

太赫兹电磁场照射下量子线中的纳米电子力^{*}

杨 谋 周光辉[†] 肖贤波

(湖南师范大学物理系, 长沙 410081)

(2002 年 11 月 1 日收到 2002 年 12 月 24 日收到修改稿)

研究两端连接电子库的量子线在太赫兹 (THz) 电磁场横向辐射下的电子力学问题. 在自由电子近似下求得了弹道区二能级电子波函数解析表达式, 发现电子概率在两个能态间随线轴坐标作 Rabi 振荡, 其幅度与外场强度和频率有关. 利用热力学统计算符方法并利用波函数计算出了传导电子对量子线中张力贡献的大小. 其计算结果可表示成与外场无关和与外场有关的两部分之和, 前者与已有的实验观测和理论计算结果一致, 而与外场参量有关的部分可用量子相干理论解释.

关键词: 量子线, THz 电磁场, 纳米电子力

PACC: 7335, 7820W, 7320D

1. 引 言

1996 年, Rubio^[1]和 Stalder^[2]两个小组独立地利用扫描隧道显微镜实验在室温下测量了金纳米线在拉伸中电导与内聚力(垂直于线横切面的张力)随线径变化的规律, 观测到了电导台阶与张力涨落相对应的现象. 张力在金属纳米线制备和使用中都是很重要的, 所以这一实验结果在该领域内引起了高度重视. 因拉伸时线中原子构形和电子结构都可能发生变化, 所以对张力涨落与电导台阶相对应这一现象存在两种主要解释: 分子动力学模拟^[3]研究结果认为拉伸使线径减小到一些临界值时发生原子重构(结构重排^[4]), 产生相应的弹性形变和屈服的交替而形成张力涨落; 另一种观点则认为电子对结合能的贡献是主要的, 金属纳米线中受限电子的量子能级应反应在结合能及结合力上. 根据量子波导理论, 自由电子模型^[5-7]和考虑了原子结构的密度泛函计算^[8]得出电子的量子传导模式对张力涨落贡献的大小与上述实验观测值(纳牛顿)相当, 其涨落与电导台阶相对应. 沿线轴向外加恒定磁场^[9]是一种操控量子模式而不影响原子结构的有效方法, 能导致纳米线相对于无外场时电导和张力更丰富的结

构, 但由于实验上难以实现而受到限制.

金属纳米线费米能级及横向子能级间隔均在 1—10 meV 量级, 对应的频率为 1—10 THz. 所以对金属纳米线加该频率范围的横向电磁场可在不影响原子结构的前提下研究电子与外场的量子干涉效应, 产生电子模式间的 Rabi 振荡^[10]、外场频率和强度的适当组合引起电子输运阻塞^[11]等新的物理效应. 还可以用来研究和测算由于尺寸效应引起的金属纳米线中电子某些不同于体材料的特征量, 如费米能量、有效质量^[12]等. 另外, 超快激光技术^[13]的发展为 THz 辐射提供了稳定可靠的激发光源, THz 辐射的检测及其与物质的相互作用过程研究正在引起各有关学科的关注^[14, 15].

本文采用与已有文献 [5—7] 中不同的热力学统计方法研究圆柱形直金属纳米线在 THz 电磁场横向照射下电子力的变化规律. 我们的研究表明, 在外场的影响下电子力的变化显示出传导电子与外场的量子相干效应, 这一现象目前还未见报道. 而无外场照射时的电子力与已有的实验观测^[1, 2]及理论计算^[5-7]一致. 这些结果可用来进一步研究量子线几何参数改变时(如拉伸)电子运动对张力的贡献与原子构型改变对张力的贡献的联系和区别, 同时也提供了一些 THz 电磁波与低维量子系

^{*} 湖南省自然科学基金(批准号: 02JJY2008)和湖南师范大学科研基金(批准号: 000627)资助的课题.

[†] 通讯联系人.

统作用方面的知识.

2. 电子波函数

长为 L 的金属纳米线(两端连接电子库)在电磁场横向照射下,取 z 轴沿线轴方向,则在弹道区自由电子近似下含时 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{1}{2m^*} (\hat{p} + e\mathbf{A})^2 + U(x, y) \right] \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t), \quad (1)$$

式中 $\mathbf{A}(t) = (\varepsilon/\omega) \cos(\omega t) \hat{e}_y$ 为电磁场矢势(ω 和 ε 分别为频率和振幅, \hat{e}_y 为极化方向单位矢), m^* 和 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ 分别为电子有效质量和动量, $U(x, y)$ 为横向限制势. 显然, 电子波函数可写为如下分离变量的形式:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{ikz} \sum_n a_n(t) \phi_n(x, y), \quad (2)$$

其中 k 为轴向波矢, $a_n(t)$ 为含时振幅, $\phi_n(x, y)$ 为无外场时的横向本征态(模式)函数, 其具体形式取决于限制势 $U(x, y)$. 为了简单, 在此我们仅考虑最低的两个横向子能级 E_1 和 E_2 . 将(2)式代入(1)式, 在弱场近似下($A^2 \approx 0$)得矩阵形式的方程,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = k^2 \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} E_1 & M \cos \omega t \\ M \cos \omega t & E_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中已选定了

$$\hbar = 2m^* = 1,$$

$$M = \left| \frac{2e\varepsilon}{\omega} \int \phi_1^* \frac{\partial}{\partial y} \phi_2 dx dy \right| \sim \varepsilon$$

为两个能级间通过外场的相互作用能. 解上述方程得电子波函数一般形式为

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_k [C_+ |+\rangle e^{-i(\lambda_+ + k^2)t} + C_- |-\rangle e^{-i(\lambda_- + k^2)t}] e^{ikz}, \quad (4)$$

式中 C_{\pm} 为待定常数, $\lambda_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\delta^2 + M^2}$, $\delta = \omega - (E_2 - E_1)$ 为失谐量, $| \pm \rangle$ 为两个态矢,

$$\begin{aligned} | \pm \rangle &= e^{i(\frac{\delta}{2} - E_1)t} \phi_1 + A_{\pm} e^{-i(\frac{\delta}{2} + E_2)t} \phi_2, \\ A_{\pm} &= \frac{1}{M} (-\delta \pm \sqrt{\delta^2 + M^2}). \end{aligned} \quad (5)$$

假定电子以总能量 E 从左向右入射, 在 $z=0$ 和 $t=0$ 时占据 ϕ_1 态的概率为 1, 则可确定归一化常数和波矢为

$$C_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + M^2}} \right), \quad (6)$$

$$k_{\pm} = \sqrt{E - E_1 + \delta/2 - \lambda_{\pm}}. \quad (7)$$

最后得电子波函数的简单形式

$$\Psi = (C_+ e^{ik_+z} + C_- e^{ik_-z}) e^{-iEt} \phi_1 + (C_+ A_+ e^{ik_+z} + C_- A_- e^{ik_-z}) e^{-i(E+\omega)t} \phi_2. \quad (8)$$

由(8)式得电子占据 ϕ_1 态的概率

$$\rho(z) = 1 - \gamma \sin^2 \left(\frac{k_+ - k_-}{2} z \right). \quad (9)$$

可见在外场作用下电子在两个态之间的概率与时间无关, 但按 z 作 Rabi 振荡^[10], 其振动幅度为

$$\gamma = \frac{M^2}{\delta^2 + M^2} \leq 1, \quad (10)$$

式中等号对应于失谐量 $\delta = 0$ (共振)的情况. 当外场强度很弱时, 即 $M \approx \varepsilon \approx 0$ 时 $\gamma \rightarrow 0$, Rabi 振荡消失.

3. 纳米电子力

文献[5—7]中, 用热力学公式 $F = -d\Omega/dL$ (Ω 为巨势)计算了无外场时张力随线长 L 的变化规律. 系统在电磁场辐照下处于非平衡态, 不能直接由[5—7]中的公式得到 Ω . 这里, 我们用统计力学方法定义热力学巨势

$$\Omega = k_B T \ln(\text{Tr} e^{-\frac{H - \mu N}{k_B T}}). \quad (11)$$

上式中 H 为电子哈密顿量, μ 为化学势, k_B 为 Boltzmann 常数. 上式对 L 求得

$$F = -\text{Tr} \left(\frac{dH}{dL} e^{-\frac{H - \mu N}{k_B T}} \right) / \text{Tr} e^{-\frac{H - \mu N}{k_B T}} = -\text{Tr} \frac{dH}{dL} \hat{\rho}, \quad (12)$$

式中 $\hat{\rho}$ 为平衡态密度矩阵算符. 这样, 我们可以定义一个力算符

$$\hat{F} = -\frac{dH(L)}{dL}, \quad (13)$$

并利用(8)式给出的波函数来计算传导电子对张力的贡献

$$F = \int_{E_1}^{E_F} dE D(E - E_1) \int_{\text{wire}} dV \Psi^* \hat{F} \Psi, \quad (14)$$

式中 E_F 为费米能级, $D(E - E_1)$ 为电子态密度函数.

假定线总体积 $V = LS$ ($S = \pi R^2$ 为线横切面积)保持不变, 并选取抛物线(软)限制势

$$U(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r^2 \equiv \frac{E_F}{R^2} r^2, \quad (15)$$

则有

$$\hat{F} = - \frac{E_F}{LR^2} r^2, \quad (16)$$

则(8)式中的横向波函数 ϕ_1, ϕ_2 为圆振子波函数. 将以上结果代入(14)式经计算得

$$F = - \frac{2\omega_0}{\pi} \sqrt{E_F - \omega_0} + \frac{\omega_0 \gamma}{\pi} \times \left(\int_{E_1}^{E_F} \frac{\sin[(k_+ - k_-)L]}{2(k_+ - k_-)L} \frac{dE}{\sqrt{E - \omega_0}} - 1 \right). \quad (17)$$

可见在横向电磁场作用下电子力为两部分之和: 第一部分是与外场无关的常数, 仅为线几何参量的函数(ω_0 与线径 R 或线长 L 有关), 与文献 5—7 的计算结果一致; 与 γ 成正比的第二部分需数值积分, 这部分为传导电子与外场的量子干涉产生的, 目前还未见这方面的研究报道. 图 1 为选取金的特征值^[5-7]由(17)式数值积分后的结果, 纵坐标为电子力 F (单位为 nN) 横坐标为 ω/ω_0 . 图中实线为无外场时($\gamma = 0$)的电子力, 虚线和点线分别为取 $M = 0.02, 0.05$ 时电子力随外场参量(ω 和 ϵ)的变化规律. 由图 1 可见, 总的效果是外场使电子力增大, 且外场的影响主要集中在共振(相干)频率($\omega/\omega_0 = 1$)附近, 但随着外场强度的增大非共振区域也显现外场对电子力的贡献.

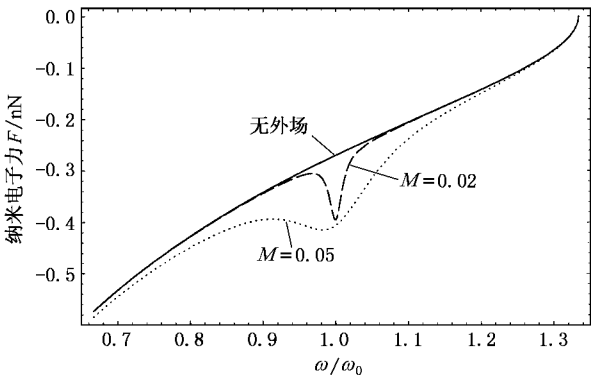


图 1 选取金的特征值由(17)式数值积分后的结果

4. 讨 论

本文的研究对象虽然是横切面有一定大小的金属纳米线(三维量子线), 其计算方法同样适应于在 GaAs-AlGaAs 超结构上加分裂栅电压形成的二维量子线及其他量子线. 只是(2)式中的横向波函数在二维量子线的情况下简化为单变量函数, 再就是对应的外场共振频率低一些. 本文虽然以金作为例子, 但对可采用自由电子模型的其他贵金属及碱金属与半金属也应有相似的结果, 所以具有普遍性. 另外, (15)式中如选取横向限制势为硬势(无限深势阱), 则(8)式中的波函数 ϕ_1, ϕ_2 为圆 Bessel 函数, 本质上不影响最后的计算结果. 而实际物理系统的限制势应介于软势与硬势之间.

[1] Rubio G , Agrait N , Vieira S 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2302

[2] Stalder S , Durig U 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 637

[3] Landman U , Luedtke W D , Burnham N A *et al* 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 1362 ; Torres J A , Saenz J J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2245

[4] Wang B L , Yin S Y , Wang G H *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2046

[5] Stafford C A , Baeriswyl D , Burki J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 2863

[6] Yannouleas C , Landman U 1997 *J. Phys. Chem. B* **101** 5780

[7] Blom S , Olin H , Costa - Krämer J L *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **57** 8830

[8] Nakamura A , Brandbyge M , Hansen L B *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1538

[9] Bogachev E N , Scherbakov A G , Landman U 1997 *Phys. Rev. B* **56** 14917

[10] Gorelik L G , Miao F A , Shekhter R I *et al* 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3169

[11] Blom S , Gorelik L Y , Jonson M *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** 16305

[12] Blom S , Gorelik L Y 2001 *Phys. Rev. B* **64** 45320

[13] Kalzenellenbogen N , Griscowsky D 1992 *Appl. Phys. Lett.* **58** 222

[14] Ferguson B , Zhang X C 2002 *Nature Materials* **1** 26

[15] Zou J , Shao B , Xing X S 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2233 [in Chinese] 邹 健、邵 彬、邢修三 1997 物理学报 **46** 2233]

Nanoelectromechanics in a quantum wire irradiated by a THz electromagnetic field^{*}

Yang Mou Zhou Guang-Hui Xiao Xian-Bo

(*Department of Physics , Hunan Normal University , Changsha 410081 , China*)

(Received 1 November 2002 ; revised manuscript received 24 December 2002)

Abstract

We study the nanoelectromechanics in a quantum wire connecting two reservoirs irradiated under an external terahertz (THz) electromagnetic field. Using the free-electron model at ballistic regime we calculated the two-level electron wavefunction and the Rabi oscillation of electron probability between the two levels. Using a statistical operator we calculated the nanoelectronic force in the wire. The result consists of two terms , which corresponds to the case with or without external field. The term without field parameter is consistent with the existing experimental observation and theoretical calculation , and the other term from the external field can be explained by the quantum coherent theory.

Keywords : quantum wires , THz electromagnetic field , nanoelectromechanics

PACC : 7335 , 7820W , 7320D

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province(Grant No. 02JJY2008) and the Research Foundation of Hunan Normal University , China(Grant No. 000627).