

量子点接触中有关电导 0.7 结构的研究*

焦惠丛¹⁾ 安兴涛²⁾ 刘建军^{1)3)†}

1) (河北师范大学物理科学与信息工程学院, 河北省新型薄膜材料实验室, 石家庄 050024)

2) (河北科技大学理学院, 石家庄 050018)

3) (石家庄学院物理系, 石家庄 050035)

(2012 年 6 月 22 日收到; 2012 年 7 月 27 日收到修改稿)

研究了由鞍形势描述的量子点接触中的电子输运性质, 利用 Hartree-Fock 近似与低维纳米器件中 Thomas-Fermi 近似方法处理了电子 - 电子之间的相互作用, 采用格点格林函数方法计算了零温下体系的电导、电子的自旋积累以及散粒噪声, 重现了 0.7 结构这个反常的实验现象. 计算结果加深了我们关于半导体纳米器件中的强关联相互作用对自旋输运影响的理解.

关键词: 量子点接触, 格林函数方法, 电子 - 电子相互作用

PACS: 73.63.Rt, 71.70.-d, 73.23.-b

DOI: 10.7498/aps.62.017301

1 引言

介观体系, 介于宏观体系和微观体系之间^[1], 几何尺寸相当于或是小于电子的相位相干长度, 就其尺度而言基本上属于宏观范围, 但又表现出明显的量子特性. 电子在输运过程中仍能够保持波函数的相位相干, 从而导致了一些新奇的物理现象. 其中最为显著的是电导的量子化效应, 即在零磁场下的量子点接触 (quantum point contact, QPC) 中, 电导以 $G_0 = 2e^2/h$ 为单位的量子台阶变化^[2,3]. 然而, 1996 年 Thomas 等^[4] 在零磁场下发现, 在电导的 $0.7G_0$ 附近存在一个额外的小平台, 由于这种反常现象不能用简单的单粒子模型给出解释, 而引起了人们的高度关注. 越来越多的研究小组通过理论^[5,6] 和实验^[7,8] 研究给出了这种电导反常随着温度、外加磁场、偏压、电子 - 电子相互作用^[9,11] 等因素的变化, 也提出了各种理论模型^[12-14]. 近年来, 一些有关散粒噪声的实验测量和研究也为揭示 0.7 结构的成因提供了信息^[15,17]. 但是, 至今人们对这种反常的实验现象仍没有一个统一、合理的物理解释. 目前大部分研究者认为它的出现一般是

与电子间的相互作用和自旋有关.

在本文中, 我们研究了由鞍形势描述的 QPC 中^[18,19] 的电子输运性质, 利用 Hartree-Fock 近似与低维纳米器件中 Thomas-Fermi 近似方法处理了电子 - 电子之间的相互作用, 采用格林函数方法计算了零温下体系的电导、电子的自旋积累情况, 以及散粒噪声. 在对电导的计算结果中, 重现了 0.7 结构这一反常的实验现象. 在对零温极限下噪声因子的计算中, 得到了 0.7 结构自旋相关的输运信息.

2 理论模型

我们考虑一个二维的 QPC 系统, 并将其划分为 $N \times M$ 个格点. 每个格点的位置用 (na, ma) 来表示, 其中的 a 为晶格常数, $n = 1, 2, \dots, N$; $m = 1, 2, \dots, M$, 如图 1 所示. 中间的灰色区域是器件部分, 其中考虑均匀垂直的磁场和电子 - 电子相互作用, 区域的两边与半无限长的理想导线相连, 且导线中不存在磁场和电子 - 电子相互作用.

我们采用了格点格林函数方法计算此体系的电导. 当仅考虑磁场存在, 而不考虑电子 - 电子相

* 国家自然科学基金 (批准号: 61176089, 11104059) 和河北省自然科学基金 (批准号: A2011208010) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: liujj@hebtu.edu.cn

相互作用时,系统的哈密顿可写为以下形式:

$$H_0 = \frac{\Pi_x^2 + \Pi_y^2}{2m^*} + V_{\text{conf}}(x, y) + g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (1)$$

其中, m^* 为电子有效质量, $\Pi = p - (e/c)\mathbf{A}$ 为正则动量, V_{conf} 为所加的束缚势, g 为朗德因子, μ_B 为玻尔磁子, 磁场强度 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, $\mathbf{A}$ 为矢势.

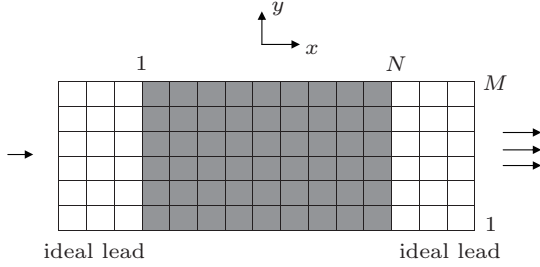


图1 鞍形势格点示意图

QPC 中的势能采用鞍形势来描述:

$$V_{\text{conf}}(x, y) = V_0 - m^* \omega_x^2 x^2 / 2 + m^* \omega_y^2 y^2 / 2. \quad (2)$$

令 (1) 式和 (2) 式中 $x = na$, $y = ma$, 则这个二维体系的哈密顿可以写为

$$H = \sum_{nm} \epsilon_{nm} |nm\rangle \langle nm| - \sum_{nm} (V_{nm, n-1m} |nm\rangle \langle n-1m| + V_{nm, nm-1} |nm\rangle \langle nm-1| + \text{H.c.}), \quad (3)$$

其中, $\epsilon_{nm} = (V_{nm} + 4t) + g\mu_B B_z \sigma$, $\sigma = \pm 1/2$, $V_{nm, n-1m} = t e^{-ieA_x a / \hbar}$, $V_{nm, nm-1} = t e^{-ieA_y a / \hbar}$.

考虑存在垂直于二维电子气平面的磁场 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, 矢势 $\mathbf{A} = (yB, 0, 0)$, 则中间器件部分的哈密顿可以写为比较简单的形式:

$$H_c = \sum_{n=1}^N |n\rangle H_n \langle n| + \sum_{n=1}^{N-1} [|n\rangle H_{n,n+1} \langle n+1| + \text{H.c.}], \quad (4)$$

其中, $|n\rangle$ 为第 n 个格点的刃矢, 且有

$$H_n \equiv H_{n,n} = \begin{pmatrix} \epsilon_{n1} & -t & 0 & \cdots & 0 \\ -t & \epsilon_{n2} & -t & \cdots & 0 \\ 0 & -t & \epsilon_{n3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{nM} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$(H_{n,n+1})_{pp'} = -t e^{-i2\pi\beta[p-(M+1)/2]} \delta_{pp'}, \quad (p, p' = 1, \cdots, M), \quad (6)$$

这里, 用 $\beta = Ba^2 / \phi_0$ 来描述磁场强度, $\phi_0 = hc/e$ 为量子磁通.

在我们的模型中, 假设位于 $\mathbf{r}$ 与 $\mathbf{r}'$ 两个粒子之间的相互作用有以下形式:

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (7)$$

其中, γ 为相互作用强度, 这个相互作用可以理解有效的库仑势. 在 Thomas-Fermi 近似下, 可以估算相互作用强度 γ 的量级^[9], $\gamma \simeq 2\pi \times \hbar^2 / (2m)$. 在计算中, 我们仅考虑了互作用影响的一级近似. 那么, 对应的推迟自能项可写成 Hartree 自能与 Fock 自能的和^[20],

$$\sum_{\mathbf{H}}^{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-i}{2\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{\tilde{\sigma}} \int d\mathbf{r}'' \times \int dE V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \times G_{\tilde{\sigma}}^<(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E), \quad (8)$$

$$\sum_{\mathbf{F}}^{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{2\pi} \int dE V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G_{\tilde{\sigma}}^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E).$$

一般情况下, Hartree 自能是局域的, 它是对所有的自旋方向的小于格林函数求和. 而 Fock 自能是非局域的, 它仅依赖于自旋方向相同的小于格林函数. 而在我们考虑的 δ 势作用下, Hartree 和 Fock 自能的贡献都是局域的, $\Sigma_{\mathbf{F}}^{\sigma}$ 正好抵消了 $\Sigma_{\mathbf{H}}^{\sigma}$ 中对自旋求和中的 ($\sigma = \tilde{\sigma}$) 这一项, 因此可以得到总的相互作用自能表达式为

$$\sum_{\text{int}}^{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{H}}^{\sigma} + \sum_{\mathbf{F}}^{\sigma} = \gamma n_{-\sigma}(\mathbf{r}), \quad (9)$$

其中

$$n_{\sigma}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2\pi} \int dE G_{\sigma}^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E) \quad (10)$$

是自旋为 σ 的电子密度. 考虑电子-电子相互作用后, 系统的哈密顿可以写为 $H^{\sigma} = H_0^{\sigma} + \Sigma_{\text{int}}^{\sigma}(\mathbf{r})$, 为无相互作用哈密顿和相互作用自能的和, 其中的相互作用自能可以看成一项额外的局域势.

再看器件的两端, 是与两个半无限长的理想电极相连, 在电极中不考虑电子电子间的相互作用. 左右电极的影响分别用 $\Sigma_{\mathbf{L}}$ 和 $\Sigma_{\mathbf{R}}$ 表示, 那么整个体系的推迟格林函数 G^r 可以写为

$$G_{\sigma}^r(E) = \left[E - H_0^{\sigma} - \sum_{\text{int}}^{\sigma} - \sum_{\mathbf{L}} - \sum_{\mathbf{R}} \right]^{-1}. \quad (11)$$

由运动方程, 我们可以通过推迟格林函数 G^r 得到小于格林函数 $G^<$ 为

$$G_{\sigma}^<(E) = G_{\sigma}^r(E) \sum^<(E) G_{\sigma}^a(E), \quad (12)$$

其中, $G_{\sigma}^a(E)$ 为超前格林函数, 即 $G_{\sigma}^a = [G_{\sigma}^r]^{\dagger}$. 小于自能的表达式为 $\Sigma^<(E) = -2i f(E, \mu) \text{Im}(\Sigma_{\mathbf{L}} + \Sigma_{\mathbf{R}})$, 这里的 $f(E, \mu)$ 为 Fermi-Dirac 分布. 在计算的过程

中,通过给出一个电子间相互作用自能的初值来进行自洽运算,从而得到合理的相互作用自能数值.

最后,通过 Landauer 公式计算系统的电导:

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} \{ \Gamma_L G^r \Gamma_R G^a \}, \quad (13)$$

其中, $\Gamma_{L/R} = i(\Sigma_{L/R} - \Sigma_{L/R}^\dagger)$.

3 结果与讨论

在计算中,我们将 QPC 划分为 7×20 个格点,即 $M=7, N=20$ 来进行计算,并以 $t = \hbar^2/2ma^2$ 作为能量单位,取 $\omega_x = 0.005, \omega_y = 7\omega_x$. 首先我们计算电导在零温时候的情况,加入一个小磁场来破坏自旋向上和自旋向下电子数的对称分布.

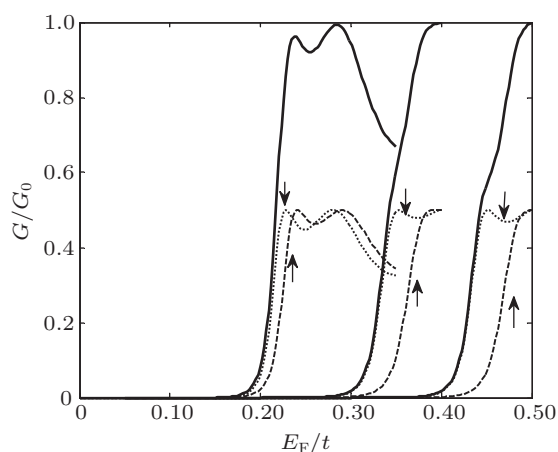


图2 $\beta = 0.004$ 时,电导随费米能的变化,其中,虚线表示自旋向上电子的电导,点线表示自旋向下电子的电导,实线表示总电导

图2给出电导随费米能的变化,曲线从左到右依次为 $\gamma = 0, 1.6\pi, 1.7\pi$. 由于小磁场的加入使得电子的自旋简并解除,但是由于所加磁场很小,当不考虑电子-电子相互作用时,能级分裂得很小,所以两个自旋相关的电导差异也并不大,如图2中左边的第一组线. 但是,随着电子-电子相互作用的增大,它们的差异也不断增大,从图中表现出来的是两条自旋相关的电导曲线间隔不断增大. 同时在这个过程中,总电导也在发生变化. 值得关注的是,当电子-电子相互作用强度 $\gamma = 1.7\pi$ 时,总电导在 $0.7G_0$ 附近出现了一个小的台阶. 出现这种现象的原因是磁场的加入引发了自旋向上电子和自旋向下电子在输运过程中粒子数的不平衡,由相互作用的自能公式 $\Sigma_{\text{int}}^\sigma(\mathbf{r}) = \gamma n_{-\sigma}(\mathbf{r})$ 可以得出,相互作用自能引发的这个额外势就会进一步加大这个不平衡,从而导致不同自旋电子间的电导差异加大,

在总电导的 $0.7G_0$ 附近出现异常.

图3(a)和图3(b)分别给出在不同的电子-电子相互作用下,电子的自旋积累情况. 在两个图中都有明显的自旋积累出现,尤其在散射区域的中间部分自旋向下的电子密度明显大于自旋向上的电子密度. 对应于图2中电导的情况,也就是自旋向下的电子数密度大,就会对自旋向上的电子形成一个额外势,阻碍其透射,从而使自旋相关的电导曲线发生分裂. 通过对图3(a)和3(b)的比较可以看出,在 $\gamma = 1.7\pi$ 时,电子的自旋积累要大于 $\gamma = 1.6\pi$ 时的情况. 也就是说当电子间相互作用强度较大时,更容易出现电子的自旋极化,表现在输运过程中分别对应着图2中右边的第二、三组电导曲线.

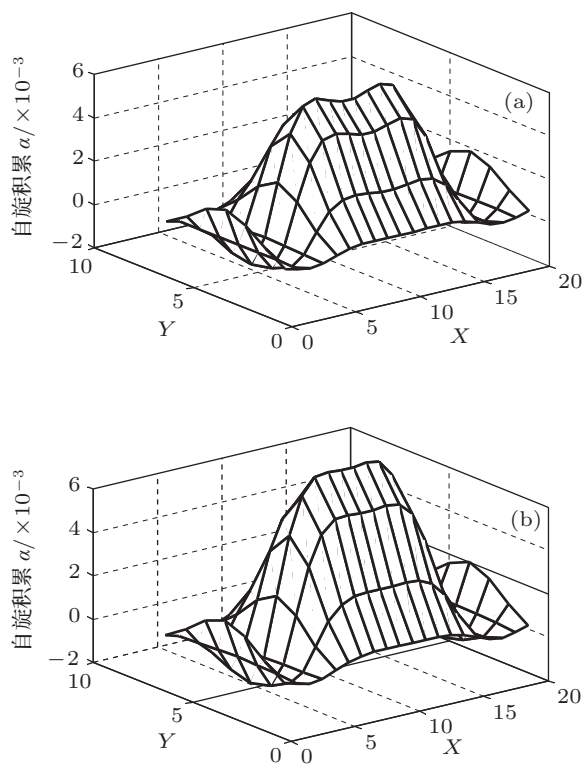


图3 (a)和(b)分别为 $\gamma = 1.6\pi$ 和 $\gamma = 1.7\pi$ 时的电子自旋积累 $\alpha = (n_{\downarrow} - n_{\uparrow})$ 情况,其中 $\beta = 0.004$

图4给出 $\gamma = 1.5\pi$, 不同磁场下电导随费米能的变化曲线. 可以看出,随着磁场的逐渐增大,电导曲线在 $0.5G_0 - 0.7G_0$ 间开始发生弯曲. 我们知道,即使不考虑电子之间的相互作用,在高磁场下,由于塞曼分裂,也会导致电导 $0.5G_0$ 的出现. 但如果考虑电子之间的相互作用,这种作用必然会加大电子的自旋极化,加宽电导的半整数台阶. 而且随着磁场的增大,由磁场引起的塞曼能会对电导的影响占主要地位,而电子-电子相互作用会作为一项额外势对其起到加强的作用.

图 5 是在不加外磁场的情况下, 只考虑电子之间的相互作用对电导的影响. 从图 5 可以看出, 当不存在外磁场扰动时, 上自旋和下自旋电子的电导曲线完全重合, 并不会发生分裂. 也就是说, 在我们所建立的模型中, 单纯考虑电子之间的相互作用并不会引起电子的自旋极化, 它的存在并不能对引起电子的自旋极化起到主导作用, 而只能是产生辅助的效果.

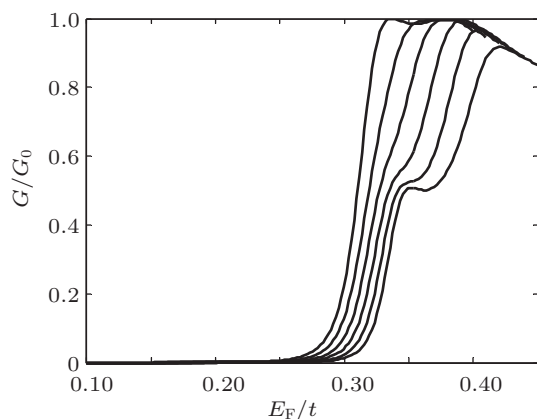


图 4 磁场对电导的影响, 其中 $\gamma = 1.5\pi$, 电导曲线对应的磁场强度从左到右依次增大, β 分别取为 0, 0.004, 0.006, 0.008, 0.01, 0.012

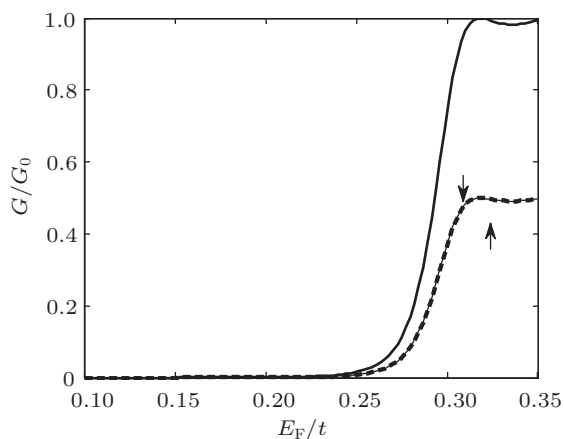


图 5 无外磁场下, 仅考虑电子-电子相互作用对电导的影响, 其中 $\beta = 0, \gamma = 2\pi$

图 6 给出零温 ($kT = 0$) 极限下的噪声因子 N 随电导的变化情况, 其中 $N = \frac{1}{2} \sum_{n,\sigma} T_{n,\sigma} (1 - T_{n,\sigma})$. 从图 6 可以看出, 在单通道情况下, 当电子透射概

率为零或是完全透射时, 上、下自旋电子的散粒噪声会被完全抑制. 其中, 在虚线描述的零磁场下, 当透射概率为 $T_\sigma = 1/2$ 时, 噪声因子达到最大值. 而当引入磁场后, 曲线从单峰形状逐渐变为近似对称的双峰形状, 这与实验结果^[15]基本一致. 由于磁场的引入, 从图 6 可以看出在 $0.7G_0$ 附近, 噪声因子被抑制. 说明在这个反常的电导附近, 存在不同的输运通道, 有可能是自旋向下的电子几乎已经完全透射从而对噪声没有贡献, 而自旋向上的电子才部分透射, 反映出了自旋相关的输运信息.

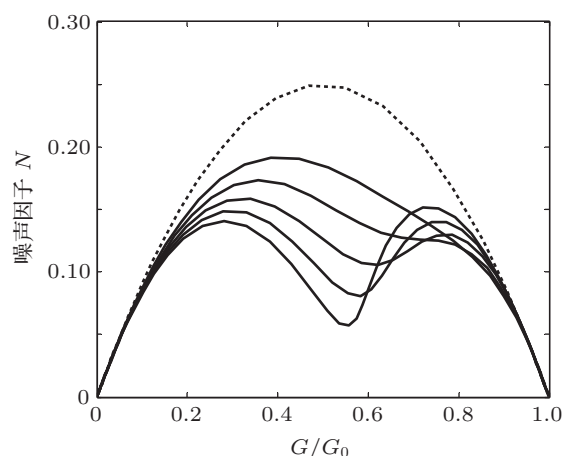


图 6 不同磁场下, 噪声因子随电导的变化曲线, 其中 $\gamma = 1.7\pi$, 曲线从上到下依次为 $\beta = 0.0, 0.002, 0.0025, 0.003, 0.0035, 0.004$

4 结论

本文利用格林函数的方法对量子化电导中有关 0.7 结构的成因进行了理论研究. 利用 Hartree-Fock 近似的方法, 简单处理了体系中的电子-电子间的相互作用. 在对电导的计算过程中发现, 随着电子-电子相互作用强度的增大, 自旋相关电导的差异也加大, 并且在电子间相互作用强度增大到一定值时, 电导在 $0.7G_0$ 附近会出现一个额外的小平台. 通过对零温极限下噪声因子的计算, 发现在 $0.7G_0$ 附近噪声被抑制, 反映出了自旋相关的输运信息. 期望能对探求半导体纳米器件中的强关联相互作用对自旋输运的影响提供依据, 揭示其中新的物理现象.

[1] Yan S S, Gan Z Z 1995 *Mesoscopic Physics* (Beijing: Beijing University Press) p3 (in Chinese) [阎守胜, 甘子钊 1995 介观物理 (北京: 北京大学出版社) 第 3 页]

[2] van Wees B J, van Houten H, Beenakker C W J, Williamson J G, Kouwenhoven L P, van der Marel D, Foxon C T 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 848

- [3] Wharam D A, Thornton T J, Newbury R, Pepper M, Ahmed H, Frost J E F, Hasko D G, Peacock D C, Ritchie D A, Jones G A C 1988 *J. Phys. C* **21** L209
- [4] Thomas K J, Nicholls J T, Simmons M Y, Pepper M, Mace D R, Ritchie D A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 135
- [5] Cornaglia P S, Balseiro C A, Avignon M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 024432
- [6] Reilly D J, Buehler T M, O'Brien J L, Hamilton A R, Dzurak A S, Clark R G, Kane B E, Pfeiffer L N, West K W 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 246801
- [7] Reukky D J, Facer G R, Dzurak A S, Kane B E, Clark R G, Stiles P J, Clark R G, Hamilton A R, O'Brien J L, Lumpkin N E, Pfeiffer L N, West K W 2001 *Phys. Rev. B* **63** 121311
- [8] Rokhsinon L P, Pfeiffer L N, West K W 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 156602
- [9] Lassl A, Schlagneck P, Richter K 2007 *Phys. Rev. B* **75** 045346
- [10] Hsiao J H, Hong T M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 115309
- [11] Wan J, Cahay M, Debray P, Newrock R 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155440
- [12] Meir Y, Hirose K, Wingreen N S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 196802
- [13] Matveev K A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 106801
- [14] Liu J J, Zhang J, An X T 2011 *J. Beijing Univ. Technol.* **37** 4 (in Chinese) [刘建军, 张建, 安兴涛 2011 北京工业大学学报 **37** 4]
- [15] Dicarolo L, Zhang Y, McClure D T, Reilly D J, Marcus C M, Pfeiffer L N, West K W 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 036810
- [16] Roche P, Ségala J, Glatli D C, Nicholls J T, Pepper M, Graham A C, Thomas K J, Simmons M Y, Ritchie D A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 116602
- [17] An X T, Li Y X, Liu J J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4105 (in Chinese) [安兴涛, 李玉现, 刘建军 2007 物理学报 **56** 4105]
- [18] Büttiker M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7906
- [19] Li Y X, Liu J J, Li B Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1366 (in Chinese) [李玉现, 刘建军, 李伯斌 2005 物理学报 **54** 1366]
- [20] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) p307

0.7 structure of conductance quantization in quantum point contact*

Jiao Hui-Cong¹⁾ An Xing-Tao²⁾ Liu Jian-Jun^{1)3)†}

1) (College of Physical Science and Information Engineering, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China)

2) (School of Sciences, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang, Hebei 050018, China)

3) (Physics Department, Shijiazhuang University, Shijiazhuang 050035, China)

(Received 22 June 2012; revised manuscript received 27 July 2012)

Abstract

In the paper, we study electronic transport property through a quantum point contact with the saddle-point potential. Our numerical approach is based on the Green's function technique which is evaluated at the Hartree-Fock level. We reproduce relevant features of 0.7 structure when the strength of electron-electron interaction has changed. Besides, we calculate spin accumulation and noise factor at zero temperature. We deepen the understanding of the effect of strong correlation interaction on spin transport in nanometer semiconductor device.

Keywords: quantum point contact, Green's function technique, electron-electron interaction

PACS: 73.63.Rt, 71.70.-d, 73.23.-b

DOI: 10.7498/aps.62.017301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61176089 11104059), and Hebei Province Natural Science Foundation of China (Grant No. A2011208010).

† Corresponding author. E-mail: liujj@hebtu.edu.cn