

О рассеянии электронов в точечном контакте одномерных проводников

© И.А. Рыжкин

Институт физики твердого тела Российской академии наук,
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: Ryzhkin@issp.ac.ru

(Поступила в Редакцию 24 ноября 1998 г.)

Рассмотрена матрица рассеяния точечного контакта одномерных когерентных проводников. Показано, что закон сохранения потока, симметрия относительно обращения времени и гипотеза о непрерывности волновой функции приводят к параметризации матрицы рассеяния одним действительным параметром, независимо от числа проводников, соединяемых контактом. Условие максимального прохождения фиксирует и этот последний параметр, однозначно определяя матрицу рассеяния. Условие сохранения потока при этом сводится к условию обращения в нуль суммы производных волновой функции по направлениям проводников. Обсуждаются возможные применения рассмотренной модели к экспериментально реализуемым цепям одномерных элементов.

Достижения нанотехнологии последних десятилетий привели к созданию полупроводниковых структур, поперечные размеры которых настолько малы, что из-за поперечного квантования в них существует только одна распространяющаяся мода. Благодаря отсутствию примесей длина свободного пробега электронов в таких системах может быть значительно больше продольных размеров. Распространение электронов в этих условиях является баллистическим, квантовым процессом и полностью описывается одномерным уравнением Шредингера, аналогичным уравнению распространения электромагнитных волн в одномодовых волноводах. Для многих задач (рассеяние на случайном потенциале, взаимодействие между электронами) возможность описывать движение электронов только продольной частью волновой функции, зависящей лишь от одномерной координаты, является решающим упрощением и позволяет получить их точное решение.

Следующими по сложности системами являются цепи одномерных проводников, содержащие разветвления или слияния чисто одномерных проводников. С теоретической точки зрения представляется интересным исследовать влияние неоднородности, вносимой контактами, на результат чисто одномерной задачи. Помимо этого возможны и экспериментальные реализации структур, содержащих разветвления или слияния, что объясняет их прикладное значение. В качестве примеров можно отметить различные модели, используемые для описания эффекта Ааронова–Бома [1], затухающих токов [2], распространение электронов в цепях квантовых проволок [3,4], модели для исследования неоднородной локализации методом ренорм-группы [5]. Главным вопросом, который возникает при переходе от одномерных моделей к их цепям, является вопрос о сшивке волновых функций в местах соединения, хотя во многих работах он просто опускается. Цель данной работы — обсуждение возможной формы граничных условий, налагаемых на продольные одномерные волновые функции электронов в точечных контактах, для частного класса контак-

тов, сохраняющих непрерывность одномерной волновой функции.

Наиболее общий и распространенный подход к данной проблеме был впервые сформулирован в работе [6] и заключается в введении матрицы рассеяния контакта, удовлетворяющей закону сохранения потока и симметрии обращения времени. Последнее означает, что комплексная матрица рассеяния должна быть унитарной, симметричной матрицей порядка $n \times n$ и может быть параметризована $n(n+1)/2$ действительными параметрами (n — число проводников, сходящихся в контакте). Значения этих параметров определяются конкретной реализацией контакта как волноводной системы, которая, как правило, известна. Такой подход является несомненно правильным, но излишне общим и малоинформативным. Действительно, используя данную параметризацию даже для простейшего нетривиального случая $n = 3$, мы получаем решения, зависящие неизвестным образом от шести действительных параметров. Поэтому приходится конкретизировать значения неизвестных параметров, используя дополнительные, нефизические соображения (действительность матричных элементов матрицы рассеяния [1,7], специальная малость некоторых матричных элементов [7,8] и так далее).

В данной работе для получения более определенной формы матрицы рассеяния используется гипотеза о непрерывности одномерной волновой функции. Обсудим ее смысл несколько подробнее. В действительности обоснованным требованием является непрерывность полной волновой функции. В одноканальных проводниках для областей удаленных от контакта полная волновая функция равна произведению продольной волновой функции и основной поперечной моды. Другие члены, содержащие высшие затухающие поперечные моды, становятся малыми при удалении от контакта. Однако в области, прилегающей к контакту, они могут быть значительными. В связи с этим совсем не очевидно, что граничное условие, заключающееся в непрерывности полной волновой функции, может быть перенесено на продольную часть

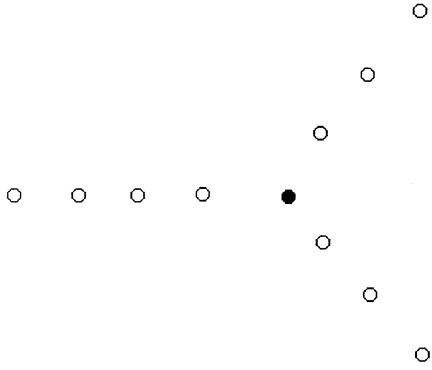


Рис. 1. Идеальная модель точечного контакта одномерных проводников. Каждому атому, в том числе и центральному, соответствует одна *s*-орбиталь. В непрерывной модели цепочки атомов заменяются узкими каналами с бесконечно высокими потенциальными стенками.

основной распространяющейся моды. К сожалению, последовательная оценка роли затухающих мод возможна только для конкретных контактов и только численными методами (см., например, [9]). С другой стороны, несомненно существует порядок предельных переходов (стремление к нулю поперечных размеров проводников, размеров контакта и стремление к бесконечности энергии частиц), при котором вкладом затухающих мод можно пренебречь. В этом случае из непрерывности полной волновой функции следует непрерывность ее продольной части, т. е. одномерной функции. Примером системы с непрерывной в контакте волновой функцией является модель, изображенная на рис. 1. Цепочки атомов имеют один общий узловой атом. Каждому атому соответствует одно электронное состояние (например, *s*-орбиталь). Очевидно, волновая функция в методе сильной связи для данной проблемы, определенная как

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_i e^{ik_i r} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (1)$$

где *r* — координаты атомов, будет непрерывна. Легко убедиться в том, что в такой модели нет никаких аналогов затухающих мод, что собственно обеспечивает непрерывность. Суммируя вышесказанное, мы утверждаем, что непрерывность одномерной волновой функции имеет место для определенного частного типа одномерных проводников и точечных контактов. В данной работе мы рассмотрим только этот тип моделей.

Следует отметить, что существует большая группа работ, в которых постулируется непрерывность волновой функции. Более того, непрерывность дополняется условием равенства нулю суммы производных по направлениям проводников

$$\sum_{i=1}^n \psi'_i = 0, \quad (2)$$

которое интерпретируется как условие сохранения потоков частиц. Совокупность этих условий называют условиями Гриффитса [10]. Легко видеть, однако, что условие

(2) не совпадает с условием сохранения потоков, которое в отличие от (2) билинейно по волновым функциям. Как будет показано далее, условия Гриффитса являются более жесткими и однозначно определяют матрицу рассеяния. Тогда как сохранение потоков, симметрия относительно обращения времени и непрерывность волновых функций оставляют один действительный параметр свободным.

Далее, в разд. 1, мы рассмотрим возможную параметризацию матрицы рассеяния нашей модели и покажем, что все элементы матрицы рассеяния определяются одним действительным параметром. Будет рассмотрено также соответствие наших результатов с граничными условиями Гриффитса, а также с известными решениями ряда квантовомеханических задач. В разд. 2 в качестве примера мы применим результаты для исследования формы осциллирующей контактанса кольца Ааронова–Бома (рис. 2). В заключение мы суммируем основные результаты работы.

1. Матрица рассеяния

Переходя к рассмотрению конкретной модели, введем одномерные координаты *x_i*, определенные на полупрямых [0, ∞). Все точки *x_i* = 0 отождествляются. Потенциальные энергии постоянны вдоль всей длины проводников, вплоть до самого контакта при *x* = 0, но могут испытывать разрыв в самом контакте. Представим волновые функции в проводниках в виде

$$\Psi_i(x) = \frac{O_i}{\sqrt{k_i}} \exp(ik_i x) + \frac{I_i}{\sqrt{k_i}} \exp(-ik_i x), \quad (3)$$

где *k_i* = √2*m*(*E* − *U_i*)/ħ² — волновой вектор в канале *i* (одинаковы для идентичных каналов), *E* — энергия, *U_i* — постоянные потенциальные энергии в проводниках, *x* — координата вдоль проводников, отсчитываемая от контакта. Подчеркнем, что согласно нашему предположению о несущественности затухающих мод, представление (3) справедливо во всем проводнике вплоть до самого контакта. Непрерывность волновых функций в контакте выражается уравнениями

$$\frac{O_i + I_i}{\sqrt{k_i}} = \frac{O_{i+1} + I_{i+1}}{\sqrt{k_{i+1}}} \quad (4)$$

для *i* = 1, 2 ... *n* − 1. Матрица рассеяния выражает рассеянные волны через падающие

$$\mathbf{O} = \hat{S} \cdot \mathbf{I}, \quad (5)$$

где *n* — компонентные вектора **O**, **I** составлены из рассеянных и падающих амплитуд. Сохранение потока и симметрия относительно обращения времени обычным способом приводят к унитарности и симметрии матрицы рассеяния. Для изучения следствия непрерывности волновой функции сначала рассмотрим случай одинаковых проводников, а затем и общий случай различных *U_i*.

Покажем, прежде всего, что матрица рассеяния имеет только два неравных элемента. Пусть имеется падающая волна единичной амплитуды только в первом проводнике. Тогда из уравнений (4), (5) имеем

$$S_{11} + 1 = S_{12} = S_{13} = \dots S_{1n}. \quad (6)$$

Аналогично, рассматривая второй проводник, приходим к соотношениям

$$S_{12} = S_{22} + 1 = S_{23} = \dots S_{2n}. \quad (7)$$

Первые равенства в (6), (7) дают $S_{11} = S_{22}$, а последующие приводят к равенству недиагональных элементов. Продолжая этот процесс, мы приходим к выводу, что матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} S_1 & S_2 & \dots & S_2 \\ S_2 & S_1 & \dots & S_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_2 & S_2 & \dots & S_1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где S_1, S_2 удовлетворяют уравнениям

$$S_1 + 1 = S_2, \quad (9)$$

$$S_1^* S_1 + (n-1) S_2^* S_2 = 1, \quad (10)$$

первое из которых есть следствие (6), (7), а второе — следствие условия унитарности. Заметим, что уравнения (9), (10) обеспечивают выполнение второго из условий унитарности, означающего ортогональность различных столбцов. Однако обратное утверждение несправедливо: два условия унитарности не обеспечивают выполнения уравнения (9). Из уравнений (9), (10) находим

$$S = \frac{2}{n} \cos \varphi, \quad \text{Re } S_1 \frac{2}{n} \cos^2 \varphi - 1, \quad \text{Im } S_1 = \frac{\sin 2\varphi}{n}, \quad (11)$$

где S, φ — амплитуда и фаза S_2 . Уравнения (11) показывают, что фаза недиагональных элементов, а все они одинаковы для идентичных каналов, является единственным свободным параметром. Значение φ определяется энергией и геометрическими свойствами контакта.

Естественно, возможно существование контактов с различными значениями параметра φ . Контакты с максимальным коэффициентом прохождения соответствуют значению $\varphi = 0$. В этом случае элементы матрицы рассеяния зависят только от числа соединяемых проводников: $S_1 = (2-n)/n, S_2 = 2/n$. К этому же результату можно прийти, предполагая выполнение линейного условия (2) вместо билинейного по амплитудам условия сохранения потока. Фактически это означает, что использование линейного условия (2) возможно только для контактов довольно частного вида: с максимальными проводящими свойствами.

Способ, использованный выше, применим и для случая каналов с неравной потенциальной энергией: все различие

заключается в неравных значениях волновых векторов. Анализ условий непрерывности и унитарности приводит в этом случае к параметризации матрицы рассеяния в следующей форме:

$$\begin{pmatrix} k_1 t - 1 & \sqrt{k_1 k_2} t & \dots & \sqrt{k_1 k_n} t \\ \sqrt{k_1 k_2} t & k_2 t - 1 & \dots & \sqrt{k_2 k_n} t \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{k_1 k_n} t & \sqrt{k_2 k_n} t & \dots & k_n t - 1 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где комплексный параметр t определяется уравнениями

$$|t| = \frac{2 \cos \varphi}{\sum_{i=1}^n k_i}, \quad \varphi = \arg(t). \quad (13)$$

Как и в предыдущем случае, свободному распространению соответствует значение $\varphi = 0$.

Заметим, что при $n = 3, \varphi = 0$ вероятность прохождения равна $4/9$, что совпадает с результатом для модели сильной связи [11] для энергий вблизи центра зоны в интервале $|E| \ll 6$ (где интеграл перекрытия, определяющий ширину одномерной зоны, выбран равным единице). Этот вывод легко может быть обобщен для производных n . Действительно, для коэффициентов прохождения и отражения t, r имеем систему уравнений

$$1 + r = t, \quad (14)$$

$$(E - E_0)t = \exp(-ik) + r \exp(ik) + t(n-1) \exp(ik), \quad (15)$$

где первое уравнение является условием непрерывности, второе — уравнением сильной связи для узлового атома; межатомное расстояние принято за единицу. Из этой системы имеем

$$t = \frac{-2i \sin k}{(2-n) \cos k - in \sin k}, \quad (16)$$

где мы использовали выражение $E - E_0 = 2 \cos k$. Отсюда следует, что при $|E| \ll 2n/|2-n|$ вероятность прохождения совпадает с результатом (11) при $\varphi = 0$.

Формула (11) при $n = 2, \varphi = 0$ соответствует свободному одномерному распространению. Формулы (12), (13) при $n = 2, \varphi = 0$ описывают рассеяние одномерной частицы на ступеньке (совпадает с [12]). Формула (11) при $n = 2, \varphi = \text{arctg}(\Omega/k)$ описывает рассеяние на одномерном δ -функциональном потенциале: $U(x) = \hbar^2 \Omega \delta(x)/m$ [13].

Отметим также и некоторые необычные свойства полученных результатов, которые являются следствием одномерности проводников и точечности контакта. Прежде всего, при стремлении $n \rightarrow \infty$ вероятность отражения от контакта стремится к единице: чем больше проводников подключено к контакту, тем вероятнее отражение от него! Другим парадоксальным свойством является независимость матрицы рассеяния от углов между проводниками, что является прямым следствием предположения о непрерывности одномерных волновых

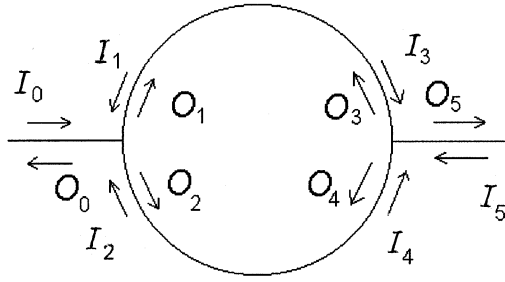


Рис. 2. Кольцо Ааронова–Бома с двумя контактами (разветвителями). Стрелками показаны волны, распространяющиеся в элементах цепи. Длина полуокружности l , магнитный поток через кольцо Φ .

функций. При этом численные расчеты для частного случая T -образного (явно несимметричного) контакта прямо указывают на независимость коэффициентов прохождения от направления в пределе $ka \ll 1$ [9], что можно рассматривать как подтверждение непрерывности волновой функции в узле в данном пределе. Отметим также, что в этом пределе численные результаты дают $|r| = 1, t = 0$, что соответствует формулам (11) с $n = 3$ и $\varphi = \pi/2$. Последнее означает, что условия Гриффитса не выполняются в данном пределе. Независимость матрицы рассеяния от углов для контакта из цепочек атомов с s -орбиталями очевидна из самого способа решения.

2. Осцилляции Ааронова–Бома

Рассмотрим систему проводников, изображенную на рис. 2 и обычно используемую для объяснения происхождения эффекта Ааронова–Бома. В обычном объяснении предполагается, что волновая функция на выходе ψ_5 пропорциональна сумме волновых функций перед входением в узел, т.е. $\psi_3 + \psi_4$. Истоки этого ошибочного предположения заключаются в некорректном использовании фейнмановского правила сложения амплитуд, соответствующих различным траекториям (используются только две траектории, по верхнему и нижнему рукаву). На самом же деле следует использовать все бесконечное число топологически различных траекторий с различными числами обходов вокруг кольца. Эффективно это может быть сделано путем записи уравнений для амплитуд волн в проводниках и их последующего решения. Последнее позволяет найти коэффициент прохождения электронов через кольцо с захваченным магнитным потоком Φ , и затем, используя формулу Ландауэра, кондактанс и его зависимость от магнитного потока.

Используя обозначения рис. 2 и формулу типа (8), получаем следующую систему уравнений для амплитуд:

$$\begin{pmatrix} O_0 \\ O_1 \\ O_2 \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} r & t & t \\ t & r & t \\ t & t & r \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} I_0 \\ I_1 \\ I_2 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$\begin{pmatrix} O_3 \\ O_4 \\ O_5 \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} r & t & t \\ t & r & t \\ t & t & r \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} I_3 \\ I_4 \\ I_5 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 & \exp(ikl - i\alpha) \\ \exp(ikl + i\alpha) & 0 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} O_1 \\ O_3 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

$$\begin{pmatrix} I_2 \\ I_4 \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 & \exp(ikl + i\alpha) \\ \exp(ikl - i\alpha) & 0 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} O_2 \\ O_4 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Здесь r, t — комплексные коэффициенты отражения, прохождения для разветвления, которое предполагается симметричным по рукавам. В уравнениях (19), (20) мы рассматриваем рукава кольца как баллистические проводники длиной l (kl — набег фазы по полукольцу, $\alpha = (\Phi/\Phi_0)\pi$, Φ — магнитный поток, захваченный кольцом, $\Phi_0 = hc/e$ — квант магнитного потока).

Выбрав амплитуду волны, падающей слева, за единицу ($I_0 = 1$), а волны, падающей справа, за нуль ($I_5 = 0$), мы приходим к неоднородной системе уравнений, которую легко решить. При этом амплитуда прошедшей волны $O_5 = t(I_3 + I_4)$ определяет комплексный коэффициент прохождения f

$$f = 2t^2 \cos \alpha \frac{e^{-ikl} - e^{ikl}(t-r)^2}{e^{-2ikl} + e^{2ikl}(t-r)^2(t+r)^2 - 2r^2 - 2t^2 \cos 2\alpha}. \quad (21)$$

Учитывая, что кондактанс системы пропорционален $|f|^2$, можно объяснить его зависимость от магнитного поля (от α). Из формулы (21) видно, что множитель $\cos \alpha$ перед дробью приводит к обычным осцилляциям Ааронова–Бома с периодом Φ_0 (зависимость типа $1 + \cos 2\alpha$). Квадрат модуля дроби из (21) дает дополнительную модуляцию кондактанса с магнитным полем, благодаря последнему члену в знаменателе. Именно эта последняя зависимость и является следствием учета траекторий с ненулевыми числами обходов вокруг кольца.

До сих пор мы использовали только симметрию разветвления, но не использовали непрерывности волновой функции. Непрерывность может быть выражена формулой (8): $t - r = 1$. Подставляя это в (21), получим для коэффициента прохождения

$$f = \frac{-4it^2 \cos \alpha \sin kl}{e^{-2ikl} + e^{2ikl}(2t-1)^2 - 2(t-1)^2 - 2t^2 \cos 2\alpha}. \quad (22)$$

Из (22) видно, что f и, следовательно, кондактанс, в этом случае стремятся к нулю при $kl \rightarrow 0$. Последнее имеет место вблизи порога, когда основная мода из затухающей превратилась в распространяющуюся. Важно подчеркнуть, что обращение в нуль кондактанса на пороге возникновения первого разрешенного канала имеет место только при $t - r = 1$, т.е. непрерывности одномерной волновой функции. В противном случае, конечный кондактанс системы возникает скачком. Тем самым это различное поведение кондактанса на пороге может быть использовано для экспериментальной проверки гипотезы о непрерывности волновой функции.

В заключение перечислим основные результаты работы. Матрица рассеяния точечного контакта одномерных проводников параметризуется единственным действительным параметром φ . Конкретные значения этого параметра определяются как геометрией контакта, так и энергией падающих частиц. Максимально проводящим контактам соответствует $\varphi = 0$. Только в этом случае вместо билинейного условия сохранения потока можно использовать линейное условие (2), т.е. условие Гриффитса. При использовании правильных граничных условий в местах соединения проводников осцилляции Ааронова–Бома имеют сложную зависимость от магнитного поля: помимо основной гармоники с периодом Φ_0 имеются и кратные гармоники. Зависимость контактного сопротивления от энергии на пороге возникновения первого проводящего канала может быть использована для проверки гипотезы о непрерывности волновой функции.

Автор выражает благодарность В.М. Эдельштейну за плодотворные обсуждения и обратившему внимание автора на работу [9].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16640).

Список литературы

- [1] Y. Gefen, Y. Imry, M.Ya. Azbel. Phys. Rev. Lett. **52**, 139 (1984).
- [2] N. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer. Phys. Lett. **96A**, 365 (1983).
- [3] Y. Avishai, J.M. Luck. Phys. Rev. **B45**, 1074 (1992).
- [4] M. Kohmoto. Preprint. Technical Report of ISSP. Tokyo, Japan (1993).
- [5] P.M. Bell, A. MacKinnon. Phys. Rev. **B51**, 9544 (1995).
- [6] B. Shapiro. Phys. Rev. Lett. **50**, 747 (1983).
- [7] M. Buttiker, Y. Imry, M.Ya. Azbel. Phys. Rev. **A30**, 1983 (1984).
- [8] D. Takai, K. Ohta. Phys. Rev. **B48**, 14 318 (1993)
- [9] J.L. Bohn. Phys. Rev. **B56**, 4132 (1997).
- [10] S. Griffith. Trans. Faraday Soc. **49**, 345 (1953); **49**, 650 (1953).
- [11] J.L. D'Amato, H.M. Pastawski, J.F. Weisz. Phys. Rev. **B39**, 3554 (1989).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Изд-во физ.-мат. лит-ры, М. (1963).
- [13] З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. Мир, М. (1974).