Московский физико-технический институт
(государственный университет)

Кафедра теоретической физики

Электрический ток в наноструктурах: кулоновская блокада и квантовые точечные контакты

Учебно-методическое пособие

МОСКВА 2010

Составители: Н. М. Щелкачёв, Я. В. Фоминов
УДК 538.935

Рецензент
д.ф.-м.н. Г. Б. Лесовик

Электрический ток в наноструктурах: кулоновская блокада и квантовые точечные контакты:
Учебно-методическое пособие/ Сост. Н. М. Щелкачёв, Я. В. Фоминов. — М.: МФТИ, 2010. — 39 с.

Теоретически рассмотрено два физических явления, связанных с протеканием электрического тока через проводники малых размеров. Первый рассматриваемый эффект — кулоновская блокада туннелирования электронов через островок малых размеров (одноэлектронный транзистор), второй эффект — особенности протекания тока через сужение малого поперечного сечения (квантовый точечный контакт), в частности явление квантования проводимости.

Предназначено для студентов физических специальностей.

УДК 538.935

Содержание

1. Введение

В ситуациях, когда электрический ток течёт через проводники малых размеров, возникает множество интересных фундаментальных явлений, которые имеют и очень важное прикладное значение, связанное с миниатюризацией электронной техники. Явления эти, в результате которых транспортные свойства макроскопических систем оказываются чувствительны к процессам, связанным с переносом отдельных электронов, относятся к сравнительно молодой и активно развивающейся в настоящее время области физики под названием *квантовая мезоскопика*.[1]

Согласно квантовой механике, электроны проявляют как свойства частиц, так и свойства волн. Корпускулярная природа электронов приводит к дискретности переноса заряда, из-за чего при определённых условиях в наноконтактах возникает подавление электронного транспорта («кулоновская блокада»). В то же время волновая природа электронов проявляется в переносе тока через очень узкие проводники, которые работают как волноводы для электронов (это происходит при ширине проводника, сравнимой с длиной волны электронов — от нанометров в металлах до микронов в полупроводниках). Оба эти явления интересны не только с академической точки зрения, но и с прикладной, так как транспортные свойства нанопроводников и наноконтактов очень чувствительны к внешним воздействиям, например электрическим и магнитным полям. Электронные устройства, основанные на упомянутых выше явлениях, используются уже сейчас в современной электронике как транзисторы, сверхчувствительные детекторы заряда. Кроме того, элементная база активно разрабатываемой сегодня микроэлектроники нового поколения в значительной степени основана на технологическом использовании корпускулярно-волновых свойств электронов.

Итак, мы обсудим два явления, обусловленные малыми геомет-

---

[1] Термин *мезоскопика* в буквальном переводе с греческого означает *междускопика*. Квантовая мезоскопика изучает явления, которые проявляются на масштабах, промежуточных между микро- и макроскопическими. Иными словами, это масштабы больше атомных, но меньше характерного масштаба длины, на котором уже можно пренебречь квантовыми корреляциями. Для точечных контактов этот верхний масштаб — порядка длины сбоя фазы или длины энергетической релаксации. В системах с кулоновской блокадой этот масштаб определяется емкостью.

рическими размерами проводников. Во-первых, если перенос заряда осуществляется через промежуточный металлический «островок» малых размеров, связанный с остальной цепью туннельными контактами, то необходимо учитывать, что с уменьшением размеров проводника уменьшается его электрическая ёмкость. В конце концов, при вполне достижимых экспериментальных параметрах ёмкость C может стать настолько малой, что даже кулоновская энергия $E_c = e^2/2C$ одного дополнительного электрона на островке может оказаться существенной. Тогда необходимо учитывать влияние кулоновских эффектов на транспорт, перенос заряда через островок требует запаса энергии, и может реализовываться явление, называемое *кулоновской блокадой*, когда к контакту приложено конечное напряжение, а ток тем не менее не течёт.

Во-вторых, мы рассмотрим ситуацию, когда кулоновских эффектов нет, т. к. проводник непрерывный, без отдельных островков, но его поперечные размеры настолько малы, что необходимо учитывать квантование движения в поперечном направлении. При определённых условиях электроны с энергией вблизи энергии Ферми E_F имеют непрерывный спектр, связанный с движением вдоль контакта (из одного резервуара к другому), но могут занимать лишь несколько дискретных уровней, соответствующих поперечному движению. Каждый дискретный уровень поперечного движения соответствует одномерному «каналу», по которому переносится ток. С каждым каналом связан вполне определённый кондактанс (т.е. обратное сопротивление, или, что то же самое, полная проводимость) $G_q = e^2/\pi\hbar = 2e^2/h$, называемый квантовым кондактансом. При расширении проводника дискретный спектр поперечного движения «проседает», и электронам с энергией E_F становятся доступны новые уровни. Это означает, что открываются дополнительные каналы переноса тока. При открытии каждого такого канала кондактанс увеличивается на величину G_q, поэтому возникает явление *квантования* кондактанса.

Более широкое изложение обсуждаемых ниже вопросов можно найти в таких учебниках, как [1, 2, 3].

2. Кулоновская блокада

2.1. Кулоновские эффекты в одноэлектронном транзисторе

Начнём рассмотрение влияния одноэлектронных кулоновских эффектов на электронный транспорт с простейшей системы: конденсатор с утечкой, имеющий ёмкость C и шунтированный сопротивлением R. В идеальном конденсаторе R было бы бесконечным, и постоянный ток через него был бы невозможен — это соответствует случаю очень толстого слоя диэлектрика между обкладками конденсатора, туннелирование через который невозможно. В нашем же случае постоянный ток возможен за счёт туннелирования через диэлектрик. Тем не менее ток (точнее говоря, средний по времени ток) в этой системе вовсе не даётся простой формулой V/R — такая формула должна нарушаться при малых напряжениях, когда ток обеспечивается туннелированием единичных электронов и становится важна дискретность переноса заряда.

Электростатическая энергия конденсатора с ёмкостью C и зарядами Q (пусть эта величина положительна) и $-Q$ на обкладках равна $Q^2/2C$, или $CV^2/2$, где $V = Q/C$ — напряжение между обкладками. Поставим следующий вопрос: какое напряжение необходимо приложить к конденсатору, чтобы туннелирование электрона с одной обкладки на другую стало возможным? Если электрон туннелирует с отрицательно заряженного электрода на положительно заряженный электрод, то заряд конденсатора становится равным $(Q - |e|)$, поэтому изменение энергии равно

$$\frac{(Q-|e|)^2}{2C} - \frac{Q^2}{2C} = \frac{e^2 - 2|e|Q}{2C}. \tag{1}$$

Чтобы такой процесс был возможен, изменение энергии должно быть отрицательным, что приводит к условию $V > |e|/2C$.[2] Таким образом, электронный транспорт невозможен (в случае нулевой температуры $T = 0$) при напряжениях $|V| < |e|/2C$. Такое состояние контакта с нулевым туннельным током при конечном напряжении является простейшим примером кулоновской блокады.

[2] Записывая это условие через заряд, получим $Q > |e|/2$. Это, конечно, не означает буквально «половину» электрона на обкладке конденсатора, т. к. заряд обкладки возникает в результате многочастичного эффекта, связанного с перераспределением заряда в цепи.

Необходимо удовлетворить двум требованиям, чтобы кулоновская блокада могла наблюдаться: (1) E_c должно превышать T,[3] чтобы эффект «не замылся» температурными флуктуациями, и (2) сопротивление R должно превосходить так называемое квантовое сопротивление $R_q = \pi\hbar/e^2 = h/2e^2 \approx 12.9\,\text{кОм}$, чтобы эффект «не замылся» квантовыми флуктуациями. Дело в том, что при наличии шунтирующего сопротивления конденсатор будет разряжаться за время $\Delta t \sim RC$, поэтому в соответствии с принципом неопределённости его энергия определена с точностью до величины $\Delta E \sim \sim \hbar/\Delta t \sim \hbar/RC$. Поэтому кулоновская энергия $e^2/2C$ приведёт к наблюдаемым эффектам только в случае, если она будет превышать величину ΔE. Отсюда и получается условие на сопротивление (по порядку величины, за коэффициентами не следим).

Довольно трудно изготовить контакт, удовлетворяющий обоим этим требованиям, поэтому кулоновская блокада в одиночных туннельных контактах даже при очень низких температурах обычно не наблюдается. Поэтому, чтобы наблюдать эффекты кулоновской блокады, обычно исследуют не туннельные контакты, а мезоскопические металлические островки или гранулы, у которых собственная ёмкость довольно маленькая и которые связаны с массивными металлическими берегами туннельными контактами с сопротивлением, много большим квантового сопротивления.[4] $I-V$ характеристика этой системы имеет ступенчатые особенности на напряжениях, соответствующих изменению среднего числа электронов на островке на единицу. Такие ступенчатые особенности принято называть кулоновской лестницей. Часто контакты такого типа называют *одноэлектронными транзисторами*. Ниже мы будем использовать этот термин для обозначения рассматриваемого контакта через островок.

Для того чтобы разобраться в физической природе данного эффекта, рассмотрим эквивалентную схему контакта через островок (рис. 1а). Островок связан с двумя проводниками, напряжение между которыми равно $V = V_2 - V_1$, туннельными контактами с ёмкостями C_1 и C_2 и сопротивлениями R_1 и R_2, а также через ёмкость C_g — с затвором, имеющим потенциал V_g.[5] При этом связь с затво-

[3] Мы будем везде подразумевать, что температура записана в энергетических единицах, поэтому константа Больцмана нигде в формулах не возникает.

[4] Одними из первых теоретических работ на эту тему были работы [4].

[5] Индекс g — от английского слова gate (затвор).

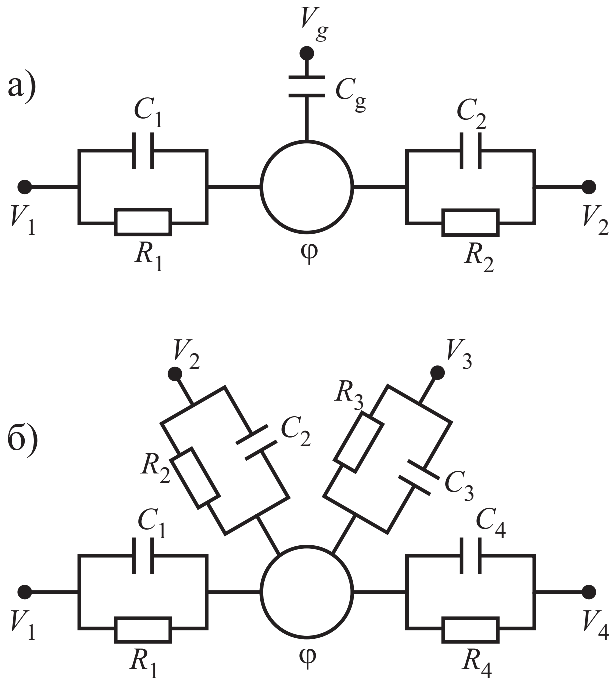

Рис. 1. (а) Эквивалентная схема контакта, состоящего из островка, граничащего с двумя проводниками через туннельные контакты и связанного ёмкостной связью с затвором. (б) Эквивалентная схема контакта островка с несколькими проводниками. В обоих случаях R — это туннельное сопротивление

ром мы будем считать чисто ёмкостной, так что туннельное сопротивление этого контакта равно бесконечности и непосредственный перенос заряда через него невозможен. Типичные экспериментальные параметры таковы, что $C_1 \sim C_2 \sim 10^{-16}\,\Phi$, в то время как $C_g \ll C_{1(2)}$. Из рис. 1а становится ясно происхождение термина *одноэлектронный транзистор* — так же, как и в обычном полупроводниковом транзисторе, в этой системе может течь ток между двумя резервуарами, и этот ток управляется с помощью напряжения на затворе.

Для симметричности изложения удобно начать рассмотрение с более общей схемы одноэлектронного транзистора (рис. 1б), где островок соединён ёмкостями C_i и туннельными сопротивлениями R_i с несколькими проводниками, имеющими потенциалы V_i. Точка отсчёта потенциалов проводников может быть выбрана любой; ниже мы будем выбирать её из соображений удобства. Потенциал φ островка равен

$$\varphi = \frac{\sum_i C_i V_i + ne}{C_\Sigma}, \tag{2}$$

где n — число избыточных электронов на островке (при $n = 0$ островок электронейтрален; число n может быть как положительным, так и отрицательным, что соответствует добавлению электронов на островок или удалению их с островка), и $C_\Sigma = \sum_i C_i$. Этот простой ответ может быть легко проверен, принимая во внимание, что добавочный заряд ne должен быть равен сумме зарядов на внутренних обкладках конденсаторов (т. е. на обкладках, соответствующих островку), что равно $\sum_i C_i(\varphi - V_i)$. (Важно помнить, что буква «e» учитывает отрицательный заряд электрона.) Зная потенциал островка, мы можем легко найти электростатическую энергию системы:

$$U = \frac{1}{2}\sum_i C_i (V_i - \varphi)^2. \tag{3}$$

Подставляя в эту формулу φ из (2), найдём выражение для U через удобные независимые переменные V_i и n:

$$U = \frac{1}{2C_\Sigma}\sum_i \sum_{j>i} C_i C_j (V_i - V_j)^2 + \frac{(ne)^2}{2C_\Sigma}. \tag{4}$$

Формула (4) даёт кулоновскую энергию для произвольных n и V_i. В это выражение входит работа, выполняемая источниками напряжения (поддерживающими потенциалы резервуаров), когда n на островке меняется при туннелировании электронов с островка или на островок. Когда электрон туннелирует на островок, потенциал островка меняется на e/C_Σ, и при этом эффективный заряд на ёмкостях меняется на eC_i/C_Σ. Работа, произведённая источником напряжения с номером k, поставляющим заряд на островок, будет равна $(1 - C_k/C_\Sigma)eV_k$, все остальные ЭДС произведут работу $-eV_iC_i/C_\Sigma$. Разность кулоновской энергии U и работ ЭДС мы назовём свободной энергией F. Сумма произведённых работ ЭДС равна

$$W_k = \frac{e}{C_\Sigma} \sum_i C_i \left(V_k - V_i\right). \tag{5}$$

Эта работа не зависит от n, то есть работа по добавлению одного электрона на островок не зависит от того, сколько уже электронов находится на островке. В то же время важно отметить, что эта работа зависит от того, через какой именно контакт произошло добавление заряда (т. е. от номера k). Работа источников при инжектировании n_k электронов через контакт с номером k, очевидно, равна n_kW_k.

2.2. Одноэлектронный транзистор в термодинамическом равновесии

Вернёмся теперь к изучению электрической цепи, показанной на рис. 1а. Для начала рассмотрим случай, когда система находится в равновесии: $V = V_1 = V_2 = 0$ (диссипативный ток не течёт). В этом случае работа источников по добавлению n электронов на островок определена однозначно и не зависит от того, через какие контакты электроны туннелировали на островок. Эта работа равна $W = -neV_gC_g/C_\Sigma$. После вычитания работы из кулоновской энергии найдём свободную энергию:

$$\begin{aligned} F = U - W &= \frac{C_g(C_1 + C_2)V_g^2 + 2neC_gV_g + (ne)^2}{2C_\Sigma} = \\ &= \frac{(C_gV_g + ne)^2}{2C_\Sigma} + F_0, \end{aligned} \tag{6}$$

где $F_0 = (1 - 2C_g/C_\Sigma)C_gV_g^2/2$. Величина F_0 не зависит от n, следовательно является константой и может быть опущена из (6) без ограничений общности, поскольку не влияет на перенос заряда. Минимизируя свободную энергию по отношению к n, мы формально получим $n = -C_g V_g/e$, что соответствует заряду $Q_0 = -C_g V_g$, наведённому затвором на островке.[6]

Однако, поскольку n — целое число, оно в общем случае не может быть в точности равно Q_0/e. На самом деле минимум свободной энергии достигается при целом n, ближайшем к Q_0/e, т. е. лежащем в диапазоне

$$\frac{Q_0}{e} - \frac{1}{2} \leqslant n \leqslant \frac{Q_0}{e} + \frac{1}{2}. \tag{7}$$

Другими словами, формула (6) порождает семейство парабол, каждая из которых описывает зависимость свободной энергии от наведённого заряда при заданном значении n, как показано на рис. 2. Для достижения минимума свободной энергии при изменении Q_0 система сама будет подстраивать n так, чтобы всегда иметь наименьшую возможную свободную энергию [эта подстройка числа избыточных электронов n и описывается формулой (7)].

Поэтому будет реализовываться зависимость $F(Q_0)$, показанная на рис. 2 сплошной линией. Таким образом, свободная энергия оказывается периодической функцией Q_0, что отражает дискретность числа электронов на островке. Важно отметить, что параболы для n и $n+1$ пересекаются в точке

$$Q_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) e \tag{8}$$

— такие точки называют точками вырождения (показаны на рис. 2), свободная энергия в них равна $e^2/8C_\Sigma = E_c/4$, где $E_c = e^2/2C_\Sigma$ — естественная единица зарядовой энергии данной системы. В этих точках состояние системы вырождено, т. к. два разных состояния (с избыточным числом электронов n и $n+1$) имеют одинаковую энергию. При изменении V_g в каждой точке вырождения один электрон туннелирует с окружающих проводников на островок (или наоборот), и число избыточных электронов на островке

[6] На практике случайно расположенные около островка заряженные примеси сдвигают наведённый заряд на случайную величину Q_{00}, которая не зависит от V_g, но может изменяться во времени. Чтобы учесть эти эффекты, надо переопределить Q_0:

$$Q_0 = Q_{00} - C_g V_g.$$

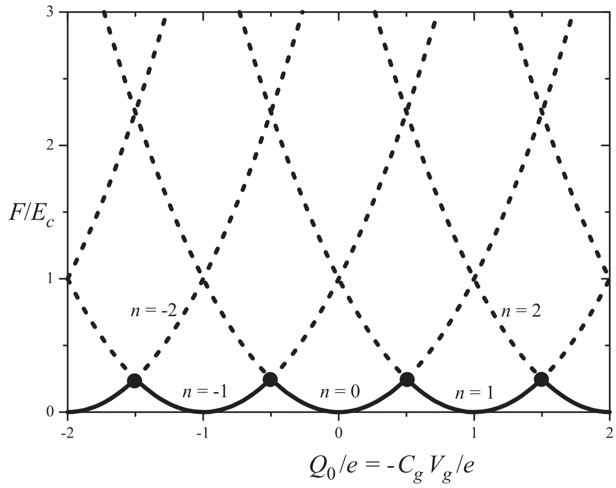

Рис. 2. Зависящая от n часть свободной энергии (6) при $T = 0$ как функция заряда $Q_0 = -C_g V_g$, наведённого затвором на островке (константа F_0, не зависящая от n, отброшена). При каждом n свободная энергия F имеет вид параболы. Минимум свободной энергии достигается выбором подходящего числа n избыточных электронов на островке, в результате реализуется кривая, изображённая сплошной линией. Минимальная свободная энергия оказывается периодической функцией Q_0, что отражает дискретность числа электронов на островке. Точками обозначены так называемые точки вырождения, в которых одинаковой свободной энергией обладают состояния с отличающимся на единицу количеством электронов на островке

меняется с n на $n+1$ (или на $n-1$). При конечных температурах переход $n \to n \pm 1$ будет, конечно, размыт температурными флуктуациями переменной n.

Важная роль вырождения состояний системы в точках пересечений парабол, соответствующих разным n, проявляется также при приложении бесконечно малого напряжения $V_2 - V_1$. Когда V_g проходит через точки вырождения (полуцелые Q_0), электронам не требуется проходить какой-либо энергетический барьер при движении от резервуара 1 к резервуару 2 через островок (даже при $T = 0$), и через контакт в этом случае начинает течь постоянный электрический ток. $I - V_g$ характеристика системы имеет, таким образом, пики в точках вырождения.

2.3. Одноэлектронный транзистор при конечных напряжениях

2.3.1. Нулевая температура

Рассмотрим, при каких условиях через одноэлектронный транзистор может протекать электрический ток при конечных напряжениях. Начнём со случая $T = 0$. Чтобы кулоновские эффекты не блокировали электронный транспорт, необходимо, чтобы туннелирование электрона через систему было энергетически выгодным. В терминах свободной энергии F это означает, что ток через систему потечёт, если изменения F, соответствующие переносу заряда, будут отрицательны. Рассмотрим это подробнее.

Используя (5), найдём работу, выполненную электрическим полем при переносе одного электрона с электрода 1 или 2 на островок (при фиксированных V_1, V_2 и V_g):

$$W_1 = \frac{e\left[(C_g + C_2)V_1 - C_2 V_2 + Q_0\right]}{C_\Sigma}, \tag{9a}$$

$$W_2 = \frac{e\left[(C_g + C_1)V_2 - C_1 V_1 + Q_0\right]}{C_\Sigma}. \tag{9b}$$

В обоих случаях изменение электростатической энергии U при изменении числа электронов на островке $n \to n \pm 1$ равно

$$\Delta U^{\pm} = \frac{e^2}{C_\Sigma}\left(\frac{1}{2} \pm n\right). \tag{10}$$

Отсюда по формулам

$$\Delta F_1^{\pm} = \Delta U^{\pm} \mp W_1, \qquad \Delta F_2^{\pm} = \Delta U^{\pm} \mp W_2 \tag{11}$$

найдём $\Delta F_1^{\pm}$ — изменение F при туннелировании одного электрона с первого электрода на островок (знак $+$) или с островка на первый электрод (знак $-$), и аналогично $\Delta F_2^{\pm}$ — изменение F при туннелировании одного электрона со второго электрода на островок или с островка на второй электрод. В результате

$$\Delta F_1^{\pm} = \frac{e^2}{C_\Sigma}\left\{\frac{1}{2} \pm \left[n - \frac{Q_0 + C_g(V_1+V_2)/2}{e}\right] \pm \frac{(C_2 + C_g/2)(V_2 - V_1)}{e}\right\}, \tag{12a}$$

$$\Delta F_2^{\pm} = \frac{e^2}{C_\Sigma}\left\{\frac{1}{2} \pm \left[n - \frac{Q_0 + C_g(V_1+V_2)/2}{e}\right] \pm \frac{(C_1 + C_g/2)(V_1 - V_2)}{e}\right\}. \tag{12b}$$

Здесь нам будет удобно воспользоваться свободой выбора начала отсчёта потенциалов, выбрав потенциалы резервуаров 1 и 2 антисимметричным образом, так что $V_1 = -V/2$, $V_2 = V/2$. В результате формулы (12) перепишутся в более простом виде, который вместо потенциалов двух резервуаров содержит лишь разность потенциалов между ними:

$$\Delta F_1^{\pm} = \frac{e^2}{C_\Sigma}\left\{\frac{1}{2} \pm \left(n - \frac{Q_0}{e}\right) \pm \frac{(C_2 + C_g/2)V}{e}\right\}, \tag{13a}$$

$$\Delta F_2^{\pm} = \frac{e^2}{C_\Sigma}\left\{\frac{1}{2} \pm \left(n - \frac{Q_0}{e}\right) \mp \frac{(C_1 + C_g/2)V}{e}\right\}. \tag{13b}$$

Чтобы такие процессы туннелирования стали возможны при $T = 0$, необходимо, чтобы соответствующие ΔF были отрицательными. Если электрон проходит, например, с первого электрода на второй через островок (см. рис. 3a), то сумма соответствующих ΔF равна eV. Действительно, в этом процессе

$$\Delta F_1^{+}(n) + \Delta F_2^{-}(n+1) = eV, \tag{14}$$

как следует из (13), поэтому во всяком случае должно быть выполнено очевидное условие $V > 0$. При этом, чтобы был возможен

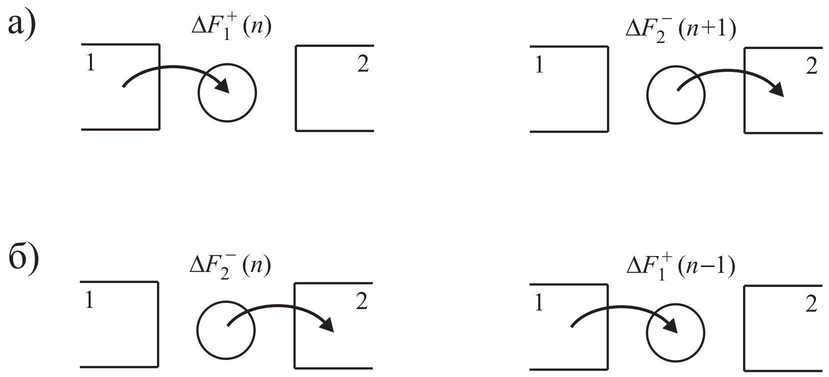

Рис. 3. Два типа переноса заряда при $V > 0$, в каждом случае процесс состоит из двух шагов (левый рисунок — первый шаг, правый — второй). Начальное число электронов на островке n, промежуточное равно $(n+1)$ в случае (а), и $(n-1)$ в случае (б), окончательное число электронов снова равно n. Поэтому процесс может повторяться снова и снова. Процессы, показанные на рисунках (а) и (б), имеют различные пороговые значения напряжения (которые соответствуют выполнению условия $\Delta F_1^+(n) < 0$ в первом случае и $\Delta F_2^-(n) < 0$ — во втором), и кулоновская блокада при $T = 0$ имеет место до тех пор, пока напряжение V не достигнет меньшего из двух пороговых значений

каждый из двух шагов процесса переноса электрона (рис. 3а), достаточно потребовать того, что возможен первый шаг: легко проверить, что если $\Delta F_1^+(n) < 0$ (туннелирование электрона на островок с первого электрода энергетически выгодно), то $\Delta F_2^-(n+1) < 0$ «автоматически».[7]

Из (13) следует, что основные параметры, определяющие транспортные свойства системы при заданных ёмкостях, — это Q_0 (т. е. потенциал затвора V_g, выраженный в единицах наведённого заряда) и разность потенциалов V между резервуарами 1 и 2. Выпишем пороговые напряжения V, при которых $\Delta F^{\pm}_{1,2}$ зануляются:[8]

$$V^{\pm}_{\mathrm{th},1} = \mp \frac{e}{C_2 + C_g/2}\left[\frac{1}{2} \pm \left(n - \frac{Q_0}{e}\right)\right], \tag{15a}$$

$$V^{\pm}_{\mathrm{th},2} = \pm \frac{e}{C_1 + C_g/2}\left[\frac{1}{2} \pm \left(n - \frac{Q_0}{e}\right)\right]. \tag{15b}$$

Очевидно, что при фиксированных n и Q_0 справедливы соотношения $V^{+}_{\mathrm{th},1}(n) = V^{-}_{\mathrm{th},1}(n+1)$ и $V^{+}_{\mathrm{th},2}(n) = V^{-}_{\mathrm{th},2}(n+1)$.

В термодинамическом равновесии, т. е. при $V = 0$ (это соответствует штриховой линии на рис. 4), число электронов n принимает целое значение, определяемое формулой (7), так как ne старается принять значение, наиболее близкое к индуцированному заряду Q_0. Если $Q_0 = 0$, то $n = 0$. Если же теперь на одноэлектронный транзистор подавать напряжение V, то электрический ток при этом Q_0 потечёт, когда V достигнет одного из значений $V^{\pm}_{\mathrm{th},1} = \mp\frac{e}{2C_2+C_g}$ или $V^{\pm}_{\mathrm{th},2} = \pm\frac{e}{2C_1+C_g}$. С другой стороны, при полуцелом Q_0 получаем $V_{\mathrm{th}} = 0$, поэтому кулоновской блокады нет при $V = 0$ в полном соответствии с нашими выводами про кулоновскую блокаду в равновесном случае, приведёнными в разделе 2.2. Пример такой ситуации показан чёрным кружком на рис. 4 (аналогично и для других

[7]Действительно, пусть мы стартуем с равновесной ситуации, тогда при $V = 0$ число электронов на островке удовлетворяет условию (7), следовательно величина $(n+1/2-Q_0/e)$ положительна. Если мы теперь прикладываем напряжение, то, как видно из формулы (13а), условие $\Delta F_1^+(n) < 0$ выполнится при определённом положительном V (напомним, что $e < 0$). Отсюда сразу ясно, что величина

$$\Delta F_2^-(n+1) = -\frac{e^2}{C_\Sigma}\left\{\left(n + \frac{1}{2} - \frac{Q_0}{e}\right) + \frac{[C_1 + C_g/2]V}{|e|}\right\}$$

в этих условиях является отрицательной.

[8]Индекс th — от английского слова threshold (порог).

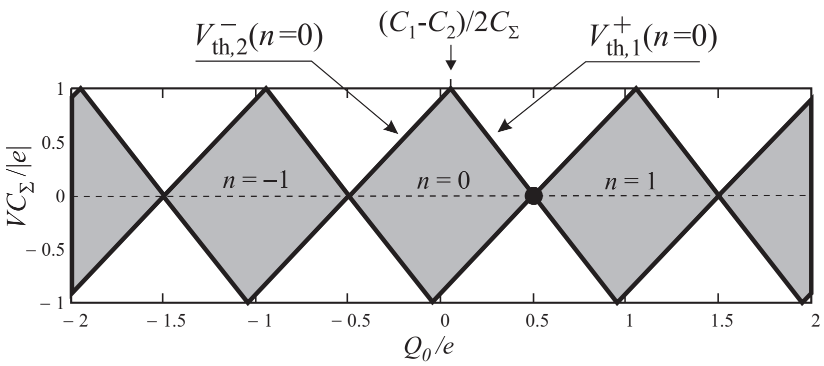

Рис. 4. Кулоновская блокада в координатах $V_g - V$. В данном случае значение напряжения на затворе V_g выражено в единицах $Q_0 = -C_g V_g$ — заряда, который затвор наводит на островке. Одноэлектронный транспорт блокирован при данном Q_0, пока напряжение V не достигнет одного из пороговых напряжений $V_{\rm th}(Q_0)$. Серая область соответствует кулоновской блокаде, а наклонные линии — пороговым напряжениям $V_{\rm th}$, при которых перенос заряда становится возможным. Выбраны следующие параметры: $C_1 = 0.3C_\Sigma$, $C_2 = 0.2C_\Sigma$ и $C_g = 0.5C_\Sigma$. Из-за некоторого сходства фигур, ограниченных линиями $V_{\rm th}$, с кристаллами алмаза подобные графики принято называть *кулоновскими алмазами* (Coulomb diamonds). Внутри каждого «алмаза» указано равновесное значение числа избыточных электронов n

точек пересечения граничных кривых V_{th} и штриховой линии $V = 0$) — это соответствует нахождению контакта в одной из точек вырождения, что означает возможность изменения заряда островка даже в отсутствие приложенного напряжения.

В общем случае, электронный транспорт блокирован при данном Q_0, пока напряжение V не достигнет одного из пороговых напряжений $V_{\text{th}}(Q_0)$, как это проиллюстрировано на рис. 4, где серая область соответствует кулоновской блокаде (нет одноэлектронного туннелирования), а наклонные линии — пороговым напряжениям V_{th}, при которых перенос заряда между резервуарами 1 и 2 становится возможным. Например, если напряжение V положительно и вначале имеется состояние с n электронами на островке, перенос заряда между резервуарами 1 и 2 возможен, если $\Delta F_1^+(n) < 0$ или $\Delta F_2^-(n) < 0$. В первом случае (рис. 3а) электрон будет туннелировать из первого электрода на островок, меняя его заряд с n на $n+1$, а затем туннелировать дальше во второй электрод, возвращая заряд островка к исходному значению n. Во втором случае (рис. 3б) транспорт происходит немного по-другому: *сначала* электрон будет туннелировать с островка во второй электрод, в результате чего заряд островка станет равным $n - 1$, а уже затем на место этого электрона придёт другой из первого электрода. В обоих случаях описанный цикл возвращает систему в исходное состояние с n электронами на островке, поэтому цикл может повторяться дальше и дальше, перенося электроны один за одним. Два описанных цикла имеют различные пороговые значения напряжения, и кулоновская блокада имеет место до тех пор, пока напряжение V не достигнет меньшего из двух пороговых значений.

В ситуации, изображённой на рис. 4, с увеличением V перенос заряда, отвечающий первому типу (рис. 3а), возникнет, например, если $0.05 < Q_0/e < 0.5$, а перенос заряда по второму механизму (рис. 3б) — если, например, $-0.5 < Q_0/e < 0.05$. Значение Q_0/e, разграничивающее эти две ситуации, в общем случае равно $(C_1 - C_2)/2C_\Sigma$ для центрального «алмаза» (что и даёт 0.05 для рис. 4). Именно несовпадением C_1 и C_2 объясняется «перекос» кулоновских алмазов (на рис. 4 они слегка наклонены вправо). Также в случае $C_1 \neq C_2$ вольт-амперная характеристика $I(V)$ будет, очевидно, асимметричной — это ясно уже хотя бы из того, что пороговые напряжения, при которых возникает ненулевой ток, для случаев положительного и отрицательного V отличаются по модулю (см.

рис. 4).

2.3.2. Конечные температуры

В данном разделе мы рассмотрим случай конечных температур и найдём электрический ток в системе. Обратите внимание, что до сих пор речи о вычислении непосредственно электрического тока не было — мы лишь обсуждали, есть он или нет, а также какими процессами переноса заряда обеспечивается, но не вычисляли его величину.

При конечных температурах ситуация сложнее, чем при $T = 0$, т. к. помимо вышеописанных процессов переноса заряда возникают дополнительные возможности. Дело в том, что теперь система не обязана находиться в основном состоянии (в частности, теперь число электронов на островке может быть не равно тому, которое получается из условия минимума свободной энергии, как на рис. 2 и в формуле (7)) и необходимо учитывать тот факт, что любое состояние может быть занято с некоторой вероятностью, и поэтому есть вероятности перехода между различными парами состояний. Электрический ток, текущий через одноэлектронный транзистор, может быть найден с помощью подхода, использующего дискретный вариант кинетического уравнения (master equation), описывающий вероятности нахождения системы в состояниях с различными n на островке.

Вероятность туннелирования электрона из первого резервуара на островок в единицу времени можно найти с помощью золотого правила Ферми [5, 6]:

$$\Gamma^{(1)}_{n\to n+1} = 2\cdot\frac{2\pi}{\hbar}|M|^2\times$$
$$\times\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_0\ \rho_1(\epsilon_1)\rho_0(\epsilon_0)f_1(\epsilon_1)\left[1-f_0(\epsilon_0)\right]\delta(\Delta F_1^+ + \epsilon_0 - \epsilon_1), \tag{16}$$

где M — матричный элемент гамильтониана взаимодействия первого резервуара и островка, энергии ϵ_1 и ϵ_0 мы будем отсчитывать от энергии Ферми[9], $\rho_1(\epsilon)$ и $\rho_0(\epsilon)$ — плотность одноэлектронных состояний в первом резервуаре и на островке соответственно, $f_1(\epsilon)$

[9]Вообще-то при таком определении энергии нижние пределы интегрирова-

и $f_0(\epsilon)$ — функция распределения электронов в первом резервуаре и на островке соответственно. Множитель 2, выделенный в правой части, учитывает две возможные проекции спина. Множитель $f_1(\epsilon_1)[1-f_0(\epsilon_0)]$ определяет вероятность того, что электрон с энергией ϵ_1 имеется в электроде, а состояние с энергией ϵ_0 не занято на островке (так учитывается ферми-статистика электронов, т. е. принцип запрета Паули). Закон сохранения энергии при туннелировании обеспечивает δ-функция в (16).

Упростим выражение (16), предполагая распределение электронов в резервуарах и на островке равновесным. Последнее допущение справедливо, если характерные размеры островка много больше, чем неупругая длина пробега электрона. Для простоты мы будем считать, что характерное расстояние δE между уровнями энергии островка много меньше, чем температура — в этом случае спектр уровней можно считать непрерывным (обобщение на случай дискретного спектра можно найти в специальной литературе [5]). Тогда в формуле (16) мы можем заменить плотности состояний в первом резервуаре и на островке на константы (это хорошее приближение в металле вблизи поверхности Ферми), что даёт

$$\Gamma^{(1)}_{n\to n+1} = \frac{1}{e^2R_1}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_0\ f_1(\epsilon_1)\,[1-f_0(\epsilon_0)]\,\delta(\Delta F_1^+ + \epsilon_0 - \epsilon_1), \tag{17}$$

где R_1 — сопротивление контакта между первым электродом и островком, которое мы нашли бы, если бы все ёмкости на рис. 1 были бесконечными (т. е. не было бы кулоновских эффектов):

$$\frac{1}{R_1} = \frac{e^2}{\hbar} 4\pi\rho_0\rho_1|M|^2. \tag{18}$$

Используя соотношение $\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, f(\epsilon)[1-f(\epsilon-E)] = E/[\exp(E/T)-1]$, справедливое, если $f(\epsilon) = 1/[\exp(\epsilon/T)+1]$ (здесь мы пользуемся равновесностью распределения электронов на островке и на

ния в формуле (16) должны быть равны $-E_F$, что соответствует дну «ферми-моря». Однако электроны с такими энергиями не дают вклада в транспорт (транспорт обеспечивается электронами из окрестности энергии Ферми, что соответствует ϵ_1 и ϵ_0 вблизи нуля), поэтому можно заменить нижние пределы на $-\infty$.

электродах), найдём

$$\Gamma^{(1)}_{n\to n\pm1} = \frac{1}{e^2R_1}\cdot\frac{-\Delta F_1^{\pm}}{1-\exp\left(\Delta F_1^{\pm}/T\right)} \tag{19a}$$

— формула с нижним знаком получается аналогично вышеописанному и соответствует переносу электрона из островка в первый резервуар. При $T=0$ это выражение сводится к нулю при $\Delta F_1^{\pm}>0$ (что согласуется с результатами раздела 2.3.1) и к $\left|\Delta F_1^{\pm}\right|/e^2R_1$ при $\Delta F_1^{\pm}<0$. Наглядный физический смысл величины Γ в последнем случае таков: $\Gamma = 1/\tau$, где τ — время, в течение которого один электрон переносится из резервуара на островок (знак $+$) или обратно (знак $-$).

Аналогично получаются вероятности туннелирования в единицу времени из второго резервуара на островок и обратно, нужно лишь везде в формуле (19a) индекс 1 заменить на 2:

$$\Gamma^{(2)}_{n\to n\pm1} = \frac{1}{e^2R_2}\cdot\frac{-\Delta F_2^{\pm}}{1-\exp\left(\Delta F_2^{\pm}/T\right)}. \tag{19b}$$

Поскольку мы будем интересоваться стационарной ситуацией (установившийся режим), средний ток из первого резервуара на островок равен среднему току с островка во второй резервуар и может быть написан следующим образом:[10]

$$\begin{aligned} I(V) &= e\sum_{n=-\infty}^{\infty} p(n)\left[\Gamma^{(1)}_{n\to n-1} - \Gamma^{(1)}_{n\to n+1}\right] = \\ &= e\sum_{n=-\infty}^{\infty} p(n)\left[\Gamma^{(2)}_{n\to n+1} - \Gamma^{(2)}_{n\to n-1}\right], \end{aligned} \tag{20}$$

где $p(n)$ — вероятность нахождения n электронов на островке, лежащая в интервале $0\leqslant p(n)\leqslant 1$. Определив

$$\Gamma_{n\to n+1} \equiv \Gamma^{(1)}_{n\to n+1} + \Gamma^{(2)}_{n\to n+1}, \tag{21a}$$

$$\Gamma_{n\to n-1} \equiv \Gamma^{(1)}_{n\to n-1} + \Gamma^{(2)}_{n\to n-1} \tag{21b}$$

[10] Знаки выбраны таким образом, что формула (20) определяет ток, текущий справа налево (из резервуара 2 в резервуар 1). Именно поэтому ток у нас будет положительным при $V = V_2 - V_1 > 0$.

— полные вероятности соответствующих изменений числа электронов на островке в единицу времени (при этом неважно, через какой из двух контактов пришёл или ушёл электрон), мы можем записать кинетическое уравнение, которому $p(n)$ удовлетворяет в общем случае:

$$\frac{dp(n)}{dt} = p(n+1)\Gamma_{n+1\to n} + p(n-1)\Gamma_{n-1\to n} - (\Gamma_{n\to n+1} + \Gamma_{n\to n-1})\, p(n). \tag{22}$$

Точнее говоря, это уравнение нужно записать при каждом n, что даёт сцепленную систему уравнений. Правая часть уравнения (22) содержит приходные члены (из соседних состояний) и уходные члены (соответствующие переходам в соседние состояния).

В стационарном режиме (режиме установившегося тока) $p(n)$ не зависит от времени, тогда производная в левой части (22) равна нулю, и мы получаем разностное уравнение, из которого можно найти $p(n)$:

$$p(n+1)\Gamma_{n+1\to n} + p(n-1)\Gamma_{n-1\to n} - p(n)\,(\Gamma_{n\to n+1} + \Gamma_{n\to n-1}) = 0 \tag{23}$$

с граничными условиями $p(n \to \pm\infty) = 0$ и условием нормировки $\sum_n p(n) = 1$. Уравнение (23) можно упростить, предполагая, что все состояния с номером больше некоторого (достаточно большого) n_0 «запрещены», т. е. эти состояния нельзя заполнять и в них нельзя переходить: $p(n) = 0$ и $\Gamma_{n-1\to n} = 0$ при $n > n_0$. Тогда, подставив граничное значение $n = n_0$ в уравнение (23), находим

$$p(n_0 - 1)\Gamma_{n_0-1\to n_0} = p(n_0)\Gamma_{n_0\to n_0-1}. \tag{24a}$$

Далее, записав (23) для $n = n_0 - 1$, получим

$$p(n_0 - 2)\Gamma_{n_0-2\to n_0-1} = p(n_0 - 1)\Gamma_{n_0-1\to n_0-2}. \tag{24b}$$

По индукции можно доказать, что (23) эквивалентно условию «детального равновесия» для любой пары соседних состояний:[11]

$$p(n)\Gamma_{n\to n+1} = p(n+1)\Gamma_{n+1\to n} \tag{25}$$

— это соотношение говорит о том, что в стационарном режиме между двумя соседними состояниями в среднем переходов нет (т. к. переходы туда и обратно происходят с одинаковой частотой).

[11] Результат — условие детального равновесия — не зависит от выбора n_0. Вообще, в конце нашего рассуждения можно устремить $n_0 \to \infty$.

Далее, в принципе, задачу можно решать численно: Γ известны из формул (21), (19) и (13), поэтому можно найти $p(n)$ из полученных уравнений детального равновесия с граничными условиями и условием нормировки и, наконец, вычислить ток $I(V)$ по формуле (20). Изложенный метод вычисления тока в одноэлектронном транзисторе обычно называют *ортодоксальным методом* (orthodox theory). Подробное изложение этого метода можно найти в обзорах [7].

Вблизи точки вырождения, при $V \to 0$, можно найти аналитическое решение разностных уравнений (25). Для определённости будем искать решение вблизи точки ($Q_0/e = 1/2$, $V = 0$), отмеченной чёрным кружком на рис. 4. Будем предполагать, что температура мала по сравнению с кулоновской энергией: $T \ll E_c$ (где $E_c = e^2/2C_\Sigma$). Близость к точке вырождения означает, что отклонение наведённого заряда от точки вырождения, определяемое как

$$\delta Q_0 = Q_0 - \frac{e}{2}, \tag{26}$$

мало́: $|\delta Q_0/e| \ll 1$. Тогда формулы (13) при $n \neq 0$ дают

$$\Delta F_1^+(n) \approx \Delta F_2^+(n) \approx 2nE_c, \qquad n \neq 0, \tag{27a}$$

а при $n \neq 1$ получается

$$\Delta F_1^-(n) \approx \Delta F_2^-(n) \approx 2(1-n)E_c, \qquad n \neq 1 \tag{27b}$$

— все эти величины по модулю во всяком случае не меньше $2E_c$, следовательно много больше температуры.

Из формул (19) и (21) тогда следует, что $\Gamma_{n\to n+1}$ экспоненциально подавлены при $n > 0$ в силу $\exp(-2E_c/T) \ll 1$, а $\Gamma_{n\to n-1}$ экспоненциально подавлены таким же множителем при $n < 1$ (рис. 5). Тогда из уравнения детального равновесия (25) следует, что все $p(n)$, кроме $p(0)$ и $p(1)$, малы в силу того же самого экспоненциального множителя: действительно, если между какой-либо парой соседних уровней на рис. 5 имеется лишь одна стрелка, это означает, что Γ обратного перехода экспоненциально мала, и тогда в условии детального равновесия (25) экспоненциально малую Γ в одной стороне необходимо компенсировать экспоненциально малым p в другой стороне.

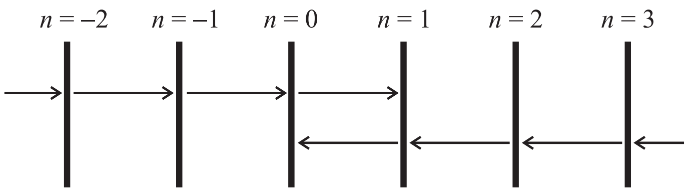

Рис. 5. Состояния системы с различным n — числом избыточных электронов на островке. Стрелками показаны переходы, которые при $T \ll E_c$ не имеют экспоненциальной малости в силу $\exp(-2E_c/T) \ll 1$. Остальные переходы экспоненциально подавлены

Таким образом, нужно учитывать только $p(0)$ и $p(1)$ (т. к. между уровнями 0 и 1 на рис. 5 имеются стрелки в обоих направлениях). Из (25) и условия нормировки получаем

$$p(0)\Gamma_{0\to1} = p(1)\Gamma_{1\to0}, \tag{28}$$

$$p(0) + p(1) = 1. \tag{29}$$

То, что задача при низких температурах сводится только к двум состояниям системы, наглядно видно из рис. 2, т. к. в окрестности рассматриваемой нами точки вырождения близки энергии именно состояний с $n = 0$ и $n = 1$, а все остальные состояния лежат выше по энергии, по крайней мере, на $2E_c$. Решение этой системы уравнений даётся формулами

$$p(0) = \frac{\Gamma_{1\to0}}{\Gamma_{0\to1} + \Gamma_{1\to0}}, \qquad p(1) = \frac{\Gamma_{0\to1}}{\Gamma_{0\to1} + \Gamma_{1\to0}}. \tag{30}$$

Сюда нужно подставлять величины Γ, определённые по формулам (19) и (21) с помощью выражений для изменений свободной энергии (13):

$$\Delta F_1^+(0) = -\Delta F_1^-(1) = -2E_c \cdot \frac{\delta Q_0 - (C_2 + C_g/2)V}{e}, \tag{31a}$$

$$\Delta F_2^+(0) = -\Delta F_2^-(1) = -2E_c \cdot \frac{\delta Q_0 + (C_1 + C_g/2)V}{e} \tag{31b}$$

— именно эти величины не вошли в формулы (27), т. к. малы по сравнению с E_c, и именно эти величины определяют выражения в формулах (30).

Теперь легко найти электрический ток, воспользовавшись формулой (20):

$$I(V) = e\frac{\Gamma^{(2)}_{0\to1}\Gamma^{(1)}_{1\to0} - \Gamma^{(1)}_{0\to1}\Gamma^{(2)}_{1\to0}}{\Gamma_{0\to1} + \Gamma_{1\to0}}. \tag{32}$$

Отсюда можно получить простую формулу для кондактанса[12] $G = dI/dV$ при $V \to 0$. Для этого надо разложить числитель (32) до первого порядка по V, а знаменатель достаточно взять в нулевом приближении. В результате находим линейный кондактанс:

$$G = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{R_1 + R_2} \cdot \frac{e\,\delta Q_0/C_\Sigma T}{\mathrm{sh}(e\,\delta Q_0/C_\Sigma T)}. \tag{33}$$

Легко показать, что эта формула в действительности справедлива вблизи любой точки вырождения, если под δQ_0 понимать отклонение от соответствующего полуцелого значения:

$$\delta Q_0 = Q_0 - (2k+1)\frac{e}{2}. \tag{34}$$

Максимальное значение кондактанса в формуле (33) определяется туннельными сопротивлениями R_1 и R_2. Характерные величины этого максимального кондактанса вблизи точек вырождения в реальных экспериментах могут составлять десятые доли квантового кондактанса G_q, т. е. по порядку величины примерно 10^{-5} Ом$^{-1}$.

2.3.3. Более общие случаи

Обсудим теперь вкратце более общие ситуации.

На рис. 6а показана зависимость линейного кондактанса G от потенциала затвора (иными словами, от Q_0) при разных температурах. Увеличение температуры соответствует переходу к более высоколежащим кривым. Пики соответствуют точкам вырождения и при низких температурах описываются формулой (33), откуда видно, что ширина пика уменьшается с уменьшением температуры. Параметры, при которых построен график 6а, соответствуют $E_c \approx 9\,\mathrm{K}$, поэтому формула (33) применима для трёх нижних кривых (для которых выполнено условие $T \ll E_c$) — в частности, высота пика в единицах графика примерно равна $h/4e^2(R_1 + R_2) \approx 0.05$

[12] Эту величину можно называть проводимостью (или, точнее, дифференциальной проводимостью), однако мы будем использовать термин *кондактанс*, в последнее время устоявшийся в русскоязычной литературе.

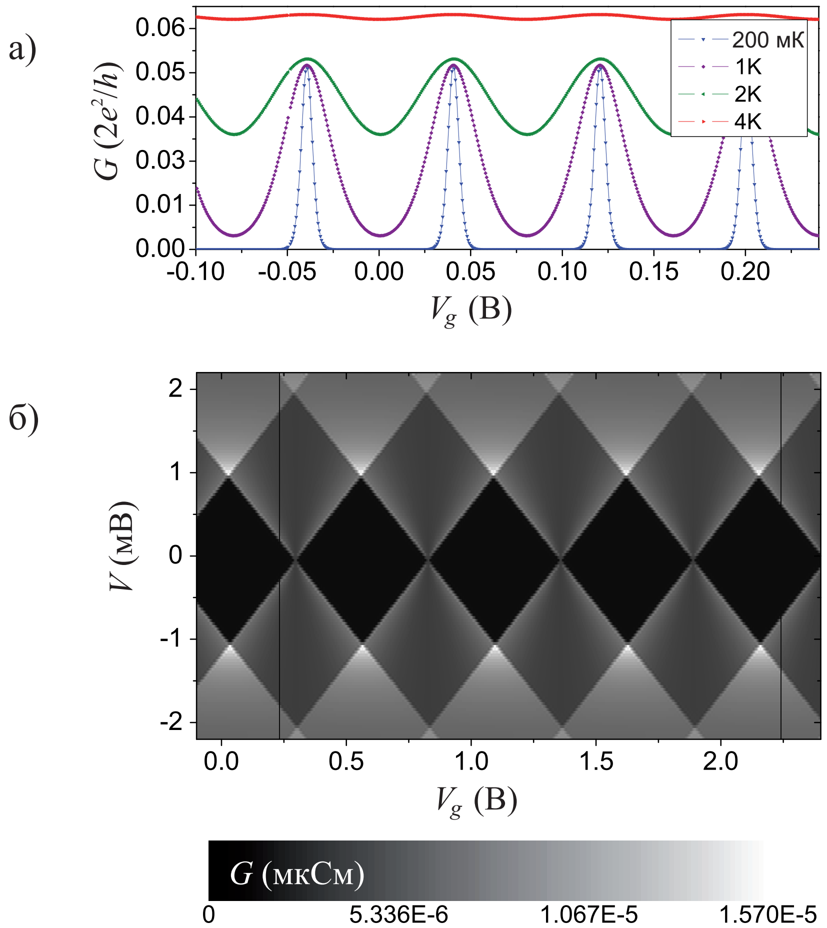

Рис. 6. (а) Линейный кондактанс ($G = dI/dV$ при $V \to 0$) в зависимости от потенциала затвора при разных температурах. Увеличение температуры соответствует переходу к более высоколежащим кривым. (б) Оттенками серого показан дифференциальный кондактанс $G = dI/dV$ в зависимости от потенциала затвора V_g и напряжения между резервуарами V. Нулевой кондактанс обозначен чёрным (центральный горизонтальный ряд «алмазов»), более светлые тона обозначают конечный кондактанс. Оба графика построены при параметрах, близких к реальным экспериментам: $R_1 = R_2 = 60\,$кОм, $C_1 = C_2 = 50 \cdot 10^{-18}\,$Ф, $C_g = 2 \cdot 10^{-18}\,$Ф.

[Графики взяты из диссертации E. Pallecchi (Регенсбург, 2009)]

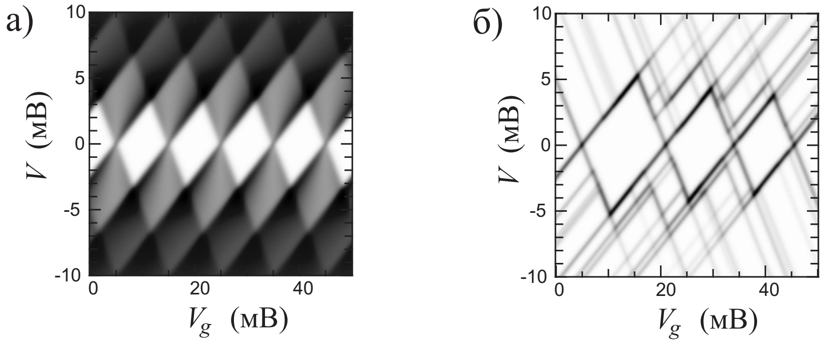

Рис. 7. Дифференциальный кондактанс G в координатах $V_g - V$. Белые области соответствуют нулевому G, тёмные — конечным G. Чем темнее оттенок, тем больше кондактанс. (а) Металлический предел, пренебрежимо малое расстояние между уровнями энергии островка (непрерывный спектр): $\delta E \ll T$, в то же время $T \ll E_c$. (б) Случай дискретного спектра островка, $\delta E \gg T$. Остальные параметры те же, что и для графика (а). [Графики взяты из диссертации M. Hofheinz (Гренобль, 2006)]

в соответствии с предсказанием формулы (33). Для самой верхней кривой ($T = 4\,\mathrm{K}$) расхождение с формулой уже заметное, т. к. условие $T \ll E_c$ выполняется хуже.

На рис. 6б оттенками серого показан дифференциальный кондактанс $G = dI/dV$ в зависимости от потенциала затвора V_g и напряжения между резервуарами V. Кулоновская блокада имеет место в центральном горизонтальном ряду «алмазов». В остальных рядах «алмазов» блокады уже нет, однако видна сложная структура, состоящая из «алмазов» с ненулевым кондактансом. Эта структура связана с открытием и закрытием каналов переноса заряда при пересечении линий пороговых напряжений, соответствующих различным n.

Влияние конечного расстояния δE между уровнями островка на кулоновскую блокаду проиллюстрировано на рис. 7. До сих пор мы обсуждали так называемый металлический предел, когда $\delta E \ll T$, поэтому спектр уровней островка можно считать непрерывным, как в обычном металле. Именно этот предел показан на рис. 7а (здесь, в отличие от предыдущего рисунка, кулоновской блокаде соответствуют белые области, а конечной проводимости — тёмные, так что принципиальных различий между рис. 7а и рис. 6б нет). Рис. 7б показывает противоположный предел, $\delta E \gg T$, в котором электроны в островке могут находиться лишь на нескольких дискретных уровнях. Необходимо отметить, что «алмазы», внутри которых имеет место кулоновская блокада, сохраняются, а внутри проводящих областей кондактанс увеличивается не непрерывно, а только когда дополнительный дискретный уровень начинает участвовать в транспорте. Именно с этим и связаны белые участки внутри проводящих областей — в них ток конечен, но *дифференциальный* кондактанс (который и показан на рисунке) равен нулю.

3. Квантовые точечные контакты

3.1. Ток через квантовый точечный контакт

В проводниках основной вклад в ток дают обычно электроны с энергиями, близкими к энергии Ферми E_F. Рассмотрим контакт двух проводников. Если ширина контакта W настолько мала, что в ней укладывается лишь несколько длин волн электронов λ_F, то будем называть такой контакт точечным. В данном разделе мы увидим, к каким особенностям транспорта приводит настолько малая ширина контакта.

В эксперименте типичный точечный контакт реализуется следующим образом: два массивных электрода соединяют слоем двумерного электронного газа (часто используется аббревиатура 2DEG = = 2-dimensional electron gas), сформированного в области полупроводникового гетероперехода (рис. 8). Затем сверху к двумерному электронному газу подводят пластины затвора (gate). Подавая на затвор потенциал, можно «выдавливать» электроны из областей вблизи затвора, делая эти области недоступными для электронов и тем самым формируя сужение в двумерном электронном газе (это и есть точечный контакт). Чем больше поданное на затвор напряжение, тем больше запрещённая для электронов область и тем у́же сужение. Таким образом, с помощью затвора достаточно легко можно менять геометрию контакта.

Для исследования электронного транспорта в мезоскопических контактах широко используется метод матриц рассеяния (также его называют подходом Ландауэра). Зная матрицу рассеяния $\hat{S}$ (составленную из коэффициентов отражения и прохождения) электронов на потенциальном поле, формирующем контакт, можно найти транспортные свойства контакта: средний ток и корреляторы токов (шум). Матрицу рассеяния можно найти решая уравнение Шрёдингера, описывающее состояние электронов в поле контакта. Подробное изложение этого метода можно найти в книге [3], а также в обзоре [8]. Наше изложение использует некоторые элементы этого подхода; в основном мы будем следовать статье [9].

Рассмотрим мезоскопическую систему, соединяющую резервуары N_1 и N_2, как показано на рис. 9. Резервуары имеют электрохимические потенциалы μ_1 и μ_2, функции распределения электронов

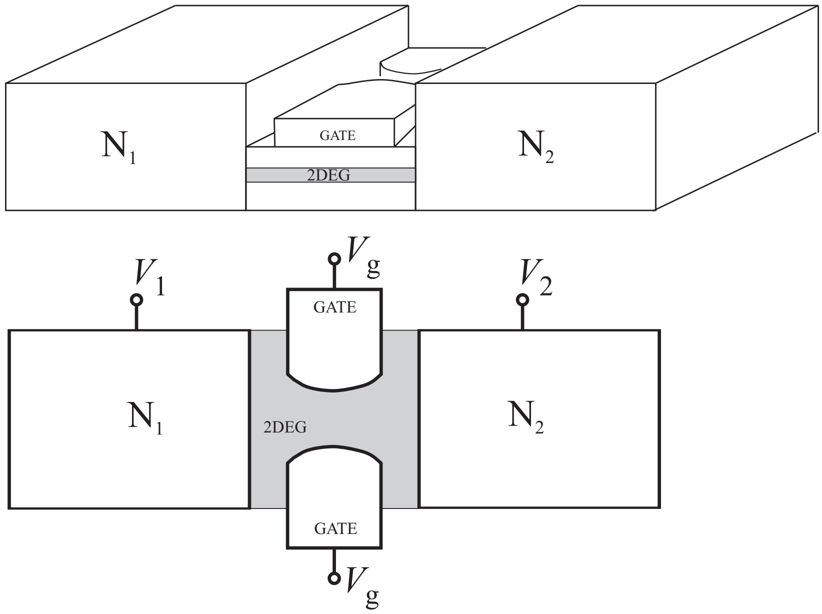

Рис. 8. Схема экспериментальной реализации точечного контакта. Два массивных электрода соединены слоем двумерного электронного газа (2DEG), возникающего в полупроводниковой гетероструктуре. Сужение формируется с помощью напряжения V_g, подаваемого на затвор (gate). Такой способ формирования сужения называется техникой расщеплённого затвора (split-gate technique [11])

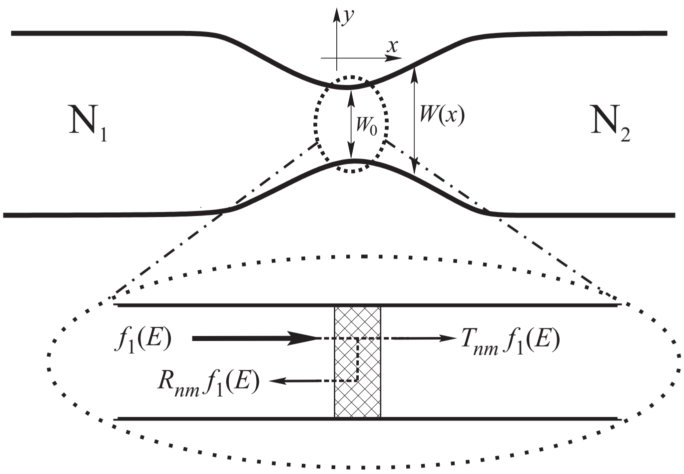

Рис. 9. Точечный контакт, имеющий форму сужения. Ширина сужения описывается функцией $W(x)$ с минимальным значением W_0. В нижней части рисунка на увеличенном фрагменте показано, что внутри сужения в общем случае может находиться некоторый рассеиватель (например, примесь или туннельный барьер), который характеризуется вероятностями отражения и прохождения R_{nm} и T_{nm} из канала m в канал n

в них имеют вид

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_\alpha)/T]+1}, \qquad \alpha = 1, 2. \tag{35}$$

Будем считать, что система двумерная, это соответствует стандартной экспериментальной ситуации, показанной на рис. 8. Выберем направление осей x, y так, как это показано на рис. 9. Тогда ток течёт вдоль оси x. Волновые функции стационарных состояний электронов удовлетворяют уравнению Шрёдингера:

$$\hat{H}(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y). \tag{36}$$

Одноэлектронный гамильтониан $\hat{H}(x,y)$ даётся формулой

$$\hat{H}(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + U(x,y), \tag{37}$$

где $U(x,y)$ — потенциал, описывающий стенки контакта. Для простоты будем считать, что стенки непроницаемые, при этом расстояние между ними меняется вдоль x по некоторому закону $W(x)$. Тогда волновая функция на стенках, т. е. при $y = \pm W(x)/2$, должна обращаться в ноль. Предполагая, что форма контакта достаточно плавная (т. е. $W(x)$ медленно меняется на расстояниях порядка фермиевской длины волны λ_F), мы можем записать решение уравнения (36) с помощью адиабатического разделения переменных:

$$\psi_n(x,y) = \phi_n(x)\sqrt{\frac{2}{W(x)}}\sin\left[n\pi\left(\frac{y}{W(x)} + \frac{1}{2}\right)\right], \tag{38}$$

где индекс $n = 1, 2, 3, \ldots$ (целые положительные числа), а функция $\phi_n(x)$ удовлетворяет одномерному уравнению Шрёдингера с эффективным потенциалом $U_n(x)$, описывающим влияние стенок контакта:[13]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U_n(x)\right]\phi_n(x)=E\phi_n(x),\qquad U_n(x)=\frac{(n\pi\hbar)^2}{2mW^2(x)}. \quad (39)$$

Характерные размеры резервуаров значительно больше длины волны электрона. Поэтому можно считать, что $W(x)\to\infty$ при $x\to\to\pm\infty$. Минимальное значение $W(x)$ обозначим W_0. Тогда эффективный потенциал (зависящий от поперечного квантового числа n) в получившемся уравнении Шрёдингера имеет вид потенциального барьера максимальной высоты

$$E_n=\frac{(n\pi\hbar)^2}{2mW_0^2}, \quad (40)$$

убывающего до нуля при $x\to\pm\infty$ (рис. 10).

Мы видим, что волновая функция характеризуется номером поперечного квантования n. Иными словами, поперечное движение электрона должно быть устроено так, чтобы на ширине контакта укладывалось целое число полуволн $\lambda_F/2$. Поэтому электроны, пролетающие через контакт, могут иметь либо одну полуволну, укладывающуюся на ширине контакта, либо две, либо три и т. д. Для обозначения таких состояний используется термин *канал*. Например, принято говорить, что электрон в состоянии с волновой функцией ψ_n находится в n-м канале.

Ввиду медленности изменения $W(x)$ можно решить (39), используя квазиклассическое приближение. В главном приближении через сужение проникают только электроны с энергиями $E>E_n$. Иногда бывает нужно учитывать дополнительное рассеяние электронов в сужении, например, на потенциале примесей или на туннельном барьере. Такой рассеиватель схематично изображён штриховкой на рис. 9.

[13] Легко заметить, что в случае $W=\text{const}$ имеет место точное разделение переменных x и y в уравнении Шрёдингера, и соответственно точными оказываются формулы (38) – (39). В случае же, когда W зависит от x, точное разделение переменных уже не имеет места. Однако, если ширина контакта $W(x)$ мала и является медленной функцией (в соответствии с нашими предположениями), имеет место адиабатическое приближение [10]: на качественном языке, движение вдоль y гораздо более быстрое, чем вдоль x, поэтому в своём движении по x частица чувствует некоторые усреднённые характеристики поперечного движения, и это позволяет разделить переменные. Технически адиабатическое приближение сводится к тому, что в формулы (38) – (39) вместо постоянного W теперь надо подставить $W(x)$.

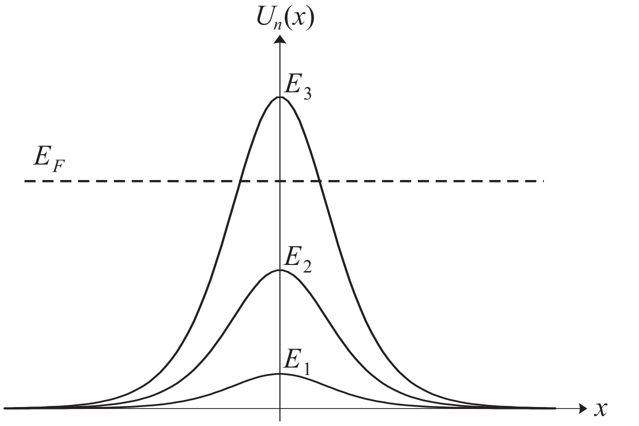

Рис. 10. Пример эффективного потенциала $U_n(x)$, возникающего в результате влияния стенок контакта. При каждом n обозначим максимальное значение потенциала (определяемое самым узким местом сужения) как E_n. Ток обеспечивается электронами, имеющими энергию вблизи энергии Ферми E_F. Изображённая ситуация соответствует двум «открытым» каналам (каналы 1 и 2, т. к. только для них выполнено соотношение $E_F > E_n$)

Вычислим электрический ток в сужении слева от рассеивающего потенциала. Электроны с энергией E, приходящие из левого резервуара N_1, дают вклад в ток, пропорциональный $ef_1(E)\sum_n v_n$, где $v_n = \sqrt{2(E-E_n)/m}$. Из-за отражения электронов от рассеивающего потенциала возникает обратный ток, пропорциональный $-ef_1(E)\sum_{n,m} v_n R_{nm}$. Здесь R_{nm} — вероятность того, что летящий на рассеиватель в канале m из N_1 электрон отразится от рассеивающего потенциала в канал n. Электроны, летящие из правого резервуара, дадут вклад в ток, пропорциональный $-ef_2(E)\sum_{n,m} v_n T_{nm}$, где T_{nm} — вероятность того, что летящий на рассеиватель в канале m из N_2 электрон пройдёт через рассеиватель в канал n. В результате ток оказывается равным

$$I = 2\sum_{n,m}\int\limits_0^\infty \frac{dE}{2\pi\hbar v_n} e v_n \left[f_1(E)(\delta_{nm} - R_{nm}) - f_2(E) T_{nm}\right], \qquad (41)$$

где мы учли, что плотность состояний в канале n равна $2/2\pi\hbar v_n(E)$

(коэффициент 2 в числителе учитывает спиновое вырождение).[14] Для простоты предполагается, что вероятности рассеяния от энергии не зависят. Аккуратнее можно сказать, что зависимость $T_{nm}(E)$ и $R_{nm}(E)$ имеется, но мы интересуемся такими случаями, когда перенос тока осуществляется электронами в непосредственной близости к поверхности Ферми, поэтому можно положить $E = E_F$.

3.2. Квантование кондактанса

Найдём теперь линейный кондактанс: $G = dI/dV$ при $V \to 0$. Будем считать, что $\mu_1 = E_F$, $\mu_2 = E_F - eV$. Тогда в пределе нулевой температуры получаем

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar}\sum_{n,m} T_{nm}. \tag{42}$$

Величина

$$G_q = \frac{e^2}{\pi\hbar} = \frac{2e^2}{h} \approx \frac{1}{12.9\ \text{кОм}} \tag{43}$$

называется *квантовым кондактансом*. Это естественная единица измерения кондактанса в мезоскопических системах.

Исследуем важный предельный случай формулы (42). Пусть $T_{nm} = \delta_{nm}\,\theta(E_F - E_n)$, где θ обозначает функцию Хевисайда — такая зависимость означает, что рассеяния на примесях в сужении нет, каналы не перемешиваются, и открыты (с прозрачностью 1) только каналы, для которых максимум эффективного потенциала (см. рис. 10) лежит ниже E_F. Тогда

$$G = NG_q, \qquad N = \sum_n \theta(E_F - E_n), \tag{44}$$

где N — число открытых каналов. Посмотрим, как будет меняться G, если мы будем менять ширину W_0 сужения, прикладывая напряжение к затвору (рис. 10). Если $W_0 \to 0$, то $E_F < E_1$, поэтому $N = 0$ и электроны не могут пройти через сужение. Если $E_1 < E_F < E_2$, то открыт один канал и $G = G_q$. При $E_2 < E_F < E_3$ открыто два

[14] В одномерном случае без учёта спина число состояний в интервале импульсов dp в расчёте на единицу объема равно $dp/(2\pi\hbar)$, что можно переписать как $dE/[2\pi\hbar(\partial E/\partial p)]$. После этого остаётся заметить, что $\partial E/\partial p = v$.

канала, поэтому $G = 2G_q$, и т. д. Таким образом, кондактанс сужения квантуется в единицах G_q (рис. 11).[15] (На экспериментальном графике рис. 11б высота ступенек подчиняется правилу квантования с очень хорошей точностью, в то время как их края заметно размыты. Это может быть связано с различными причинами, такими, как конечная температура, конечная вероятность подбарьерного прохождения и надбарьерного отражения и др.)

Разделение каналов на открытые и закрытые очень наглядно видно на рис. 10. Эффективная энергия $U_n(x)$ учитывает влияние стенок сужения, т. е. учитывает поперечное квантование. Для открытия какого-либо канала необходимо, чтобы энергия электронов E_F превысила эффективную энергию, соответствующую этому каналу (т. е. энергия электрона должна превышать энергию поперечного квантования) — тогда электроны проходят. В противном же случае электроны отражаются от барьера (у них «не хватает» энергии на поперечное квантование, и уж тем более не остаётся энергии для движения по x), и такой канал закрыт. Если при фиксированном E_F мы будем увеличивать ширину сужения W_0, то эффективная энергия будет уменьшаться, и всё большее число каналов будет удовлетворять критерию $E_n < E_F$.

[15] В этом идеальном случае G_q можно назвать квантом кондактанса. Однако, в общем случае, когда имеется отражение от примесей в сужении, кондактанс одного канала будет меньше, чем G_q, и эта величина теряет смысл кванта кондактанса. Поэтому во избежание недоразумений мы называем её *квантовым кондактансом.*

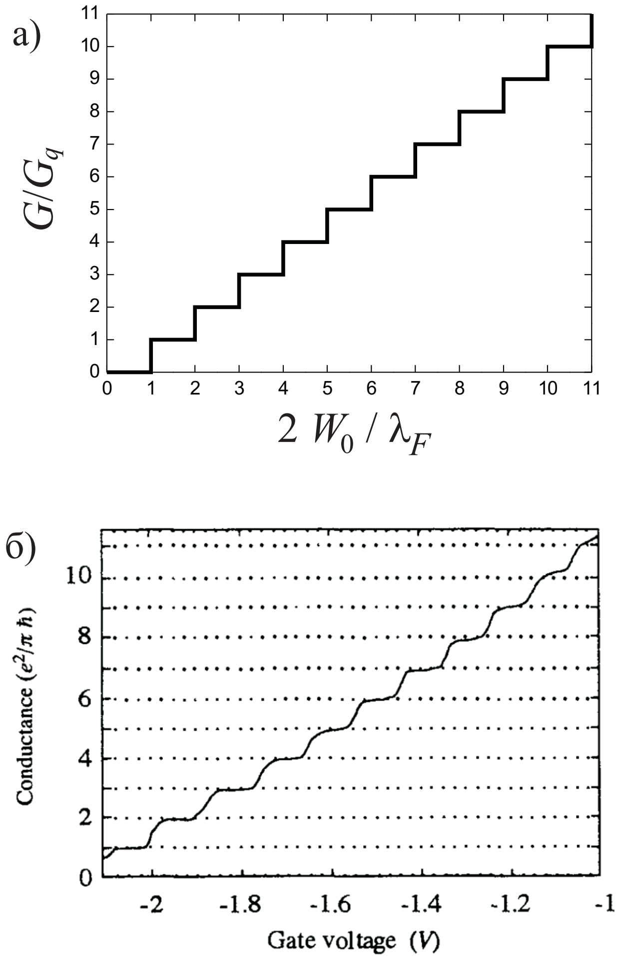

Рис. 11. Квантование кондактанса точечного контакта при изменении ширины сужения W_0 напряжением на затворе, (см. рис. 8). (а) Кондактанс как функция W_0. (б) Экспериментальные зависимости кондактанса сужения как функции напряжения на затворе V_g. С хорошей степенью точности можно считать, что W_0 — линейная функция V_g. (Первыми экспериментальными работами на эту тему были статьи [11, 12]. График (б) взят из работы [12])

Литература

1. Tinkham M. Introduction to superconductivity (second edition). — McGraw-Hill, 1996.

2. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику. — М.: Физматлит, 2002.

3. Datta S. Electronic transport in mesoscopic systems. — Cambridge University Press, 1995.

4. Шехтер Р. И. Нулевые аномалии сопротивления туннельного контакта, содержащего металлические включения в оксидном слое // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 63. — С. 1410–1416.
   Кулик И. О., Шехтер Р. И. Кинетические явления и эффекты дискретности заряда в гранулированных средах // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 68. — С. 623–640.

5. Grabert H., Devoret M. H. (editors). Single charge tunneling: Coulomb blockade phenomena in nanostructures, volume 294 of NATO ASI series B: Physics. — Plenum Press, 1992.

6. Бурштейн Э., Лундквист С. Туннельные явления в твёрдых телах. — М.: Мир, 1973.

7. Averin D. V., Likharev K. K. Single Electronics: Correlated Transfer of Single Electrons and Cooper Pairs in Systems of Small Tunnel Junctions // in B. L. Altshuler, P. A. Lee and R. A. Webb (editors), “Mesoscopic Phenomena in Solids”, Chapter 6. — Amsterdam, Elsevier, 1991.
   Likharev K. K. Single-electron devices and their applications // in Proceedings of the IEEE, volume 87, pages 606–632. IEEE, April 1999.

8. Blanter Ya. M., Büttiker M. Shot noise in mesocsopic conductors // Physics Reports. — 2000. — V. 336. — P. 1–166.

9. Глазман Л. И., Лесовик Г. Б., Хмельницкий Д. Е. и др. Безотражательный квантовый транспорт и фундаментальные ступени баллистического сопротивления в микросужениях // Письма в ЖЭТФ. — 1988. — Т. 48. — С. 218–220.

10. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. Ч. 1, гл. 8, § 6. — М.: УРСС, 2001.

11. Wharam D. A., Thornton T. J., Newbury R. et al. One-dimensional transport and the quantization of the ballistic resistance // J. Phys. C. — 1988. — V. 21. — P. L209–L214.

12. Wees B. J. van, Houten H. van, Beenakker C. W. J. et al. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. Lett. — 1988. — V. 60. — P. 848–850.