Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского
Серия «Физико-математические науки». Том 25 (64). 2012 г. № 1. С. 26-33

УДК 530.1

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ОДНОМЕРНОЙ КВАНТОВОЙ НИТИ

Ахрамович Л.Н., Гадиев Д.Р., Гопман А.Б.

Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: aXleo@yandex.ru

На основании формализма трансфер-матрицы разработан алгебраический метод решения задач рассеяния электронов в одномерных квантовых нитях. Этим методом найден точный результат задачи квантового рассеяния электронов в одномерном одноканальном проводнике. Установлен характер сопротивления квантовой нити в зависимости от числа рассеивателей. Асимптотический предел точного решения хорошо согласуется с известными результатами. Показано, что и в однородной квантовой нити возникает явление локализации электронов, приводящее к экспоненциальной зависимости сопротивления одномерного квантового проводника от его длины.
Ключевые слова: рассеяние, квантовая нить, сопротивление, локализация.

ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии создания элементов электронных приборов достигли уровня, когда из-за их малых размеров требуется учитывать квантовые свойства носителей зарядов. При поперечных размерах проводника, сравнимых с длиной волны электрона, в электронной плотности возникают уровни пространственного квантования, что приводит к скачкообразному поведению проводимости [1]. Это объясняется ограничением поперечных движений электронов относительно оси x проводника, и, как следствие, квантованием энергетических уровней $E = \dfrac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m\sigma} + \dfrac{p_x^2}{2m}$, где σ – площадь поперечного сечения проводника, m – масса электрона, p_x – импульс электрона вдоль оси проводника.

Скачкообразность связывают с количеством n каналов проводимости, которые дают вклад в транспорт электронов. В пределе $\sigma \to 0$ открытым оказывается только один канал проводимости. Такой одноканальный квантовый проводник исследуется в настоящей работе.

Считается, что одним из первых вопросы электронного транспорта в проводниках малых размеров исследовал Ландауэр [2]. Он впервые определил сопротивление проводника малых размеров, в зависимости от квантовых коэффициентов прохождения d и отражения r электронов: $R = \dfrac{2\pi\hbar}{e^2}\dfrac{r}{d}$.

Вопросы транспорта электрического заряда в проводниках или полупроводниках являются актуальными. В современных полупроводниковых приборах электроны проводимости представляют собой газ в пространстве пониженной размерности: одномерный или двумерный электронный газ.

Изучение токовых состояний при распространении электронов в средах показывает, что при низких температурах, когда неупругие процессы рассеяния энергии при слабых колебаниях решетки становятся несущественными, определяющую роль в рассеянии будут играть квантовые процессы, связанные с волновыми свойствами электронов. При многократном отражении электронных волн возникают интерференционные эффекты, приводящие к экспоненциальной зависимости сопротивлений одномерных проводников от их длины, что связано с локализацией электронных состояний [3, 4]. В работе [5] высказано предположение о том, электронные состояния в одномерных и двумерных проводниках локализованы и металлическая проводимость отсутствует.

В настоящей работе исследуется сопротивление одномерного проводника, состоящего из упорядоченной цепочки атомов. Рассеяние и интерференция электрона на атомных потенциалах приводят к таким зависимостям коэффициентов отражения r и прохождения t от параметров задачи (энергии электрона, периода и высоты потенциалов), которые не сильно чувствительны к форме потенциала, что и явилось основанием выбора такой модели, в которой потенциалы атомов в линейной упорядоченной цепочке моделируются δ-функциями.

Рассеяние при электронном транспорте упругое, взаимодействие между электронами отсутствует, что позволяет существенно упростить рассмотрение решением одномерного уравнения Шредингера.

1. МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ

Удобным средством вычисления коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии электрона на более чем двух атомных потенциалах является метод трансфер-матрицы. В его основе лежит линейное преобразование, позволяющее выразить коэффициенты рассеяния через параметры рассеивающих центров, создаваемых атомными потенциалами. Метод позволяет определить волновые функции уравнения Шредингера в трансляционно-инвариантной форме, когда решения не зависят от координат атомов, а определяются исключительно величиной атомных потенциалов Ω и межатомным расстоянием a.

Уравнение Шредингера для цепочки из N одинаковых атомов с мощностью потенциалов Ω

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\Omega\sum_{n=1}^{N}\delta(x-an)\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

может быть эффективно проинтегрировано, если в качестве решений рассматривать плоские волны $exp(\pm ikx)$, где $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$, Тогда волновая функция определяется с точностью до $2N$ констант интегрирования, которые связаны между собой линейными уравнениями, вытекающими из условий сшивки волновых функций в точках $x_n=na$ из диапазона $1\le n\le N$.

Исключением «лишних» констант интегрирования, решение задачи сводится к рассмотрению линейного уравнения для векторов, определенных на двумерном пространстве состояний свободных волн, распространяющихся в разных направлениях слева и справа от атомной цепочки

$$\psi_L = \begin{pmatrix} C_1 e^{i\varphi} \\ C_2 e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \ \psi_R = \begin{pmatrix} C_3 e^{iN\varphi} \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $\varphi = ka$ – безразмерный параметр задачи. Таким образом, для уравнения Шредингера получаем представление группы линейных преобразований в двумерном комплексном пространстве амплитуд рассеяния:

$$\psi_L = \mathrm{T}\psi_R, \tag{3}$$

где трансфер-матрица T записывается в форме

$$\mathrm{T} = \underbrace{(\mathrm{AB})(\mathrm{AB})...(\mathrm{AB})}_{N}\mathrm{B}^{-1} = (\mathrm{AB})^N \mathrm{B}^{-1}, \tag{4}$$

в которой она выражается через матрицу трансформации решения на отдельном атомном потенциале

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 1+i\chi & i\chi \\ -i\chi & 1-i\chi \end{pmatrix}, \tag{5}$$

и матрицу переноса между атомами цепочки

$$\mathrm{B} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где $\chi = \sqrt{\dfrac{m\Omega^2}{2\hbar^2 E}}$ один из параметров задачи, характеризующий перенормированную мощность потенциала рассеяния, отнесенную к энергии электрона.

Такое представление трансфер-матрицы в факторизованном виде позволяет интерпретировать процессы преобразования волновой функции электрона при туннелировании через систему потенциалов любого вида и дает алгоритм построения трансфер-матрицы для любого количества потенциалов.

2. АЛГЕБРА ОПЕРАТОРОВ ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ

Решению задачи – нахождению матричных элементов трансфер-матрицы в значительной степени помогает знание алгебры операторов (5) и (6). Исследуем алгебраические свойства этих операторов.

Матрица A представима в показательной форме. Для этого заметим, что записанная в форме

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i\chi \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

она выражается через единичную матрицу $\mathrm{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и матрицу $\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$, квадрат и детерминант которой равны нулю: $\Lambda^2 = 0$, $\det \Lambda = 0$. В то же время, она выражается через матрицы Паули $\Lambda = \sigma_z + i\sigma_y$ и может рассматриваться как понижающий оператор на собственных векторах оператора σ_x:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \; \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Теперь представление матрицы элементарных трансформаций $\mathrm{A} = \mathrm{I} + i\chi\Lambda$ в показательной форме с учетом перечисленных выше свойств не вызывает особых затруднений, поскольку разложение экспоненты в ряд Тейлора будет содержать оператор Λ не выше первого порядка. Добавляя слагаемые, тождественно равные нулю, получим формальный экспоненциальный ряд:

$$\mathrm{A} = \mathrm{I} + i\chi\Lambda = \mathrm{I} + i\chi\Lambda + \frac{(i\chi\Lambda)^2}{2!} + \frac{(i\chi\Lambda)^3}{3!} + \ldots = \exp\{i\chi\Lambda\}. \tag{8}$$

Перейдем к рассмотрению матрицы переноса (6). На основании формул Эйлера для экспонент с мнимым показателем, имеем $\mathrm{B} = \mathrm{I}\,cos\,\varphi - i\sigma_z\,sin\,\varphi$.

Учитывая, что квадрат матрицы Паули равен единице ($\sigma_z^2 = 1$) и, записывая функции синуса и косинуса в виде рядов Тейлора, приходим к показательной форме матрицы B:

$$\mathrm{B} = exp\{i\varphi\sigma_z\}. \tag{9}$$

Теперь матрицу $\mathrm{Q} = \mathrm{AB}$ можно записать в экспоненциальной форме:

$$\mathrm{Q} = e^{i\chi\Lambda} e^{-i\varphi\sigma_z}. \tag{10}$$

Дальнейший успех решения задачи зависит от возможности представления произведения двух операторных экспонент в виде одной операторной экспоненты. Ввиду некоммутативности операторов Λ и σ_z, такое представление является неочевидным. Воспользуемся одной из формул, выражающей произведение операторных экспонент одной экспонентой:

$$\mathrm{Q} = e^{\mathrm{F}} e^{\mathrm{G}} = e^{\mathrm{F}+\mathrm{G}+\frac{1}{2!}[\mathrm{F},\mathrm{G}]+\frac{1}{3!}[\mathrm{F},[\mathrm{F},\mathrm{G}]]+\frac{1}{4!}[\mathrm{F},[\mathrm{F},[\mathrm{F},\mathrm{G}]]]+\ldots}. \tag{11}$$

Применение этой формулы эффективно в том случае, если коммутаторная алгебра операторов F и G замкнута и состоит из конечного числа элементов. Учитывая, что F и G линейно выражаются через операторы Λ и σ_z, исследуем алгебру Ли этих операторов.

Коммутатор матриц Λ и σ_z легко вычисляется и равен

$$[\Lambda, \sigma_z] = -2\sigma_x.$$

Вычисление коммутаторов с элементом алгебры σ_x дает

$$[\Lambda,[\Lambda,\sigma_z]]=-4\Lambda\,.$$

Далее, очевидно, что коммутаторная алгебра замыкается, поскольку

$$[\Lambda,[\Lambda,[\Lambda,\sigma_z]]]=-4[\Lambda,\Lambda]=0\,.$$

Таким образом, использование формулы (11) становится эффективным и, после подстановки соответствующих операторов, получаем представление оператора Q в следующей экспоненциальной форме

$$\mathrm{Q}=\exp\left\{i\left(\chi-\frac{2\chi^2\varphi}{3}\right)\Lambda-\chi\varphi\sigma_x\right\}. \tag{12}$$

Полученная формула позволяет сравнительно легко находить трансфер-матрицу квантового проводника как степень матрицы Q, а также исследовать характерную зависимость амплитуд электронных волн в зависимости от расстояний до краев проводника, что позволяет выяснить в явной форме характер слабой локализации электронов.

3. ЛАНДАУЭРОВСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ

Сопротивление проводника определяется коэффициентами прохождения и отражения в соответствии с формулой Ландауэра [2]. Для вычисления сопротивления, найдем явные выражения для матричных элементов T_{11} и T_{21} трансфер-матрицы в соответствии с (4). Последние определяются N-ой степенью оператора Q:

$$\mathrm{T}=\mathrm{Q}^N\,,$$

где N – количество атомов в нити, или безразмерная длина нити $N=\dfrac{L}{a}$, L – длина нити, a – межатомное расстояние.

На основании установленной формы оператора Q в виде экспоненты (12), явный вид трансфер-матрицы находится несложно:

$$\mathrm{T}=exp\{i\chi N\tau\},$$

где матрица τ определяется выражением

$$\tau=\left(1-\frac{2\chi\varphi}{3}\right)\Lambda+i\varphi\sigma_x\,.$$

Для последующих преобразований существенны свойства этой матрицы, которые вытекают из явного ее вида

$$\tau=\begin{pmatrix} 1-\dfrac{2\chi\varphi}{3} & 1-\dfrac{2\chi\varphi}{3}+i\varphi \\ -1+\dfrac{2\chi\varphi}{3}+i\varphi & -1+\dfrac{2\chi\varphi}{3} \end{pmatrix}.$$

Отсюда устанавливаем:

1) $det\,\tau = -(\chi\varphi)^2$;
2) $Sp\,\tau = 0$;
3) $\tau^2 = -\varphi^2 \mathrm{I}$.

Эти замечательные особенности матрицы τ позволяют сравнительно просто найти искомые матричные элементы. Разлагая экспоненту в ряд, после очевидных преобразований, получим

$$\mathrm{T} = \mathrm{I}\,ch(\chi\varphi N) + \frac{i\tau}{\varphi} sh(\chi\varphi N).$$

Отсюда легко восстанавливаются матричные элементы матрицы T:

$$T_{11} = ch(\chi\varphi N) + \frac{i}{\varphi} sh(\chi\varphi N)\left(1 - \frac{2}{3}\chi\varphi\right),$$

$$T_{12} = \frac{i}{\varphi} sh(\chi\varphi N)\left(1 - \frac{2}{3}\chi\varphi + i\varphi\right),$$

$$T_{21} = -\frac{i}{\varphi} sh(\chi\varphi N)\left(1 - \frac{2}{3}\chi\varphi - i\varphi\right),$$

$$T_{22} = ch(\chi\varphi N) - \frac{i}{\varphi} sh(\chi\varphi N)\left(1 - \frac{2}{3}\chi\varphi\right).$$

Заметим, что появившийся в ходе преобразований аргумент синуса и косинуса $\chi\varphi N$ не зависит от волнового числа k (следовательно, от энергии электрона), а выражается исключительно через длину нити L и перенормированную мощность атомных потенциалов æ, поэтому $\chi\varphi N = æaN = æL$.

Поскольку коэффициенты отражения и прохождения, выраженные через матричные элементы матрицы T, равны

$$R = \left|\frac{T_{21}}{T_{11}}\right|^2, \quad D = \frac{1}{|T_{11}|^2},$$

то безразмерная величина сопротивления, определяемая отношением $\rho = \dfrac{R}{D}$, выражается через матричный элемент T_{21} и равна

$$\rho = |T_{21}|^2 = \left(1 + \left(\frac{1}{\varphi} - \frac{2}{3}\chi\right)^2\right)\mathrm{sh}^2(\chi\varphi N) = \left(1 + \left(\frac{1}{ka} - \frac{2}{3}\frac{æ}{k}\right)^2\right)\mathrm{sh}^2(æL).$$

Ландауэровское сопротивление теперь можно записать в форме

$$R = \frac{h}{e^2}\left(1 + \left(\frac{1}{ka} - \frac{2}{3}\frac{æ}{k}\right)^2\right)\mathrm{sh}^2(æL). \tag{13}$$

Отсюда асимптотическое поведение сопротивления при неограниченном увеличении длины квантовой нити определяется формулой

$$R \sim e^{\frac{L}{\xi}}$$

т.е. сопротивление увеличивается по экспоненциальному закону, что выражает свойство локализации электронных состояний. Характерная длина, на которой существенно повышается сопротивление, выражается соотношением

$$\xi = \frac{1}{2æ} = \frac{\hbar^2}{2m\Omega}.$$

Характеристическая длина ξ имеет квантовый характер, на что указывает постоянная Планка в ее выражении, также она обратно пропорциональна мощности потенциала отдельного атома и массе электрона.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хорошо известно, что в модели Кронига-Пенни [6], описывающей состояния электрона в поле бесконечно протяженного периодического потенциала, электрон без рассеяния распространяется вдоль всего такого одномерного кристалла, т.е. такие состояния являются делокализованными. Локализованные состояния отсутствуют, волновая функция таких состояний равна нулю, отсюда возникает картина разрешенных и запрещенных энергетических зон.

Однако при конечной длине одномерной кристаллической решетки наряду с делокализованными возникают локализованные состояния. Причем континуум энергетических состояний в каждой из зон становится квазинепрерывным, при этом в каждой из запрещенных зон возникает континуум состояний, соответствующий локализованным состояниям.

В современных исследованиях [3, 4, 7] о локализации электронов говорят в связи с исследованием неупорядоченных сред. Неупорядоченность связывают со структурным или композиционным беспорядком расположения атомов. Складывается впечатление, что локализация обязана исключительно беспорядку.

Однако природа локализации иная и заключается в том, что электронные волны с длиной волны не кратной межатомному расстоянию испытывают значительные трансформации при каждом акте рассеяния. С учетом интерференции это приводит к значительному запутыванию электронов в одномерной кристаллической решетке и, в конечном итоге, к локализации.

Разработанный метод исследования позволяет установить поведение амплитуд электронных волн внутри проводника, и, тем самым, исследовать характер локализации детально. Также открывается возможность исследования свойств комбинированных и составных квантовых проводников.

Список литературы

1. Шик А. Я. Физика низкоразмерных систем / Шик А. Я., Бакуева Л. Г., Мусихин С. Ф., Рыков С. А. – СПб. : Наука, 2001.
2. Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices / Landauer R. // Philosophical Magazine. – 1970. – Vol. 21. – P. 863-867.
3. Седракян Д. М. Локализация электрона на одномерной цепочке из периодически расположенных случайных δ-потенциалов / Седракян Д. М., Бадалян Д. А., Хачатрян А. Ж. // ФТТ. – 1999. – Т. 41, вып. 10. – С. 1851-1855.
4. Седракян Д. М. Рассеяние электрона на одномерной цепочке со структурным и композиционным беспорядком / Седракян Д. М., Бадалян Д. А., Хачатрян А. Ж. // ФТТ. – 2000. – Т. 42, вып. 4. – С. 747-751.
5. Abrahams E. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions / Abrahams E., Anderson P. W., Liccardello D. C., and Ramakrishnan T. V. // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42. – P. 693.
6. Kronig R. de L., Penney W. G., Quantum mechanics of electrons in crystal lattices, "Proc. Roy. Soc. London" – 1931. – Vol. 130A. – P. 499.
7. Имри Й. Введение в мезоскопическую физику / Йозеф Имри ; Пер. с англ.: С. А. Булгадаев и др. – М. : Физматлит – 2004. – 304 с.

Ахрамович Л. М. Локалізація електронів в одновимірній квантовій нитці / Ахрамович Л. М., Гадієв Д. Р., Гопман О. Б. // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2012. – Т. 25(64), № 1. – С. 26-33.

На підставі формалізму трансфер-матриці розроблений алгебраїчний метод рішення задач розсіювання електронів в одновимірних квантових нитках. Цим методом знайдений точний результат задачі квантового розсіювання електронів в одновимірному одноканальному провіднику. Встановлено характер опору квантової нитки залежно від числа розсіювачів. Асимптотика точного рішення при великій кількості розсіювачів відповідає відомим результатам. Показано, що й в однорідній квантовій нитці виникає явище локалізації електронів, що приводить до експонентної залежності опору одномірного квантового провідника від його довжини.

Ключові слова: розсіювання, квантова нитка, опір, локалізація.

Akhramovich L. N. Electron localization in one-dimensional quantum wires / Akhramovich L. N., Gadiev D. R., Gopman A. B. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2012. – Vol. 25(64), No 1. – P. 26-33.

On the basis of the transfer matrix formalism developed an algebraic method for solving the scattering of electrons in one-dimensional quantum. This method found the exact result of the quantum problem of scattering of electrons in single-channel one-dimensional conductor. The nature of the resistance quantum wire depending on the number of scatterers is determined. Asymptotic limit of the exact solution for a large number of scatterers are in good agreement with known results. It is shown that in a homogeneous quantum wire there is the phenomenon of electron localization, which leads to an exponential dependence of the resistance of one-dimensional quantum wire of length.

Keywords: scattering, quantum wires, resistance, localization.

Поступила в редакцию 07.04.2012 г.