

Keywords : coherent transport , contact , mesoscopic systems

PACC : 7210 , 7320D , 7340C , 6110D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774041) .

[†] Corresponding author . E-mail : apybyu@hnu.edu.cn

[‡] Corresponding author . E-mail : mqcai@hnu.cn