

УДК 519.6

М. А. БЕЛОВ, Г. Г. КРЫЛОВ

ПОЛЕВОЕ УПРАВЛЕНИЕ КОГЕРЕНТНЫМ КВАНТОВЫМ ТРАНСПОРТОМ ЗАРЯДА
В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ

(Представлено членом-корреспондентом Л. И. Гурским)

Белорусский государственный университет, Минск

Поступило 23.04.2014

Введение. Современное состояние в области разработки и миниатюризации электрокомпонентов достигло уровня, когда в устройствах непосредственно используются когерентные квантовые явления. Можно выделить два основных направления исследований, а именно, разработку новых материалов и создание приборов, использующих квантовые эффекты.

Материалы с выраженной высокой анизотропией поверхности Ферми обычно называют одномерными системами. У одномерных систем наблюдается ряд необычных свойств [1; 2], в том числе аномальные флуктуации проводимости. Одномерные модели активно рассматривались на этапе становления физики твердого тела, однако ввиду наличия таких аномальных свойств, их изучение было приостановлено. Интерес к одномерным системам возрос, когда были выявлены необычные электронные свойства таких веществ, как тетрагидрофульвалена-тетрацианохинодиметан, $(\text{SN})_x$, $(\text{CH})_x$, сильно отличающиеся от свойств трехмерных систем [3].

Были предложены теории, описывающие электронные и транспортные свойства одномерных и квазиодномерных систем [4–7], давшие описания температурной и частотной зависимости проводимости, аномальным флуктуациям проводимости для мезоскопических образцов, эффектам, обусловленным неупорядоченностью, локализацией квантовых состояний и прочего. Изучались свойства одномерной цепочки (волновода) нетривиальной формы [8–10]. В работе [11] было показано существование связанных состояний в таких волноводах, а также то, что локализация квантовых состояний является общим свойством ансамблей таких систем. Успешное теоретическое обобщение этих свойств приведено в [12]. Также хотелось бы выделить работы [13; 14], в которых авторы используют модель Кронига–Пенни для оценки эффекта компенсации локализации волновой функции для неупорядоченной нанопроволоки с управлением проводимости продольным электрическим полем.

Очевидным применением таких нанопроволок является их использование в качестве канала полевого транзистора. Аналитическое описание когерентного квантового транспорта заряда в нанопроволоках, помещенных во внешнее электрическое поле, приводится в работе [15], где для вычисления проводимости использовался подход Ландауэра и первое приближение теории возмущений по величине поперечной составляющей внешнего электрического поля. В этой работе пересмотрена модель нанопроволоки, введенная в [14], и описана проводимость (коэффициент пропускания) изогнутой нанопроволоки, помещенной во внешнее электрическое поле с продольным ускоряющим и поперечным управляющим компонентами. Показано существование области управления проводимостью и квадратичная зависимость коэффициента пропускания от величины поля.

В случае больших значений напряжений внешнего поля, а также для учета особенностей геометрии системы, требуются обобщения модели [14; 15] и более точный расчет зависимостей проводимости от величины электрического поля, что и является целью настоящей работы.

Описание модели. Будем рассматривать одномерную цепочку из N равноотстоящих рассеивающих центров, размещенных вдоль кривой, задаваемой выражением

$$z = s(x) = H \left(\frac{\exp(\beta(x/L - 1/2)^2) - \exp(\beta/4)}{1 - \exp(\beta/4)} \right), \quad (1)$$

где параметр $\beta = 16 \log 0,5$ выбран так, чтобы полуширина цепочки была равна половине длины системы (рис. 1). Концы цепочки фиксированы, $s(0) = s(L) = 0$. Цепочка помещена в однородное электрическое поле с компонентами E_x и E_z вдоль соответствующих осей. Тогда потенциальная энергия заряда в электрическом поле в произвольной точке цепочки (1) задается выражением

$$U(x) = e(E_x x + E_z z(x)). \quad (2)$$

Поскольку продольное поле должно ускорять электроны, использовано отрицательное значение E_x . При этом рассматривается случай достаточно вытянутой формы цепочки, удовлетворяющей условию $L \gg H$, что позволяет допустить, что рассеивающие центры распределены равномерно вдоль направления оси x .

За основу рассмотрения взята работа [13], где для расчета проводимости используется модель цепочки неупорядоченных рассеивающих центров типа Кронига–Пенни. Следуя работам [13; 14], запишем квантовую модель Кронига–Пенни с использованием потенциала (2):

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=1}^N V_n \delta(x - na) + U(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x),$$

где E – собственное значение Гамильтониана в атомных единицах $Ry \equiv hcR_\infty \approx 13,61$ эВ; a – параметр решетки; V_n – случайный потенциал n -го рассеивающего центра. Используется однородное распределение амплитуд случайного потенциала $V_n \in (V - \Delta V, V + \Delta V)$.

Как и в работах [13; 14], в связи со свойствами рассеивающих потенциалов стационарное уравнение Шредингера может быть представлено посредством лестничного приближения отображения Пуанкаре

$$\Psi_{n+1} = \left(\cos k_{n+1} + \frac{k_n \sin k_{n+1} \cos k_n + V_n \frac{\sin k_{n+1}}{k_{n+1}}}{k_{n+1} \sin k_n} \right) \Psi_n - \frac{k_n \sin k_{n+1}}{k_{n+1} \sin k_n} \Psi_{n-1},$$

где $k_n = (E + eE_z na + eE_x z(na))^{1/2}$; N – количество атомов в цепочке.

Коэффициент пропускания системы выражается формулой

$$T = \frac{k_0}{k_N} \frac{|\exp(2ik_N) - 1|^2}{|\Psi_{N-1} - \Psi_N \exp(-ik_L)|^2}, \quad (3)$$

где $k_0 = E^{1/2}$, $k_N = (E + eE_x Na)^{1/2}$.

Как было упомянуто, известной отличительной чертой одномерных моделей является наличие аномальных флуктуаций проводимости [5]. В рассматриваемой системе соответствующий эффект выражается в том, что дисперсия коэффициента пропускания достигает 10 % при 10000 реализаций модели для каждого волнового числа. Для уменьшения дисперсии при расчете

используется геометрическое среднее по 100000 реализаций для каждого значения T , рассчитанного по (3).

Очевидно, что управляющим параметром будет не напряженность поперечного электрического поля E_z , а максимум потенциальной энергии этого поля в цепочке $U_z = eE_z z(L/2)$. Из аналогичных соображений введена и энергия ускоряющего поля $U_x = eLE_x$. Пример зависимости коэффициента пропускания (в логарифмическом масштабе) от волнового числа электронов k_N для двух различных U_z приведен на рис. 2.

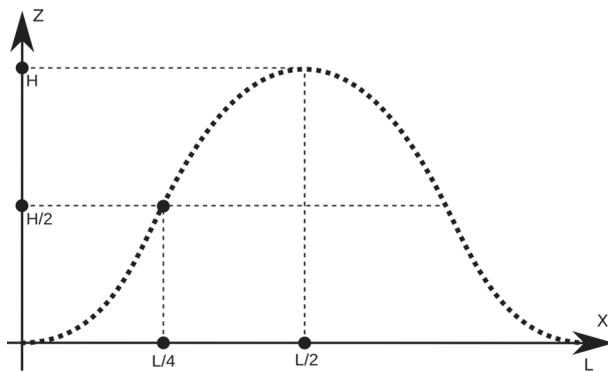


Рис. 1. Форма, размеры и ориентация нанопроволоки

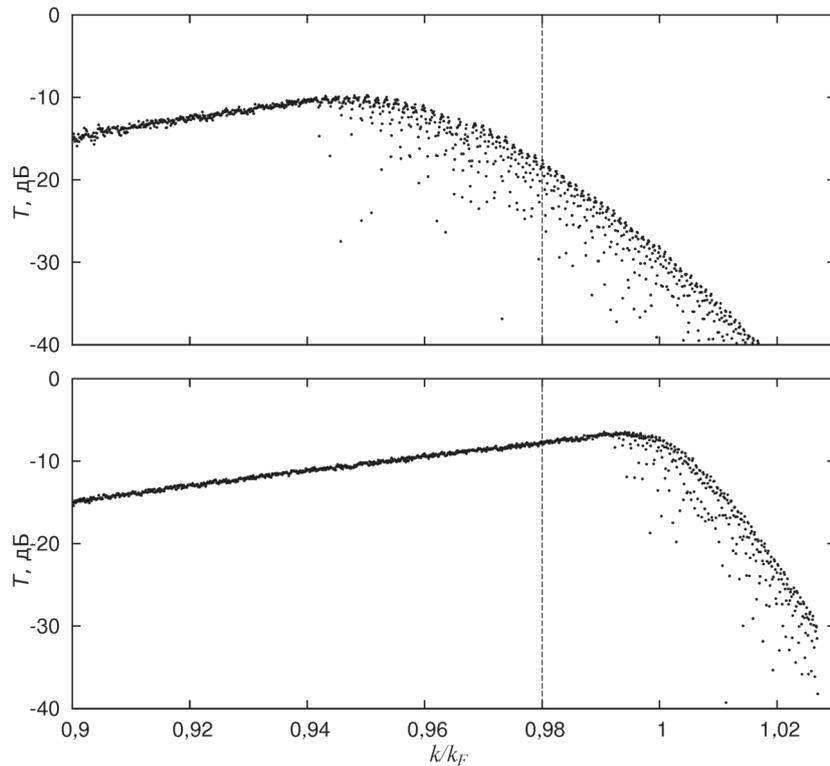


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания рассеивающей цепочки в дБ ($10\log_{10}T$) от волнового числа k_N (в единицах волнового числа Ферми $k_F = \pi / a$) для двух различных значений энергии управляющего поля $U_z = 0,01$ эВ (сверху), $U_z = 0,07$ эВ (снизу)

Результаты моделирования. Прежде всего, интересна оценка влияния внешнего поля на коэффициент пропускания нанопроволоки, результаты моделирования показаны на рис. 2. Как видно, приложение поперечного поля может сильно изменять проводимость цепочки, особенно в диапазоне волновых чисел, близком к границе зоны Брюллиэна (например, для случая, обозначенного вертикальной штриховой линией на рис. 2); скачки коэффициента пропускания в этой области наблюдались также в работах [13; 14]. Таким образом, можно использовать поперечное электрическое поле для управления проводимостью в рассматриваемой одномерной системе.

Электроника является самой очевидной областью приложения эффекта полевого управления коэффициентом пропускания цепочки, при этом энергии, соответствующие волновым числам $k \approx k_F$, $E = k_F^2 / 2 \approx 50$ эВ, оказываются велики для электронных устройств. Соответственно, интересным представляется изучение проводящих свойств цепочки на более низких энергиях, а именно, при начальной энергии частицы $E = 1$ эВ, энергии продольного и поперечного поля до 1 эВ, средних значениях для потенциала рассеивающих центров $V = 1$ эВ и дисперсией $\Delta V = 0,1$ эВ. Следует также отметить, что точность выбранного метода не обеспечена для крайне малых значений T . При численном моделировании иногда наблюдалась потеря точности (антипереполнение) для значений T менее -200 дБ при использовании 80-битной арифметики с плавающей точкой, соответственно, в сообщении представлены лишь результаты со значениями T существенно выше данного уровня.

Во-первых, была изучена зависимость коэффициента пропускания от величины поперечного поля при нескольких значениях величин U_x и N . Вдалеке от границы зоны Брюллиэна флуктуации проводимости значительно ниже, так что усреднение по 1000 реализациям оказывается достаточным, и свойства системы ожидаются более стабильными. Результаты численного моделирования зависимости коэффициента пропускания T от величины поперечного поля U_z при нескольких значениях энергии управляющего поля U_x и количества рассеивающих центров N представлены на рис. 3. Как было упомянуто, теория возмущений дает квадратичную зависимость проводимости от U_z [15]. Однако в результате прямого численного моделирования показано, что

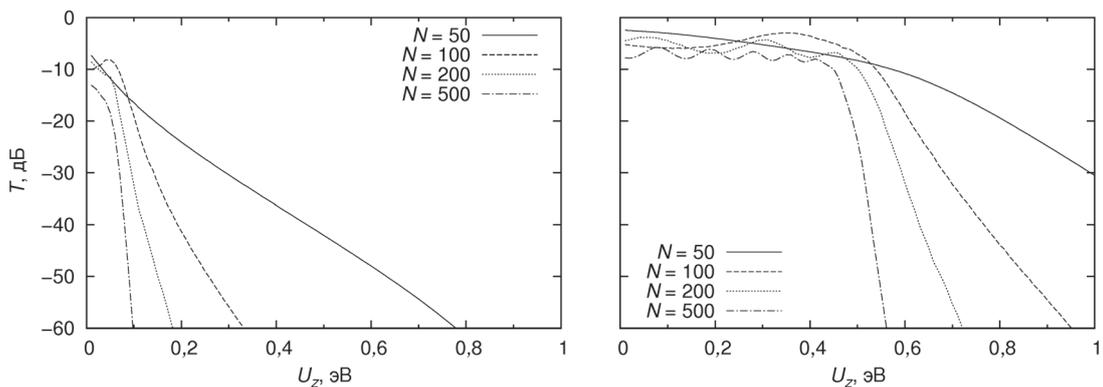


Рис. 3. Зависимость коэффициента пропускания цепочки T от энергии управляющего поля U_z при энергии ускоряющего поля $U_x = 0,1$ эВ (слева), $U_x = 1,0$ эВ (справа): сплошная линия для 50 рассеивателей, штриховая для 100, пунктирная для 200 и штрих-пунктирная для 500

наблюдается более сильное, а именно, экспоненциальное уменьшение коэффициента пропускания с ростом U_z . Следует также отметить, что наклон графика зависимости зависит от количества рассеивающих центров в цепочке. Приложение более сильного продольного поля приводит к сдвигу точки начала экспоненциальной зависимости вправо. Слева от этой точки коэффициент пропускания колеблется над уровнем -10 дБ, справа от нее экспоненциально падает.

Во-вторых, был изучен упомянутый сдвиг в зависимости от коэффициента пропускания. Для каждого значения U_x рассмотрены зависимости $T(U_z)$, и в них выбираются самые правые точки, для которых T превышает -10 дБ. Если такие точки существуют, то сдвиг выбирается как значение U_z в этих точках, иначе сдвиг полагается нулевым. Для полученных значений производится линейная аппроксимация, результаты которой приведены на рис. 4. В рассматриваемом диапазоне можно говорить про линейную зависимость сдвига от энергии ускоряющего поля; сдвиг имеет приблизительную величину $0,52$ эВ на 1 эВ энергии продольного поля. Для больших значений U_x наблюдается также зависимость сдвига от количества рассеивателей, но эта зависимость не вносит значительного вклада.

Наконец, на рис. 5 представлены зависимости $T(U_x)$. Зависимости для случая $U_z = 0$ оказываются типичными, коэффициент пропускания оказывается выше для более коротких цепочек. Для случая $U_z = 0,5$ эВ наблюдаются экспоненциальные зависимости, растущие вплоть до уровня -10 дБ. Как и в предыдущих зависимостях, наклон графика зависимости оказывается выше для более длинных цепочек.

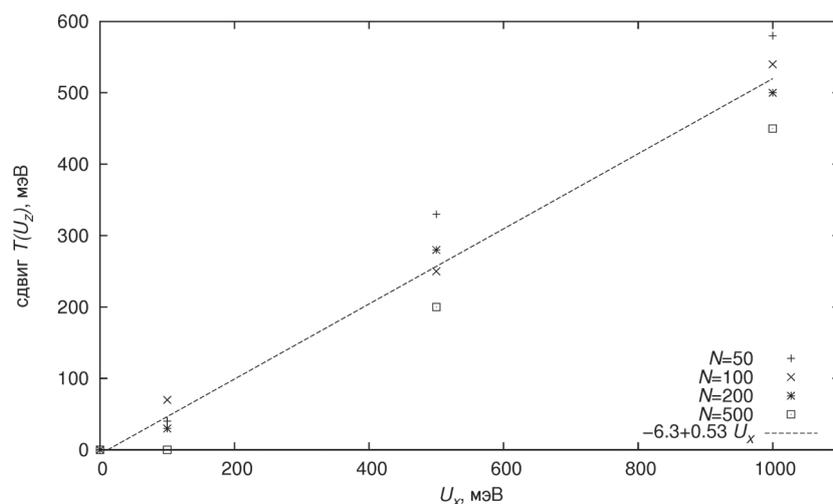


Рис. 4. Линейная аппроксимация зависимости сдвига коэффициента пропускания $T(U_z)$ от величины ускоряющего поля U_x для различных значений N

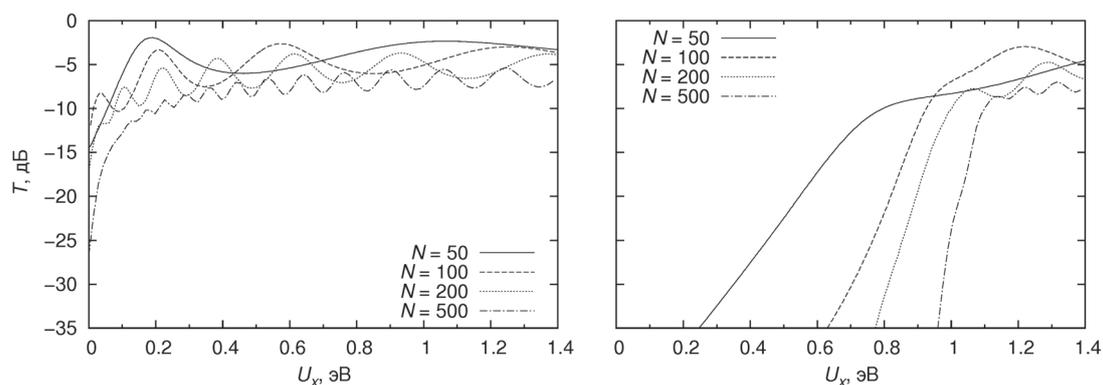


Рис. 5. Зависимость коэффициента пропускания T от U_x при различных значениях N в случаях $U_z = 0$ эВ (слева) и $U_z = 0,5$ эВ (справа)

Заключение. Результаты проведенного численного моделирования открывают возможность использования электронных ключей, основанных на эффекте управления когерентным квантовым транспортом заряда в изогнутой нанопроволоке посредством поперечного электрического поля. Наблюдаемые экспоненциальные зависимости проводимости системы от приложенного внешнего поля позволяют использовать модельную систему в широком диапазоне параметров.

Литература

1. Kagoshima S., Nagasawa H., Sambongi. One-Dimensional Conductors (Springer Series in Solid-State Sciences). Springer-Verlag, 1988.
2. Березинский В. Л. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65, № 3. С. 1251–1266.
3. Polymers, liquid crystals and low-dimensional solids / eds by N. March, M. Tosi. New York, 1984.
4. Edwards S. F., Anderson P. W. // J. Phys. F. 1975. Vol. 5. P. 965–974.
5. Shapiro B. // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 34. P. 4394–4397.
6. Сатанин А. М. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100, № 3. С. 1077–1087.
7. Gogolin A. A. // Phys. Rep. 1988. Vol. 166, N 5. P. 269–351.
8. Exner P., Seba P. // J. Math. Phys. 1989. Vol. 30. P. 2574–2580.
9. Clark I. J. // J. Phys. A. 1998. Vol. 31. P. 2103–2107.
10. Duclos P., Exner P., Meller B. // Helv. Phys. Acta. Vol. 71. P. 133–162.
11. Domany E. et al. // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. P. 3110–3123.
12. Efetov K. Supersymmetry in Disorder and Chaos. Cambridge, 1997.
13. Ouasti R. et al. // J. Phys: Cond. Matt. 1995. Vol. 7. P. 811.
14. Zekri N. et al. // J. Phys: Cond. Matt. 1995. Vol. 7. P. L275.
15. Krylov G. // Int. J. Nonlin. Phen. Com. Sys. 2001. Vol. 4. P. 129–135.

M. A. BELOV, G. G. KRYLOV

mpui@tut.by; krylov@bsu.by

ELECTRIC FIELD CONTROL OF QUANTUM CHARGE TRANSPORT IN DISORDERED NANOWIRES

Summary

We have considered a one-dimensional Kronig–Penney-like model of coherent electron transport. The model represents a curved channel with scattering centers which is subjected to an external uniform electric field. We have shown that the transmission coefficient of the channel is exponentially sensitive to both transverse and longitudinal field magnitudes.