

# Wprowadzenie do teorii transportu elektronowego w układach nanoskopowych

Paweł Wójcik Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

# Plan wykładu

Wstęp do teorii transportu elektronowego w układach nanoskopowych

- 1. Transport balistyczny i dyfuzyjny
- 2. Formuła Landauera
- 3. Układy wieloterminalowe formuła Landauera-Büttikera
- 4. Kwantyzacja konduktancji w kwantowym kontakcie punktowym (QPC)
- 5. Eksperymenty QPC, SGM, i inne

#### Transport dyfuzyjny vs. transport balistyczny

Rozważmy ruch elektronu pod wpływem działania stałego pola elektrycznego  $\mathcal{E}$ .

$$m^* \frac{d\mathbf{V}_q}{dt} = q\mathbf{\mathcal{E}} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{V}_q(t) = \frac{q\mathbf{\mathcal{E}}}{m^*}t$$



Prędkość unoszenia (dryftu) dla nośnika o ładunku q

$$\langle \mathbf{V}_q \rangle = \frac{q \boldsymbol{\mathcal{E}} \tau}{m^*} = \pm \mu_q \boldsymbol{\mathcal{E}}$$

A zatem

$$\mathbf{V}_{drf|q} = \pm \mu_q \boldsymbol{\mathcal{E}}$$
$$\mu_q = \left| \frac{q\tau}{m^*} \right|$$

Prąd unoszenia

$$\mathbf{j}_{drf|q} = qn_q \mathbf{V}_q = \pm qn_q \mu_q \boldsymbol{\mathcal{E}}$$

Prędkość unoszenia jest wprost proporcjonalna do przyłożonego pola elektrycznego, zaś współczynnikiem proporcjonalności jest wielkość zwana **ruchliwością (mobilnością) nośników** 

	elektrony ( $cm^2/Vs$ )	dziury ( <i>cm<sup>2</sup>/Vs</i> )
Si	1350	480
GaAs	8500	400
Ge	3900	1900

#### Transport dyfuzyjny vs. transport balistyczny

Co się stanie gdy rozmiar układu będzie mniejszy od średniej drogi pomiędzy rozproszeniami



Transport dyfuzyjny Ruchliwość jako wielkość fizyczna ma uzasadnienie jedynie w przypadku transportu dyfuzyjnego

Obszar transportu kwazi-klasycznego (kwazi-balistycznego), obszar przejściowy.

Zakres transporty zależy od skali długości:

- długość koherencji  $\xi$
- średnia długość rozpraszania  $\lambda$



Transport balistyczny

W przypadku transportu kwantowego wielkością, która determinuje transport jest współczynnik transmisji

# Transport balistyczny – czyli co się stanie gdy długość układu staje się mniejsza niż długość rozpraszania

Pytania na które należy odpowiedzieć:

- 1. Czy taki układ wykazuje opór?
- 2. Jeśli tak, jakie jest pochodzenie tego oporu?
- 3. Gdzie odkłada się spadek napięcia związany z istnieniem oporu, aby spełnione były prawa Kirchoffa ?

Intuicyjnie, transport powinien być określony przez **współczynnik transmisji** – czyli prawdopodobieństwo tego, że elektron przejdzie z kontaktu 1 do kontaktu 2, generując prąd.



Transport balistyczny – czyli co się stanie gdy długość układu staje się mniejsza niż długość rozpraszania

Pytania na które należy odpowiedzieć:



### Struktura elektronowa – uproszczony model 2D

#### Uproszczony model nanodrutu



Potencjał uwięzienia:

- 1. w kierunku osi x cząstka swobodna,
- 2. w kierunku osi y nieskończona studnia potencjału lub oscylator harmoniczny

$$\begin{array}{ccc}
\mathsf{V} & \mathsf{V}_{conf} \\
\mathfrak{m} &= 0 \\
\mathsf{n=2} \\
\mathsf{n=1} \\
\mathsf{m=1} \\
\mathsf{m} &\mathsf{m} \\
\mathsf{m=1} \\
\mathsf{m=1} \\
\mathsf{m} \\$$

#### Struktura elektronowa – uproszczony model 2D

#### Uproszczony model nanodrutu



$$\psi_n(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}}\chi_n(y)e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{2}{W}}\sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right)e^{ikx}$$

Stąd energie

$$E_n(k) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* W^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

k



Ważne założenie - kontakty "bezodbiciowe":

- Elektrony wypływające z przewodnika do kontaktu nie ulegają odbiciu – dobre przybliżenie
- Elektrony wypływające z kontaktu do przewodnika również nie ulegają odbiciu – słabe przybliżenie
- Elektrony wypływające z kontaktu 1 obsadzają stany +k, a zatem ich kwazi-poziom Fermiego jest równy μ<sub>1</sub>
- Elektrony wypływające z kontaktu 2 obsadzają stany
   -k a zatem ich kwazi-poziom Fermiego jest równy μ<sub>2</sub>
- Przy niezerowym napięciu prąd niesiony jest przez stany +k pomiędzy μ<sub>1</sub> oraz μ<sub>2</sub>



Dno pasma przewodnictwa

 $\varepsilon_N = E(N, k = 0)$ 

Liczba pasm o energii E

$$M(E) = \sum_{N} \theta(E - \varepsilon_N)$$

Prąd w kierunku osi x od jednego pasma

$$I^{+} = \frac{e}{L} \sum_{k} Vf^{+}(E) = \frac{e}{L} \sum_{k} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^{+}(E)$$

Zamieniając sumowanie po k na całkowanie

$$\sum_k \to 2 \times \frac{L}{2\pi} \int dk$$



Stąd, prąd
$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon}^{\infty} f^+(E) dE$$

Uwzględniając wszystkie pasma

 $I^{+} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} f^{+}(E)M(E)dE$ 

Prąd jest sumą prądów płynących w lewo i prawo

$$I = I^{+} - I^{-} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} (f^{+} - f^{-})M(E)dE$$

Zakładając stałą liczbę pasm w zakresie energii oraz współczynnik transmisjiT=1

$$I = \frac{2e^2}{h}M\frac{\mu_1 - \mu_2}{e}$$



Oszacowanie liczby modów *M.* Zakładając uwięzienie w postaci nieskończonej studni

$$k_{y,n} = \frac{n\pi}{W}$$

Przy założeniu parabolicznej relacji dyspersji

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Ponieważ

$$M = Int\left[\frac{k_F W}{\pi}\right] = Int\left[\frac{2W}{\lambda_F}\right]$$

 $\lambda_F$  w metalach rzędu 1-2 nm w półprzewodnikach ok. 30 nm



Konduktancja

$$G_c = \frac{2e^2}{h}M$$

Rezystancja

$$G_c^{-1} = \frac{(\mu_1 - \mu_2)/e}{I} = \frac{h}{2e^2M} = \frac{12.9k\Omega}{M}$$

Kwant konduktancji

$$G_0 = \frac{2e^2}{h}$$

# Kwantyzacja konduktancji

Kwantowy kontakt punktowy, QPC



B. J. van wees, H. van Houten, C. w. J. Beenakker, J. G Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988)



Policzmy całkowity prąd przepływający przez dwie płaszczyzny (i) i (ii).



Policzmy całkowity prąd przepływający przez dwie płaszczyzny (i) i (ii).





Przypadek dla temperatury T=0, przy stałej liczbie modów poprzecznych oraz współczynniku transmisji T, który nie zależy od energii.

FORMUŁA LANDAUERA  $G = \frac{2e^2}{MT}$ Rezystancja kontaktów Rezystancja centrum  $G^{-1} = \frac{h}{2e^2M} \frac{1}{T} = \frac{h}{2e^2M} + \frac{h}{2e^2M} \frac{1-T}{T} = G_C^{-1} + G_{scat}^{-1}$ rozpraszania

#### Formuła Landauera dla niezerowych T i napięcia

Formuła Landauera zakłada, że

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) T(E) (f_1(E, \mu_1) - f_2(E, \mu_2)) dE$$

Załóżmy, że temperatura T jest mała oraz do układu przyłożono niewielkie napięcie  $\mu_1 - \mu_2$ . Rozwijając  $f_1$  w szereg Taylora wokół  $\mu_2$ 

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E)T(E) \left( f_1(E,\mu_2) + \frac{\partial f_1}{\partial \mu} d\mu - f_2(E,\mu_2) \right) dE$$
$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E)T(E) \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) (\mu_1 - \mu_2) dE$$
$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E)T(E) \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE$$
Przybliżenie liniowej odpowiedzi

Dla małych temperatur dąży do delty Diraca

$$G = \frac{2e^2}{h}M(E_F)T(E_F)$$

# Formuła Landauera a prawo Ohma

Dla układu makroskopowego (wiele pasm) wiemy, że zachodzi prawo Ohma



A zatem w granicy dużych rozmiarów próbki (dużej ilości centrów rozpraszania) powinniśmy z formuły Landauera móc otrzymać prawo Ohma.

Dla uproszczenia rozważmy dwa centra rozpraszania

#### Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia przez dwa centra ?



$$T_{12} = T_1 T_2$$

# Formuła Landauera a prawo Ohma

Dla układu makroskopowego (wiele pasm) wiemy, że zachodzi prawo Ohma



A zatem w granicy dużych rozmiarów próbki (dużej ilości centrów rozpraszania) powinniśmy z formuły Landauera móc otrzymać prawo Ohma.

Dla uproszczenia rozważmy dwa centra rozpraszania



#### Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia przez dwa centra?



# Formuła Landauera a prawo Ohma

Dla układu makroskopowego (wiele pasm) wiemy, że zachodzi prawo Ohma



A zatem w granicy dużych rozmiarów próbki (dużej ilości centrów rozpraszania) powinniśmy z formuły Landauera móc otrzymać prawo Ohma.

Dla uproszczenia rozważmy dwa centra rozpraszania

Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia przez dwa centra ?









Sumowanie daje szereg geometryczny

$$T_{12} = T_1 T_2 + T_1 T_2 R_1 R_2 + T_1 T_2 R_1^2 R_2^2 + \ldots = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2}$$

Samo *T* nie jest wielkością addytywną, ale wielkością taką jest

$$\frac{1 - T_{12}}{T_{12}} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}$$

Stąd dla N centrów rozpraszania

$$\frac{1-T(N)}{T(N)} = N\frac{1-T}{T}$$

#### Formuła Landauera a prawo Ohma

A zatem współczynnik transmisji dla N centrów rozpraszania

$$T(N) = \frac{T}{N(1-T) + T}$$

Zakładając stałą gęstość linową centów rozpraszania

Długość charakterystyczna odpowiadającej średniej długości rozpraszania

/

$$T(N) = \frac{T}{n_{scat}L(1-T) + T} = \frac{\frac{T}{n_{scat}(1-T)}}{L + \frac{T}{n_{scat}(1-T)}} = \frac{L_0}{L + L_0}$$

Ponieważ liczba modów

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{k_F W}{\pi} T = \frac{2e^2}{h} \frac{k_F W}{\pi} \frac{L_0}{L + L_0}$$

Ponieważ zazwyczaj  $L \gg L_0$ 

$$G = rac{2e^2}{h} rac{k_F L_0}{\pi} rac{W}{L} = \sigma rac{W}{L}$$
 Prawo Ohma

#### Formuła Landauera – mody poprzeczne

Do tej pory wszędzie zakładaliśmy, że liczba modów poprzecznych w każdym kanale jest taka sama (kanały są takie same) i nie ma rozpraszania między poszczególnymi modami poprzecznymi

$$\bar{T}_{pq} = M(E)T_{pq}$$

Fizyka samego kontaktu jest jednak znacznie bardziej skomplikowana. Każdy z nich składa się z wielu modów (stanów) poprzecznych, pomiędzy którymi może zachodzić transport, tzn. elektron z leadu 1 w stanie 1 może odbić się do leadu 1 w stanie 2 (przejście międzypasmowe), zmieniając swój wektor falowy (energia stała).



#### Formuła Landauera – mody poprzeczne

Uproszczony model leadu



Równanie Schrödingera

 $T_{pq}^{nm}$  - prawdopodobieństwo, że elektron z kontaktu q i stanu m przejdzie do kontaktu p i modu n.

stąd

$$\bar{T}_{pq} = \sum_{m \in q} \sum_{n \in p} T_{pq}^{nm}$$

#### Formuła Landauera – mody poprzeczne



Powinniśmy rozpatrzeć, że elektron wchodzi do układu z każdego możliwego modu w lewym kontakcie. Ale dla tego szczególnego przypadku , w którym elektron wchodzi do układu z lewego kontaktu z n=1

$$R_{11}^{n1} = |r_n|^2$$
$$T_{21}^{n1} = |t_n|^2$$

#### Macierz rozpraszania

Macierz rozpraszania - macierz łącząca amplitudy fal wychodzących z układu z amplitudami fal wchodzącymi do układu.



W zapisie macierzowym

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

Każda amplituda wyjściowa jest wynikiem transmisji do tego modu elektronów z wszystkich możliwych modów wchodzących do układu.

$$T^{nm} = |s_{nm}|^2$$

Współczynnik transmisji z modu m do modu n. Oba mody mogą znajdować się w różnych kontaktach.

#### Własności macierzy rozpraszania

W zapisie macierzowym

$$\begin{pmatrix} b_{1} \\ b_{2} \\ b_{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1} \\ a_{2} \\ a_{3} \end{pmatrix}$$

$$Wektor amplitud Wektor amplitud wchodzących Macierz rozpraszania$$

Z zasady zachowania prądu suma gęstości prądu wchodzącego musi być równa gęstości prądu wychodzącego

$$\sum_{m}|a_{m}|^{2}=\sum_{m}|b_{m}|^{2}$$
 $a^{\dagger}a=b^{\dagger}b$ 
 $a^{\dagger}a=[Sa]^{\dagger}Sa=a^{\dagger}S^{\dagger}Sa$ 
 $S^{\dagger}S=1=SS^{\dagger}$  Matrix

Macierz rozpraszania jest macierzą unitarną

#### Własności macierzy rozpraszania

Z unitarności macierzy rozpraszania

$$S^{\dagger}S = 1 = SS^{\dagger} \longrightarrow \sum_{m} |s_{mn}|^2 = 1 = \sum_{m} |s_{nm}|^2$$

Pierwsza z równości mówi o tym, że suma prawdopodobieństw transmisji do jakiegokolwiek modu dla elektronu wstrzykniętego z modu n jest równe 1. Druga równość nie jest już tak oczywista i mówi, że suma po wszystkich modach wejściowych zakładając jeden mod wyjściowy, który obserwujemy również jest równa 1.

Wracając do wcześniejszych oznaczeń

$$\sum_{q} \bar{T}_{qp} = \sum_{n \in p} \sum_{m} T_{qp}^{mn} = \sum_{n \in p} 1 = M_P$$
$$\sum_{q} \bar{T}_{pq} = \sum_{n \in p} \sum_{m} T_{qp}^{nm} = \sum_{n \in p} 1 = M_P$$



#### Własności macierzy rozpraszania

Dla układu dwuterminalowego

$$\begin{array}{lll} \bar{T}_{pq}(E) & q=1 & q=2 \\ p=1 & xx & xx & SUM=M_1 \\ p=2 & xx & xx & SUM=M_2 \\ SUM= & M_1 & M_2 \end{array}$$

A to oznacza, że

$$\bar{T}_{11} + \bar{T}_{12} = \bar{T}_{11} + \bar{T}_{21}$$

$$\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21}$$

# Formuła Büttikera

Układ wieloterminalowy - w roku 1985 Buttiker uogólnił formułę Landauera na układy wieloterminalowe.





Schematyczny rozkład prądów od poszczególnych kontaktów oznaczone kolorami odpowiadającymi kolorom kontaktów. Komputerowe symulacje urządzeń nano- i mezoskopowych

#### Formuła Büttikera

W roku 1985 Büttiker uogólnił formułę Landauera na układy wieloterminalowe



Konwencja zapisu w teorii transportu

$$T_{pq} = T_{p \leftarrow q}$$

# Formuła Büttikera

Otrzymujemy

$$I_1 = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) \left[ (T_{21}(E) + T_{31}(E)) f_1(E, \mu_1) - T_{12}(E) f_2(E, \mu_2) - T_{13}(E) f_3(E, \mu_3) \right] dE$$

Wprowadzając oznaczenie

$$\bar{T}_{pq} = M(E)T_{pq}$$

i uogólniając na układ n-terminalowy

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \bar{T}_{qp}(E) f_p(E, \mu_p) - \bar{T}_{pq}(E) f_q(E, \mu_q) \right] dE$$

Ponieważ potencjał w kontakcie  $\mu/e$ , to dla *T=0 K* 

$$I_p = \sum_{q} \left[ G_{qp} V_p - G_{pq} V_q \right]$$
$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}$$

gdzie

Ponieważ

$$[G_{pq}]_{+B} = [G_{qp}]_{-B}$$
$$I_p = \sum_q G_{pq} [V_p - V_q]$$

Mamy

## Formuła Büttikera

Dla układu trójterminalowego

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{bmatrix}$$

Ponieważ zachodzi prawo Kirchhoffa , a potencjały mierzy względem jednego z kontaktów, tzn. możemy założyć, że

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \end{bmatrix}$$

Odwracając to równanie

$$\left[\begin{array}{c} V_1\\ V_2 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc} R_{11} & R_{12}\\ R_{21} & R_{22} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} I_1\\ I_2 \end{array}\right]$$

Macierz rezystancji

$$R = \begin{bmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} \end{bmatrix}^{-1}$$

### **KWANT - laboratorium**



ora/doc/

https://kwant-project.org/doc/

#### Quantum transport simulations made easy





20

40



C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal, *Kwant: a software package for quantum transport*, <u>New</u> <u>J. Phys. 16, 063065 (2014)</u>.







SGM – scaning gate microscopy – przykład



no SO

Eksperyment





PRB, 90, 035301 (2014)

Dziękuję za uwagę !!!

Dziękuję za uwagę !!! Jutro przejdziemy do praktyki