

## 准一维纳米线电子输运的梯度无序效应\*

段玲<sup>1)</sup> 胡飞<sup>1)</sup> 丁建文<sup>1)2)†</sup>

1)(湘潭大学物理系, 纳米物理与稀土发光研究所, 湘潭 411105)

2)(湘潭大学低维材料及其应用技术教育部重点实验室, 湘潭 411105)

(2010年11月19日收到; 2011年3月16日收到修改稿)

考虑实际体系的梯度无序和结散射, 发展格林函数矩阵分解消元方法, 研究了准一维纳米线的电子输运性质. 结果表明, 由于结散射, 电导随能量呈现振荡行为, 无序的引入破坏了电子相干性, 在低无序度区平均电导呈现异常增加, 呈现一个新的电导峰. 当表面存在无序但无梯度衰减时, 体系的平均电导随无序度增强先减后增, 出现类局域—退局域性转变. 当表面无序线性衰减时, 平均电导在强无序区稍有增加, 而当表面无序高斯型衰减时, 平均电导指数衰减, 类局域—退局域性转变消失, 不同于以前的理论预言. 研究结果对准一维纳米线电子器件的结构设计和应用有指导作用.

**关键词:** 准一维纳米线, 梯度无序, 电子输运

**PACS:** 72.10.Fk, 73.23.-b

## 1. 引言

随着材料科学技术和微加工技术的进步, 人们已经成功制备出各种低维量子结构体系. 在低维量子结构中, 由于量子干涉作用, 展示了许多奇特的物理现象<sup>[1-3]</sup>. 近年来, 以量子点、纳米线和超晶格为代表的低维量子结构中的电子态, 声子态及其相关输运性质研究一直是凝聚态领域内重要的研究课题<sup>[4-8]</sup>. 纳米线由于具有独特的物理特性及广阔的应用前景, 受到了人们的广泛关注<sup>[9-11]</sup>. 在纳米线中, 不仅观察到其弹道输运, 还发现其他许多重要的性质. 例如, 硅纳米线具有很好电子响应<sup>[12]</sup>以及热电偶性质<sup>[13]</sup>. 利用纳米线制备场效应晶体管, 具有高频低噪声等特性. 随着实验制备技术的发展, 器件的连接线更是达到纳米刻度, 其电子输运性质值得人们特别关注.

在低维纳米结构的实验制备中, 客观存在各种杂质、缺陷、晶格畸变等因素的影响. 同时, 实验样品还受到基底及其周围环境的影响, 甚至人为掺杂以改进其性能<sup>[11, 14]</sup>, 从而可导致特殊的表面无序存在. 实际上, 人们也有目的地制备样品, 使其无序主

要分布在样品的边缘区域, 而样品内部是相对有序的. 在这种体系中, 电子的散射机理将由边界条件和边缘缺陷主导, 因而其电子输运性质及其规律仍有待深入探索. 在研究无序时, 人们通常采用块体无序模型, 认为静态无序分布在固体材料的体内. 玻耳兹曼半经典理论的弱散射理论, 成功地描述了金属导体的电导率与杂质和温度的关系. 当杂质浓度非常高时, 杂质散射增强, 弱散射理论难以解释一些新的奇异现象. Anderson<sup>[15]</sup>采用一组无规则势描述系统内的无序行为, 探索了高杂质浓度金属系统的输运特性. 根据安德森理论, 在一维体系中任意的无序将导致电子的局域化, 局域化程度随无序度增加而增强. 该模型被人们广泛应用于无序体系研究<sup>[16-19]</sup>.

然而, 在表面无序体系中, 边界条件、边缘缺陷和外层无序主导了电子的散射机理, 完全不同于块体无序体系. 关于表面无序散射机理的研究, 已有不少报道, 如边缘无序的一维量子线<sup>[19-21]</sup>, 边缘无序石墨带<sup>[18, 22, 23]</sup>, 壳层掺杂纳米线<sup>[24]</sup>, 表面无序二维介观环<sup>[25]</sup>, 表面无序 Billiard<sup>[26]</sup>等. 在这种有序-无序系统中, 表面无序效应导致奇异的量子动力学行为, 从中可观察到奇异的局域-退局域化转变. 不

\* 国家自然科学基金(批准号:10674113, 11074212)和全国优秀博士学位论文作者专项基金(批准号:200726)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jwding@xtu.edu.cn

过,在这些模型系统中,有序-无序区域界限分明,在分界线的一侧存在高度的无序,而另一侧却是完全有序. 考虑实验制备中无序的引入,可能通过离子注入掺杂等方法,或者外界环境等因素介入的随机性,这种界限分明的有序-无序系统实际上很难实验实现,特别是在强无序时该系统将远偏离于实际. 考虑表面无序的梯度分布<sup>[27]</sup>和结散射,本文发展格林函数矩阵分解消元方法<sup>[28]</sup>,系统研究了准一维有序-无序复合纳米结构的电子输运性质.

## 2. 模型与方法

考虑图 1 中准一维纳米线,连接在两个半无限长的左右电极上,表面无序存在一个梯度分布. 为简单起见,假设中间样品与两端电极是由相同的材料组成,无序仅分布在中间散射区,而左右两半无限长电极是完美的. 以晶格单胞基矢为单位,中间散射区的长为  $P$ ,宽为  $H$ .

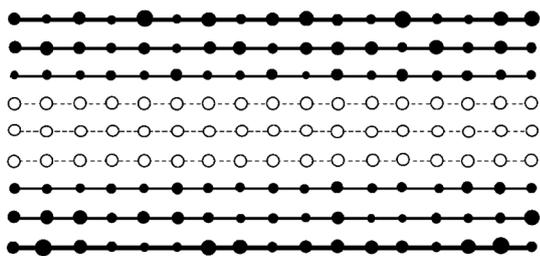


图 1 准一维纳米线梯度无序模型,体系的尺寸宽度  $H=20$ ,长度  $P=200$ ,虚线代表有序区域,实线代表无序区域. 实心圆代表无序区格点,其格点能随机分布;空心圆代表有序区格点,其格点能为零

基于紧束缚近似,体系的哈密顿量表示为

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

其中  $\varepsilon_i$  为格点能,  $t_{ij}$  为  $i, j$  格点间的转移积分. 只考虑最近邻格点之间相互作用,转移积分为常数  $t$ .  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) 分别为格点  $i$  的电子产生(湮没)算符. 采用安德森对角无序理论模型,对散射区无序区域的格点能选取为

$$\varepsilon'_i \rightarrow \varepsilon_i + \delta\varepsilon_i, \quad (2)$$

$\delta\varepsilon_i$  为  $[-W, W]$  间的一组随机数,  $W$  定义为无序度,单位为  $t$ . 为方便起见,假设  $\varepsilon_i$  为零. 在无序区  $\delta\varepsilon_i$  随机的分布在  $[-W, W]$ , 而有序区  $\delta\varepsilon_i$  为零. 当考虑结散射时,则在中间散射区与电极的连接处存在着一个散射势垒. 为了模拟这一势垒,引入了散射

势  $U$ , 假设左右两电极的结散射势相等,分别分布在电极上最邻近散射区的格点上<sup>[29]</sup>.

基于格林函数方法,发展格林函数矩阵分解消元法<sup>[28]</sup>,计算中间散射区哈密顿矩阵对应的分块格林函数  $G^R$ . 由此求出透射系数

$$T = \text{Tr}(\Gamma_L G_{\text{IN}}^L \Gamma_R G_{\text{IN}}^R), \quad (3)$$

其中  $G_{\text{IN}}^L = G_{\text{IN}}^{R+}$ , 线宽函数  $\Gamma_{L(R)} = i \left[ \Sigma_{L(R)}^+ - \Sigma_{L(R)} \right]$ ,  $\Sigma_{L,R}$  分别为左右电极的自能,代表左右半无限长电极对中间散射区的影响,  $i$  为虚数单位. 由 Landauer-Büttiker 公式求出体系的电导为

$$G = (2e^2/h)T. \quad (4)$$

实际体系中有序和无序界面区域无序存在梯度分布. 通常,体系中存在的无序从两边逐渐衰减,并过渡到中心有序区域,如图 1 所示. 设无序区域边缘最大无序度为  $W_{\text{max}}$ , 衰减到最小无序度为  $W_{\text{min}}$ , 内部中心有序区域  $W=0$ . 由于实验环境、制备条件的影响,可能存在不同类型的无序梯度分布. 这里我们考虑无序无梯度衰减、无序线性衰减以及无序高斯衰减三种情况,探索其对准一维纳米结构的电子输运性质影响.

当无序无梯度衰减时,无序区域的无序度恒定不变,等于最边缘最大无序度  $W_{\text{max}}$ ,  $W = W_{\text{max}}$ . 当无序线性衰减时,则距边缘的第  $m$  行的格点上的无序度  $W_m$ .

$$W_m = W_{\text{max}} - (m-1) \frac{W_{\text{max}} - W_{\text{min}}}{L-1} \quad (m = 1, 2, \dots, L). \quad (5)$$

其中  $L$  为无序的渗透深度. 若无序以高斯函数形式衰减,则可类似的得出无序区域距边缘第  $m$  层无序度  $W_m$

$$W_m = W_{\text{max}} e^{-\frac{(m-1)^2}{2\sigma^2}} \quad (m = 1, 2, \dots, L). \quad (6)$$

其中  $\sigma$  可由  $W_{\text{max}}$  和  $W_{\text{min}}$  之间的高斯函数衰减关系求出. 计算中,我们对 200 种无序构型做平均.

## 3. 结果和讨论

考虑长度  $P=200$ , 宽度  $H=20$  的模型系统,其无序渗透深度  $L=4$ . 图 2 示出了系统的平均电导随无序区域边缘最大无序度  $W_{\text{max}}$  的变化关系,其中最小无序度  $W_{\text{min}} = 0.05 t$ , 我们的理论模型中,假设格点间的跃迁积分为  $1 t$ ,  $t$  的大小与具体的材料有关. 在图 2(a) 和 (b) 中分别对应无结散射和考虑结散

射的情况. 从图 2(a) 中可以看出, 无序无梯度衰减时, 在弱无序区其平均电导明显小于无序线性衰减及高斯衰减时的电导. 不过, 在强无序区, 无序无梯度衰减时其平均电导随无序度增大而明显增大, 出现了局域 - 退局域转变, 类似于以前的理论预言<sup>[22, 24]</sup>. 当无序线性衰减时, 平均电导随无序区域边缘最大无序度的增大有所增加, 但增加极缓慢. 特别是, 当无序高斯衰减时, 平均电导随最大无序度增大指数衰减, 不再增加, 类局域 - 退局域性转变消失, 不同于以前理论预言. 这是因为存在无序线性衰减特别是高斯衰减时, 从无序区到有序区无序有梯度的衰减, 导致有序区附近区域存在较小无序度, 对有序区电子产生强的散射, 导致平均电导不再增加. 该结果表明, 实验中能否观察到类局域 - 退局域性转变依赖于无序衰减梯度, 因而与实验环境和实验条件密切相关.

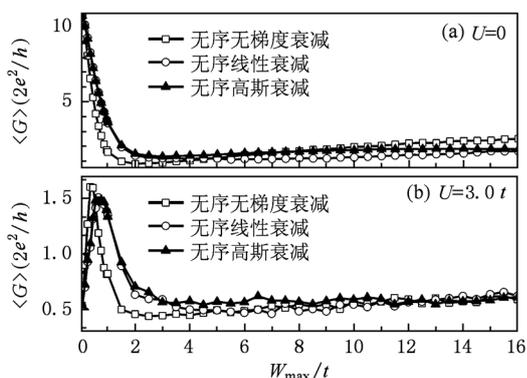


图 2 在不同梯度无序分布的情况下, 平均电导  $\langle G \rangle$  随无序区域边界最大无序度  $W_{\max}$  的变化关系. 无序区域最小无序度  $W_{\min} = 0.05t$ , 体系尺寸为  $P = 200, H = 20$ , 无序渗透深度  $L = 4$ , 电子入射能是  $E = 1.65t$  (a) 不考虑结散射; (b) 考虑结散射

在样品的实验测量时, 样品连接的两个电极将产生接触势垒, 形成结散射. 由于结散射, 电导随能量变化呈现振荡行为, 呈现量子干涉效应. 图 2(b) 中为考虑结散射时其平均电导随无序度  $W_{\max}$  的变化. 从图中可看出, 其平均电导相对无结散射时有较大减小, 在高无序区其结果与无结散射时定性一致. 特别是, 当入射电子处于某些能量时 (如  $E = 1.65t$ ), 由于量子干涉效应, 电导处于极小值. 在低无序区域, 由于无序的引入破坏了电子的相干性, 其平均电导呈现异常增大行为, 出现了一个新的电导峰. 因此, 在准一维纳米结构器件和连线的设计以及应用中, 其结散射和表面无序分布效应必须予以充分考虑.

在  $W_{\max}$  和  $W_{\min}$  确定情况下, 改变无序渗透深度  $L$ , 同样也改变体系的无序衰减梯度. 在  $W_{\max} = 4.5t$  和  $W_{\min} = 0.05t$  时, 图 3 进一步示出了平均电导随无序渗透深度  $L$  的变化. 不考虑结散射时, 如图 3(a) 所示, 从中可以看出, 随无序渗透深度增大, 不同无序梯度分布下体系的平均电导均下降. 这是因为随着渗透深度的增大, 体系中有序区域的相对尺度降低, 对应的有效通道数相应的减少, 体系的平均电导下降. 当无序无梯度衰减时, 且  $L > 8$  时, 体系的电导趋于零, 相当于块体无序, 这是由于强无序导致电子的强局域化. 当无序梯度衰减 (线性或高斯衰减) 时, 即使  $L$  较大时, 体系的平均电导依然保持为一个有限值, 表明中心通道尽管存在较小的无序, 依然保持一定的导电性. 考虑结散射, 其结果如图 3(b) 中所示, 与无结散射时结果定性一致. 不过, 由于结散射, 体系的平均电导明显低于无结散射时的电导. 此外, 我们也进一步计算了不同无序梯度衰减情况下有无结散射时平均电导随有序区宽度的变化, 呈现出特殊的量子尺寸效应. 相关结果均表明梯度无序和结散射对电子运输的重要调制作用.

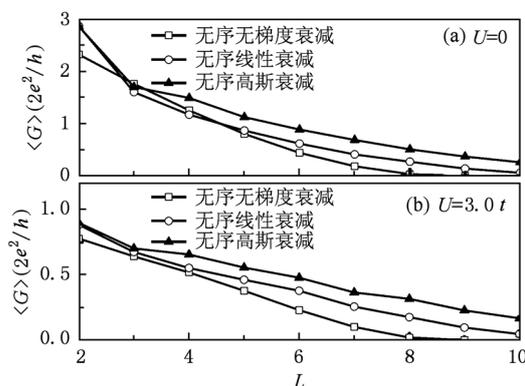


图 3 在不同梯度无序分布的情况下, 平均电导  $\langle G \rangle$  随无序渗透深度  $L$  的变化关系, 无序区域最大无序度  $W_{\max} = 4.5t$ , 最小无序度  $W_{\min} = 0.05t$ , 体系尺寸为  $P = 200, H = 20$ , 电子入射能是  $E = 1.65t$  (a) 不考虑结散射; (b) 考虑结散射

为探索电子运输机制, 我们进一步计算了体系平均电导随长度  $P$  的变化情况, 如图 4 所示. 为便于分析, 纵轴的平均电导选为对数形式. 体系宽度  $H = 20$ , 无序的渗透深度  $L = 6$ ,  $W_{\max} = 4.5t$  和  $W_{\min} = 0.05t$ . 根据安德森无序理论, 在一维及二维的无序体系中, 所有的波函数都是局域的. 从图 4 中可以看出, 体系的电导大小明显的依赖于散射区的长

度. 随着散射区长度的增大, 三种无序梯度分布对应的电导整体下降. 不考虑结散射时, 如图 4(a) 所示, 在散射区长度  $P$  较小时, 体系的平均电导随  $P$  变化, 偏离通常的指数衰减形式. 这是由于, 无序仅存在于体系的表面, 而中间是有序的, 与安德森的块体无序不同. 当  $P$  增大到一定值后, 平均电导随  $P$  增大呈现指数衰减, 最后逐渐趋于一个常数. 考虑结散射后, 其结果图 4(b) 所示, 由于结散射势对电子的散射作用, 体系的平均电导整体下降, 且平均电导随散射区长度增加呈指数衰减. 从图中也可以看到, 在相同散射区长度下, 无序高斯衰减、无序线性衰减及无序无梯度衰减时的电导依次降低. 该结果也进一步表明, 无序的梯度分布对体系的电子输运性质有着重要调制作用. 因此, 梯度无序、结散射

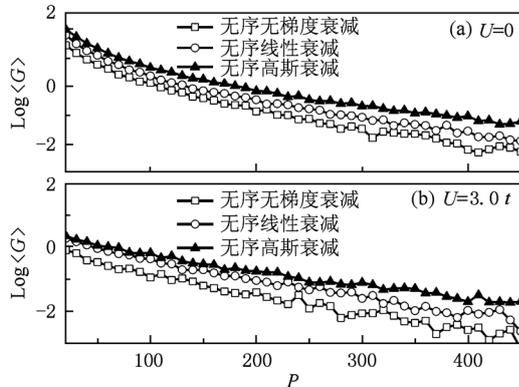


图 4 在不同梯度无序分布的情况下, 平均电导  $\langle G \rangle$  随体系中散射区长度  $P$  的变化, 散射区宽度  $N = 20$ , 无序的渗透深度为  $L = 6$ , 无序区域最大无序度  $W_{\max} = 4.5 t$ , 最小无序度  $W_{\min} = 0.05 t$ , 电子入射能是  $E = 0.01 t$  (a) 不考虑结散射; (b) 考虑结散射

及体系的量子尺寸效应对准一维体系的电子输运性质有着重要影响, 其结果对实验测量及器件设计有指导意义.

#### 4. 结 论

利用安德森无序模型, 发展格林函数矩阵分解消元方法, 研究了不同的无序梯度分布及结散射对准一维纳米线的电子输运性质的影响. 由于结散射, 电导随能量呈现振荡行为, 出现量子干涉效应, 并且体系的平均电导整体减小, 出现了一些新而有趣的量子效应. 例如, 在某些入射能量处, 电导处于极小值, 当进一步引入无序, 电子的相干性被破坏. 在低无序时, 平均电导随无序的增大呈现先增后减的异常现象, 出现了一个新的电导峰. 考虑不同的无序梯度分布, 准一维纳米线的平均电导在强无序区随无序的变化呈现不同的变化趋势. 当无序度无梯度衰减时, 平均电导随无序度的增大而增大, 并且增大的特别明显, 出现了类局域-退局域化的转变; 当无序度线性衰减时, 平均电导也出现了随无序的增大而增大的现象, 但增加极为缓慢. 特别的是, 当无序度高斯衰减时, 平均电导随无序的增大呈指数衰减, 不再增加, 类局域-退局域化转变消失, 不同于以前的理论预言. 结果表明, 类局域与退局域性转变的实验观察依赖于无序的梯度分布, 因而与实验环境和条件等因素密切相关. 研究结果对准一维纳米线结构器件和连线的设计及应用有重要指导作用.

[1] Aharonov Y, Bohm D 1959 *Phys. Rev.* **115** 485  
 [2] Van der Marel D, Haanappel E G 1989 *Phys. Rev. B* **39** 7811  
 [3] Lévy L P, Dolan G, Dunsmuir J, Bouchiat H 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2074  
 [4] Pichler T, Knupfer M, Golden M S, Fink J, Rinzler A, Smalley R E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4729  
 [5] Zwanenburg F, van Rijmenam C, Fang Y, Lieber C, Kouwenhoven L 2009 *Nano Lett.* **9** 1071  
 [6] Gustavsson S, Leturcq R, Simović B, Schleser R, Ihn T, Studerus P, Ensslin K, Driscoll D C, Gossard A C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 076605  
 [7] Takagahara T, Takeda K 1992 *Phys. Rev. B* **46** 15578  
 [8] Songmuang R, Katsaros G, Monroy E, Spathis P, Bougerol C, Mongillo M, De Franceschi S 2010 *Nano Lett.* **10** 3345  
 [9] Xia Y, Yang P, Sun Y, Wu Y, Mayers B, Gates B, Yin Y, Kim F, Yan H 2003 *Adv. Mater.* **15** 353  
 [10] Cui Y, Wang Q Q, Park H K, Lieber C 2001 *Science* **293** 1289  
 [11] Gudixsen M, Lauthon L, Wang J, Smith D, Lieber C 2002 *Nature* **415** 617  
 [12] Ramayya E B, Vasileska D, Goodnick S M, Knezevic I 2007 *IEEE Trans. Nanotech.* **6** 113  
 [13] Hochbaum A I, Chen R 2008 *Nature* **451** 163  
 [14] Duan X, Huang Y, Cui Y, Wang J, Lieber C 2001 *Nature* **409** 66  
 [15] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492  
 [16] Lee P A, Ramakrishnan T V 1985 *Rev. Mod. Phys.* **57** 287  
 [17] Kander I, Imry Y, Sivan U 1990 *Phys. Rev. B* **41** 12941  
 [18] Mucciolo E, Castro Neto A, Lewenkopf C 2009 *Phys. Rev. B* **79** 075407  
 [19] Markussen T, Rurali R, Brandbyge M, Jauho A P 2006 *Phys.*

- Rev. B **74** 245313
- [20] Akguc G B, Gong J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 115317
- [21] Feist J, Bäcker A, Ketzmerick R, Burgdörfer J, Rotter S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 245322
- [22] Yang C Y, Ding J W, Xu N 2007 *Physica. B* **394** 69
- [23] Areshkin D A, Gunlycke D, White C T 2007 *Nano Lett.* **7** 204
- [24] Zhong J X, Stocks G M 2006 *Nano Lett.* **6** 128
- [25] Chen H B, Ding J W 2008 *Physica. B* **403** 2015
- [26] Cuevas E, Louis E, Vergés J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 1970
- [27] Ma M M, Ding J W, Chen H B, Xu N 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2726 (in Chinese)[马明明、丁建文、陈宏波、徐宁 2009 物理学报 **58** 2726]
- [28] Xu N, Ding J W, Xing D Y 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 083710
- [29] Jiang J, Dong J, Xing D Y 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 056802

## Effects of gradient disorder on electronic transport in quasi-one-dimensional nanowires\*

Duan Ling<sup>1)</sup> Hu Fei<sup>1)</sup> Ding Jian-Wen<sup>1)2)†</sup>

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

2) (Key Laboratory of Low Dimensional Materials and Application Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 19 November 2010; revised manuscript received 16 March 2011)

### Abstract

Considering both the gradient decay of the real disorder and the contact scattering, we investigate the electronic transport in quasi-one-dimensional nanowires by developing a decomposition elimination method for Green's function matrix. In the presence the contact scattering, the conductance oscillates with energy. For some energies of incident electrons, an abnormal enhancement is obtained in the average conductance due to the destroyed coherence by the introduction of much low disorder, showing that there appears a new conductance peak. In the absence of disorder gradient, the average conductance firstly decreases then increases with disorder strength, indicating that there exists a localization-delocalization transition. In the presence of linearly decaying disorder, the average conductance increases slightly in a strong disorder region. In the case of the Gaussian-type decaying disorder, the average conductance decreases exponentially and the localization-delocalization transition disappears, which is different from previous theoretical result. The results are helpful for the design and the application of quasi-one-dimensional nanowires device.

**Keywords:** quasi-one-dimensional nanowires, gradient disorder, electronic transport

**PACS:** 72.10.Fk, 73.23.-b

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10674113, 11074212) and the Foundation for the Author of National Excellent Doctoral Dissertation of China (Grant No. 200726).

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