

第三章 纳米结构中的输运问题

3.1 纳米结构

3.2 弹道输运

3.3 共振隧穿

3.4 库仑阻塞

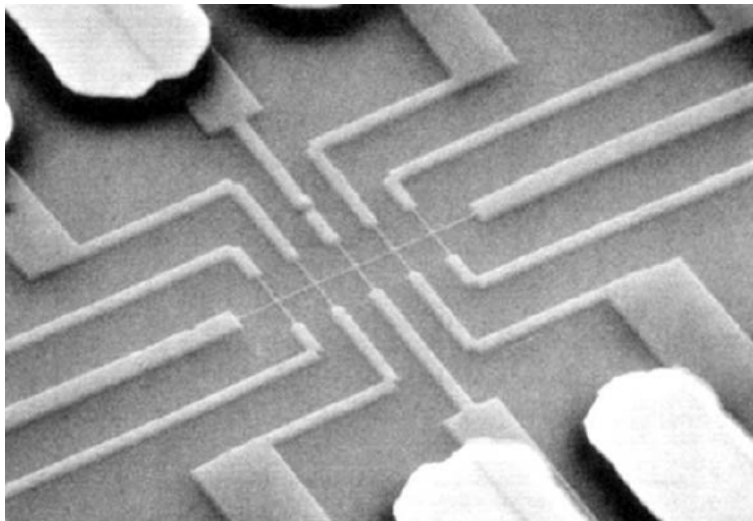
3.5 环状结构中的量子输运

3.6 观察到弹道输运的条件

References

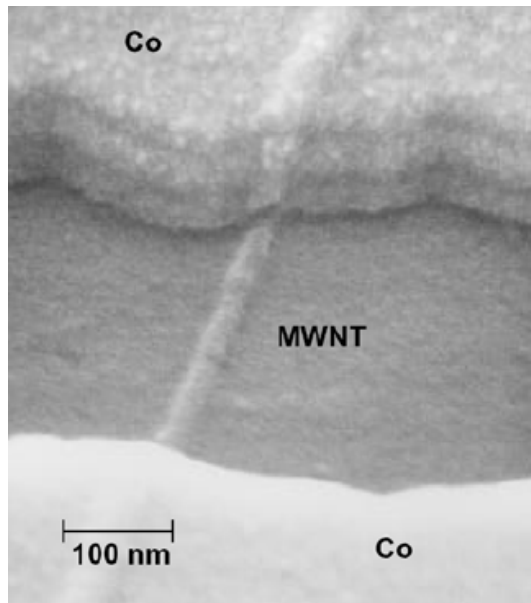
- “Solid State Properties”, Chap 11
- 《凝聚态物理学（上）》，冯端、金国钧，高等教育出版社，第十章

纳米结构



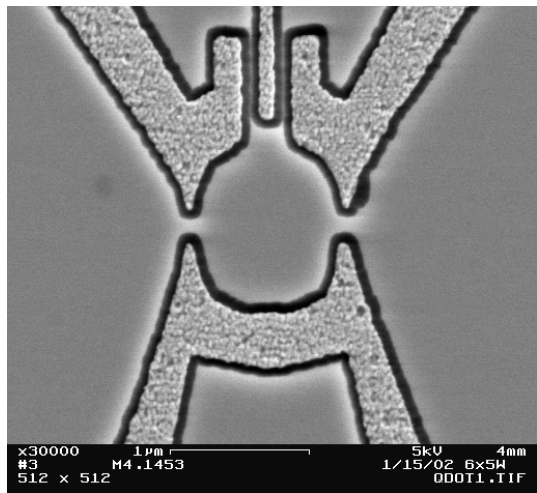
刻蚀纳米线, 75 nm, Roukes *et al.*, PRL **59**, 3011 (1987)

纳米结构



碳纳米管, Tsukagoshi *et al.*, Nature **401**, 572 (1999)

纳米结构



导线到点里的越迁几率、量子点里的电子能级可以通过门电压调节

Split-gate GaAs/GaAlAs 量子点

能带结构和态密度

有效质量近似

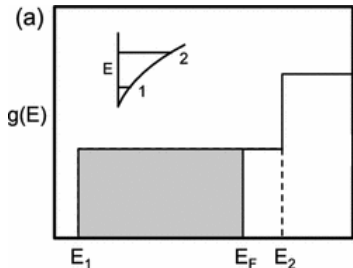
$$\varepsilon_n(\mathbf{k}_0 - i\nabla)\psi_p = \varepsilon_p\psi_p$$

$$\varepsilon_{n_z}(k_x, k_y) = \varepsilon_0 + \varepsilon_{n_z} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}$$

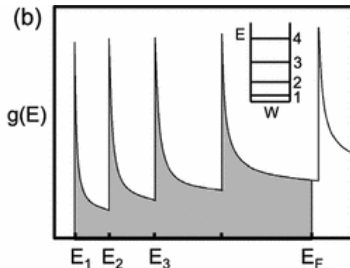
准二维

$$\varepsilon_{n_x, n_y}(k_z) = \varepsilon_0 + \varepsilon_{n_x, n_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

准一维



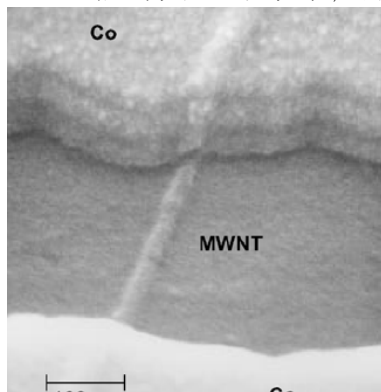
准二维体系态密度



准一维体系态密度

弹道运输 / Ballistic transport

- 介观系统中，载流子基本不受散射的运输
- 主要发生在量子线（一维或者准一维）或者量子点（准零维）系统中
- 系统结构对运输性质有非常重要的影响，甚至可能是决定性的
- 载流子的量子波动性在运输过程中扮演重要角色。运输系数可能出现量子化现象，例如电导 / 电阻量子化。



一维纳米结构中的量子输运

- 模型：一个导线，中间有一个节（散射中心）。在导线两端加上电压 V ，有电流 I 通过。

$$V = IR, \text{ 或者 } I = GV \quad \Rightarrow \quad \text{测量 / 计算 } R \text{ 或者 } G$$

- 假设电压都加在节上，两端的量子线内部没有电压，在导线内电子服从平衡分布
- 有效质量近似下，单个量子线内载流子包络波函数：（沿着 z 方向输运， xy 方向运动受约束）

$$\psi_{p,k}(\mathbf{r}) = F_{pk}(z)F_p(x,y)\psi_{nk_0} \propto e^{ikz}F_p(x,y)\psi_{nk_0}$$

$$\varepsilon(p,k) = \varepsilon_n(k_0) + \varepsilon_p + \varepsilon_k^p$$

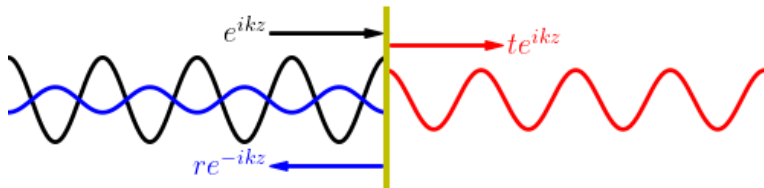
n 是体材料的能带指标； p 是约束导致的子带 / 微带指标。

- 由于外加电场，两边载流子的能量零点不同
左边能量： $\varepsilon_L(p,k) = \varepsilon_n(k_0) + eV + \varepsilon_p + \varepsilon_k^p$ ；
右边能量： $\varepsilon_R(p,k) = \varepsilon_n(k_0) + \varepsilon_p + \varepsilon_k^p$ ；

$$f_L(k) = f_0(\varepsilon_L(p,k)) = \frac{1}{e^{[\varepsilon_L(p,k) - \mu]/k_B T} + 1}$$

$$f_R(k) = f_0(\varepsilon_R(p,k))$$

一维纳米结构中的量子输运



暂时不考虑载流子在不同子带之间的跃迁。

对于第 p 个子带，先考虑一个从左边过来的电子的波函数及其对电流的贡献：

- 入射（包络）波函数 e^{ikz} ，在节上发生散射，一部分透过节到右边，透射系数 $t_p(k)$
- 一部分反射回去，反射系数 $r_p(k)$

$$F_L(z) = e^{ikz} + r_p(k)e^{-ikz}$$

$$F_R(z) = t_p(k)e^{ik'z} = t_p(k)e^{ikz}$$

$$R_p(\varepsilon) = |r_p(k)|^2$$

$$T_p(\varepsilon) = |t_p(k)|^2 = 1 - R_p$$

Landauer-Büttiker 公式

左边入射的电子对电流的贡献

$$v_p(k) = \frac{1}{\hbar} \partial_k \varepsilon_k^p \quad \text{电子群速度}$$

$$\begin{aligned} I_L^{(\rightarrow)} &= -e \sum_k v_p(k) f_L(k) \quad \text{左边入射} - (-e) \sum_k v_p(k) R_p(k) f_L(k) \quad \text{反射} \\ &= -e \sum_k [1 - R_p(k)] v_p(k) f_L(k) = -e \sum_k T_p(k) v_p(k) f_L(k) \end{aligned}$$

$$I_R^{(\rightarrow)} = -e \sum_k v_p(k) T_p(k) f_L(k) \quad \text{左边透射到右边}$$

同理可得到从右边入射电子对电流的贡献

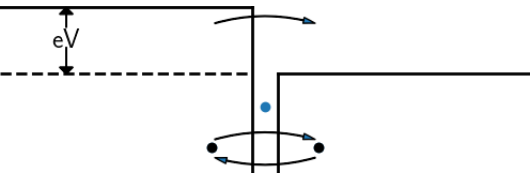
$$I_L^{(\leftarrow)} = -e \sum_k v_p(-k) T_p(-k) f_R(-k) = - \sum_k v_p(k) T_p(k) f_R(k)$$

$$I_R^{(\leftarrow)} = -e \sum_k v_p(-k) [1 - R_p(-k)] f_R(-k) = - \sum_k v_p(k) T_p(k) f_R(k)$$

Landauer-Büttiker 公式

线性响应区间：当外加电压很小时，

$$\begin{aligned} I = I_L &= I_L^{(\rightarrow)} + I_L^{(\leftarrow)} = -e \sum_k [v_p(k) T_p(k) f_L(k) - v_p(k) T_p(k) f_R(k)] \\ &= -e \int \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_p(k)}{\partial k} T_p(\varepsilon_p) [f_L(\varepsilon_p) - f_R(\varepsilon_p)] \frac{dk}{2\pi} \\ &= -\frac{e}{h} \int T_p(\varepsilon) [f_0(\varepsilon + eV) - f_0(\varepsilon)] d\varepsilon \simeq -\frac{e}{h} \int d\varepsilon T_p(\varepsilon) f'_0(\varepsilon) eV \\ &= \frac{e^2}{h} V \int d\varepsilon T_p(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) = \frac{e^2}{h} T_p(\varepsilon_F) V = G_p V \end{aligned}$$



- 左右两边费米面相差 eV
- 只有两个费米面之间的电子对电流有贡献

更准确的 Landauer-Büttiker 公式

考虑 Pauli 不相容原理，左边入射的电子对电流的贡献

$$I_L^{(\rightarrow)} = -e \sum_k v_p(k) f_L(k) \text{ (左边入射)} \\ + e \sum_k v_p(k) R_p(k) f_L(k) [1 - f_L(-k)] \text{ (反射)}$$

$$I_R^{(\rightarrow)} = -e \sum_k v_p(k) T_p(k) f_L(k) [1 - f_R(k)] \quad \text{(左边透射到右边)}$$

同理可得到从右边入射电子对电流的贡献

$$I_L^{(\leftarrow)} = -e \sum_k v_p(-k) T_p(-k) f_R(-k) [1 - f_L(-k)] \\ = e \sum_k v_p(k) T_p(k) f_R(k) [1 - f_L(k)] \\ I_R^{(\leftarrow)} = -e \sum_k v_p(-k) [1 - R_p(-k)] f_R(-k) = - \sum_k v_p(k) T_p(k) f_R(k)$$

得到的最终结果和前面的简化方法相同

Conductance quantum / 量子化电导

$$\frac{1}{R} = G = \sum_p G_p \quad \text{可能有多个子带 / 微带同时参与输运}$$
$$= 2 \boxed{\text{自旋指标}} \times \sum_p \frac{e^2}{h} T_p(\varepsilon_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_p T_p(\varepsilon_F) = G_0 \sum_p T_p(\varepsilon_F)$$

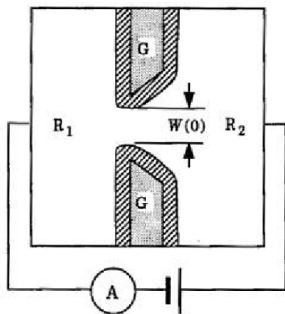
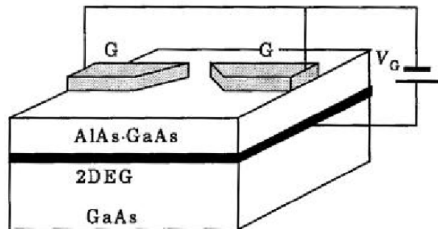
- 每个子带 / 微带对电导的贡献 $(2e^2/h)T_p = G_0 T_p$ 。每个子带代表一个导电通道。
- 每个导电通道有一个最大的电导：Conductance quantum

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} = \frac{e^2}{\pi\hbar} = \frac{2}{R_K} = 7.748091729 \times 10^{-5} \text{ S}$$

$$R_K = \frac{h}{e^2} = 2.581280745 \times 10^4 \Omega \quad \text{von Klitzing constant}$$

- 在没有任何阻碍时, $T_p = 1$ 时, 电导量子化

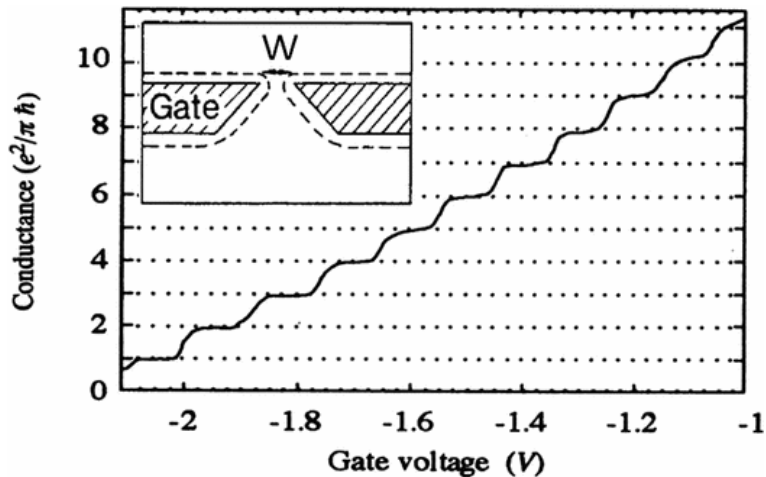
Quantum Point Contacts Effects



van Wees *et al.*, PRL **60**, 848 (1988)

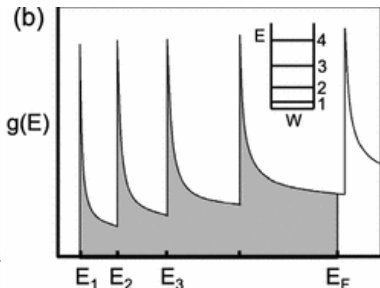
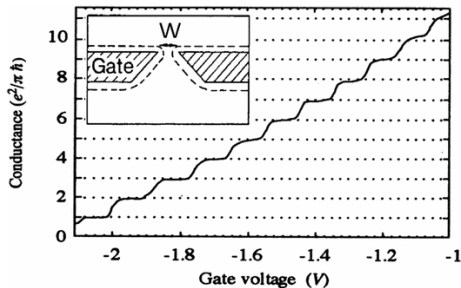
- 两个电极之间形成一个导电通道（类似于量子线）
宽度 $\sim 100 \text{ nm}$ ，长度 $\sim 1 \mu\text{m}$
- 通道的宽度 / 化学势可以通过电极调控

Quantum Point Contacts Effects



van Wees *et al.*, PRL **60**, 848 (1988)

Quantum Point Contacts Effects



👉 量子约束导致 x, y 方向能量量子化，形成子带 / 微带

$$\varepsilon_{n_x, n_y}(k_z) = \varepsilon_0 + \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* a_x^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* a_y^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

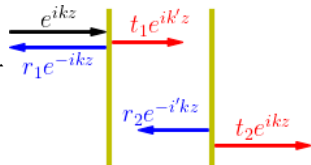
👉 每个子带对电导贡献 $\sim G_0$

👉 改变门电压时改变了通道的宽度 (a_x 或者 a_y)

👉 门电压减小， a_x 或者 a_y 增大，能级间隔减小，电子占据更多子带，导电渠道增加 $\Rightarrow$ 电导增加

Resonant Tunneling/共振隧穿

假设有两个节，电子会在两节间多次反射



$$\theta = k' L$$

$$t_{sd} = t_1 e^{i\theta} t_2 + t_1 e^{i\theta} r_2 e^{i\theta} r_1 e^{i\theta} t_2 + \dots$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} t_1 e^{i\theta} (r_1 r_2 e^{2i\theta})^j t_2 = \frac{t_1 t_2 e^{i\theta}}{1 - r_1 r_2 e^{2i\theta}}$$

$$T_{sd} = |t_{sd}|^2 = \frac{|t_1 t_2|^2}{1 + |r_1 r_2|^2 - 2|r_1 r_2| \cos(2\theta + \phi)}$$

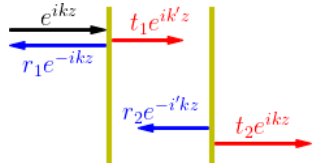
$$= \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos(2\theta + \phi)} \quad \text{对称情况下, } T_1 = T_2 = T$$

$$= \frac{T^2}{1 + (1 - T)^2 - 2(1 - T) \cos 2\theta} \quad R_1 = R_2 = R = 1 - T, \phi = 0$$

$$= \frac{T^2}{2(1 - T)(1 - \cos 2\theta) + T^2} = \frac{T^2}{4(1 - T) \sin^2 \theta + T^2}$$

Resonant Tunneling/共振隧穿

$$T_{sd} = \frac{T^2}{4(1-T)\sin^2\theta + T^2} \quad \theta = k'L$$



👉 一般情况下, $T_{sd} \simeq T^2 \sim 0$, 电导很小

👉 共振隧穿: $G = G_0$

如果 $\theta = k'L = p\pi$, $T_{sd} = 1 \Rightarrow$

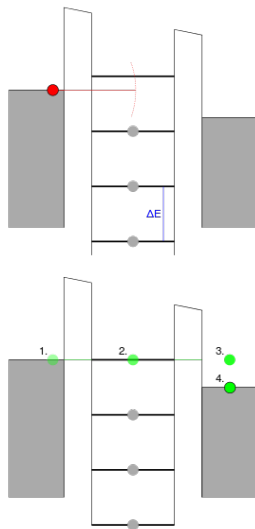
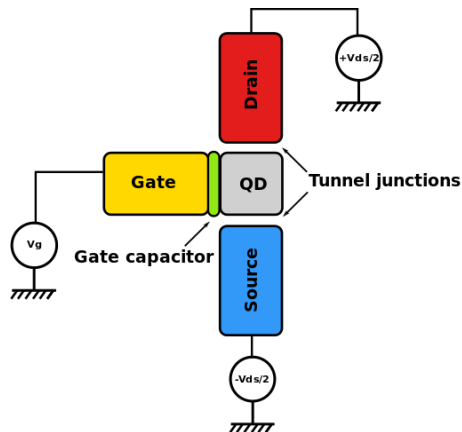
不管单侧的透射率 T 多小, 总体的透射率 $T_{sd} = 1$ 。

👉 共振条件:

$$k' = \frac{p\pi}{L} \quad \varepsilon_p = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{p\pi}{L} \right)^2$$

- 把两个节看成一种约束, 那么两个约束之间的系统变为一个量子点, 上面的表达式为量子点中粒子的本征能量。
- 入射电子能量为量子点中的本征能量时, 电子完全透过障碍 $\Rightarrow$ 共振隧穿。
- 线性输运时, Fermi 能和量子点中的本征能量相同时发生共振隧穿, 有较大电导 $G = G_0$ 。不共振时电导很小。

量子点中的库仑阻塞 Coulomb Blockade

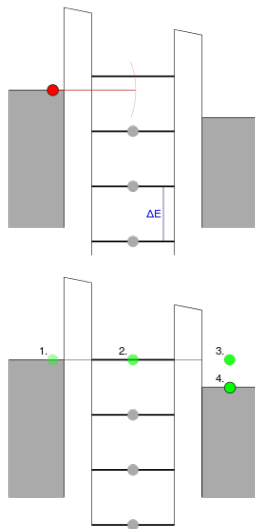
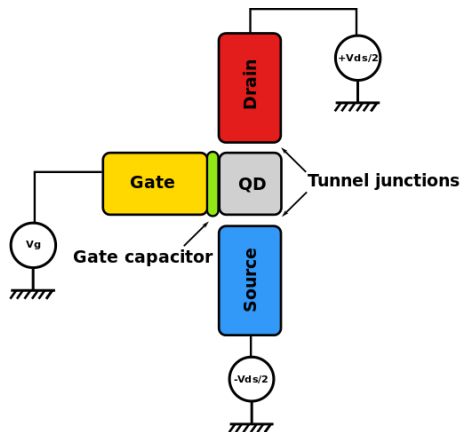


量子点里电子之间的 Coulomb 作用非常重要

$$E(N) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{Q^2}{2C} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{e^2}{2C} N^2 = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + N^2 \varepsilon_C$$

$$\mu = \Delta E(N) = E(N) - E(N-1) = \varepsilon_N + (2N-1)\varepsilon_C$$

量子点中的库仑阻塞 Coulomb Blockade

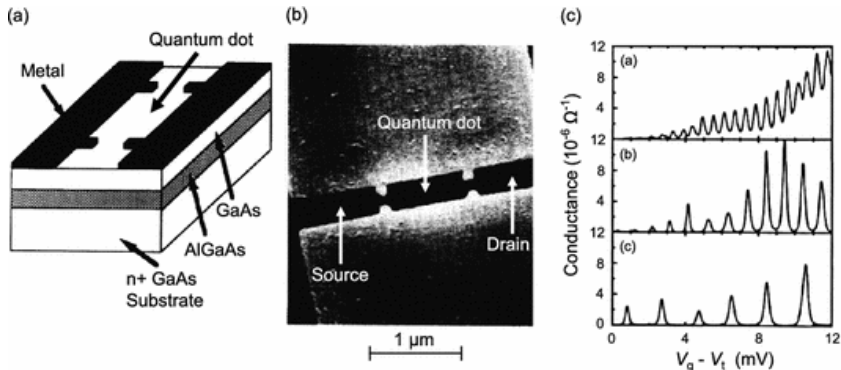


量子点上加上门电压 V_g 后, $E(N) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + N^2 \varepsilon_C - NeV_g$

$\mu = \varepsilon_N + (2N - 1)\varepsilon_C - V_g$

☞ 可以通过门电压改变量子点能量 ☞ 改变电导

Coulomb Blockade

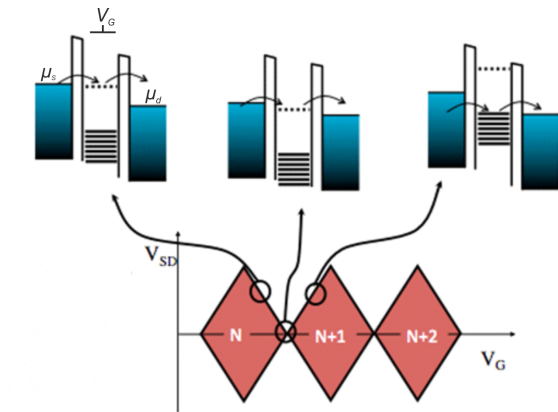


PRL **65**, 771 (1990)

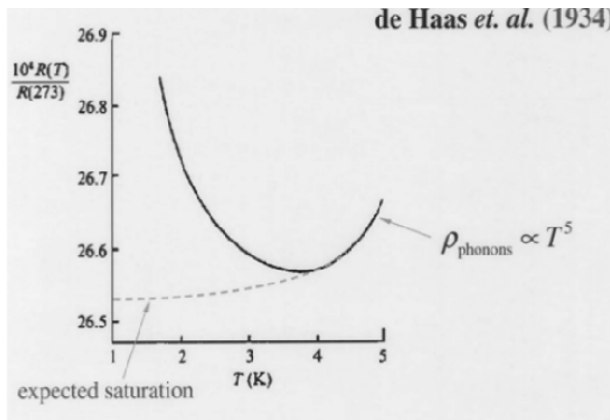
- 量子点能级落在导线两端的化学势（费米能）之间时发生共振隧穿，电导大；否则电导小
- 线性电导率随着门电压（量子点能级）剧烈改变
- 量子点里的能级主要由 Coulomb 相互作用决定 Coulomb blockade
- 共振宽度由温度决定：Coulomb blockade thermometer

导线两端电压差比较大时的情况：Coulomb diamonds

当导线两端电压差比较大时，量子点能级在一定范围内改变都可以发生共振，因此在 $V_{SD}-V_G$ 图上微分电导非零的区域形成一系列菱形，被称为 Coulomb diamonds。



Kondo 效应



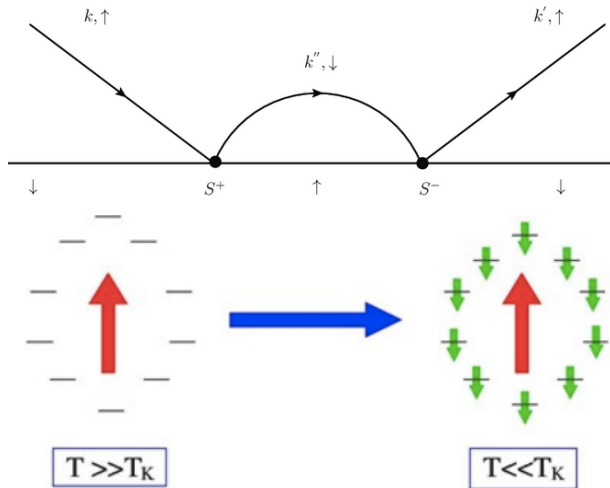
- 正常金属电阻和温度关系: $\rho(T) = \rho_i + \rho_{ph} = \rho_0 + bT^5$
- 金属中参入少量磁性杂质低温电阻反常行为

$$\rho(T) = \rho_0 + c_m \ln \frac{\mu}{T} + bT^5$$

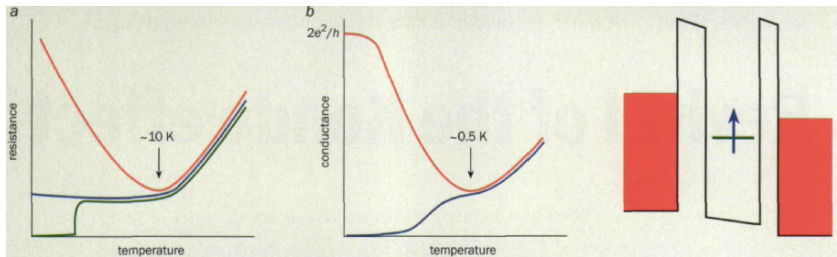
- 电阻极小温度: T_K , Kondo 温度

Kondo 效应

磁性杂质的高阶散射的相干叠加



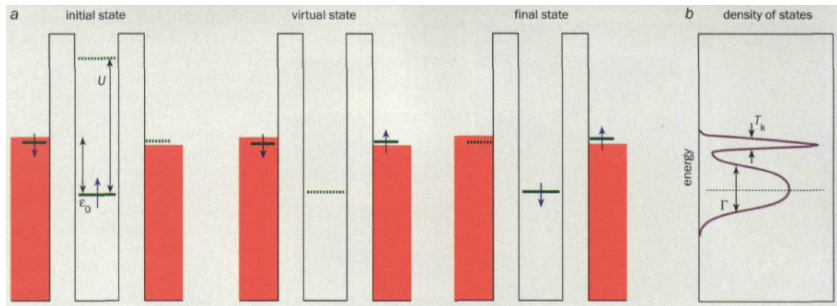
量子点系统里的 Kondo 效应



稀磁金属 vs 量子点中的 Kondo 效应

- 左边为体材料中的 Kondo 效应，低温**电阻**随温度降低而升高
- 中间为量子点中的 Kondo 效应，低温**电导**随温度降低而升高

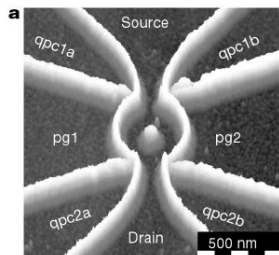
量子点系统里的 Kondo 效应



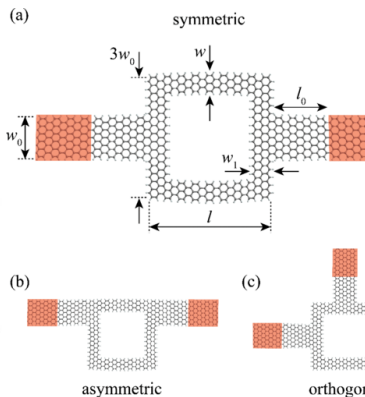
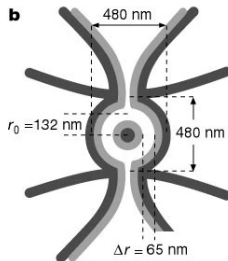
量子点中的 cotunneling

- Fermi 面和量子点能级不匹配，没有共振隧穿，单电子隧穿对电导无贡献
- 共隧穿 $\Rightarrow$ 两电子过程，不需要能量匹配

环状纳米结构中的量子输运



Nature **413**, 822 (2001)



PRB **99**, 165428 (2019)

$$T = t_1 + t_2 = |t_1|e^{i\theta_1} + |t_2|e^{i\theta_2} = e^{i\theta_1} [|t_1| + |t_2|e^{i(\theta_2-\theta_1)}]$$

$$|T|^2 = ||t_1| + |t_2|e^{i(\theta_2-\theta_1)}|^2$$



两条路径相位可以不同，相互干涉。详见第五章

弹道运输的条件

- 系统尺寸很小: $L \ll l_w, l$
- 低温
 - 声子贡献小
 - 温度小 $k_B T \ll \Delta \epsilon_p$