

Наноэлектроника: эффект Холла и измерение электрохимических потенциалов в концепции «снизу-вверх»

Ю.А. Кругляк¹, П.А. Кондратенко², Ю.М. Лопаткин³

¹ Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, 65016 Одесса, Украина

² Национальный авиационный университет, пр. Космонавта Комарова, 1, 03058 Киев, Украина

³ Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

(Получено 10.04.2015; опубликовано online 10.06.2015)

В рамках концепции «снизу-вверх» современной наноэлектроники рассматриваются классический и квантовый эффекты Холла, методы измерения электрохимических потенциалов, формулы Ландауэра и Бюттекера, измерение холловского потенциала, учет магнитного поля в методе НРФГ, квантовый эффект Холла, уровни Ландау и краевые состояния в графене.

Ключевые слова: Нанофизика, Наноэлектроника, Молекулярная электроника, Снизу-вверх, Эффект Холла, Квантовый эффект Холла, Химпотенциал, Электрохимический потенциал, Уровни Ландау, Краевые состояния, Графен, Метод НРФГ.

PACS numbers: 73.43. – f, 73.50.Jt, 84.37. + q

1. ВВЕДЕНИЕ

Эдвин Холл в 1879 году обнаружил возникновение поперечной разности потенциалов при помещении тонкой золотой пластинки с постоянным током в магнитное поле [1]. В простейшем варианте эффект Холла проявляется следующим образом. Поместим 2D проводник с электрическим током в слабое магнитное поле \vec{B} , направленное перпендикулярно к поверхности проводника – вдоль оси y на рис. 1. Магнитное поле под действием силы Лоренца

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = -q\vec{v} \times \vec{B} \quad (1)$$

отклоняет электроны, движущиеся со скоростью \vec{v} от истока S к стоку D , от их траектории вдоль или против вектора скорости к боковым краям проводника (рис. 1).

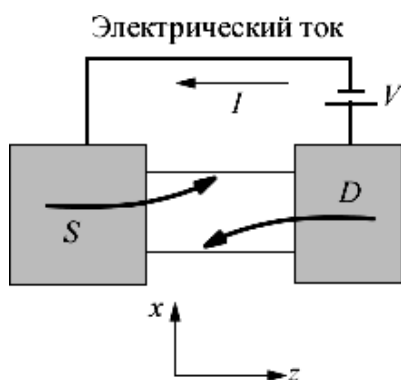


Рис. 1 – Магнитное поле, направленное перпендикулярно к проводнику с током, отклоняет электроны к краям проводника

Критерием малости магнитного поля обычно служит условие, чтобы электроны не начали двигаться по циклоиде.

Поскольку больше электронов движется от истока к стоку, создается холловская разность потенциалов V_H в поперечном направлении x (рис. 2).

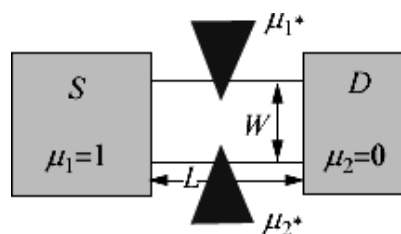


Рис. 2 – Холловская разность потенциалов создается в поперечном направлении

Эффект Холла всегда вызывал значительный интерес. Он особенно возрос в 1980 году, когда К. фон Клитцинг обнаружил, что холловское сопротивление

$$R_H = \frac{V_H}{I} \quad (2)$$

принимает дискретные значения [2, 3], которые могут быть вычислены с помощью следующей простой формулы

$$R_H = \frac{25812.80}{k}, k = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Обнаруженное явление получило название целочисленного квантового эффекта Холла. Точность измерения сопротивления столь велика, что Национальное бюро стандартов США выбрало именно эффект Холла для калибровки сопротивлений [4].

К. фон Клитцинг показал [2, 3], что холловское сопротивление фактически измеряет отношение двух фундаментальных физических констант – постоянной Планка и квадрата заряда электрона

$$R_H = \frac{h}{q^2} \cdot \frac{1}{k}, k = 1, 2, 3, \dots, \quad (4)$$

а через скорость света c связано с постоянной тонкой структуры

$$\alpha = \frac{q^2}{hc} = \frac{1}{137.0359895}, \quad (5)$$

что имеет исключительно важное значение для метрологии фундаментальных констант физики.

Уже в 1982 году был экспериментально обнаружен дробный квантовый эффект Холла [5, 6]. В ферромагнетиках в холловском сопротивлении обнаружен вклад, зависящий непосредственно от намагниченности материала, причем этот вклад может быть намного больше нормального холловского сопротивления. Это явление получило название аномального эффекта Холла [7]. Известны и другие, не менее интересные проявления эффекта Холла – спиновый эффект Холла Дьяконова – Переля [8, 9], квантовый спиновый эффект Холла в графене [10], как и иные проявления действия магнитного поля на электрические цепи, как, например, невязимые электрические цепи (non-reciprocity circuits), которые трудно интерпретировать в терминах обычных эффективных сопротивлений [11], что тем более интересно, поскольку появился новый класс материалов – топологические диэлектрики (topological insulators), которые как будто бы обладают невязимостью даже в отсутствие магнитных полей [12]. Эти и другие смежные вопросы мы рассмотрим с разной степенью полноты в этой и следующих публикациях с позиций концепции «снизу-вверх» современной наноэлектроники [13].

Рассмотрим подробнее обычный классический эффект Холла при низких магнитных полях. Одной из причин, вызвавших повышенный интерес к эффекту Холла, был тот факт, что холловское сопротивление имеет разный знак для n - и p -проводников, что открывает возможность экспериментально определять различие между ними. Этой же цели можно достичь, измеряя направление тока по проводнику между контактами, находящимися при разных температурах [14]. И в том и в другом случае обычно пользуются понятием «дырок» как носителей положительного заряда в p -проводниках. Подобную трактовку нельзя признать удовлетворительной, поскольку и в n -, и в p -проводниках носителями тока являются только электроны.

В случае термоэлектрических измерений направление тока определяется наклоном плотности состояний $D(E)$, то ли эта функция является растущей с ростом энергии (n -проводник), то ли падающей (p -проводник) [14]. Знак же холловского эффекта определяется знаком эффективной массы, определяемой по (75) из работы [15] как отношение импульса p к скорости dE/dp . В результате, хотя сила Лоренца (1) одна и та же и для n -, и для p -проводников, давая одно и то же значение dp/dt , результирующая dv/dt имеет разные знаки для n - и p -проводников, закручивая электроны в последних в противоположном направлении, что и приводит к изменению знака холловской разности потенциалов.

Обратимся к элементарной теории эффекта Холла, как она обычно излагается в учебниках по физике твердого тела, например [16]. Ток дается выражением

$$I = q(N/L)v_d, \quad (6)$$

где N/L есть линейная плотность электронов, а их дрейфовая скорость равна произведению подвижности электронов на электрическое поле вдоль длины проводника

$$v_d = \bar{\mu}(V/L). \quad (7)$$

В состоянии равновесия поперечное поле компенсирует силу Лоренца

$$V_H/W = v_d B, \quad (8)$$

так что используя (6) и (7) для холловского сопротивления имеем

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{B}{q(N/LW)}. \quad (9)$$

Это уравнение широко используется для определения плотности электронов N/LW по наклону зависимости холловского сопротивления от магнитного поля.

Эта элементарная теория эффекта Холла излагается с теми или иными незначительными нюансами во всех учебниках. И везде фигурирует электрическое поле как в продольном, так и в поперечном направлении в качестве причины возникновения электрического тока. Согласиться с этим никак нельзя [15]. Согласно (9), холловское сопротивление зависит от электронной плотности по всему спектру энергий, что, конечно, не так. Как и любые другие транспортные коэффициенты [14], холловское сопротивление – это свойство фермиевской поверхности и зависит оно только от электронов, энергия которых лежит в интервале приблизительно нескольких kT вокруг значения $E = \mu_0$ [15].

Мы покажем, что холловское сопротивление для одномерного упругого резистора дается выражением

$$R_H(E) = \frac{2BLW}{qD(E)v(E)p(E)}, \quad (10)$$

которое нужно еще усреднить по энергии в интервале нескольких kT вокруг значения $E = \mu_0$, используя стандартную функцию теплового уширения F_T [15], а именно:

$$\frac{1}{R_H} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{1}{R_H(E)}. \quad (11)$$

Обратим внимание на то, что в общем случае нужно усреднять проводимость $1/R_H(E)$, а не сопротивление $R_H(E)$, поскольку все модовые каналы проводимости «работают» параллельно и находятся под одной и той же разностью потенциалов.

Уравнения (10)-(11) сводятся к стандартному выражению (9), используя фундаментальное соотношение [15]

$$D(E)v(E)p(E) = N(E) \cdot d \quad (12)$$

для 2D проводника ($d = 2$) и усредняя $N(E)$, как это было показано в [15]. Если же дисперсионное соотношение для изучаемого проводника не известно, то остается только пользоваться уравнениями (10)-(11).

В любом случае уравнение (11) свидетельствует о том, что эффект Холла не затрагивает все электроны при всех возможных энергиях. Есть, правда, одно явление, которое затрагивает все электроны при любых энергиях, – это существование равновесных токов в проводнике, помещенном в магнитное поле (рис. 3).

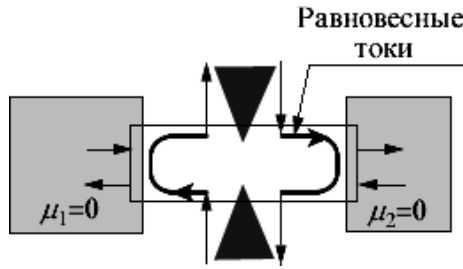


Рис. 3 – Равновесные токи существуют в любом проводнике, находящемся в магнитном поле

Однако же, исчезающие токи, которые существуют даже в атоме водорода, помещенном в магнитное поле, не имеют никакого отношения к транспортным коэффициентам. Транспортные модели надлежит строить таким образом, чтобы нефермиевские токи элиминировались с самого начала. Подобная проблема по отношению к спиновым токам возникает даже без учета внешнего магнитного поля [17].

Далее мы рассмотрим расчет неравновесных электрохимических потенциалов внутри проводника, а также моделирование проводника в четырехтерминальном окружении с использованием уравнения Бюттикера [18, 19]. Однако, сначала конспективно рассмотрим общую динамику электронов в магнитном поле.

2. ПОЧЕМУ ОТЛИЧАЮТСЯ МЕЖДУ СОБОЙ *n*- И *p*-ПРОВОДНИКИ?

Почему холловское сопротивление имеет противоположные знаки для *n*- и *p*-проводников? Основная причина состоит в том, что в *n*-проводниках скорость и импульс сонаправлены, а в *p*-проводниках – антинаправлены; и поскольку $v = dE/dp$, а в *p*-проводниках энергия уменьшается с ростом импульса (рис. 4) [15].

Чтобы увидеть какую роль играет различие в знаках скорости и импульса, обратимся к силе Лоренца (1). Для любого изотропного дисперсионного соотношения скорость и импульс коллинеарны (параллельны или антипараллельны) и пусть находятся, например, под углом θ к продольной оси *z* проводника (рис. 5).

Тогда

$$\begin{aligned} \vec{p} &= p \cos \theta \hat{z} + p \sin \theta \hat{x} \\ \vec{v} &= v \cos \theta \hat{z} + v \sin \theta \hat{x} \end{aligned} \quad (13)$$

а после подстановки в (1) получим

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{qvB}{p} \quad (14)$$

Другими словами, угол θ меняется линейно со временем, а векторы скорости и импульса вращаются с постоянной угловой скоростью ω_C . Однако, для *n*- и *p*-проводников вращение происходит в противоположных направлениях, поскольку отношение p/v

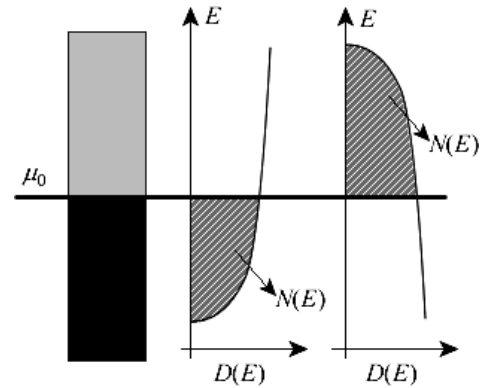


Рис. 4 – Холловское сопротивление имеет разные знаки для *n*-проводников (слева) и *p*-проводников (справа) и обратно пропорционально $N(E)$ при $E = \mu_0$

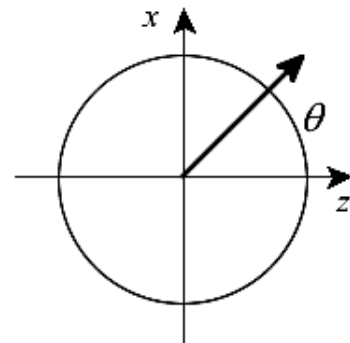


Рис. 5 – К разложению импульса и скорости электрона на проекции вдоль и поперек 2D проводника (рис. 1)

них имеет разные знаки. Это отношение определяется как масса (ур-е (75) в [15]) и является константой для параболической дисперсии (ур-е (78) в [15]), так что циклотронная частота

$$\omega_C = \left. \frac{qvB}{p} \right|_{E=\mu_0} = \left. \frac{qB}{m} \right|_{E=\mu_0} \quad (15)$$

Для линейной дисперсии (ур-е (79) в [15]) масса растет с энергией, так что циклотронная частота (15) уменьшается с ростом плотности носителей тока, что и наблюдается в графене [20].

Магнитное поле вращает электроны по круговой траектории с частотой ω_C . Если $\omega_C \tau \ll 1$, где τ – среднее время свободного вращения, то вращение никогда не заканчивается, что соответствует режиму наблюдения холловского сопротивления (9)-(11) в слабом магнитном поле. В режиме сильного магнитного поля $\omega_C \tau \gg 1$ и наблюдается квантовый эффект Холла.

3. ПРОСТРАНСТВЕННЫЙ ПРОФИЛЬ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Приведем соображения в пользу формулы (10)-(11) для холловского сопротивления, опираясь на общую теорию баллистического транспорта, изложенную в Приложении 1 работы [21].

В модели упругого резистора скорость дрейфа определяется разностью потенциалов

$$\delta\mu = \mu^+ - \mu^- \quad (16)$$

между состояниями, связанными со стоком, и состояниями, связанными с истоком, так что вместо уравнения для тока (6) запишем уравнение (A1.39) из работы [21], а именно:

$$I(E) = \frac{q}{h} M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \delta\mu, \quad (17)$$

где для числа мод используется формула (67) из работы [15]

$$\frac{M(E)}{h} = \frac{D(E)v(E)}{\pi L}. \quad (18)$$

Из уравнений (A1.15) и (A1.23) работы [21] вместо уравнения (7) имеем разность потенциалов, связанную с напряжением, приложенным к концам проводника,

$$\delta\mu = \frac{qV\lambda}{L + \lambda} \cong q\lambda \frac{V}{L}. \quad (19)$$

Так же как из (6) и (7) следует формула Друде для проводимости

$$G = \frac{I}{V} = \sigma \frac{W}{L}, \quad (20)$$

где удельная проводимость

$$\sigma = \frac{q\bar{\mu}N}{WL}, \quad (21)$$

так и из (17) и (18) следует более общее выражение для проводимости, полученное в [15].

Сейчас покажем, что вместо стандартного уравнения эффекта Холла (8) имеет место уравнение

$$\frac{V_H}{W} = \frac{2}{\pi} \frac{\delta\mu}{p} B \quad (22)$$

которое вместе с (17) и (18) дает приведенное выше выражение (10)-(11) для холловского сопротивления однодотового упругого резистора.

Ранее в работе [21] было получено уравнение (A1.12)

$$v_z \frac{\partial \mu}{\partial z} = -\frac{\mu - \mu_0}{\tau}, \quad (23)$$

решения которого определяют электрохимические потенциалы μ^+ и μ^- (рис. 6).

Покажем, что эти решения могут быть записаны в виде

$$\mu(z, \theta) \equiv \bar{\mu}(z) + \frac{2}{\pi} \delta\mu \cos \theta. \quad (24)$$

Поскольку речь идет об упругом резисторе, электроны в котором движутся при фиксированной энергии и стало быть имеют постоянный импульс, удобно использовать цилиндрические координаты p, θ (рис. 7) вместо декартовых p_x, p_y .

Пусть мы рассматриваем электроны, движущиеся под фиксированным углом θ . Тогда с учетом (19) получим

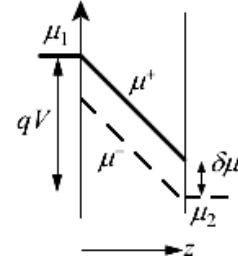
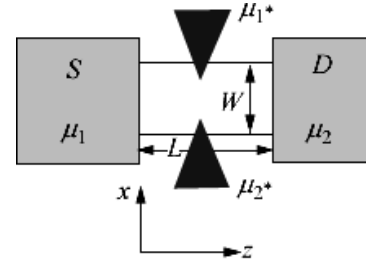


Рис. 6 – Пространственный профиль потенциалов μ^+ и μ^- вдоль длины проводника

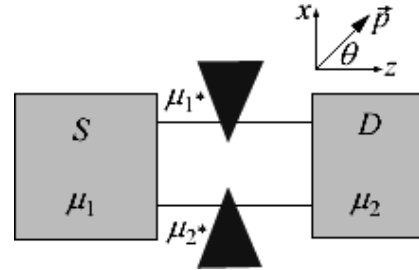


Рис. 7 – К ориентации цилиндрических координат p, θ относительно канала проводимости

$$\mu(z) = \bar{\mu}(z) + \frac{qV}{L} v\tau \cos \theta, \quad (25)$$

имея в виду, что в этом простом случае длина свободного пробега

$$2v_z\tau = 2v\tau \cos \theta. \quad (26)$$

Сравнивая (25) и (24) и выполнив усреднение по углам для 2D проводника (ф-ла (58) из работы [15]), для разности потенциалов получаем

$$\delta\mu \approx \frac{qV}{L} \frac{\pi}{2} v\tau, \quad (27)$$

и, наконец, комбинируя (25) и (27), получаем искомое выражение (24).

Теперь вопрос в том, как изменится решение (24) уравнения (23) при учете силы Лоренца, создаваемой магнитным полем. Для этого нам потребуется транспортное уравнение Больцмана в приближении времени релаксации [22]

$$v_x \frac{\partial \mu}{\partial x} + v_z \frac{\partial \mu}{\partial z} + F_x \frac{\partial \mu}{\partial p_x} + F_z \frac{\partial \mu}{\partial p_z} = -\frac{\mu - \mu_0}{\tau}, \quad (28)$$

где слева сохранены все x - и z -компоненты, поскольку речь идет о 2D проводнике в плоскости xz (рис. 1). Это уравнение по сравнению с его частным случаем (23)

содержит три новых слагаемых. Два из них связаны с силой Лоренца и могут быть переписаны в виде

$$F_x \frac{\partial \mu}{\partial x} + F_z \frac{\partial \mu}{\partial z} = \vec{F} \cdot \nabla_{\mu} = \frac{F_{\theta}}{p} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} + F_r \frac{\partial \mu}{\partial r}, \quad (29)$$

где радиальная составляющая силы Лоренца (1) отсутствует, а угловая составляющая

$$F_r = 0, \quad F_{\theta} = -qvB. \quad (30)$$

Теперь уравнение (28) запишется в виде

$$v_x \frac{\partial \mu}{\partial x} + v_z \frac{\partial \mu}{\partial z} - \frac{qvB}{p} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} = -\frac{\mu - \mu_0}{\tau}. \quad (31)$$

С учетом того, что решением уравнения (23) служит уравнение (24), не трудно убедиться, что решением уравнения (31) будет

$$\mu(z, \theta, x) = \bar{\mu}(z) + \frac{2}{\pi} \delta \mu \cos \theta - \frac{2}{\pi} \frac{\delta \mu}{p} qBx, \quad (32)$$

откуда следует

$$-qV_H = \mu(x=W) - \mu(x=0) = -\frac{2}{\pi} \frac{\delta \mu}{p} qBW \quad (33)$$

и соответственно искомое уравнение (22).

Прежде, чем перейти к интересующему нас измерению потенциала Холла в четырехтерминальной модели проводника, рассмотрим более подробно общие вопросы измерения электрохимических потенциалов.

4. ИЗМЕРЕНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ. ФОРМУЛЫ ЛАНДАУЭРА И БЮТТЕКЕРА

Классическое распределение Ферми (ур-е (10) в работе [15]) с высокой точностью пригодно для массивных контактов, которые всегда остаются практически в равновесном состоянии, но это не обязательно справедливо для небольших проводников даже при малой приложенной разности потенциалов. В Приложении 1 работы [21] показано, как важно ввести два отдельных электрохимических потенциала μ^+ и μ^- для понимания физического смысла граничного сопротивления как основы новой формулировки закона Ома. Неравновесные электрохимические потенциалы этого типа оказываются весьма полезными и широко используются в практической наноэлектронной инженерии, хотя и поныне все еще высказываются сомнения в их концептуальной ценности и даже измеримости.

Далее на простом примере мы рассмотрим особенности неравновесных потенциалов и вопросы их измеримости, что позволит увязать их с представлениями и формулами Ландауэра и Бюттекера [18, 23-27], которые занимают центральное место в теории транспортных процессов современной мезофизики.

Следуя Ландауэру [23-27], рассмотрим баллистический канал с одним локализованным дефектом, пропускающим долю T падающих на дефект электронов и отражающим долю $1 - T$ назад (рис. 8). Мы могли бы следовать логике рассуждений в Приложе-

нии 1 работы [21] и получили бы пространственные профили потенциалов μ^+ и μ^- в канале с дефектом, как это качественно показано на рис. 8, и таким образом оценили бы сопротивление, оказываемое дефектом, как это проделал Ландауэр еще в 1957 году.

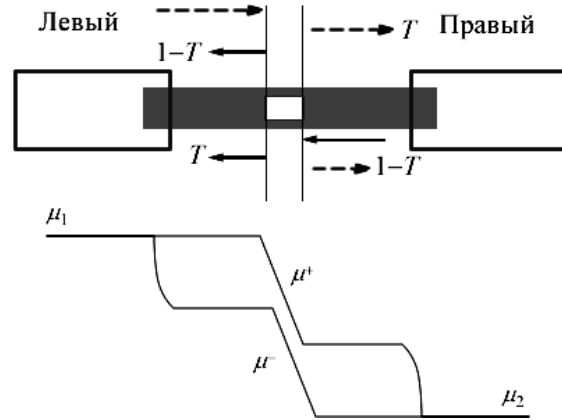


Рис. 8 – Профиль неравновесных потенциалов в канале с одним дефектом

Преодолеть высказываемые сомнения в реалистичности неравновесных потенциалов могли бы четырехтерминальные эксперименты (рис. 9) с использованием двух дополнительных контактов, проводящих незначительный ток, с тем, чтобы измерить падение напряжения на дефекте.

Мы покажем, что в случае одинаковых и слабосвязанных пробных контактов четырехтерминальная проводимость

$$G_{4t} = \frac{I}{(\mu_1^* - \mu_2^*)/q} = M \frac{q^2}{h} \frac{T}{1-T}, \quad (34)$$

где M – число мод проводника, а двухтерминальная проводимость имеет меньшее значение

$$G_{2t} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/q} = M \frac{q^2}{h} T, \quad (35)$$

так что различие между ними и есть граничное сопротивление (рис. 10)

$$\frac{1}{G_{2t}} - \frac{1}{G_{4t}} = \frac{h}{q^2 M}. \quad (36)$$

Хотя граничное сопротивление было предсказано и обнаружено Ю.В. Шарвиним у металлических проводников еще в 1965 году [28, 29], его вездесущая роль признана все еще недостаточно широко и сегодня. В первой половине 80-х годов шла дискуссия о смысле и различии двух формул проводимости (34) и (35), когда, наконец, в 1986 г. Имри не идентифицировал различие между ними (36) как граничное сопротивление [30, 31]. При становлении мезофизики уравнение (35) получило широкую известность и было известно как формула Ландауэра, тогда как действительно оригинальная формула Ландауэра (34) была почти забыта. Падение напряжения на дефекте, контактное сопротивление и обе формулы Ландауэра подробно обсуждаются в обзоре Лесовика и Садовского [32].

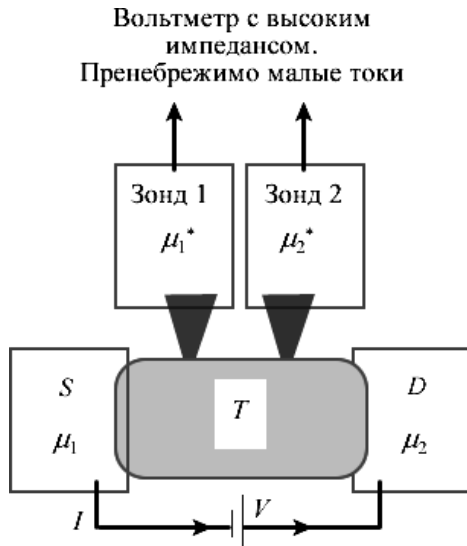


Рис. 9 – Четырехтерминальный эксперимент по измерению проводимости 1D канала с одним дефектом с коэффициентом пропускания T

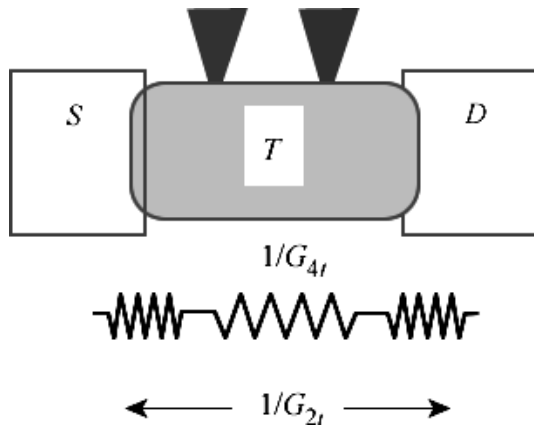


Рис. 10 – Двухтерминальное сопротивление можно рассматривать как сопротивление на дефекте, соединенное последовательно с граничными сопротивлениями

Одна из проблем в годы становления мезофизики состояла в том, что контакты были сильно связаны с основным проводником и вели себя как «дополнительные дефекты», исключить которые было не так просто. Бюттекер [18, 27] с целью интерпретации четырехтерминальных измерений предложил элегантную формулу

$$I_m = (1/q) \sum_n G_{m,n} (\mu_m - \mu_n), \quad (37)$$

связывающую ток на контакте с номером m с электрохимическими потенциалами на других контактах, где $G_{m,n}$ есть проводимость, определяемая через коэффициент прохождения $T_{m,n}$ между контактами m и n . Для двухтерминальной схемы измерений формула Бюттекера упрощается до

$$I_1 = (1/q) G_{1,2} (\mu_1 - \mu_2) = -I_2 \quad (38)$$

и совпадает с двухтерминальной формулой Ландауэра (35), если проводимость $G_{1,2}$ идентифицировать как $(q^2/h)M$.

Если бы мы знали все химпотенциалы μ_m , могли бы воспользоваться формулой Бюттекера (37) и вычислили бы все токи I_m . Но в четырехтерминальных измерениях (рис. 9) нам не известны электрические потенциалы на контактах 1^* и 2^* , так что нам не известны химпотенциалы μ_{1^*} и μ_{2^*} . Однако, мы знаем токи I_{1^*} и I_{2^*} , и они должны быть равны нулю (рис. 9). Если же нам известны на каждом контакте либо μ_m , либо I_m , формула Бюттекера позволяет посчитать все недостающие величины.

Рассмотрим ландауэровское падение напряжения на дефекте (рис. 8) и покажем, что для слабосвязанных контактов формула Бюттекера дает те же самые результаты, что и неравновесные потенциалы μ^+ и μ^- внутри проводника.

Потенциал, измеряемый пробным контактом (рис. 9), есть некое среднее значение потенциалов μ^+ и μ^- (рис. 11), при этом корректное усреднение определяется конструкцией контактов. Промоделируем такое измерение путем сопоставления проводимостей g^+ и g^- двум потокам электронов I^+ и I^- (рис. 11). Полагая ток на пробном контакте нулевым, имеем

$$g^+ (\mu^+ - \mu_{зонд}) + g^- (\mu^- - \mu_{зонд}) = 0, \quad (39)$$

так что

$$\mu_{зонд} = \frac{g^+}{g^+ + g^-} \mu^+ + \frac{g^-}{g^+ + g^-} \mu^-, \quad (40)$$

где весовые коэффициенты

$$\frac{g^+}{g^+ + g^-} = \alpha, \quad \frac{g^-}{g^+ + g^-} = 1 - \alpha. \quad (41)$$

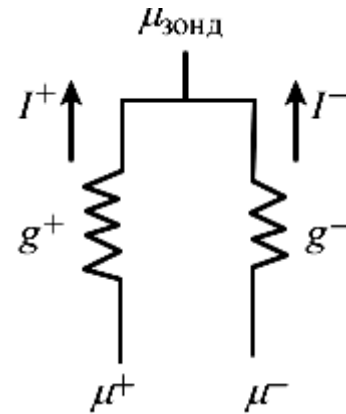


Рис. 11 – К подсчету химпотенциала на пробном контакте

Предполагая, что в измерениях используются неинвазивные пробные контакты атомных размеров, можно ожидать, что проводимости будут практически одинаковыми, так что весовой коэффициент $\alpha \sim 50\%$, и пробный контакт меряет среднее арифметическое

$$\mu_{зонд} = (\mu^+ + \mu^-) / 2. \quad (42)$$

Если контакт недостаточно мал и по разному возмущает потоки I^+ и I^- , весовой коэффициент α отличен от 50%. Если к тому же оба пробных кон-

такта 1^* и 2^* в измерительной схеме (рис. 9) отличаются весовыми коэффициентами, то измеренное сопротивление дефекта окажется иным по сравнению с ландауэровским значением (34).

5. ФОРМУЛЫ ЛАНДАУЭРА

Вернёмся теперь к задаче нахождения профиля неравновесных потенциалов в канале с дефектом (рис. 8). Сначала сбалансируем выходящие и входящие токи (рис. 12):

$$I_R^+ = TI_L^+ + (1-T)I_R^-, \quad (43a)$$

$$I_L^- = (1-T)I_L^+ + TI_R^-. \quad (43b)$$

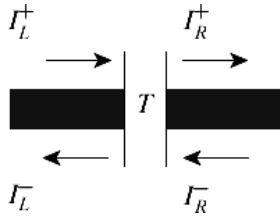


Рис. 12 – Распределение токов слева и справа от дефекта

Затем, следуя формулам (A1.35) и (A1.36) Приложения 1 работы [21], от токов перейдем к функциям распределения

$$f_R^+ = Tf_L^+ + (1-T)f_R^-, \quad (44a)$$

$$f_L^- = (1-T)f_L^+ + Tf_R^-, \quad (44b)$$

а затем к потенциалам

$$\mu_R^+ = T\mu_L^+ + (1-T)\mu_R^- = T\mu_1 + (1-T)\mu_2, \quad (45a)$$

$$\mu_L^- = (1-T)\mu_L^+ + T\mu_R^- = (1-T)\mu_1 + T\mu_2. \quad (45b)$$

Упростим выкладки, выбрав потенциал на одном контакте равным нулю, а на другом – равным единице (рис. 13).

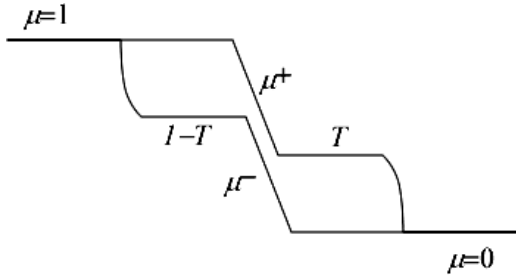


Рис. 13 – Профили потенциалов μ^+ и μ^- на дефекте, нормированные на суммарную разность потенциалов, равную единице

Нужную разность потенциалов всегда можно учесть путем умножения на $\mu_1 - \mu_2 = qV$. Тогда уравнения (45) упрощаются до

$$\mu^+ - \mu^- = T(\mu_1 - \mu_2) \quad (46)$$

и вместе с выражением для тока

$$I = \frac{q}{h} M(\mu^+ - \mu^-) \quad (47)$$

дают стандартную формулу Ландауэра (35).

Для получения первой формулы Ландауэра (34) находим скачок на дефекте либо потенциала μ^+ , либо μ^- :

$$\mu_L^+ - \mu_R^+ = (1-T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (48a)$$

$$\mu_L^- - \mu_R^- = (1-T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (48b)$$

а затем делим ток на эту разность и получаем формулу (34).

Не забудем, что нас интересует измерение электрохимических потенциалов внутри проводника. Как это соотносится с измерением напряжения неинвазивным зондом сканирующего туннельного микроскопа (СТМ)? Если предположить, что такой зонд СТМ измеряет среднее значение электрохимических потенциалов μ^+ и μ^- , то получим график на рис. 14, сравнение которого с рис. 13 и позволяет утверждать, что неинвазивный зонд СТМ действительно измеряет среднее значение электрохимического потенциала $(\mu^+ + \mu^-)/2$.

Что если зонд СТМ измеряет средневзвешенное значение μ^+ и μ^- с весовым коэффициентом a (40), отличным от 50%? До тех пор, пока весовой коэффициент a остается одинаковым для обоих потенциалов μ^+ и μ^- , скачок на дефекте (48) остается прежним

$$\mu_L^{\text{зонд}} - \mu_R^{\text{зонд}} = (1-T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (49)$$

что ведет к той же самой первой формуле Ландауэра (34).

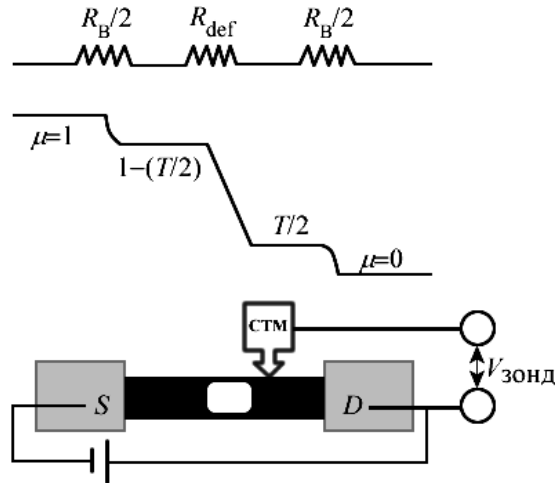


Рис. 14 – Сканирующий туннельный микроскоп измеряет среднее значение электрохимического потенциала $(\mu^+ + \mu^-)/2$

Если же весовые коэффициенты различны для μ^+ и μ^- , то формула (34) окажется неверной. В предельном случае, когда весовой коэффициент a равен нулю слева и единице справа (рис. 11),

$$\mu_L^{\text{зонд}} - \mu_R^{\text{зонд}} = (1-2T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (50)$$

что ведет к отрицательному сопротивлению при $T > 0.5$.

Концепция неравновесных потенциалов μ^+ и μ^- ведет к интуитивно правильным результатам и сейчас уже широко используется, однако, ее применение требует осторожности. Именно дефект вызывает скачок потенциала, а не область баллистического транспорта (рис. 14), подразумевая, что сопротивление по (34) определяется дефектом. Нужно помнить, что мы все еще рассматриваем упругие резисторы. Да, скачок напряжения IR остается, а диссипация джоулева тепла I^2R в проводнике отсутствует и происходит лишь на контактах.

6. ФОРМУЛА БЮТТЕКЕРА

Его формула (37) содержит непосредственно измеряемые величины, оставляя за ее пределами любые вопросы, касающиеся немых внутренних переменных. Хотелось бы подчеркнуть общую применимость формулы Бюттекера, независимо от того, проводник является упругим или не является таковым. Действительно, как мы сейчас увидим, для вывода формулы (37) потребуется лишь совсем немного сверх обычной линейной теории электрических цепей.

Определим для начала мультитерминальную проводимость

$$G_{m,n} \equiv -\frac{\partial I_m}{\partial(\mu_n/q)}, \quad m \neq n \quad (51a)$$

$$G_{m,m} \equiv +\frac{\partial I_m}{\partial(\mu_m/q)}, \quad (51b)$$

где естественно задаться вопросом, почему при $m \neq n$ знак выбран отрицательным в отличие от случая, когда $m = n$. Выбор знака можно проиллюстрировать на примере четырехтерминального измерения канала с одним дефектом (рис. 15).

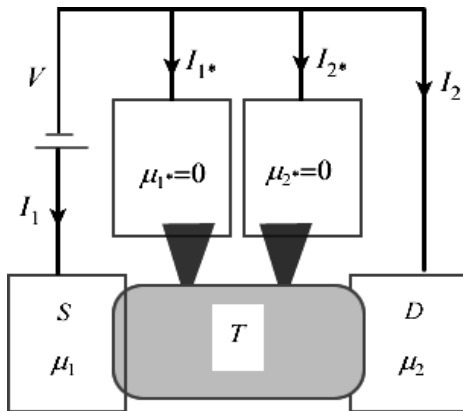


Рис. 15 – Мысленный эксперимент с четырехтерминальным измерением канала с одним дефектом, как на рис. 8

Увеличение химпотенциала μ_1 ведет к увеличению тока, входящего в контакт 1 (положительный ток), и к оттоку от всех других контактов (отрицательные токи). Знаки в (51) выбраны таким образом, чтобы коэффициенты проводимости $G_{m,n}$ всегда были положительными, как того интуитивно требует смысл понятия проводимости.

Теперь ток (37) перепишем через коэффициенты проводимости

$$I_m = G_{m,m} \mu_m/q - \sum_{n \neq m} G_{m,n}, \quad (52)$$

при этом коэффициенты должны удовлетворять следующим двум правилам суммируемости.

Во-первых, если все химпотенциалы одинаковы (состояние равновесия), все токи по (52) должны быть равны нулю, что влечет за собой правило сумм

$$G_{m,m} = \sum_{n \neq m} G_{m,n}. \quad (53a)$$

Во-вторых, при произвольных значениях химпотенциалов сумма всех токов должна быть равна нулю, что приводит ко второму правилу сумм

$$G_{m,m} = \sum_{n \neq m} G_{n,m}, \quad (53b)$$

доказательство которого не столь очевидно, как это имело место с первым правилом сумм, и получить его можно опираясь на уравнение (52). Сначала просуммируем все токи (52)

$$\sum_m I_m = 0 = \sum_m G_{m,m} \mu_m/q - \sum_{m,n} G_{m,n} \mu_n/q, \quad (54)$$

затем воспользуемся правилами суммирования (53) и поменяем местами индексы в двойной сумме

$$0 = \sum_m G_{m,m} \mu_m/q - \sum_{m,n} G_{n,m} \mu_m/q, \quad (55)$$

что при произвольных значениях химпотенциалов справедливо только, если удовлетворяется второе правило сумм (53b). Окончательно,

$$G_{m,m} = \sum_{n \neq m} G_{m,n} = \sum_{n \neq m} G_{n,m}. \quad (56)$$

Воспользовавшись правилами сумм (56), перепишем первое слагаемое в (52) в виде суммы и в результате получим знаменитую формулу Бюттекера (37). Обратим внимание на то, что в формуле Бюттекера суммирование нет нужды ограничивать по $n \neq m$, поскольку слагаемое при $n = m$ всегда равно нулю.

Иногда формулу Бюттекера (37) удобнее записать через так называемые коэффициенты отклика [33]

$$I_m = \sum_n g_{m,n} \mu_n/q, \quad (57)$$

которые определяются следующим образом:

$$g_{m,n} \equiv -G_{m,n}, \quad m \neq n \quad (58)$$

$$g_{m,m} \equiv G_{m,m}$$

с правилами суммирования

$$\sum_n g_{m,n} = \sum_n g_{n,m} = 0. \quad (59)$$

Применим подход Бюттекера к ситуации на рис. 14, где утверждается, что два неинвазивных зонда, расположенные до и после дефекта с коэффициентом пропускания T , генерируют потенциалы соответственно $1 - T/2$ и $T/2$ (рис. 16). Получим ли мы те же результаты методом Бюттекера?

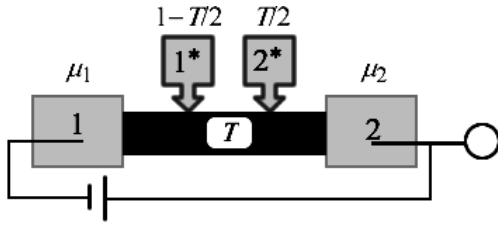


Рис. 16 – На зондах до и после дефекта с коэффициентом пропускания T генерируются потенциалы $1 - T/2$ и $T/2$, соответственно

Имея в виду, что в этом измерении речь идет о четырех токах и четырех потенциалах на контактах 1, 2, 1* и 2*, запишем уравнение (57) в матричном виде

$$\begin{Bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_{1^*} \\ I_{2^*} \end{Bmatrix} = \frac{Mq}{h} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_{1^*} \\ \mu_{2^*} \end{Bmatrix}, \quad (60)$$

где матрицы A, B, C и D имеют форму (2×2) .

Поскольку

$$\begin{Bmatrix} I_{1^*} \\ I_{2^*} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (61)$$

то можно записать, что

$$\begin{Bmatrix} \mu_{1^*} \\ \mu_{2^*} \end{Bmatrix} = -D^{-1}C \begin{Bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{Bmatrix} \quad (62)$$

с матрицами C и D в виде

$$[C \ D] = \begin{bmatrix} -t_1 & -t_2 & r & 0 \\ -t'_2 & -t'_1 & 0 & r' \end{bmatrix}, \quad (63)$$

где элементы матрицы C интерпретируются как вероятности межконтактного транспорта 1 на 1*, 2 на 1*, 2 на 2* и 1 на 2* (рис. 17), причем предполагается, что контакты 1* и 2* слабо связаны и транспортом между ними можно пренебречь.

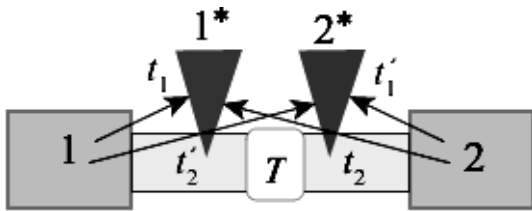


Рис. 17 – Вероятности межконтактного транспорта при четырехтерминальном измерении проводимости канала с одним дефектом с коэффициентом пропускания T

Правила сумм (59) дают

$$\begin{aligned} r &= t_1 + t_2 \\ r' &= t'_1 + t'_2 \end{aligned} \quad (64)$$

Из уравнений (62)-(64) имеем

$$\mu_{1^*} = \frac{t_1}{t_1 + t_2} \mu_1 + \frac{t_2}{t_1 + t_2} \mu_2, \quad (65a)$$

$$\mu_{2^*} = \frac{t'_2}{t'_1 + t'_2} \mu_1 + \frac{t'_1}{t'_1 + t'_2} \mu_2. \quad (65b)$$

Учтем также, что вероятность t_1 (рис. 17) может быть представлена как сумма вероятности τ прямого переноса $1 \rightarrow 1^*$ и вероятности $(1 - T)\tau$ отразиться от дефекта, а затем достичь контакта 1*:

$$t_1 = \tau + (1 - T)\tau. \quad (66a)$$

Аналогичные соображения для вероятности t_2 дают

$$t_2 = T\tau, \quad (66b)$$

поскольку на пути электрона с контакта 2 сначала нужно преодолеть дефект (вероятность T), а затем попасть на контакт 1* (вероятность τ). По тем же соображениям $t_1 = t_1'$ и $t_2 = t_2'$ (рис. 17).

Пользуясь уравнениями (66) и положив $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 0$, из уравнений (65) получаем ожидаемые значения для потенциалов на зондах 1* и 2*:

$$\begin{aligned} \mu_{1^*} &= 1 - (T/2) \\ \mu_{2^*} &= T/2 \end{aligned}, \quad (67)$$

в чем можно было бы и не сомневаться, поскольку в формуле Бюттекера фигурируют только характеристики контактов и фактически свернуты все тонкости, связанные с неравновесными электрохимическими потенциалами.

7. НЕ ТРИВИАЛЬНО ЛИ УРАВНЕНИЕ БЮТТЕКЕРА?

В конце концов, любую сложную электрическую схему всегда можно представить эквивалентной схемой эффективных транзисторов, как, например, на рис. 18 для трех терминалов. Даст ли нам стандартная теория электрических цепей такой же результат, как и уравнение Бюттекера (37)?

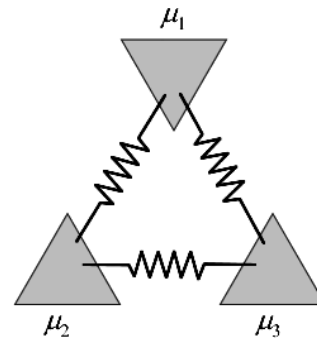


Рис. 18 – Уравнение Бюттекера эквивалентно сети эффективных резисторов только в том случае, если все проводимости обратимы ($G_{m,n} = G_{n,m}$)

Ответ на этот вопрос несомненно положительный, однако, только для нормальных взаимных электрических цепей, у которых проводимости между всеми терминалами полностью обратимы

$$G_{m \leftarrow n} = G_{n \leftarrow m}, \quad (68)$$

другими словами, электроны одинаково легко транспортируются в обе стороны для каждой пары терминалов (m, n).

Область применимости же уравнения Бюттекера (37) намного более широкая, чем нормальные взаимные электрические цепи, например, она применима для проводников в магнитном поле, когда не имеет места взаимная проводимость:

$$G_{m \leftarrow n} \neq G_{n \leftarrow m}. \quad (69)$$

Для таких ситуаций обосновать применимость уравнения Бюттекера (37) не так то просто. Если в уравнении Бюттекера (37) проводимость $G_{m,n}$ поменять на $G_{n,m}$, то мы просто получим ошибочную формулу, применяя которую к многотерминальным невязанным цепям получим ошибочные результаты, не соответствующие формуле Бюттекера (37).

8. ИЗМЕРЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ХОЛЛА

Обратимся, наконец, к вычислению холловского напряжения с использованием формулы Бюттекера (37) при четырехтерминальном эксперименте, отличающемся от рассмотренного выше (рис. 17) размещением пробных зондов 1* и 2* поперек проводника (рис. 19).

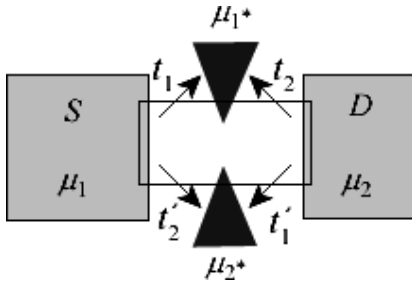


Рис. 19 – Вероятности межконтактного транспорта при четырехтерминальном измерении холловского напряжения

В отсутствии магнитного поля разность зондовых потенциалов нулевая. При включении магнитного поля перпендикулярно к поверхности проводника (плоскости рисунка) электроны, движущиеся слева направо, отклоняются вдоль или против направления движения к боковым краям проводника (рис. 1), создавая различие между зондовыми потенциалами μ_1^* и μ_2^* , которое мы и хотим вычислить в зависимости от напряжения, создающего ток в проводнике.

Уравнения для зондовых потенциалов остаются прежними (65), если вероятностям межконтактного транспорта придать смысл, показанный на рис. 19. Вычисление этих вероятностей либо численно, либо в полуклассическом приближении приводит к холловскому напряжению V_H

$$-qV_H = \mu_1^* - \mu_2^* \quad (70)$$

в согласии с уже полученным ранее уравнением (22).

Уравнение (22) было получено опираясь на транспортное уравнение Больцмана, но его можно получить и из уравнений (65), если переписать их применительно к тонкому проводнику ширины где-нибудь посередине длинного проводника меньшей,

чем средняя длина свободного пробега, с электронами, движущимися слева, где потенциал μ^+ , и справа, где потенциал μ^- , для потенциалов на середине проводника на его боковых сторонах в точках, имитирующих зонды 1* и 2* (рис. 20), а именно:

$$\mu(x+dx) = \frac{t_1}{t_1+t_2} \mu^+ + \frac{t_2}{t_1+t_2} \mu^-, \quad (71a)$$

$$\mu(x) = \frac{t'_2}{t'_1+t'_2} \mu^+ + \frac{t'_1}{t'_1+t'_2} \mu^-. \quad (71b)$$

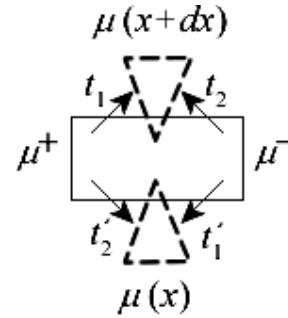


Рис. 20 – К выводу уравнения (22) из вероятностей межконтактного транспорта при четырехтерминальном измерении холловского напряжения

Для вычисления вероятностей в уравнениях (71) заметим, что в отсутствии магнитного поля электроны со скоростями, лежащими в пределах угла θ (рис. 5)

$$0 < \theta < +\pi/2,$$

движутся вверх, а лежащими в пределах

$$-\pi/2 < \theta < 0,$$

движутся вниз (рис. 21).

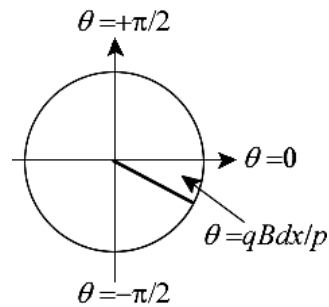


Рис. 21 – К вычислению угла заворота электрона под действием силы Лоренца

Магнитное поле закручивает траекторию электронов на угол, равный произведению угловой скорости (14) на время dx/v , затрачиваемое на преодоление расстояния dx

$$\frac{qvB dx}{p v} = \frac{qB dx}{p}. \quad (72)$$

Тогда вероятности межконтактного транспорта будут пропорциональны углам

$$t_1 = t'_1 : \frac{\pi}{2} + \frac{qB}{p} dx, \quad (73a)$$

$$t_2 = t_2' : \frac{\pi}{2} - \frac{qB}{p} dx \quad (736)$$

и подстановка их в уравнения (71) дает

$$\mu(x + dx) - \mu(x) = \frac{2qB dx}{\pi p} (\mu^+ - \mu^-), \quad (74)$$

так что

$$\frac{d\mu}{dx} = \frac{2qB}{\pi p} \delta\mu \quad (75)$$

в согласии с уравнением (32), а стало быть и с (22).

9. КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА, УРОВНИ ЛАНДАУ И КРАЕВЫЕ СОСТОЯНИЯ В ГРАФЕНЕ

Одним из наиболее эффектных приложений подхода Бюттекера служит интерпретация режима квантового эффекта Холла, когда магнитное поле настолько велико, что электроны, движущиеся от истока, не достигают зонда 2*, а электроны, движущиеся от стока, не достигают зонда 1* (рис. 19). В результате

$$\frac{V_H}{(\mu_1 - \mu_2)/q} = \frac{t_1 - t_2'}{t_1 + t_2'} = 1, \quad (76)$$

поскольку $t_2 = t_2' = 0$, так что холловское напряжение оказывается равным разности потенциалов на концах проводника, а холловское сопротивление равно обычному двухтерминальному сопротивлению.

Интересно, что в этом режиме сопротивление дается выражением (4) с высочайшей степенью точности [4]. Это можно представить себе так, как будто бы мы имеем идеальный баллистический проводник с только граничным сопротивлением. Длина проводников в экспериментах нередко достигает нескольких сот микрометров, подобная баллистичность просто удивительна, что и было отмечено Нобелевской премией в 1985 году (Клаус фон Клитцинг).

Обратимся к графену. В предыдущей публикации [19] сформулирован метод неравновесных функций Грина (НРФГ) в матричной формулировке применительно к решению модельных транспортных задач нанoeлектроники, в частности, для графеновых лент были приведены результаты расчета методом НРФГ коэффициента прохождения и плотности состояний для двух конфигураций ленточных границ – зигзагообразной и креслоподобной в приближении сильной связи в ортогональном базисе с параметрическим учетом взаимодействия лишь соседних атомов через кулоновский ε и резонансный t_0 интегралы (хюккелевское приближение) в полном согласии с результатами вычислений с более точными модельными гамильтонианами. Сейчас мы учтем внешнее магнитное поле для графеновых лент в этом же приближении и приведем результаты расчета коэффициента прохождения и плотности состояний в присутствии магнитного поля, а также квантового эффекта Холла и проводимости графеновых лент в магнитном поле [34].

Изучаемая нами система представляет собой длинный 2D проводник с двумя пробными зондами по обеим сторонам проводника (рис. 22) для измерения поперечного холловского напряжения, возникающего в присутствии магнитного поля, направленного перпендикулярно к поверхности 2D проводника.

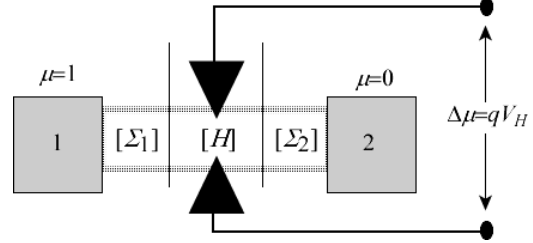


Рис. 22 – К измерению холловского напряжения через разность химпотенциалов, создаваемую между поперечными зондами при включении перпендикулярного к проводнику магнитного поля

Вначале учтем магнитное поле в гамильтониане проводника H и контактных матрицах Σ_1 и Σ_2 метода НРФГ.

Энергия частицы с зарядом $-q$ в поле векторного потенциала A дается выражением

$$E(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{(\vec{p} + q\vec{A}) \cdot (\vec{p} + q\vec{A})}{2m} + U(\vec{r}). \quad (77)$$

Для нахождения параметров хюккелевского гамильтониана с учетом магнитного поля рассмотрим однородную решетку атомов с постоянным значением E_c и постоянным векторным потенциалом. Сначала рассмотрим 1D проводник, вытянутый вдоль оси x

$$E(p_x) = E_c + \frac{(p_x + qA_x)(p_x + qA_x)}{2m}, \quad (78)$$

так что дисперсионное соотношение имеет вид

$$E(k_x) = E_c + \frac{(\hbar k_x + qA_x)(\hbar k_x + qA_x)}{2m} \quad (79)$$

и может быть аппроксимировано функцией косинуса

$$E(k_x) = \varepsilon + 2t \cos\left(k_x a + \frac{qA_x a}{\hbar}\right) \quad (80)$$

с хюккелевскими параметрами ε и t [19]

$$\begin{aligned} \varepsilon &= E_c - 2t \\ t &= -\hbar^2 / 2ma^2 = -t_0' \end{aligned} \quad (81)$$

где a – постоянная решетки. Отличие от однородной решетки без учета поля векторного потенциала [19] состоит лишь в появлении фазового множителя $\exp(\pm iqA_x a / \hbar)$ у резонансных интегралов (рис. 23).

Для однородной решетки 2D проводника фазовые множители с фазами

$$\varphi_x = \frac{qA_x a}{\hbar}, \quad \varphi_y = \frac{qA_y a}{\hbar} \quad (82)$$

появляются у резонансных интегралов в обоих направлениях плоскости проводника (рис. 24).

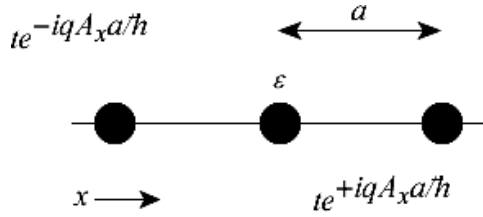


Рис. 23 – Однородный 1D проводник в поле векторного потенциала

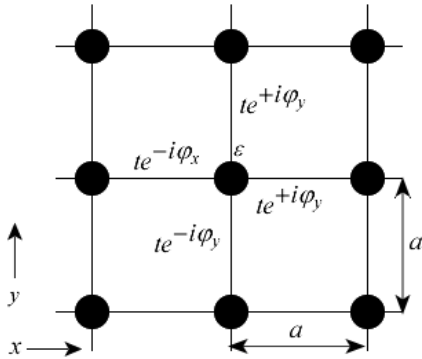


Рис. 24 – Учет магнитного поля, направленного вдоль оси z, сводится к учету фазовых множителей у резонансных интегралов хюккелевской решетки

Магнитное поле

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \tag{83}$$

так что интересующее нас магнитное поле, перпендикулярное плоскости 2D проводника,

$$B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \tag{84}$$

Холловское сопротивление дается отношением холловского напряжения к току по проводнику (9). Холловское напряжение можно вычислить двумя способами. Используя четырехтерминальную измерительную схему и уравнение Бюттекера, вычислить разность химпотенциалов, создаваемых на двух поперечных зондах (рис. 22). По другому, в рамках метода НРФГ [19] след неравновесной функции Грина G^n

$$2\pi N = \text{Tr} [G^n] \tag{85}$$

пропорционален числу электронов, а спектральная функция A

$$2\pi D(E) = A \tag{86}$$

пропорциональна плотности состояний, так что заселенность состояния j есть отношение соответствующих диагональных элементов функции Грина и спектральной функции

$$f(j) = \frac{G^n(j,j)}{A(j,j)}. \tag{87}$$

В области линейного отклика заселенность пропорциональна химпотенциалу [15]. Если на одном контакте положить $f = 0$, а на другом $f = 1$, так что разность между ними есть qV , то заселенность $f(j)$, вычисленная по (87), будучи умноженной на qV , даст значение химпотенциала

$$\mu(j) = qVf(j) \tag{88}$$

На рис. 25 показаны результаты вычисления холловского сопротивления, нормированного на квант сопротивления h/q^2 , как функции магнитного поля.

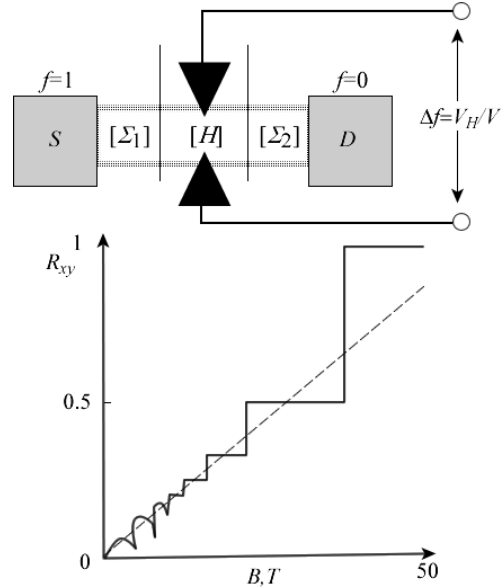


Рис. 25 – Нормированное холловское сопротивление в зависимости от магнитного поля для графеновой ленты шириной $W = 26a = 65 \text{ nm}$ в хюккелевском приближении при энергии $E = t_0$ [19]

Замечательный результат – это появление ступенек в сильных магнитных полях, известный как квантовый эффект Холла. Однако, сначала обратимся к области слабых магнитных полей, где холловское сопротивление, согласно стандартной полужэмпирической теории эффекта Холла, зависит от магнитного поля линейно (9)

$$R_H = B / qn, \tag{89}$$

что и показано на рис. 25 пунктирной линией, вычисленной для

$$n = \frac{N}{LW} = \frac{k^2}{4\pi} \tag{90}$$

при $E = t_0 = 2.7 \text{ эВ}$ и $ka = \pi/3$ с $a = 2.5 \text{ нм}$ [19].

С ростом магнитного поля постепенно возникает ступенчатая зависимость холловского сопротивления от поля, обязанная квантовым эффектам в виде уровней Ландау (рис. 26). На этом экранном снимке отложены диагональные элементы спектральной функции $A(j,j;E)$ в зависимости от энергии E , вычисленные методом НРФГ и представляющие собой локальную по ширине j графеновой ленты плотность состояний для трех уровней Ландау.

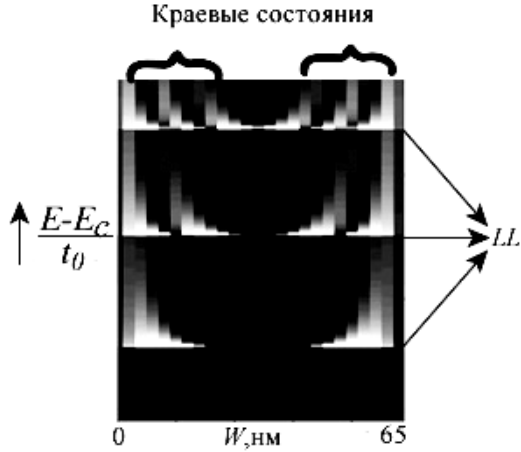


Рис. 26 – Локальная по ширине графеновой ленты плотность состояний в зависимости от энергии уровней Ландау при $B = 20 T$

Энергия уровней Ландау

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (91)$$

где n – целое число, ω_c – циклотронная частота (15). Эквидистантные уровни Ландау располагаются друг относительно друга с инкрементом

$$\hbar \omega_c = \frac{\hbar q B}{m} = \frac{2q B a^2}{h} t_0, \quad (92)$$

выражение для которого получено с использованием (15) и (81). При использованных в расчете значениях $B = 20 T$ и $a = 2.5$ нм инкремент получается равным $\hbar \omega_c \approx 0.37 t_0$ в неплохом согласии с результатами расчета методом НРФГ (рис. 26).

Выражение для энергии уровней Ландау (91) есть чисто квантовый результат аналитического решения уравнения Шредингера с учетом векторного потенциала, лежащего также в основе численного решения методом НРФГ для конкретной геометрии графеновой ленты. Этот результат можно понять качественно, если обратиться к полуклассической модели, согласно которой электроны движутся по круговым орбитам, совершая один оборот за время

$$t_c = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi p}{q v B}, \quad (93)$$

так что длина окружности орбиты с радиусом r_c

$$2\pi r_c = v t_c = \frac{2\pi p}{q B}. \quad (94)$$

Если теперь учесть квантовое ограничение, согласно которому длина окружности орбиты должна быть такой, чтобы на ней укладывалось целое число K де-Бройлевских длин волн h/p , то получим

$$\frac{2\pi p}{q B} = K \cdot h / p \quad (95)$$

Полуклассически электрон может иметь любую энергию $E = p^2/2m$, однако, квантовое ограничение в виде равенства длины окружности целому числу K

длин волн ведет к

$$p^2 = K \cdot \hbar q B, \quad (96)$$

так что разрешенные значения энергии

$$E = K \frac{\hbar q B}{2m} = K \frac{\hbar \omega_c}{2}, \quad (97)$$

что не совсем то же самое, что и правильный результат (91), но качественно вполне приемлемо.

Если число краевых состояний обозначить K_{es} , то результирующий ток

$$I_H = \frac{q^2}{h} V \cdot K_{es}, \quad (98)$$

поскольку холловское напряжение V_H просто равно напряжению V , приложенному к концам проводника, так как один край проводника находится в равновесии с истоком, а другой – со стоком.

Это ведет к квантованию холловского сопротивления

$$R_H = \frac{h}{q^2} \frac{1}{K_{es}}, \quad (99)$$

порождая у нормированного холловского сопротивления плато при $1/4, 1/3, 1/2$ и 1 (рис. 25) по мере того как магнитное поле генерирует уровни Ландау, изменяя число краевых состояний K_{es} при энергии $E = t_0$ с 4-х до 3-х, до 2-х и до 1-го (рис. 26).

Что касается распределения электрического тока в 2D проводнике в режиме наблюдения квантового эффекта Холла, то часто используют [35, 36] полуклассическую модель движения электронов по так называемым [37] открытым орбитам (skipping orbits) (рис. 27). В результате образуются краевые токи, обеспечивающие исключительно высокую баллистическую проводимость.

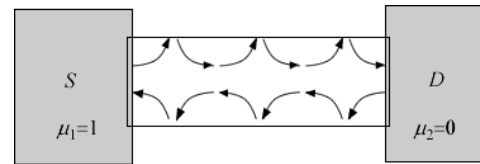


Рис. 27 – Предполагают, что электроны в 2D проводнике в сильном магнитном поле движутся по открытым орбитам, создавая компактные трассы краевых токов, как бы локализованных в квантовом волноводе [37]

Ранее уже приводились результаты расчета методом НРФГ коэффициента прохождения и плотности состояний графеновых лент для двух конфигураций ленточных границ – зигзагообразной ZGNR/Zigzag Graphene NanoRibbon и креслоподобной AGNR/Armchair GNR в отсутствии магнитного поля [19]. Влияние сильного магнитного поля показано на рис. 28.

Уровни Ландау LL/Landau Levels в сильных магнитных полях образуются в таких 2D проводниках, ширина которых достаточна для образования циклотронных орбит. Чем больше ширина проводника, тем требуется меньшее магнитное поле для генерации первого LL.

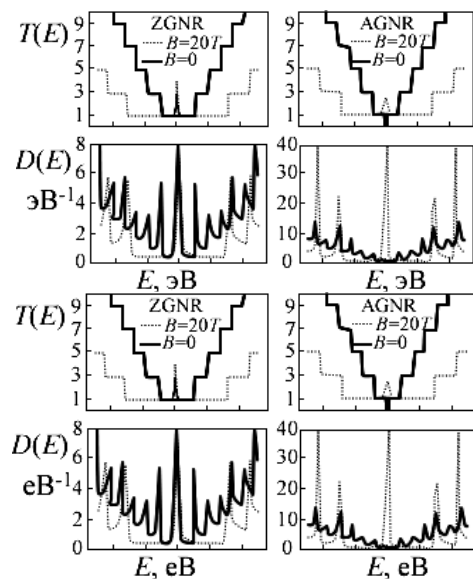


Рис. 28 – Влияние сильного магнитного поля $B = 20 \text{ T}$ на коэффициент прохождения $T(E)$ и плотность состояний $D(E)$ графеновых лент шириной $W = 53 \text{ нм}$ для двух конфигураций границ – ZGNR и AGNR [34]

В графене энергии уровней Ландау

$$E_n^{LL} = \pm v_0 \sqrt{2q\hbar n B}, \quad (100)$$

где фермиевская скорость принималась равной $v_0 = 10^6 \text{ м/с}$ [38]. Согласно (100), первый и второй уровни Ландау при $B = 20 \text{ T}$ возникают при $E_1^{LL} = 0.15 \text{ эВ}$ и $E_2^{LL} = 0.23 \text{ эВ}$. Есть также уровень Ландау при $E = 0$, это нулевой уровень Ландау E_0^{LL} [39-41]. Результаты расчета методом НРФГ (рис. 28) полностью согласуются с приведенными оценками.

За пределами настоящей работы остался спиновый квантовый эффект Холла, рассмотрению которого будет посвящено следующее сообщение.

Настоящая работа явилась результатом посещения одним из нас (ЮАК) курсов лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» и «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитанных он-лайн в январе – апреле 2012 года проф. С. Датта (Supriyo Datta) и курса лекций «Nanoscale Transistors», прочитанных он-лайн в октябре – ноябре 2012 года проф. М.Лундстромом (Mark Lundstrom) в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность проф. Supriya Datta за проявленный интерес к работе и поддержку её публикации.

Нанoeлектроніка: ефект Хола і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу-вгору»

Ю.О. Кругляк¹, П.О. Кондратенко², Ю.М. Лопаткін³

¹ Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, 65016 Одеса, Україна

² Національний авіаційний університет, пр. Космонавта Комарова, 1, 03058 Київ, Україна

³ Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

В рамках концепції «знизу-вгору» сучасної нанoeлектроніки розглядаються класичний і квантовий ефекти Хола, методи вимірювання електрохімічних потенціалів, формули Ландауера і Бютекера, вимірювання холівського потенціала, врахування магнітного поля в методі НРФГ, квантовий ефект Хола, рівні Ландау і крайові стани в графені.

Ключові слова: Нанofізика, Нанoeлектроніка, Молекулярна електроніка, Знизу-вгору, Ефект Хола, Хімпотенціал, Електрохімічний потенціал, Рівні Ландау, Крайові стани, Графен, Метод НРФГ.

Nanoelectronics: the Hall Effect and Measurement of Electrochemical Potentials by «Bottom-Up» Approach

Yu.A. Kruglyak¹, P.A. Kondratenko², Yu.M. Lopatkin³

¹ Odessa State Environmental University 15, Lviv Str., 65016 Odessa, Ukraine

² National Aviation University, 1, Komarov Ave., 03058 Kyiv, Ukraine

³ Sumy State University, 2, Rymsky-Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

Classical and quantum Hall effects, measurement of electrochemical potentials, the Landauer formulas and Buttiker formula, measurement of Hall potential, an account of magnetic field in the NEGF method, quantum Hall effect, Landau method, and edge states in graphene are discussed in the frame of the «bottom-up» approach of modern nanoelectronics.

Keywords: Nanophysics, Nanoelectronics, Molecular electronics, Bottom-up, Hall effect, Quantum Hall effect, QHE, Chemical potential, Electrochemical potential, Landau levels, Edge states, Graphene, NEGF.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E.H. Hall, *Am. J. Math.* **2** No 3, 287 (1879).
2. K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
3. К. фон КЛИТЦИНГ, *УФН* **150** № 1, 107 (1985) (K. von Klitzing, *Ukr. Phys. J.* **150** No 1, 107 (1985)).
4. G.M. Reedtz, M.E. Cage, *J. Res. Nation. Bureau Standards* **92** No 5, 303 (1987).
5. D.S. Tsui, H.L. Stormer, A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
6. Ю.П. Степановский, *Электромагнитные явления* **1** № 3, 427 (1998) (Yu.P. Stepanovskiy, *Elektromagnitnyye yavleniya* **1** No 3, 427 (1998)).
7. Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeki Onoda, A.H. MacDonald, N.P. Ong, *Rev. Mod. Phys.* **82** No 2, 1539 (2010).
8. M.I. Dyakonov, V.I. Perel, *Sov. Phys. JETP Lett.* **13**, 467 (1971).
9. M.I. Dyakonov, V.I. Perel, *Phys. Lett. A* **35** No 6, 459 (1971).
10. C.L. Kane, E.J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
11. S. Srinivasan, A. Sarkar, B. Behin-Aein, S. Datta, *IEEE T. Magn.* **47** No 10, 4026 (2011).
12. C.L. Kane, J.E. Moore, *Phys. World.* **24**, 32 (2011).
13. Supriyo Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012).
14. Ю.А. Кругляк, П.А. Кондратенко, Ю.М. Лопаткин, *Ж. нано- электрон. физ.* **6**, № 1, 01013 (2014) (Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **6** No 1, 01013 (2014)).
15. Ю.А. Кругляк, П.А. Кондратенко, Ю.М. Лопаткин, *Ж. нано- электрон. физ.* **5** № 1, 01023 (2013). (Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **5** No 1, 01023 (2013)).
16. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела, тома 1 и 2* (Москва: Мир: 1979) (N. Ashcroft, N. Mermin, *Fizika tverdogo tela, toma 1 i 2* (Moskva: Mir: 1979)).
17. E.I. Rashba, *Phys. Rev. B* **68** No 24, 241315 (2003).
18. M. Buttiker, *IBM J. Res. Dev.* **32** No 3, 317 (1988).
19. Yu.A. Kruglyak, M.V. Strikha, *Sensor Electron. Microsys. Tech.* **10** No 3, 22 (2013).
20. Yu.A. Kruglyak, M.V. Strikha, *Sensor Electron. Microsys. Tech.* **10** No 4, 5 (2013).
21. Ю.А. Кругляк, П.А. Кондратенко, Ю.М. Лопаткин, *Ж. нано- электрон. физ.* **6** № 4, 04042 (2014). (Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **6** No 4, 04042 (2014)).
22. F.W. Sears, G.L. Salinger, *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics* (Boston: Addison-Wesley: 1975).
23. Rolf Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1** No 3, 223 (1957).
24. Rolf Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
25. Rolf Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **32**, 306 (1988).
26. Rolf Landauer, *J. Math. Phys.* **37** No 10, 5259 (1996).
27. M. Buttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).
28. Yu.V. Shavrin *Sov. Phys. JETP* **21**, 655 (1965).
29. Yu.V. Sharvin, N.I. Bogatina, *Sov. Phys. JETP* **29** No 3, 419 (1969).
30. Y. Imry, *Directions in Condensed Matter Physics* (Ed. by G. Grinstein, G. Mazenko) (Singapore: World Scientific: 1986).
31. Y. Imry, Rolf Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71** No 2, S306 (1999).
32. Г.Б. Лесовик, И.А. Садовский, *УФН* **181** № 10, 1041 (2011) (G.B. Lesovik, I.A. Sadovskiy, *Usp.-Phys.* **181** No 10, 1041 (2011)).
33. A.D. Stone, A. Szafer, *IBM J. Res. Dev.* **32** No 3, 384 (1988).
34. R.G. Mojarad, A.N.M. Zainuddin, G. Klimeck, S. Datta, *J. Comput. Electron.* **7**, 407 (2008).
35. R.J. Haug, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 131 (1993).
36. M.E. Cage, *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **102**, 677 (1997).
37. Дж.М. Мартинес-Дуарт, Р.Дж. Мартин-Палма, Ф. Агулло-Рueda, *Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники* (Москва: Техносфера: 2007) (Dzh.M. Martines-Duart, R.Dzh. Martin-Palma, F. Agullo-Ruyeda, *Nanotekhnologii dlya mikro- i optoelektroniki* (Moskva: Tekhnosfera: 2007)).
38. C. Berger, Song Zhimin, Li Xuebin, Wu Xiaosong, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, Li Tianbo, J. Hass, A.N. Marchenkov, E.H. Conrad, P.N. First, W.A. de Heer, *Science* **312**, 1191 (2006).
39. L. Brey, H.A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 195408 (2006).
40. N.M. Peres, A.H. Castro Neto, F. Guinea, *Phys. Rev. B* **73**, 195411 (2006).
41. D.A. Abanin, P.A. Lee, L.S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 176803 (2006).