

二维介观环中持续电流的梯度无序效应*

马明明 丁建文[†] 陈宏波 徐 宁

(湘潭大学物理系, 纳米物理与稀土发光研究所, 湘潭 411105)

(2008 年 9 月 30 日收到, 2008 年 10 月 28 日收到修改稿)

基于紧束缚模型, 考虑无序的梯度衰减, 研究了无序-有序二维介观环体系中无序梯度及结构尺寸等因素对持续电流的影响. 在表面无序区无梯度衰减时, 持续电流随无序度的变化先减小后增大, 观察到类弹道和局域性的转变. 当存在梯度衰减时, 无序区部分区域无序度相应减小, 对有序区产生较强散射, 典型电流比没有无序衰减时偏小. 有趣的是, 当无序度指数衰减时, 上述类弹道和局域性的转变却消失了, 揭示了介观实验中能否观察到该转变与无序的梯度分布密切相关. 此外, 计算表明表面无序渗透的深度和环的宽度对持续电流也有重要影响, 呈现奇异的量子尺寸效应. 这不同于以前的理论预言.

关键词: 介观环, 梯度无序, 持续电流

PACC: 7320F, 7335

1. 引 言

由于电子波函数的相位相干性, 在介观体系中观察到了许多新奇的物理现象^[1]. 当非超导介观尺度金属环中外加磁场时, 环中将出现随磁通量变化作周期性振荡的持续电流^[2]. 这一典型的宏观量子效应已引起人们广泛的注意, 在理论^[3-9]和实验方面^[10-13]均有大量的研究报道. 不过, 迄今为止理论与实验之间仍存在很大差异, 实验值一般要比理论值大 1—2 个数量级, 并且磁响应方向也与理论不符. 因而, 非超导介观环中的持续电流仍是介观物理中最受关注的研究课题之一^[14].

一般而言, 系统中存在的无序及电子-电子相互作用是影响持续电流大小的两个重要因素. 在相关研究中人们通常考虑块体无序, 认为静态无序分布在整个材料中间. 杂质原子的分布和强度决定了体系的输运是弹道扩散或是受限于局域区^[15]. 在扩散区(即金属区), 持续电流的大小相对于理想情形要乘以一个与无序度有关的因子 l/L , 其中 l 和 L 分别为电子的平均自由程和样品的尺寸. 在局域区, 持续电流的大小随体系尺寸的增大呈指数衰减. 一般认为, 系统中存在的无序总是抑制持续电流的大

小^[3, 4, 16, 17]. 有趣的是, 随着制备技术的进步, 人们能够制备一些特别的介观样品和器件. 在这种器件中, 无序仅仅存在于器件的表面, 而系统中心或者内部保持相对有序, 载流子主要受到边界杂质原子的散射^[18]. 特别是当体系的尺寸减小到纳米尺度时, 表面(或边界)与块体的比率变大, 而表面粗糙、表面掺杂和吸附等无序效应将对电子输运产生更为重要的影响. 研究电子在这种类表面掺杂系统中的输运性质及其机制对低维纳米结构器件的设计和应用将具有重要的指导作用.

为研究这类表面无序效应, 目前已有一些关于量子 billiard^[19-21]、纳米线^[22-24]、石墨纳米带^[25-27]等方面的探索性工作报道^[19-27]. 如 Cuevas 等^[19]采用紧束缚方法, 研究了量子 billiard 中表面无序对能谱统计规律的影响. 在这样一个体系中, 他们发现了表面共振现象, 并且在能谱的中心区域观察到了准局域的状态, 获得了不同的能谱统计规律. Zhong 等^[23]提出了表面掺杂纳米线模型, 研究了表面无序对电子扩散行为的影响. 随着无序度的变化观察到局域-准局域的转变. Yang 等^[26]研究了石墨纳米带中的边缘无序效应和量子尺寸效应, 获得了奇异的量子动力学行为. 同时, 人们还研究了表面无序纳米线中的磁量子输运性质^[24], 发现垂直于散射区的磁场导致

* 国家自然科学基金(批准号: 10674113) 教育部新世纪优秀人才支持计划(批准号: NCET-06-0707) 全国优秀博士学位论文作者专项基金(批准号: 200726) 和湖南省教育厅科研基金(批准号: 06A071) 资助的课题.

[†] 通信联系人, E-mail: jwding@xtu.edu.cn

量子与经典转变区的局域长度呈指数发散.因此,研究表面无序效应对介观环的持续电流的影响将具有重要的意义.最近,Chen 等^[28]研究了有限宽介观环中持续电流的边缘无序效应.研究发现,在弱无序区,整个体系的持续电流将随着无序度的增加而减小,但在强无序区,持续电流随着无序度的增加反而增加,得到了完全不同于块体无序情形下的结果.

在这些工作中,相关模型均将系统分为界限分明的有序和无序两部分.不过,由于受制备条件的限制,这种系统在实验上无疑是很难实现的.特别是在强无序时,系统的一边存在着高度的无序,而在分界处无序度突降为零,在另一边变得完全有序.显然实际情形中这是不可能的,因为如考虑离子注入掺杂,掺入的离子可能存在一个梯度分布.在本文中考虑梯度无序,基于实际实验系统构建了一个新型的无序-有序二维介观环模型.在该模型中,无序从环的内外两个边界向环的中心区域梯度衰减,最后过渡到有序区域,由此探索了在不同的无序分布情况下无序梯度及结构尺寸等因素对系统中持续电流的影响.

2. 模型和方法

考虑一个无序-有序二维介观环,磁通穿过其中心区域,环面区域没有磁通.边缘无序环模型如图 1 所示,基于紧束缚方法,系统可以看成 M 个同心圆环链,每个环上有 N 个格点.在这里,采用单电子单原子轨道近似,只考虑最近邻原子之间的相互作用,忽略电子-电子相互作用,体系的哈密顿量可表示为

$$H = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j} t(i,j) a_i^\dagger a_j, \quad (1)$$

其中 ϵ_i 是格点 i 的占位能, $a^\dagger(a)$ 为电子的产生(湮没)算符.假设矢势 A 只有切向分量,并且考虑最近邻相互作用,则跳跃积分表示为 $t(i,j) = t \exp[i(2e\hbar) \int_i^j dr \cdot A]$, 其中积分是由格点 i 到最近邻格点 j 的矢量积分, t 为跳跃积分常数.在零温时,系统的持续电流为

$$I = -\partial E / \partial \Phi = -\sum_n \partial E_n / \partial \Phi, \quad (2)$$

其中 E 为系统的总能量, n 表示相应的第 n 条能级, Φ 为通过环中心的磁通.

为了模拟系统中的无序,我们采用 Anderson 对角无序模型.对于块体无序,整个体系的格点能 ϵ_i

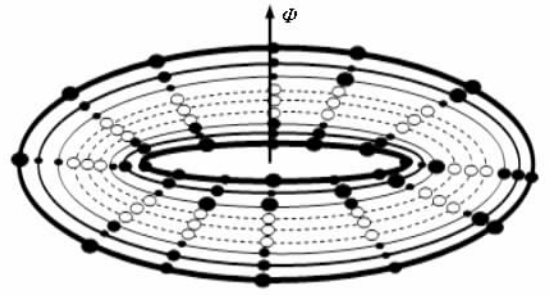


图 1 无序-有序二维介观环模型.体系尺寸为 $M=9$ 和 $N=12$.实线圆环代表无序区域,虚线圆环代表有序区域.实线圆环的粗细代表无序度,无序区域的实心圆代表无序的格点,格点能是随机分布的,有序区域的空心圆代表有序格点,其格点能为零

随机地分布于区间 $[-W, W]$, 其中 W 描述无序强度,单位为 t .至于表面无序,其无序区域的格点能 ϵ_i 随机地分布于区间 $[-W, W]$, 而有序区域的格点能则设置为零.基于实际的实验系统,我们可以进一步考虑梯度无序.假设系统中的无序从内外两个边界向中心逐步衰减,最后过渡到有序区域.例如,考虑线性衰减,假设无序区域边界无序度为 W_{\max} , 而内层最小无序度为 W_{\min} (接近于零), 则距表面第 m 个环上的无序度 W_m 为

$$W_m = W_{\max} - (m-1) \frac{W_{\max} - W_{\min}}{L-1} \quad (m = 1, 2, \dots, L), \quad (3)$$

其中 L 为无序渗透的深度.同样,考虑无序按照指数规律衰减,可以类似地得出无序区域距表面第 m 个环上的无序度 W_m 为

$$W_m = W_{\max} e^{-(m-1)t(W_{\max}/W_{\min})(L-1)} \quad (m = 1, 2, \dots, L). \quad (4)$$

若表面无序区不存在无序衰减,则该区域每个环上的无序度相同,即 $W_m = W_{\max}$ ($m = 1, 2, \dots, L$), 此即通常的表面无序模型.由此,我们可以研究各种不同无序对系统持续电流的影响.

为了更好地描述电流的变化特性,通常采用系统平均典型电流 $I_{\text{typ}}^{[29]}$, 定义为

$$I_{\text{typ}} = \sqrt{I^2_{\Phi, W}}, \quad (5)$$

单位为 t/Φ_0 , 磁通量子 $\Phi_0 = h/e$, 其中 $\dots_{\Phi, W}$ 表示对磁通和无序进行平均.计算中,考虑无序的不同位型,无序平均的次数取为 100, 便于与实验平均对应.

3. 结果和分析

体系无序区域尺寸不变时,改变边界最大无序度 W_{\max} ,因而也就改变了体系的无序梯度分布.由此可以探索无序梯度效应对持续电流的影响.图2给出了系统的典型电流随无序区域边界最大无序度 W_{\max} 的变化关系.环的尺寸为 $M = 20$ 和 $N = 24$,无序区域最小无序度 $W_{\min} = 0.5$,无序从内外两个边界向中心渗透5个环,即无序渗透深度 $L = 5$.从图2可以看出,在表面区无序不衰减情况下($W = W_{\max}$),在弱无序区典型电流随无序度增加而减少,在强无序区却随无序度增加而增加.这与以前理论结果类似,可能揭示了一种类弹道和局域性的转变^[27].在表面无序线性衰减情况下,我们同样可观察到典型电流随无序度先减小后增加的现象,不过典型电流的值要明显小于无衰减情形的值.在无序区域,靠近环面中心区的无序度相应减小了,可导致无序区内的持续电流有所增加,但由于无序散射作用,无序区内的持续电流一般很弱,因而使得总电流的增加极为有限.另一方面,由于相应部分区域的无序度减小,对有序区的散射与其无序度成反比^[23],因而更有效地抑制了有序区的电流.两者共同作用的结果使得总电流减小.

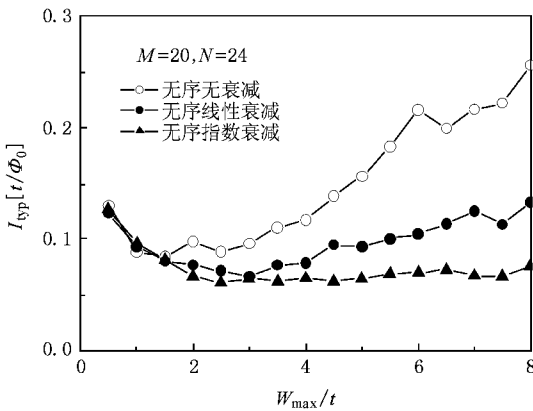


图2 不同无序梯度分布情况下,典型电流 I_{typ} 随无序区域边界最大无序度 W_{\max} 的变化.无序区域最小无序度 $W_{\min} = 0.5$,体系尺寸为 $M = 20$ 和 $N = 24$,无序区域的渗透深度 $L = 5$

从图2观察到,当无序指数衰减时,典型电流随无序度增加单调下降,然后增加得极其缓慢,几乎趋于不变.显然,在这种无序分布下无序区域的弱电流导致的增加更为有限,而无序区依然对有序区有较

强的散射,因而总电流增加得极为有限.由于无序的指数变化,无序区形成强散射的范围有限,最后导致总的持续电流几乎不变.因此我们的结果表明,体系无序度的不同分布对持续电流有极其重要的影响.在无序-有序介观体系的实验中,能否观察到这种类弹道与局域性转变,显然与无序区域的无序分布密切相关.这些结果有待进一步的实验观察和检验.

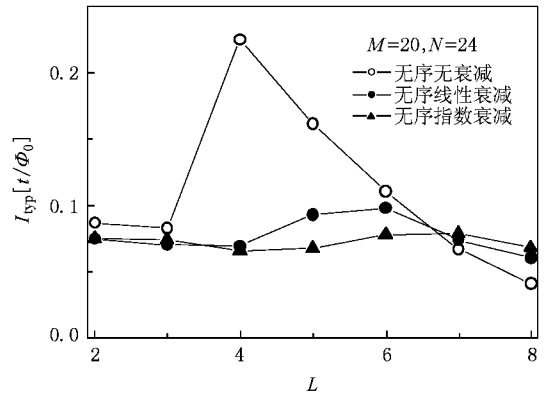


图3 不同无序梯度分布情况下,典型电流 I_{typ} 随无序区域的渗透深度 L 的变化.无序度参数 $W_{\max} = 5$ 和 $W_{\min} = 0.5$,体系尺寸为 $M = 20$ 和 $N = 24$

在参数 W_{\max} 和 W_{\min} 给定情况下,改变无序渗透的深度 L ,同样也改变了体系的无序梯度分布.不过,此时也相应地改变了体系有序和无序区域的相对尺寸.由此可以探索存在无序梯度分布时可能的奇异量子尺寸效应.图3给出了典型电流随无序渗透深度的变化关系.无序参数 $W_{\max} = 5$,无序渗透的深度变化取为 $L = 2, 3, \dots, 8$,其他参数与图2一致.从图3可以看到,在无序无衰减情况下典型电流随无序渗透深度呈非单调变化,存在一临界深度 L_0 ($L_0 = 4$).当 $L > L_0$ 时,体系无序区不断扩大,逐渐近似于块体无序,典型电流随 L 增加而单调递减.当 $L < L_0$ 时,典型电流随 L 有一个反常增加,呈现奇异的量子尺寸效应.这可能是由于界面无序的突变成形成强烈的界面散射, L 的改变使得有序区尺寸 M_0 ($M_0 = M - 2L$) 可满足一定的量子干涉条件,从而导致持续电流的增加.在无序线性和指数衰减两种情况下,我们未能观察到这种异常增加.在 L 较大时持续电流趋向减小,类似于块体无序,但明显比表面无序不变时衰减得慢一些.特别是在 L 变化很宽的范围,可以看出持续电流随 L 的变化基本不变或稍有一定起伏.随 L 的递增,体系无序区相对于有序区尺寸增大,弱无序区增多,有序区通道减

少,有序与无序区相互作用也相应改变,加上没有明显的分界面,诸多因素将破坏相应的量子干涉条件,因而可以观察到典型电流有一定的起伏,但没有出现异常增加.我们的结果进一步表明了梯度无序对持续电流有重要影响,其结果对实验设计和测量都有指导作用.

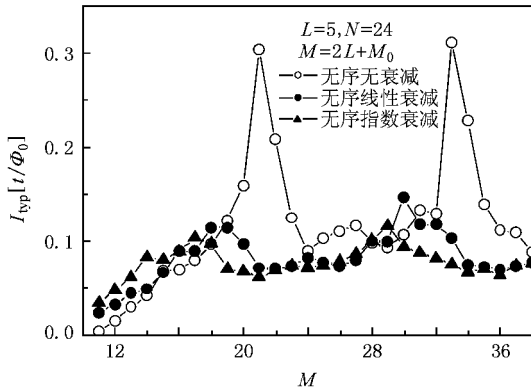


图4 在无序梯度分布一定的情况下,典型电流 I_{typ} 随体系通道数 M 的变化. M_0 为有序区域的环数,每个环上 24 个格点, L 为无序区域的渗透深度,无序度参数为 $W_{\text{max}} = 5$ 和 $W_{\text{min}} = 0.5$

给定表面无序区的无序梯度分布,改变有序区域的环数 M_0 , M_0 从 1 增加到 28. 由此可以进一步研究存在表面无序且梯度分布一定时典型电流随体系通道数的变化. 图 4 示出了体系在三种不同无序分布下典型电流随通道数的变化关系,无序参数 $W_{\text{max}} = 5$,其他参数与图 2 一致.从图 4 可以看出,当体系环数 M 较小时,三种情况下典型电流随通道数的变化基本类似,几乎呈线性递增.这是因为持续电流主要由体系有序区域通道数所决定.环数较少时,整个有序区均受到无序区的散射,因而随有序环数增加,持续电流呈现线性递增趋势.当体系环数 M

较大时,在无序无衰减情况下持续电流随环数出现较大起伏.特别是当有序环数 $M_0 = 11, 23$ 时,观察到典型电流的极值.这主要是因为分界面处无序的突变形成较强烈散射,可能导致量子干涉效应所致.实际上,在完全有序或块体无序($W = 0.5$)情况下,当体系处于某些尺寸时也观察到典型电流特殊的递增效应^[29].在表面无序存在梯度衰减时,典型电流相对稳定,起伏不大,未出现上述跳跃性的极值变化.这是由于分界面处无序的梯度变化反而破坏了量子干涉效应所致.我们的结果表明,由于表面无序效应及其梯度变化,介观环中持续电流呈现特殊的尺寸效应,不同于以前的理论预言^[3, 4, 23, 28, 29].

4. 结 论

基于紧束缚模型,考虑无序的梯度分布,研究了无序-有序二维介观环体系中梯度无序及结构尺寸等因素对持续电流的影响.当表面无序无梯度衰减时,典型电流随无序度的变化先减小后增大,揭示了一种类弹道和局域性的转变.当表面无序存在梯度衰减时,由于无序区部分区域的无序度减小,对有序区散射增强,典型电流比无衰减时的值偏小.特别是当表面无序呈指数衰减时,典型电流随无序度单调下降,在强无序区却基本上趋于不变,类弹道和局域性的转变消失.结果表明,体系无序度的不同分布对持续电流有极其重要的影响.在有序-无序介观体系的实验中,能否观察到上述转变显然与无序区域的无序梯度分布密切相关.进一步计算也表明,表面无序渗透的深度和环的宽度对持续电流也有重要影响,呈现奇异的量子尺寸效应,不同于以前的理论预言.相关结果对理解无序-有序介观体系奇异量子尺寸效应有帮助,对持续电流相关实验具有指导作用.

[1] Imry Y 1997 *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford: Oxford University Press) p60
 [2] Büttiker M, Imry Y, Landauer R 1983 *Phys. Rev. Lett.* A **96** 365
 [3] Cheung H F, Gefen Y, Riedel E K, Shih W H 1988 *Phys. Rev. B* **37** 6050
 [4] Cheung H F, Riedel E K, Gefen Y 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 587
 [5] Bouchiat H, Montambaux G 1989 *J. Phys. France* **50** 2695
 [6] Ambegaokar V, Eckern U 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 381
 [7] Schmid A 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 80
 [8] von Oppen F, Riedel E 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 84

[9] Altshuler B L, Gefen Y, Imry Y 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 88
 [10] Levy L P, Dolan G, Dunsmuir J, Bouchiat H 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2074
 [11] Chandrasekhar V, Webb R A, Brady M J, Ketchen M B, Gallagher W J, Kleisasser A 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3578
 [12] Maillly D, Chaperlier C, Benoit A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2020
 [13] Jariwala E M Q, Mohanty P, Ketchen M B, Webb R A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1594
 [14] Eckern U, Schwab P 2002 *J. Low Temp. Phys.* **126** 1291
 [15] Kopietz P, Efetov K B 1992 *Phys. Rev. B* **46** 1429

- [16] Weisz J F , Kishore R , Kusmartsev F V 1994 *Phys. Rev. B* **49** 8126
- [17] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [18] Sohn L L , Kouwenhoven L P , Schön G 1997 *Mesoscopic Electron Transport* (Netherlands : Proceedings of the NATO Advanced Study Institute) p83
- [19] Cuevas E , Louis E , Vergés J A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 1970
- [20] Blanter Y M , Mirlin A D , Muzykantskii B A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4161
- [21] Blanter Y M , Mirlin A D , Muzykantskii B A 2001 *Phys. Rev. B* **63** 235315
- [22] Sánchez-Gil J A , Freilikher V , Yurkevich I , Maradudin A A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 948
- [23] Zhong J X , Stocks G M 2006 *Nano Lett.* **6** 128
- [24] Feist J , Bäcker A , Ketzmerick R , Rotter S , Huckestein B , Burgdörfer J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 116804
- [25] Areshkin D A , Gunlycke D , White C T 2007 *Nano Lett.* **7** 204
- [26] Yang C Y , Ding J W , Xu N 2007 *Physics B* **394** 69
- [27] Li T C , Lu S P 2008 *Phys. Rev. B* **77** 085408
- [28] Chen H B , Ding J W 2008 *Physica B* **403** 2015
- [29] Louis E , Vergés J A , Chiappe G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 6912

Effects of gradient disorder on persistent currents in two-dimensional mesoscopic rings ^{*}

Ma Ming-Ming Ding Jian-Wen[†] Chen Hong-Bo Xu Ning

(Department of Physics , Institute of Nanophysics and Rare-earth Luminescence , Xiangtan University , Xiangtan 411105 , China)

(Received 30 September 2008 ; revised manuscript received 28 October 2008)

Abstract

Taking into account the gradient decay of the real disorder , we explore the effects of the disorder gradient and the structure sizes on persistent currents in the disorder-order two-dimensional mesoscopic ring system , within the tight-binding model . In the absence of disorder gradient , the persistent current firstly decreases and then increases with disorder strength , indicating a localized-ballistic-like transition existing there . In the presence of disorder gradient , the persistent current is decreased , due to the stronger disorder scattering in the surface disorder region of lower disorder strength . In the case of exponentially decaying disorder , especially , the localized-ballistic-like transition disappeared , meaning that its observability depends on the distribution of the gradient disorder . In addition , the effects of both the ring width and the penetration depth of the disorder on persistent currents are explored , showing a strange quantum size-effect , which is different from previous results .

Keywords : mesoscopic rings , gradient disorder , persistent current

PACC : 7320F , 7335

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674113) , the Program for the New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education , China (Grant No. NCET-06-0707) , the Foundation for the Author of National Excellent Doctoral Dissertation of China (Grant No. 200726) and the Scientific Research Foundation of the Education Bureau of Hunan Province , China (Grant No. 06A071) .

[†] Correspondent author. E-mail : jwding@xtu.edu.cn