

Нелинейный кондактанс квантового контакта, содержащего единичные дефекты

Е.С. Авотина, Ю.А. Колесниченко

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: avotina@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 15 июля 2003 г.

Теоретически исследована проводимость квантового контакта, содержащего единичные точечные дефекты и потенциальный барьер. В рамках модели квантовой проволоки, соединяющей массивные берега, получена зависимость кондактанса G от приложенного напряжения U . Проанализировано соотношение нелинейных вкладов в кондактанс, которые связаны с интерференцией электронных волн, рассеянных дефектами, а также дефектами и барьером. Последний вклад становится преобладающим уже при весьма малых коэффициентах отражения электронов от барьера. Показано, что зависимость коэффициента прохождения T_{12} от энергии электрона E объясняет наблюдавшееся экспериментально подавление осцилляций кондактанса $G(U)$ при его абсолютном значении, близком к величине одного кванта $G_0 = 2e^2/h$.

Теоретично досліджено провідність квантового контакту, який містить одиничні точкові дефекти та потенційний бар'єр. У рамках моделі квантового дроту, що з'єднує масивні береги, отримано залежність кондактансу G від прикладеної напруги U . Проаналізовано співвідношення нелінійних вкладів у кондактанс, які пов'язані з інтерференцією електронних хвиль, які розсіюються дефектами, а також дефектами та бар'єром. Останній вклад стає переважним вже при доволі малих коефіцієнтах віддзеркалення електронів від бар'єру. Показано, що залежність коефіцієнта проходження T_{12} від енергії електрона E пояснює пригнічення осциляцій кондактансу $G(U)$, яке спостерігалось експериментально, при його абсолютному значенні, близькому до величини одного кванту $G_0 = 2e^2/h$.

PACS: 73.23.-b, 72.10.Fk

Введение

Физические характеристики проводников с мезоскопическими размерами, таких, например, как квантовые контакты, проволоки, кольца, квантовые точки, чрезвычайно чувствительны к наличию единичных дефектов, которые могут существенно изменить их свойства и привести к появлению новых эффектов, отсутствующих в чистых, баллистических объектах. Разнообразные дефекты, как правило, неизбежно возникают в процессе изготовления проводящих структур, и изучение их влияния на транспортные характеристики является важным в связи с интенсивным развитием нанoeлектроники. С другой стороны, внесение в мезоскопическую систему контролируемого числа примесей, обладающих определенными свойствами, открывает возможности варь-

ирования их кинетических коэффициентов. Изучение влияния отдельных примесей на процессы переноса в мезоскопических системах интересно и с точки зрения фундаментальной физики, поскольку в этом случае рассеяние электронов (например, рассеяние Кондо) проявляет себя в наиболее явной форме, не завуалированной усреднением по большому числу дефектов, что позволяет получить о нем детальную информацию. Указанные обстоятельства определяют интерес к экспериментальному и теоретическому исследованию свойств проводников малых размеров, содержащих единичные дефекты.

Одним из интенсивно исследуемых в настоящее время классов мезоскопических проводников являются квантовые баллистические контакты. Квантовыми контактами называют микросужения или проволочки, диаметр которых сравним с дебройлевской

длиной волны электрона, соединяющие массивные металлические берега. Кондактанс G (первая производная вольт-амперной характеристики $G = dI/dU$) таких систем определяется числом N уровней $\varepsilon_s < \varepsilon_F$ (ε_F — энергия Ферми, $s = 1, \dots, N$) поперечного квантования энергии электрона (или, как часто говорят, числом квантовых проводящих мод). Каждая из таких мод, согласно теории Ландауэра [1,2], вносит вклад в G , равный кванту $G_0 = 2e^2/h$, так что полный кондактанс равен $G = NG_0$. Величину N можно изменять, например, меняя диаметр контакта d . При этом функция $G(d)$ представляет собой ступенчатую зависимость с шагом, равным кванту кондактанса G_0 . Впервые этот эффект был обнаружен в сужениях, созданных на основе двумерного электронного газа, и впоследствии наблюдался в трехмерных контактах обычных металлов (см., например, обзоры [3,4]). В реальных контактах отражение электронов может быть учтено с помощью коэффициента прохождения s -й моды $\tau_s \leq 1$, а кондактанс в приближении закона Ома ($U \rightarrow 0$) при низких температурах ($T \rightarrow 0$) описывается формулой Ландауэра — Буттикера [1,2]

$$G = G_0 \sum_{s=1}^N \tau_s. \quad (1)$$

Отличие величины τ_s от единицы связано как с формой контакта, так и с рассеянием электронов. При этом если проводимость определяется малым числом квантовых мод, то наличие единичных дефектов может привести к существенному изменению кондактанса. Теоретическому изучению этого вопроса посвящен ряд работ [5–12]. Однако нелинейные по напряжению эффекты в квантовых контактах мало изучены. В то же время малый размер контакта и, следовательно, его большое сопротивление, позволяют избежать эффектов разогрева при смещениях eU порядка десятых долей энергии Ферми, что делает возможным изучение сильно неравновесных электронных состояний.

Немонотонная зависимость кондактанса квантового контакта от напряжения U впервые экспериментально обнаружена в работе [13]. Впоследствии этот эффект наблюдался в экспериментах [14]. Авторы [13] предположили, что причиной этой немонотонности может служить интерференция электронных волн. Суть эффекта состоит в следующем: электронная волна с волновым вектором k_s , налетая на контакт, с вероятностью t_s проходит через него и с вероятностью r_s отражается. Если на расстоянии z_i от контакта расположен дефект, то отраженная волна после обратного рассеяния на нем может вновь вернуться в контакт. Две волны когерентны и интерferируют. Соответствующий вклад такого

процесса в полный коэффициент прохождения τ_s , осциллирующим образом зависит от относительного сдвига фаз $2k_s z_i$ двух волн. Поскольку энергия электронов и, следовательно, волновые векторы k_s зависят от приложенного напряжения U , изменение последнего приводит к немонотонной зависимости кондактанса $G(U)$. Теоретически влияние «грязных» берегов на нелинейный кондактанс $G(U)$ баллистических контактов рассматривалось в работах [14,15]. Авторы [15] предсказали обнаруженное позднее в эксперименте [14] подавление флуктуаций кондактанса вблизи краев ступеней функции $G(d)$. Работа [15] основана на численном моделировании, при котором использовались определенные значения параметров, и по этой причине ее результаты не могут быть использованы для анализа конкретных экспериментальных данных. В работе [14] с помощью формализма матриц рассеяния получено весьма общее выражение для нелинейного кондактанса. Наряду с матрицей рассеяния электронов в контакте в теорию была введена матрица обратного рассеяния в берегах, через которую выражена полная вероятность T_{12} прохождения электрона из одного берега контакта в другой. Конкретный вид матриц рассеяния в формулах для кондактанса, полученных в работе [14], является неопределенным, что не позволяет оценить амплитуду и характерные периоды немонотонностей функции $G(U)$. В то же время вероятность попадания электрона обратно в контакт после рассеяния примесью, расположенной на достаточном удалении от него в точке \mathbf{r}_i , мала в меру малости телесного угла, под которым контакт виден из точки \mathbf{r}_i [16]. Более реальной представляется ситуация, при которой интерferируют электронные волны, отраженные от дефектов внутри контакта или расположенных в непосредственной близости от него. В работе [5] теоретически был проанализирован кондактанс длинного квантового контакта (проволоки), содержащего единичные точечные дефекты, и найдены нелинейные поправки, осциллирующие с напряжением. Такая модель не учитывает одного важного факта — конечной вероятности отражения электронов даже в чистом баллистическом контакте. Последнее обстоятельство может быть связано, например, с рассогласованием фермиевских скоростей при приведении в контакт разных металлов либо с неадиабатичностью формы контакта.

В настоящей работе мы рассмотрели зависимость от напряжения кондактанса квантовой проволоки, которая содержит единичные точечные дефекты (по положению которых не проводится усреднение) и потенциальный барьер, пересекающий ее сечение. Эта модель позволяет учесть как отражение от плос-

кости контакта (которое описывается коэффициентом отражения от барьера), так и рассеяние на примесях. Относительная простота модели дает возможность получить точные аналитические выражения для кондактанса, описывающие его зависимость от положения дефектов.

Модель и вычисление коэффициента прохождения электронов через контакт

Рассмотрим контакт в форме длинного узкого канала длиной L намного большей его диаметра $d = 2R$. Края канала плавно (в масштабе фермиевской длины волны λ_F) подсоединены к массивным металлическим берегам (адиабатическое приближение [17]), к которым приложено напряжение $eU \ll \epsilon_F$ (рис. 1). Эти условия позволяют пренебречь отражением электронов от краев контакта. В центре контакта ($z = 0$) расположен потенциальный барьер V , вблизи которого в точках \mathbf{r}_i находится несколько точечных примесей. Одноэлектронный гамильтониан такой системы запишем в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V\delta(z) + g \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ и m — оператор импульса и эффективная масса электрона, g — константа взаимодействия электронов с примесями.

Вычисление кондактанса мезоскопического канала (см., например, [18]) сводится к определению матрицы рассеяния $\hat{t}(E)$, зависящей от энергии электрона E . Наиболее общее выражение для электрического тока через канал имеет вид

$$I = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T_{12}(E) \left[f_F \left(E + \frac{eU}{2} \right) - f_F \left(E - \frac{eU}{2} \right) \right], \quad (3)$$

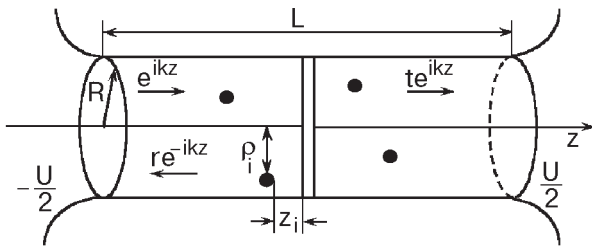


Рис. 1. Модель квантового контакта в форме канала радиусом R , соединяющего два массивных берега. Барьер и примеси внутри контакта изображены схематически. Стрелки показывают направление движения влетающих в контакт, отраженных и прошедших через барьер электронов, ρ_i — расстояние дефекта от оси контакта.

$$\text{где } T_{12} = \text{Sp}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) = \sum_{ss'} T_{ss'} = \sum_{ss'} |t_{ss'}|^2, \quad (4)$$

$T_{ss'}$ — вероятность того, что электрон, принадлежащий в левом берегу контакта квантовой проводящей моде с номером s , пройдет через него, и в правом берегу будет принадлежать моде с номером s' . Суммирование по s и s' в формуле (4) ограничено условием $\epsilon_{s(s')} < \epsilon_F$. Матрица $\hat{t}^\dagger \hat{t}$ может быть диагонализирована и формула Ландауэра — Буттикера (1) записана через ее собственные значения τ_s . При температуре $T \rightarrow 0$ выражение для кондактанса принимает простой вид:

$$G = \frac{e^2}{h} \left[T_{12} \left(\epsilon_F + \frac{eU}{2} \right) + T_{12} \left(\epsilon_F - \frac{eU}{2} \right) \right]. \quad (5)$$

Отметим, что при конечных напряжениях U кондактанс баллистического контакта определяется двумя потоками движущихся в противоположных направлениях электронов, энергия которых отличается на величину eU [19]. Соответственно, энергии поперечных квантовых мод для этих групп электронов также отличаются на величину eU . Поэтому с увеличением диаметра контакта квантовая мода становится разрешенной сначала для одного направления волнового вектора, которому соответствует меньшее значение энергии. В результате кондактанс испытывает скачки величиной $G_0/2$ [20,21].

Вероятности $T_{ss'}$ могут быть выражены через опережающие функции Грина $G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ электронов (см. ниже). В адиабатическом приближении (вдали от краев) волновые функции $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ электронов в баллистическом канале в отсутствие барьера ($V = g = 0$) можно представить в виде

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \psi_{\perp\beta}(\mathbf{R}) e^{ik_z z}, \quad (6)$$

где $\alpha = (\beta, k_z)$ — полный набор квантовых чисел, состоящий из набора двух дискретных чисел $\beta = (m, n)$, определяющих уровни энергии поперечного квантования ϵ_β , и непрерывного квантового числа k_z — проекции волнового вектора электрона на ось контакта; $\psi_{\perp\beta}(\mathbf{R})$ — перпендикулярная оси контакта компонента волновой функции электрона, которая может быть выбрана вещественной; $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$. Полная энергия электрона соответственно равна $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta + \hbar^2 k_z^2 / 2m$. Функции $\psi_{\perp\beta}(\mathbf{R})$ удовлетворяют нулевым граничным условиям на поверхности контакта. Ниже, при проведении численных расчетов, для определенности будем полагать, что канал имеет цилиндрическую форму. В этом случае волновые функции и уровни энергии поперечного квантования электронов в баллистическом канале ($L \rightarrow \infty$) без примесей и барьера имеют вид

$$\Psi_{\perp nm}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{\pi R^2 J_{m+1}(\gamma_{mn})}} J_m\left(\gamma_{mn} \frac{\rho}{R}\right) e^{im\varphi};$$

$$\varepsilon_{nm} = \frac{\hbar^2 \gamma_{mn}^2}{2mR^2}. \quad (7)$$

Здесь мы использовали цилиндрические координаты $\mathbf{r} = (\rho, \varphi, z)$; γ_{mn} — n -й нуль функции Бесселя $J_m(x)$.

Используя факторизацию волновой функции (6), $G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ можно представить в виде разложения

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \sum_{\beta\beta'} \Psi_{\perp\beta}(\mathbf{R}) \Psi_{\perp\beta'}(\mathbf{R}') G_{\beta\beta'}^+(z, z'). \quad (8)$$

В соответствии с результатами работы [22] вероятности прохождения $T_{\beta\beta'}(E)$ равны

$$T_{\beta\beta'}(E) = \frac{\hbar^4}{m^2} k_{\beta} k_{\beta'} \left| G_{\beta\beta'}^+(z, z', E) \right|^2, \quad z \rightarrow -\infty, \quad z' \rightarrow +\infty, \quad (9)$$

где $k_{\beta} = \sqrt{2m(E - \varepsilon_{\beta})}/\hbar$ — волновой вектор электрона, соответствующий квантованному уровню энергии ε_{β} . В формуле (9) мы перешли от классификации электронных мод по номеру s (формулы (1), (4)), с возрастанием которого увеличиваются значения энергий ε_s , к классификации по набору дискретных квантовых чисел β .

Функция Грина $G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в канале с потенциальным барьером в отсутствие примесей удовлетворяет уравнению

$$G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + V \int d\mathbf{R}'' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}'') G_b(\mathbf{R}'', \mathbf{r}')|_{z''=0}, \quad (10)$$

где

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\alpha} \frac{\Psi_{\alpha}(\mathbf{R}) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{R}')}{E - \varepsilon_{\alpha} - i\eta} \quad (11)$$

$$G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{G_1(\mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') + G_1(\mathbf{r}_1) G_1(\mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}')}{1 - G_b(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_1(\mathbf{r}_1) G_1(\mathbf{r}_2)} +$$

$$+ \frac{G_1(\mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}') + G_1(\mathbf{r}_1) G_1(\mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) G_b(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')}{1 - G_b(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_1(\mathbf{r}_1) G_1(\mathbf{r}_2)}, \quad (17)$$

$$\text{где } G_1(\mathbf{r}_i) = \frac{g}{1 - g G_b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i)}.$$

При достаточно большом количестве примесей точное выражение для функции $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ становится чрезвычайно громоздким. В предположении о малости константы взаимодействия g выражение для вероятностей прохождения (9) может быть получено с помощью борновского разложения по степеням g . С точностью до членов, пропорциональных g^2 , получаем

— функция Грина в отсутствие примесей и барьера. Из уравнения (10) находим коэффициенты разложения (9) функции $G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$:

$$G_{b\beta\beta'}^+(z, z', E) = -\delta_{\beta\beta'} \frac{im}{\hbar^2 k_{\beta}} \left\{ e^{ik_{\beta}|z'-z|} + r_{\beta} e^{ik_{\beta}(|z|+|z'|)} \right\}, \quad (12)$$

где амплитуда отражения от барьера r_{β} равна

$$r_{\beta} = -\frac{imV}{(\hbar^2 k_{\beta} + imV)} = -i|r_{\beta}| e^{i\varphi_{\beta}}. \quad (13)$$

Матрица $T_{\beta\beta'}$ из (9) может быть записана в виде $T_{\beta\beta'} = T_{\beta}^b \delta_{\beta\beta'}$, где T_{β}^b выражается через амплитуду прошедшей волны $t_{\beta} = r_{\beta} + 1 = |t_{\beta}| e^{i\varphi_{\beta}}$:

$$T_{\beta}^b = |t_{\beta}|^2 = \left[1 + \left(\frac{mV}{\hbar^2 k_{\beta}} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (14)$$

При наличии примесей функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, определяющая вероятности прохождения (9), должна быть найдена из уравнения

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + g \sum_i G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'). \quad (15)$$

Уравнение (15) может быть точно решено для любого конечного числа примесей i . Для этого необходимо записать уравнение (15) при всех значениях $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$ и решить систему из i линейных алгебраических уравнений для функций $G^+(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}')$. Приведем в качестве примеров решения уравнения (15) для одной и двух примесей.

Одна примесь в точке \mathbf{r}_1 :

$$G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_1(\mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_b(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'). \quad (16)$$

Две примеси, расположенные в точках $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{1,2}$:

$$T_{\beta\beta'} = T_{\beta}^b \delta_{\beta\beta'} + \Delta T_{1\beta\beta'} + \Delta T_{2\beta\beta'}. \quad (18)$$

Поправка первого порядка равна

$$\Delta T_{1\beta\beta'} = -2\delta_{\beta\beta'} \left(\frac{m}{\hbar^2} \right) T_{\beta}^b g \times$$

$$\times \frac{1}{k_{\beta}} \sum_i A_{\beta\beta'}^{(ii)} |r_{\beta}| \cos(2k_{\beta}z_i + \varphi_{\beta}), \quad (19)$$

где $A_{\beta\beta'}^{(ij)} = \Psi_{\perp\beta}(\mathbf{R}_i) \Psi_{\perp\beta'}(\mathbf{R}_j)$.

Вид поправки второго порядка $\Delta T_{2\beta\beta'}$ к коэффициенту прохождения зависит от положения дефектов относительно барьера. В случае, когда примеси расположены по разные стороны барьера, $\Delta T_{2\beta\beta'}$ определяется формулой ($z_i < 0, z_j > 0$)

$$\begin{aligned} \Delta T_{2\beta\beta'} = & - \left(\frac{gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{k_{\beta}k_{\beta'}} [-2|t_{\beta'}||t_{\beta}| \sum_{i \neq j} A_{\beta\beta'}^{(ij)} A_{\beta\beta'}^{(ij)} \{-T_{\beta}^b \cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_j - z_i) + \varphi_{\beta} + \varphi_{\beta'}) + \\ & + |r_{\beta}|^2 \cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_j - z_i) + 2\varphi_{\beta}) + |r_{\beta'}||r_{\beta'}| \cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_i + z_j))\} + \\ & + T_{\beta}^b \sum_i A_{\beta\beta'}^{(ii)2} \{T_{\beta'}^b + 2|r_{\beta}| \sin(2k_{\beta}z_i + \varphi_{\beta}) + |r_{\beta'}||r_{\beta'}| \cos(2(k_{\beta} + k_{\beta'})z_i + \varphi_{\beta} + \varphi_{\beta'})\}] \end{aligned} \quad (20)$$

или

$$\begin{aligned} \Delta T_{2\beta\beta'} = & - \left(\frac{gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{k_{\beta}k_{\beta'}} [-2T_{\beta}^b \sum_{i \neq j} A_{\beta\beta'}^{(ij)} A_{\beta\beta'}^{(ii)} \{-\cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_j - z_i)) + \\ & + 2|r_{\beta'}||r_{\beta'}| \cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_j + z_i) + \varphi_{\beta} + \varphi_{\beta'}) - \\ & - 2|r_{\beta}| \sin(k_{\beta}(z_i + z_j) + k_{\beta'}(z_j - z_i) + \varphi_{\beta}) + |r_{\beta'}|^2 \cos((k_{\beta} + k_{\beta'})(z_i - z_j))\} + \\ & + T_{\beta}^b \sum_i A_{\beta\beta'}^{(ii)2} \{T_{\beta'}^b + 2|r_{\beta}| \sin(2k_{\beta}z_i + \varphi_{\beta}) - 2|r_{\beta'}||r_{\beta'}| \cos(2(k_{\beta} + k_{\beta'})z_i + \varphi_{\beta} + \varphi_{\beta'})\}] \end{aligned} \quad (21)$$

в случае, когда примеси расположены по одну сторону барьера ($z_i < z_j$).

Эти формулы справедливы, когда значение полной энергии электронов не приближается к значениям энергии квантовых мод ε_{β} . Если же это не так (т.е. $k_{\beta} \rightarrow 0$), то для вычисления коэффициента прохождения необходимо использовать точное выражение для функции Грина.

Обсуждение результатов

Учет отражения электронов от барьера в контакте приводит к сложной немонотонной зависимости его кондактанса от напряжения. Если константа взаимодействия g электрона с примесью мала, то вероятности прохождения электрона $T_{\beta\beta'}$ (18) могут быть получены в борновском приближении для произвольного числа дефектов (15). В этом случае осцилляторно зависящие от энергии слагаемые в вероятностях $T_{\beta\beta'}$ (18) имеют ясный физический смысл и могут быть пояснены на языке электронных траекторий. Как обсуждалось во введении, наличие таких слагаемых обусловлено интерференцией электронной волны, прошедшей контакт без рассеяния (траектория 1 на рис. 2), и электронных волн, отраженных дефектами и барьером. В качестве примера на рис. 2 приведено несколько возможных тра-

екторий электронов. Первая поправка $\Delta T_{1\beta\beta'}$ (пропорциональная g) соответствует интерференции между непосредственно прошедшей волной и волной, которая претерпевает одно отражение от примеси и одно отражение от барьера (траектория 2 на рис. 2,а). Интерференция траекторий, изображенных на рис 2,б,в, соответствует некоторым слагаемым в поправке второго порядка $\Delta T_{2\beta\beta'}$, причем траектории 3 и 5 содержат два рассеяния на примесях, а траектории 4 и 6 включают также два отражения от барьера. Первое и второе слагаемые в формуле (21) связаны с интерференцией между траекторией 1 и траекториями 3 и 4 на рис. 2,б соответственно. На рис. 2,в показаны траектории 5 и 6, интерференция между каждой из них и траекторией 1 отвечает первому и второму слагаемым в формуле (20). Интересно отметить, что в проводимость контакта вошло слагаемое, пропорциональное g , которое отсутствует при учете процессов рассеяния на примесях с помощью, например, квантового аналога интеграла столкновений. Это слагаемое исчезает после усреднения по положениям большого числа примесей, однако в мезоскопическом контакте с несколькими дефектами и барьером оно может играть определяющую роль. Дополнительный набег фазы связан с расстоянием между примесями, их расположением относи-

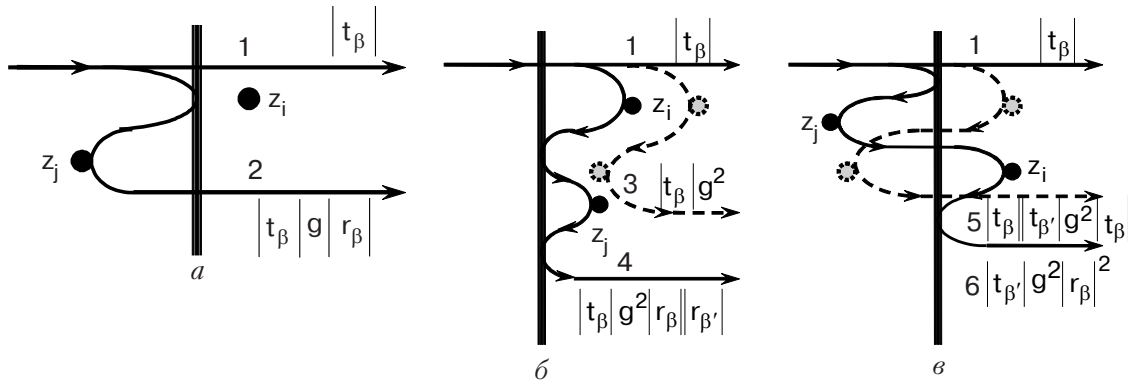


Рис. 2. Схематическое изображение некоторых возможных типов траекторий электронов в квантовом канале с барьером и примесями.

тельно барьера, возможным изменением величины волнового вектора k_β (номера квантовой моды β) при рассеянии на примеси, а также с отражением электрона от барьера. Отметим, что взаимодействие электрона с барьером в рамках данной модели не приводит к перемешиванию квантовых мод. Вклад интерференционных слагаемых в кондактанс существенно зависит от положения примесей относительно оси контакта \mathbf{R}_i и определяется $v_\beta(\mathbf{R}_i, E) = m\psi_{\perp\beta}^2(\mathbf{R}_i)/(\hbar^2 k_\beta(E))$ — локальной плотностью состояний для β -й моды в точке \mathbf{R}_i . Поскольку поперечные волновые функции $\psi_{\perp\beta}$ в определенных точках обращаются в нуль, вклад рассеяния на примесях, расположенных вблизи таких точек, в проводимость β -й моды оказывается малым. В частности, примеси на поверхности не влияют на кондактанс.

На рис. 3 показана зависящая от напряжения часть кондактанса $\Delta G(U)$ для различных значений барьерного потенциала V и двух примесей, расположенных по одну либо разные стороны от барьера (все численные расчеты выполнены для нулевой температуры). Эти

зависимости показывают, что уже при относительно малых значениях V преобладающим становится вклад, отвечающий одному акту рассеяния на примеси и отражению от барьера. Для сравнения на рис. 4 мы привели аналогичную зависимость $\Delta G(U)$, вычисленную в первом порядке теории возмущений по константе взаимодействия g .

На рис. 5 показаны зависимости $\Delta G(U)$ для одномодового канала $\beta = (0,1)$ при разных значениях его радиуса. При $R = 3\lambda_F$ энергия квантовой моды ε_{01} достаточно удалена от уровня Ферми ε_F , а при $R = 2,6 \lambda_F$ находится вблизи него. Эти зависимости наглядно демонстрируют подавление осцилляций $\Delta G(U)$ вблизи ступени скачка кондактанса, что соответствует экспериментальным результатам работы [14]. В рамках нашей модели такое уменьшение осцилляций кондактанса имеет естественное физическое объяснение. Коэффициент прохождения электрона через барьер T_{01}^b (14) зависит от энергии моды ε_β , которая, согласно формуле (7), уменьшается с увеличением радиуса R . При приближении

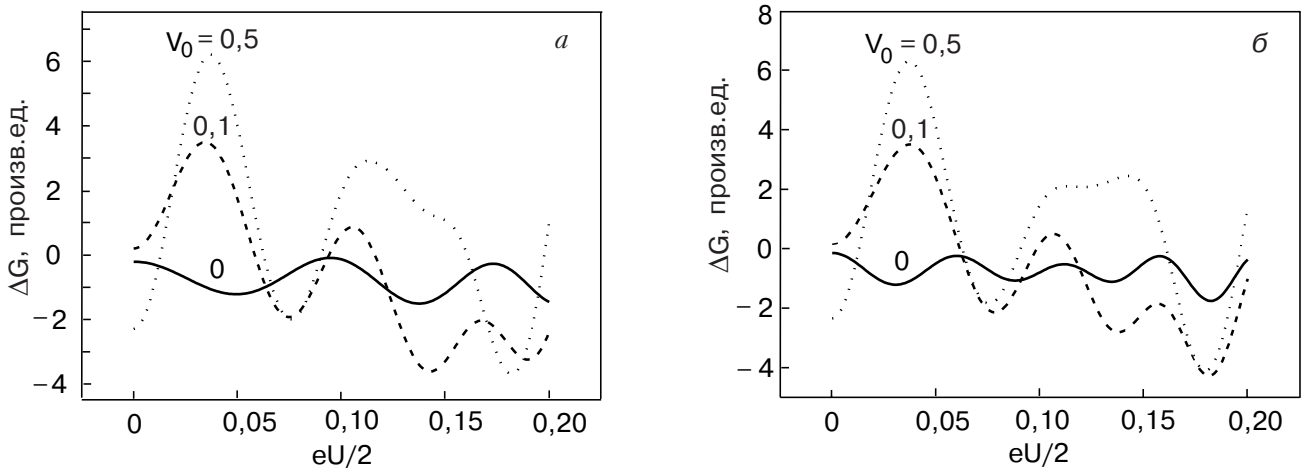


Рис. 3. Зависимость кондактанса от $eU/2$ (в единицах энергии Ферми) при наличии в контакте двух дефектов (примеси расположены по одну (а) и по разные (б) стороны от барьера); $\rho_1 = \lambda_F$, $\rho_2 = 1,5\lambda_F$, $g_0 = 0,1$, $R = 3\lambda_F$, $V_0 = mV/(\hbar^2 k_F)$, $g_0 = mg/(\pi R^2 \hbar^2 k_F)$.

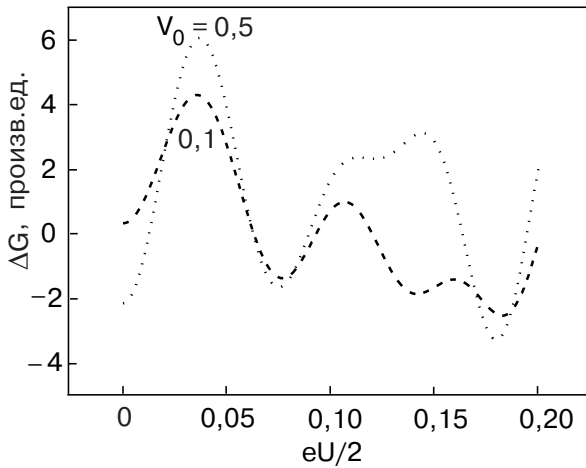


Рис. 4. Зависимость кондактанса от $eU/2$ (в единицах энергии Ферми), вычисленная в линейном приближении по константе взаимодействия g ; $\rho_1 = \lambda_F$, $\rho_2 = 1,5\lambda_F$, $g_0 = 0,1$, $R = 3\lambda_F$.

R к значению R_2 , отвечающему «вхождению» в канал следующей моды с большей энергией ε_{11} , коэффициент T_{01}^b увеличивается, а интерференционный вклад, связанный с отражением от барьера, минимален. Осцилляции кондактанса малы вблизи $R = R_2$ и в двухмодовом канале ($R > R_2$), поскольку, как нетрудно видеть из формулы (14), $T_\beta^b \rightarrow 0$ при $E \rightarrow \varepsilon_\beta$.

Заключение

В работе теоретически изучен нелинейный кондактанс $G(U)$ квантового канала, содержащего единичные примеси и барьер. Показано, что дополнительный набег фазы волновой функции, зависящий от расстояний между примесями или примесями и

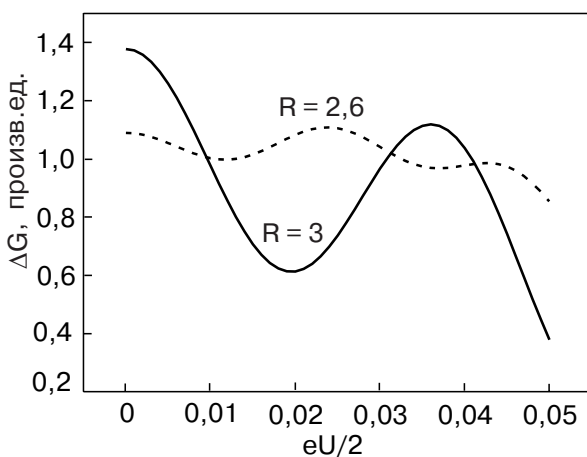


Рис. 5. Зависимости от $eU/2$ (в единицах энергии Ферми) кондактанса одномодового канала ($\beta = (0,1)$) при разных значениях радиуса контакта (радиус указан в единицах λ_F); $g_0 = 0,1$, $V_0 = 0,1$.

барьером, приводит к осцилляциям вероятности прохождения электрона через контакт как функции его энергии E . При отражении электрона от барьера либо прохождении через него волновая функция электрона также приобретает некоторую фазу $\varphi_\beta(E)$. Увеличение напряжения U на контакте изменяет энергии влетающих в него электронов, приводя к немонотонной зависимости $G(U)$. Функция $G(U)$ аperiодична (не может быть представлена в виде конечного числа фурье-гармоник по напряжению U) вследствие сложной зависимости фазы волновых функций от энергии E . Амплитуда немонотонностей кондактанса $G(U)$ определяется расположением примесей относительно оси контакта. Примеси, находящиеся в точках, в которых локальная плотность электронных состояний для одной из квантовых мод обращается в нуль, и примеси на поверхности контакта не влияют на вклад в проводимость этой моды. Мы показали, что отражение электронов от барьера в контакте уже при весьма малых его амплитудах (абсолютная величина кондактанса близка к его значению в баллистическом контакте в отсутствие барьера) становится основной причиной немонотонного поведения $G(U)$. Полученные результаты свидетельствуют, что зависимость от энергии вероятности прохождения электронов через барьер позволяет объяснить наблюдавшееся в экспериментах [14] подавление осцилляций кондактанса одномодового контакта диаметром, близким к значению, соответствующему вхождению следующей квантовой моды.

В заключение авторы выражают благодарность А.Н. Омелянчуку за обсуждение результатов работы и полезные замечания.

1. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957). R
2. M. Buttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).
3. Ya.M. Blanter and M. Buttiker, *Phys. Rep.* **336**, 1 (2000)
4. N. Agrait, A.L. Yeyati, and J.M. van Ruitenbeek, *Phys. Rep.* **377**, 81 (2003).
5. A. Namiranian, Yu.A. Kolesnichenko, and A.N. Omelyanchouk, *Phys. Rev.* **B61**, 16796 (2000).
6. M.E. Flatté and J.M. Byers, *Phys. Rev.* **B53**, R10536 (1996).
7. E. Granot, *cond-mat/0303347 v1*, (2003).
8. M.I. Molina and H. Bahlouli, *Phys. Lett.* **A284**, 87 (2002).
9. I. E. Aronov, M. Jonson, and A.M. Zagoskin, *Appl. Phys. Rep.* **93**, 57 (1994).
10. Ч.С. Ким, О.Н. Рознова, А.М. Саганин, В.Б. Штенберг, *ЖЭТФ* **121**, 1157 (2002).
11. Н.Г. Галкин, В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, *ЖЭТФ* **118**, 223 (2000).
12. D. Boese, M. Lischka, and L.E. Reichl, *Phys. Rev.* **B62**, 16933 (2000).

13. C. Untiedt, G. Rubio Bollinger, S. Vieira, and N. Agraït, *Phys. Rev.* **B62**, 9962 (2000).
14. B. Ludoph and J.M. van Ruitenbeek, *Phys. Rev.* **B61**, 2273 (2000).
15. D.L. Maslov, C. Barnes, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1984 (1993).
16. Ю.А. Колесниченко, А.Н. Омелянчук, and I.G. Tuluzov, *Physica* **B218**, 73 (1996).
17. Е.Н. Богачек, А. М. Загоскин, И.О. Кулик, *ФНТ* **16**, 1404 (1990).
18. C.W.J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).
19. И.О. Кулик, А.Н. Омелянчук, Р.И. Шехтер, *ФНТ* **3**, 1543 (1977).
20. Л.И. Глазман, А.В. Хаецкий, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 546 (1988).
21. А.М. Загоскин, *Письма в ЖЭТФ* **52**, 1045 (1990).
22. P.A. Lee and D.S. Fisher, *Phys. Rev.* **B23**, 6851 (1981).

Nonlinear conductance of quantum contact containing single impurities

Ye.S. Avotina and Yu.A. Kolesnichenko

Conductance of a quantum contact containing single point defects and a potential barrier has been investigated theoretically. The model of quantum wire connecting massive banks is used to derive the dependence of conductance G on applied bias U . We analyze nonlinear contributions to the conductance which are due to the interference of electron waves, scattered by defects or by defects and the barrier. The latter contribution becomes dominant for a relatively small reflection coefficient of electrons from the barrier. It is shown that the dependence of transmission coefficient on electron energy $T_{12}(E)$ explains the experimentally observed suppression of the conductance oscillations $G(U)$, if its absolute value is close to the value of the quantum $G_0 = 2e^2/h$.