

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 73.43.-f, 73.50.Jt, 84.37.+q

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ЕФЕКТ ХОЛЛА І ВИМІРЮВАННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ У КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

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

тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*

* Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України
пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, *E-mail: maksym_strikha@hotmail.com*

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ЕФЕКТ ХОЛЛА І ВИМІРЮВАННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ У КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. На продовження попередніх навчально-оглядових статей авторів у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядаються класичний і квантовий ефекти Холла, методи вимірювання електрохімічних потенціалів, формули Ландауера і Бюттекера, вимірювання холлівського потенціалу, врахування магнітного поля в методі НРФГ, квантовий ефект Холла, рівні Ландау і крайові стани в графені.

Ключові слова: наноелектроніка, ефект Холла, рівні Ландау, крайові стани, графен, метод НРФГ

LESSONS OF NANOELECTRONICS: HALL EFFECT AND MEASUREMENT OF ELECTROCHEMICAL POTENTIALS WITHIN «BOTTOM – UP» APPROACH

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. 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 levels, and edge states in graphene are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics in continuation to the previous tutorial review articles of the authors.

Keywords: nanoelectronics, Hall effect, Landau levels, edge states, graphene, NEGF

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: ЭФФЕКТ ХОЛЛА И ИЗМЕРЕНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ В КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ»

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В продолжение предыдущих учебно-обзорных статей авторов 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: наноэлектроника, эффект Холла, уровни Ландау, краевые состояния, графен, метод НРФГ

Вступ. Цією статтею автори продовжують серію навчально-оглядових статей, які друкуються в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» починаючи з №4 за 2012 рік. Нагадаємо, що раніше у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки ми розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№4, 2012), термоелектричні явища (№1, 2013), основи спінтроніки (№2, 2013) та застосування методу нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3,4, 2013). У цій статті ми розглядатимемо класичний і квантовий ефекти Холла, методи вимірювання електрохімічних потенціалів, формули Ландауэра і Бюттекера, вимірювання холлівського потенціалу, врахування магнітного поля в методі НРФГ, квантовий ефект Холла, рівні Ландау і крайові стани в графені. Наша стаття зорієнтована насамперед на викладачів, аспірантів і

студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, й має на меті популяризацію сучасної концепції викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), сформульованої в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і до певної міри альтернативної традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках.

24-річний американський фізик Едвін Холл, працюючи в університеті Джона Гопкінса над докторською дисертацією, у 1879 році виявив виникнення поперечної різниці потенціалів при вміщенні тонкої золотої платівки з постійним струмом у магнітне поле [1]. В найпростішому випадку ефект Холла виглядає так: помістимо 2D провідник з електричним струмом у слабе магнітне поле \vec{B} , направлене

перпендикулярно до поверхні провідника – уздовж осі y на рис. 1. Магнітне поле діє сили Лоренца

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

відхиляє електрони, що рухаються зі швидкістю \vec{v} одні – від витoku S до стоку D , інші – в протилежному напрямкові, від стоку й до витoku, викривлюючи їхні траєкторії до бічних країв провідника (рис. 1). Критерієм мализни магнітного поля звичайно служить умова, згідно з якою електрони, багаторазово розсіюючись, не починають однак рухатися по циклоїді.

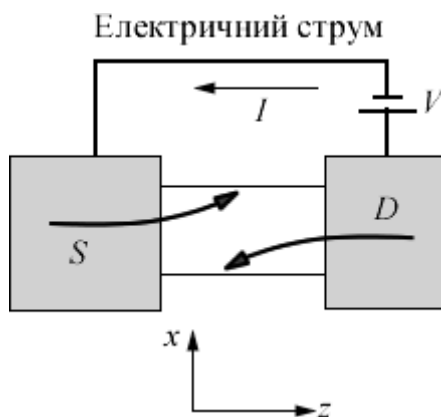


Рис. 1. Магнітне поле, направлене перпендикулярно до провідника зі струмом, відхиляє електрони, що постачаються в провідник із контактів витoku й стоку, до країв провідника.

Зауважмо, що внаслідок теплової рівноваги електрони постачаються в провідник і з витoku, і з стоку. Але оскільки за наявності прикладеного поля більше електронів рухається від витoku до стоку, виникає холлівська різниця потенціалів V_H в поперечному напрямі x (рис. 2).

Ефект Холла завжди викликав значний інтерес – адже він дозволив експериментально встановити тип провідності (електронний чи дірковий) і кількісно визначити концентрацію носіїв заряду в провіднику. Цей інтерес особливо зріс у 1980 році, коли Клаус фон Клітцинг виявив, що холлівський опір

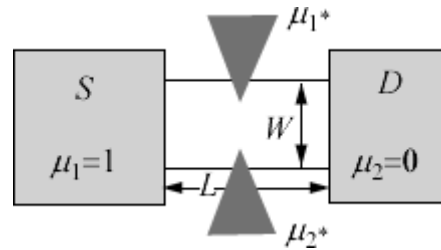


Рис. 2. Холлівська різниця потенціалів виникає в поперечному до поля й струму напрямі.

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

у двовимірній квантовій ямі кремнію (де ширина ями менша від довжини хвилі де Бройля для електронів і відтак рух у напрямі магнітного поля квантований) за високих полів близько $18 T$ і низьких субгелійових температур набуває дискретних значень [2, 3], які в омах відповідають простій формулі:

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

Виявлене явище отримало назву цілочисельного квантового ефекту Холла. Точність вимірювання квантованого холлівського опору така велика, що вже в 1987 році Національне бюро стандартів США вибрало саме ефект Холла для калібрування опорів [4], а в 1998 році значення, що входить до (3) було оголошено Міжнародним консультативним комітетом еталонним для визначення електричного опору.

Клаус фон Клітцинг показав [2, 3], що холлівський опір дорівнює відношенню двох фундаментальних фізичних констант – сталої Планка і квадрата заряду електрона:

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

а через швидкість світла він зв'язаний зі сталою тонкої структури

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

що має винятково важливе значення для метрології фундаментальних констант фізики.

Вже в 1982 році був експериментально виявлено дробовий квантовий ефект Холла [5, 6]. У ферромагнетиках у холлівському опорі був виявлений внесок, залежний безпосередньо від намагніченості матеріалу, причому цей внесок може бути набагато більшим від нормального холлівського опору. Це явище отримало назву аномального ефекту Холла [7]. Відомі й інші, не менше цікаві, прояви ефекту Холла: спіновий ефект Холла Дьяконова – Переля [8, 9], квантовий спіновий ефект Холла в графені [10], ефект дії магнітного поля на невзаємні електричні кола (non-reciprocity circuits), які важко інтерпретувати в термінах звичайних ефективних опорів [11]. Останній ефект особливо цікавий, оскільки з'явився новий клас матеріалів – топологічні діелектрики (topological insulators) [12]. Ці та інші пов'язані питання ми розглянемо з різним ступенем повноти в цій та подальших публікаціях з позицій концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки, використовуючи методологічну схему лекційного курсу [13], в якій виконано наші попередні роботи [14, 15].

Ефект Холла: елементарний розгляд і його обмеженість. Розглянемо докладніше звичайний класичний ефект Холла при низьких магнітних полях. Однією з причин, що викликали підвищений інтерес до ефекту Холла, було те, що холлівський опір має різний знак для n - і p -провідників, що відкриває можливість експериментально легко встановити тип провідності. Цієї ж мети можна досягти, вимірюючи напрям струму в провіднику між контактами, що перебувають при різних температурах [14]. І в тому і в іншому випадку звичайно користуються поняттям «дірок» («порожніх» станів, не зайнятих електронами у «майже заповненій» валентній зоні) як носіїв позитивного заряду в p -провідниках. Таке трактування, вперше запроваджене Вернером фон Гейзенбергом у 1931 р., добре описує великі тривимірні напівпровідникові кристали, але зустрічається з труднощами при переході до нанорозмірів, де поняття трансляційної симетрії вже незастосовне, а носіями струму в усіх випадках є тільки електрони.

Нагадаємо: при термоелектричних вимірюваннях напрям струму визначається нахилом функції густини станів $D(E)$, яка або зростає зі зростанням енергії (n -провідник), чи то спадає (p -провідник) [14]. Натомість знак холлівського ефекту визначається знаком ефективної маси, введеної за формулою (75) з роботи [15] як відношення імпульсу p до швидкості dE/dp . Як наслідок, результуюча dv/dt має різний знак для n - і p -провідників, відхиляючи електрони, емітовані з витоку і зі стоку, до протилежних граней пластини (рис.1), що і призводить до зміни знаку холлівської різниці потенціалів при зміні типу провідності від електронної до «діркової».

Звернімося до звичайного «підручничового» викладу елементарної теорії ефекту Холла (див., наприклад, [16]). Струм визначається виразом

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

де N/L є 2D густина електронів у площині, перпендикулярній до напрямку струму, а їхня дрейфова швидкість дорівнює добуткові рухливості електронів на електричне поле уздовж довжини провідника

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

В стані рівноваги поперечне поле компенсує силу Лоренца

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

отже, використовуючи (6) і (7), для холлівського опору одержуємо:

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

Це співвідношення широко використовується для визначення густини електронів N/LW за нахилом залежності холлівського опору від магнітного поля.

Такий виклад елементарної теорії ефекту Холла повторюється з тими або іншими незначними нюансами в усіх підручниках. І як причина виникнення струму як у поздовжньому, так і в поперечному напрямі скрізь фігурує електричне поле. Межі застосовності такої інтерпретації для наносистем обговорю-

но нами в [15]. Згідно з формулою (9), холлівський опір залежить від електронної густини (концентрації), підсумованої за всім спектром енергій, що, як було нами показано, незастосовне для наносистем. Як і всі інші транспортні коефіцієнти [14, 15], холлівський опір – це властивість поверхні Фермі і залежить він тільки від електронів, енергія яких лежить в інтервалі приблизно декількох kT в околі значення $E = \mu_0$ [15].

Покажемо, що холлівський опір для одномодового пружного резистора визначається виразом

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

який потрібно ще усереднити по енергії в інтервалі декількох kT навколо значення $E = \mu_0$, використовуючи стандартну функцію теплового розширення F_T [15], а саме:

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

Звернімо увагу на те, що, у відповідності до закону Маттієссена, в загальному випадку потрібно усереднювати саме провідність $1/R_H(E)$, а не опір $R_H(E)$, оскільки всі модові канали провідності «працюють» паралельно і перебувають під однією і тією ж різницею потенціалів.

Вирази (10) і (11) можна звести до стандартного визначення холлівського опору (9), використовуючи фундаментальне співвідношення [15]

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

для 2D провідника ($d = 2$) і усереднюючи $N(E)$, як це було показано в [15]. Якщо ж дисперсійне співвідношення для провідника, який ми вивчаємо, невідоме, то залишається тільки користуватися виразами (10) і (11).

У будь-якому випадку вираз (11) свідчить про те, що ефект Холла зумовлений не всіма електронами при всіх можливих енергіях. Однак існує також явище, яке спричинене всіма електронами при будь-яких енергіях, – це наявність рівноважних струмів у провіднику, вміщеному в магнітне поле (рис. 3).

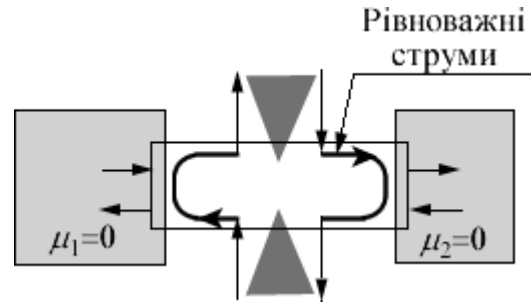


Рис. 3. Рівноважні струми існують в будь-якому провіднику, що вміщений у магнітне поле.

Проте рівноважні струми, які існують навіть в атомі водню, вміщеному в магнітне поле, не мають жодного відношення до транспортних коефіцієнтів. Транспортні моделі належить будувати так, щоб вилучати струми нефермівських електронів із самого початку. Схожа проблема щодо спінових струмів виникає навіть без урахування зовнішнього магнітного поля [17].

Надалі ми розглянемо розрахунок нерівноважних електрохімічних потенціалів усередині провідника, а також моделювання провідника в чотирьохтермінальному підключенні з використанням рівняння Бюттікера [18, 19]. Однак спершу конспективно розглянемо загальну динаміку електронів у магнітному полі.

Чому відрізняються між собою n - і p -провідники? Причина, через яку холлівський опір має протилежні знаки для n - і p -провідників, полягає в тому, що в n -провідниках швидкість та імпульс мають один напрям, а в p -провідниках їх напрями протилежні (оскільки $v = dE/dp$, а в p -провідниках енергія зменшується зі зростанням імпульсу, див. рис. 4 [15]).

Щоб побачити, яку роль відіграє відмінність у знаках швидкості та імпульсу, звернімося до виразу для сили Лоренца (1). Для будь-якого ізотропного дисперсійного співвідношення швидкість та імпульс колінеарні (паралелі або антипаралелі). Нехай вони спрямовані, наприклад, під кутом θ до поздовжньої осі z провідника (рис. 5).

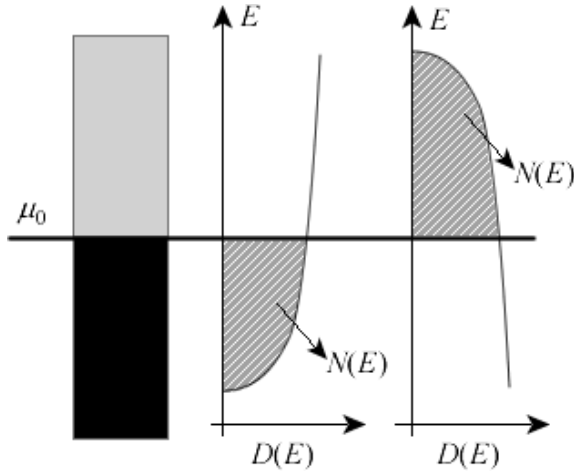


Рис. 4. Холлівський опір має різні знаки для *n*-провідників (ліворуч) і *p*-провідників (праворуч) і обернено пропорційний до $N(E)$ при $E = \mu_0$.

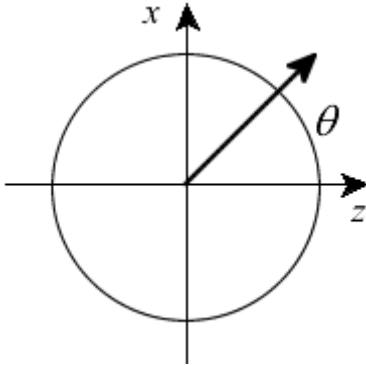


Рис. 5. Розкладання імпульсу та швидкості електрона на проекції вздовж і впоперек 2D провідника (рис. 1).

Тоді

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

а після підстановки цих значень у (1) отримаємо

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

Це означає, що кут θ змінюється лінійно з часом, а вектори швидкості й імпульсу обертаються зі сталою кутовою швидкістю ω_c . Проте, для *n*- і *p*-провідників обертання відбувається в протилежних напрямках, оскільки відношення p/v для них має різні знаки. Це відношення за визначенням дорівнює ефективній масі (вираз (75) у [15]) і є константою

для параболічного закону дисперсії (вираз (78) у тій-таки роботі). Для такого випадку циклотронна частота дорівнює

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

Для лінійного закону дисперсії (вираз (79) у [15]) ефективна маса зростає з енергією, так що циклотронна частота (15) зменшується із зростанням густини носіїв струму, що й спостерігається в графені [20].

Магнітне поле обертає електрони по коловій траєкторії з частотою ω_c . Якщо $\omega_c \cdot \tau \ll 1$, де τ – середній час вільного пробігу, таке обертання триватиме довго, що відповідає режиму спостереження холлівського опору (9) – (11) в слабкому магнітному полі. В режимі сильного магнітного поля $\omega_c \cdot \tau \gg 1$ і спостерігається квантовий ефект Холла.

Просторовий профіль електрхімічного потенціалу. Наведімо міркування на користь формул (10) – (11) для холлівського опору, спираючись на загальну теорію балістичного транспорту, викладену в Додатку 1 роботи [21].

В моделі пружного резистора швидкість дрейфу визначається різницею потенціалів

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

між станами, пов'язаними зі стоком, і станами, пов'язаними з витокком. Тому замість виразу для струму (6) використаємо формулу (A1.39) з роботи [21]:

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

де для числа мод використовується формула (67) з роботи [15]:

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

З формул (A1.15) і (A1.23) роботи [21] одержуємо різницю потенціалів, пов'язану з напругою, прикладеною до кінців провідника:

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

Аналогічно до того, як з виразів (6) і (7) впливає формула Друде для провідності

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

де питома провідність

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

так із (17) та (18) впливає більш загальний вираз для провідності, отриманий в [15].

Покажемо, що замість стандартного виразу для напруги Холла (8) справедливий вираз

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

який разом із (17) та (18) дає наведені вище вирази (10) – (11) для холлівського опору одномодового пружного резистора.

Раніше в роботі [21] було отримано рівняння (A1.12)

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

розв'язки якого визначають електрохімічні потенціали μ^+ та μ^- (рис. 6).

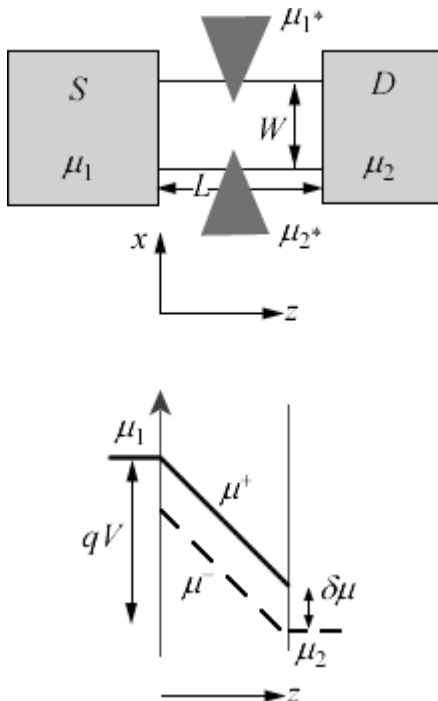


Рис. 6. Просторовий профіль потенціалів μ^+ і μ^- уздовж довжини провідника.

Покажемо, що ці розв'язки можуть бути записані у вигляді

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

Оскільки йдеться про пружний резистор, у якому електрони рухаються з фіксованою енергією і сталим імпульсом, для проєкцій імпульсу вздовж і впоперек до резистора зручно замість декартових координат p_x, p_y використовувати циліндричні p, θ (рис. 7).

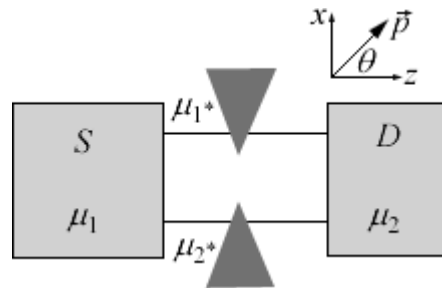


Рис. 7. Орієнтація циліндричних координат p, θ щодо каналу провідності.

Розгляньмо електрони, що рухаються під фіксованим кутом θ до напрямку витік - стік. Тоді з урахуванням (19) отримаємо

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

взявши до уваги, що в цьому простому випадку довжина вільного пробігу дорівнює

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

Порівнюючи (25) і (24) і виконавши усереднення по кутах для 2D провідника (формула (58) з роботи [15]), для різниці потенціалів одержуємо:

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

Нарешті, комбінуючи (25) і (27), одержуємо шуканий вираз (24).

Тепер питання в тому, як зміниться розв'язок (24) рівняння (23) при врахуванні сили Лоренца, створюваної магнітним полем. Для цього нам буде потрібне транспортне рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації [22]:

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

де зліва збережено всі x - і z -компоненти, оскільки йдеться про 2D провідник у площині xz (рис. 1). Це рівняння в порівнянні з його частковим випадком (23) містить три нові доданки. Два з них пов'язані з силою Лоренца і можуть бути переписані у вигляді

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

де радіальна складова сили Лоренца (1) відсутня, а кутова складова дорівнює

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

Тепер рівняння (28) запишеться у вигляді

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

З урахуванням того, що розв'язком рівняння (23) є вираз (24), неважко переконатися, що розв'язком рівняння (31) буде

$$-qV_H = \mu(x=W) - \mu(x=0) = -\frac{2}{\pi} \frac{\delta \mu}{\rho} qBW, \quad (32)$$

Звідси випливає:

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

з чого відразу отримуємо вираз (22) для Холлівської різниці потенціалів.

Вимірювання електрохімічних потенціалів. Формули Ландауера і Бюттекера. Перш ніж перейти до вимірювання потенціалу Холла в чотирьохтермінальній моделі провідника, розглянемо детальніше загальні питання вимірювання електрохімічних потенціалів.

Класичний розподіл Фермі (вираз (10) у роботі [15]) з високою точністю придатний для масивних контактів, які завжди залишаються практично в рівноважному стані, але він не конче справедливий для невеликих провідників, навіть при малій прикладеній різниці потенціалів. В Додатку 1 роботи [21] показано, як важливо ввести два окремі електрохімічні потенціали μ^+ і μ^- для розуміння фізичного значення межового опору як основи нового формулювання закону Ома. Нерівноважні

електрохімічні потенціали цього типу виявляються вельми корисними і широко використовуються в практичній наноелектронній інженерії, хоча й понині інколи все ще висловлюють сумніви в їхній концептуальній цінності й навіть вимірності.

Далі на простому прикладі ми розглянемо особливості нерівноважних потенціалів і питання їх вимірності, що дозволить пов'язати їх з уявленнями і формулами Ландауера і Бюттекера [18, 23 – 27], які посідають центральне місце в теорії транспортних процесів сучасної мезофізики.

Услід за Ландауером [23 – 27], розглянемо балістичний канал з одним локалізованим дефектом, що пропускає частку T електронів, що налітають на цей дефект, і відбиває частку $1 - T$ назад (рис. 8).

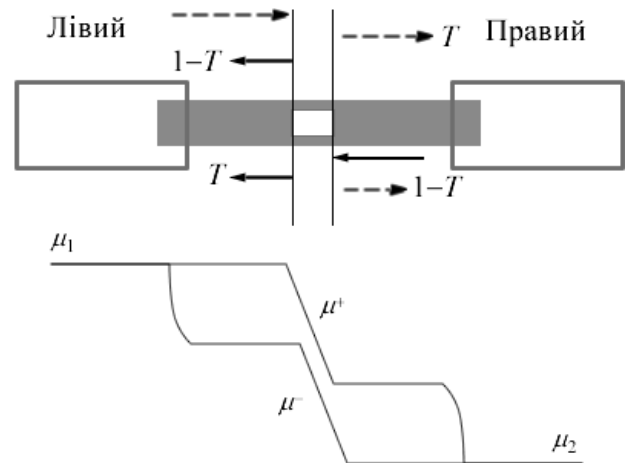


Рис. 8. Профіль нерівноважних потенціалів у каналі з одним дефектом.

Ми могли б використати схему, викладену в Додатку 1 роботи [21] і отримали б просторові профілі потенціалів μ^+ і μ^- у каналі з дефектом, якісно зображені на рис. 8. Таким чином ми оцінили б опір, зумовлений дефектом, як це зробив Ландауер ще в 1957 році.

Подолати сумніви щодо реалістичності нерівноважних потенціалів могли б чотирьохтермінальні експерименти (рис. 9) з використанням двох додаткових контактів, що проводять слабкий струм, з тим, щоб виміряти падіння напруги на дефекті.

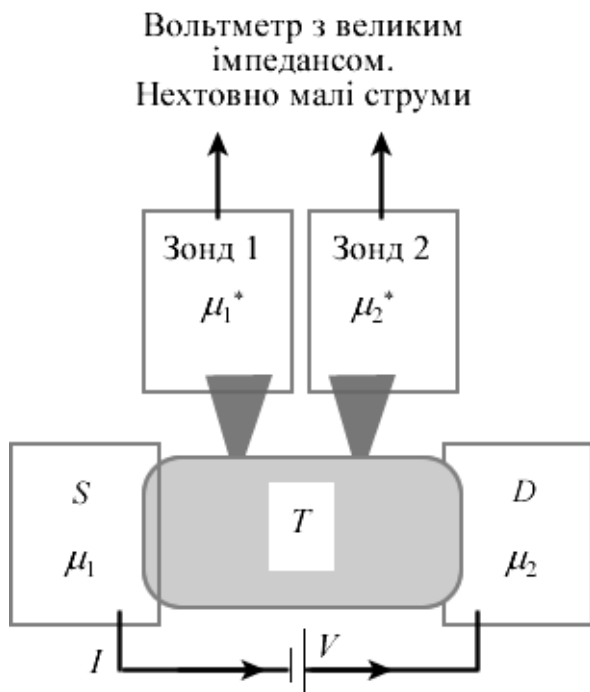


Рис. 9 Чотирихтермінальний експеримент з вимірювання провідності 1D каналу з одним дефектом з коефіцієнтом пропускання T .

Ми покажемо, що у випадку однакових і слабкопов'язаних пробних контактів чотирихтермінальна провідність дорівнює

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

де M – число мод провідника, а двоохтермінальна провідність має менше значення

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

Отже, різниця між ними і є межовий опір (рис. 10)

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

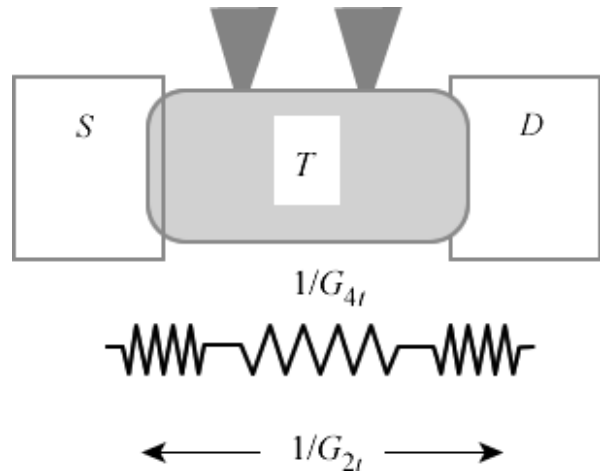


Рис. 10. Двохтермінальний опір можна розглядати як опір на дефекті, сполучений послідовно з межовими опорами.

Хоча межовий опір був передбачений і виявлений Ю.В.Шарвіним у металевих провідниках ще в 1965 році [28, 29], його роль визнана все ще недостатньо широко й сьогодні. В першій половині 1980-х років точилася дискусія щодо відмінності між двома формулами для провідності (34) і (35), аж поки, нарешті, в 1986 році Імрі ідентифікував різницю між ними (36) як межовий опір [30, 31]. За доби становлення мезофізики рівняння (35) здобуло широку популярність і було відоме як формула Ландауера, тоді як справжня оригінальна формула Ландауера (34) була майже забута. Падіння напруги на дефекті, контактний опір і обидві формули Ландауера детально обговорюються в огляді Лісовика і Садовського [32].

У роки становлення мезофізики проблема полягала в тому, що контакти були сильно пов'язані з провідником і поводитися як «додаткові дефекти», виключити які було не так просто. Бюттекер [18, 27] з метою інтерпретації чотирихтермінальних вимірювань запропонував елегантну формулу

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

яка пов'язує струм на контакті з номером m з електрохімічними потенціалами на інших контактах, де $G_{m,n}$ - провідність, визначувана через коефіцієнт проходження $T_{m,n}$ між контактами m і n . Для двоохтермінальної схеми вимі-

рювань формула Бюттекера спрощується до

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

і збігається з двохтермінальною формулою Ландауера (35), якщо провідність $G_{1,2}$ ідентифікувати як $(q^2/h)M$.

Якби ми знали всі хімпотенціали μ_m , то могли б скористатися формулою Бюттекера (37) і обчислили б усі струми I_m . Але в чотирьохтермінальних вимірюваннях (рис. 9) нам не відомі електричні потенціали на контактах 1* і 2*, отже, нам не відомі й хімпотенціали μ_{1^*} та μ_{2^*} . Однак ми знаємо струми I_{1^*} і I_{2^*} - вони повинні дорівнювати нулю (рис. 9). Якщо ж нам відомі на кожному контакті або μ_m , або I_m , формула Бюттекера дозволяє вирахувати всі величини, яких бракує.

Розгляньмо ландауерівське падіння напруги на дефекті (рис. 8) і покажемо, що для слабкозв'язаних контактів формула Бюттекера дає ті ж самі результати, що і нерівноважні потенціали μ^+ та μ^- усередині провідника.

Потенціал, вимірюваний пробним контактом (рис. 9), є певним середнім значенням потенціалів μ^+ та μ^- (рис. 11), при цьому спосіб усереднювання визначається конструкцією контактів. Промодельємо таке вимірювання, поставивши провідності g^+ та g^- у відповідність до двох потоків електронів I^+ та I^- (рис. 11). Вважаючи струм на пробному контакті нульовим, маємо

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

Звідси одержуємо:

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

де вагові коефіцієнти позначимо як

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

Припускаючи, що у вимірюваннях використовуються неінвазивні пробні контакти атомних розмірів, можна очікувати, що провідності будуть практично однаковими, так що ваговий коефіцієнт $\alpha \sim 50\%$ і пробний контакт вимірює середнє арифметичне

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

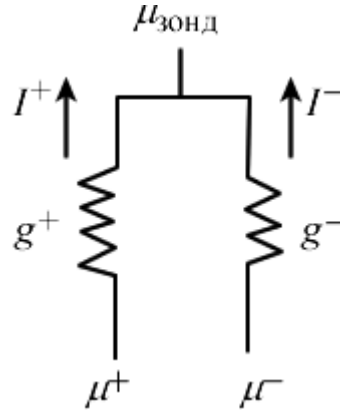


Рис. 11. До підрахунку хімпотенціалу на пробному контакті.

Якщо контакт недостатньо малий і по різному збуджує струми I^+ та I^- , ваговий коефіцієнт $\alpha \sim$ відрізняється від 50%. Якщо до того ж обидва пробні контакти 1* і 2* у вимірвальній схемі (рис. 9) відрізняються ваговими коефіцієнтами, то вимірюваний опір дефекту виявиться іншим у порівнянні з ландауерівським значенням (34).

Формули Ландауера. Повернімося до задачі знаходження профілю нерівноважних потенціалів у каналі з дефектом (рис. 8). Спочатку збалансуємо вхідний і вихідний струми (рис. 12):

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

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

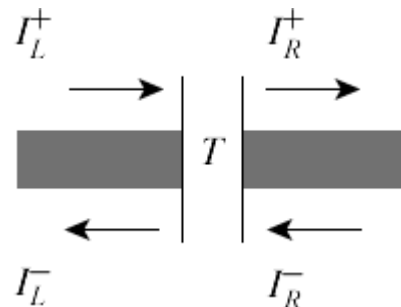


Рис. 12. Розподіл струмів ліворуч і праворуч від дефекту.

Потім відповідно до формул (A1.35) і (A1.36) Додатку 1 роботи [21] від струмів перейдемо до функцій розподілу

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

$$f_L^- = (1-T) f_L^+ + T f_R^-, \quad (44б)$$

а потім до потенціалів

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

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

Спростимо виклад, поклавши потенціал на одному контакті рівним нулеві, а на іншому - рівним одиниці (рис. 13).

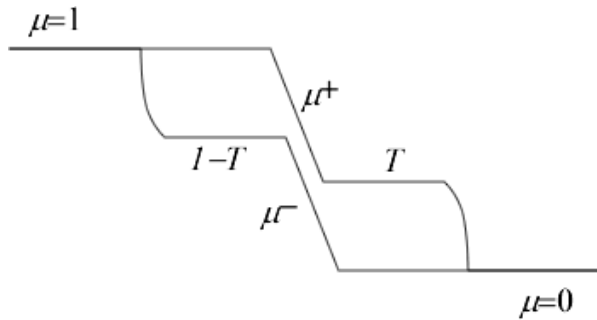


Рис. 13. Профілі потенціалів μ^+ та μ^- на дефекті, нормовані на сумарну різницю потенціалів, рівну одиниці.

Потрібну різницю потенціалів завжди можна врахувати шляхом множення на $\mu_1 - \mu_2 = qV$. Тоді рівняння (45) спрощуються до

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

і разом із виразом для струму

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

дають стандартну формулу Ландауера (35).

Для отримання першої формули Ландауера (34) знаходимо стрибок на дефекті або потенціалу μ^+ , або потенціалу μ^- :

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

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

а потім ділимо струм на цю різницю і одержуємо формулу (34).

Не забуваймо, що нас цікавить вимірювання електрохімічних потенціалів усередині провідника. Як це співвідноситься з вимірюванням напруги неінвазивним зондом скану-

ючого тунельного мікроскопа (СТМ)? Якщо припустити, що такий зонд СТМ вимірює середнє значення електрохімічних потенціалів μ^+ та μ^- , то отримаємо графік, зображений на рис. 14, порівняння якого з рис. 13 дозволяє стверджувати, що неінвазивний зонд СТМ справді вимірює середнє значення електрохімічного потенціалу $(\mu^+ + \mu^-)/2$.

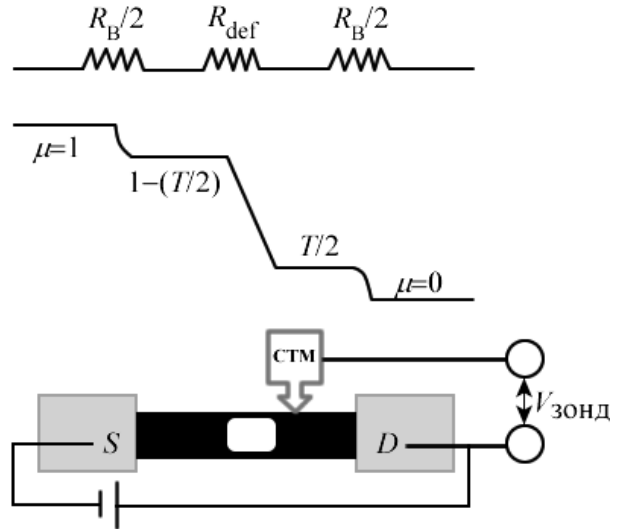


Рис. 14. Скануючий тунельний мікроскоп вимірює середнє значення електрохімічного потенціалу $(\mu^+ + \mu^-)/2$.

А що буде в випадку, коли зонд СТМ вимірює середньозважене значення μ^+ та μ^- з ваговим коефіцієнтом α (40), відмінним від 50%? Поки ваговий коефіцієнт α залишається однаковим для обох потенціалів μ^+ та μ^- , стрибок на дефекті (48) залишається тим самим:

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

що веде до тієї ж самої першої формули Ландауера (34). Якщо ж вагові коефіцієнти різні для μ^+ та μ^- , то формула (34) виявиться неправильною. В граничному випадку, коли ваговий коефіцієнт α дорівнює нулю ліворуч і одиниці праворуч (рис. 11),

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

що призводить до негативного опору при $T > 0.5$.

Концепція нерівноважних потенціалів μ^+ та μ^- веде до інтуїтивно легких для сприйня-

тя результатів і зараз уже широко використовується, проте її застосування потребує обережності. Стрибок потенціалу викликає саме дефект, а не область балістичного транспорту (рис. 14), оскільки опір за (34) визначається дефектом. Потрібно пам'ятати, що ми розглядаємо пружні резистори, в яких стрибок напруги IR залишається, а дисипація джоулевого тепла I^2R у провіднику відсутня й відбувається лише на контактах.

Формула Бюттекера. Запропонована Бюттекером формула (37) містить безпосередньо вимірювані величини і справедлива незалежно від того, є провідник пружним, або не є. Справді, як ми зараз побачимо, для виведення формули (37) потрібно лише трохи вийти за межі звичайної лінійної теорії електричних кіл.

Визначимо спершу мультитермінальну провідність

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

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

Природно запитати: чому для $m \neq n$ знак був вибраний від'ємним, на відміну від випадку, коли $m = n$. Такий вибір знаку можна проілюструвати на прикладі чотирьохтермінального вимірювання каналу з одним дефектом (рис. 15).

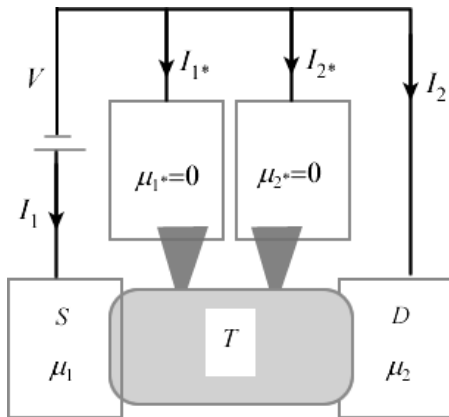


Рис. 15. Уявний експеримент з чотирьохтермінальним вимірюванням каналу з одним дефектом.

Збільшення хімпотенціалу μ_i веде до збільшення струму, що входить у контакт 1 (позитивний струм), і до відтоку від усіх інших контактів (негативні струми). Знаки в (51) вибрані так, щоб коефіцієнти провідності $G_{m,n}$ завжди були додатними, як того інтуїтивно вимагає поняття провідності.

Тепер струм (37) перепишемо через коефіцієнти провідності

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

При цьому коефіцієнти повинні задовольняти двом подальшим правилам сумованості.

По-перше, якщо всі хімпотенціали однакові (стан рівноваги), всі струми у (52) повинні бути рівні нулеві, що зумовлює правило сум

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

По-друге, при довільних значеннях хімпотенціалів сума всіх струмів повинна бути рівною нулеві, що приводить до другого правила сум:

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

Доказ цього не такий очевидний, як у випадку першого правила сум. Отримати (53б) можна, спираючись на рівняння (52). Спочатку підсумуємо всі струми у (52):

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

Потім скористаємося правилами підсумовування (53) і поміняємо місцями індекси в подвійній сумі

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

При довільних значеннях хімпотенціалів це справедливе тільки тоді, коли виконується друге правило сум (53б). Остаточо

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

Скориставшись правилами сум (56), перепишемо перший доданок у (52) у вигляді суми і в результаті отримаємо знамениту формулу

Бюттекера (37). Звернімо увагу на те, що у формулі Бюттекера підсумовування немає потреби обмежувати випадком $n \neq m$, оскільки доданок із $n = m$ завжди дорівнює нулеві.

Іноді формулу Бюттекера (37) зручніше записати через так звані коефіцієнти відгуку [33]:

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

які визначаються таким чином:

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

з правилами підсумовування

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

Застосуємо підхід Бюттекера до ситуації, зображеної на рис. 14, де стверджується, що два неінвазивні зонди, розташовані до і після дефекту з коефіцієнтом пропускання T , генерують потенціали $1 - T/2$ і $T/2$ відповідно (рис. 16). Чи отримаємо ми ті ж результати методом Бюттекера?

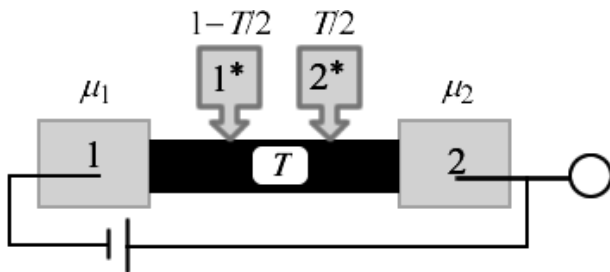


Рис. 16. На зондах до і після дефекту з коефіцієнтом пропускання T генеруються потенціали $1 - T/2$ і $T/2$, відповідно.

Маючи на увазі, що в цьому вимірюванні йдеться про чотири струми і чотири потенціали на контактах 1, 2, 1* і 2*, запишемо рівняння (57) в матричному вигляді

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

де матриці A , B , C і D мають форму (2×2) .

Оскільки

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

то можна записати, що

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

з матрицями C і D у вигляді

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

Тут елементи матриці C інтерпретуються як імовірності міжконтактного транспорту 1 на 1*, 2 на 1*, 2 на 2* і 1 на 2* (рис. 17), причому передбачається, що контакти 1* і 2* слабо зв'язані і транспортом між ними можна знехтувати.

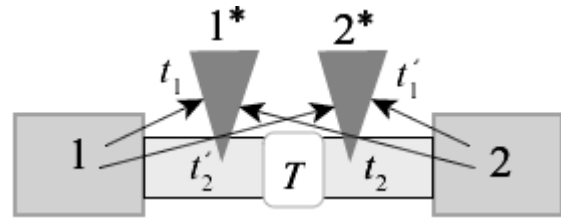


Рис. 17. Ймовірність міжконтактного транспорту при чотирьохтермінальному вимірюванні провідності каналу з одним дефектом із коефіцієнтом пропускання T .

Правила сум (59) дають:

$$r = t_1 + t_2 \quad (64)$$

$$r' = t'_1 + t'_2$$

З (62) – (64) одержуємо:

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

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

Врахуємо також, що ймовірність t_1 (рис. 17) може бути представлена як сума ймовірності τ прямого перенесення $1 \rightarrow 1^*$ і ймовірності $(1 - T) \cdot t$ відбитися від дефекту, а потім досягти контакту 1*:

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

Аналогічні міркування для ймовірності t_2 дають

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

оскільки на шляху електрона з контакту 2 спочатку потрібно подолати дефект (ймовірність T), а потім потрапити на контакт 1* (ймовірність t). Згідно з аналогічними міркуваннями $t_1 = t_1'$ і $t_2 = t_2'$ (рис. 17).

Користуючись рівняннями (66) і поклавши $\mu_1 = 1$ та $\mu_2 = 0$, з рівнянь (65) отримуємо значення для потенціалів на зондах 1* і 2*:

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

Такий результат очікуваний, оскільки у формулі Бюттекера фігурують тільки характеристики контактів і фактично випущені всі тонкощі, пов'язані з нерівноважними електродімічними потенціалами.

Чи не тривіальне рівняння Бюттекера?

Врешті-решт, будь-яку складну електричну схему завжди можна представити еквівалентною схемою ефективних резисторів, як, наприклад, зображено на рис. 18 для трьох терміналів. Чи дасть нам стандартна теорія електричних кіл такий самий результат, як і рівняння Бюттекера (37)?

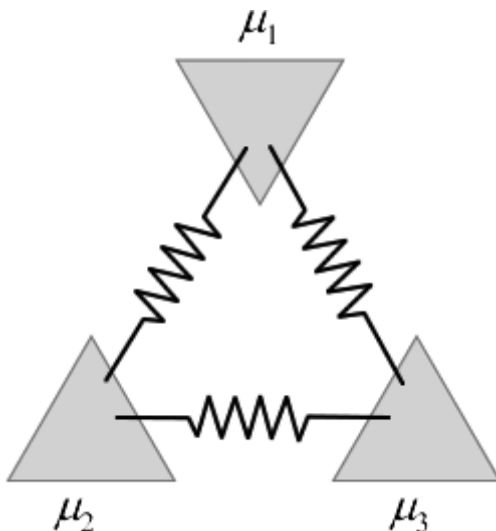


Рис. 18. Рівняння Бюттекера еквівалентне мережі ефективних резисторів тільки в тому випадку, якщо всі провідності оборотні ($G_{m,n} = G_{n,m}$).

Відповідь на це питання поза сумнівом ствердна, проте, тільки для нормальних взаємних електричних кіл, у яких провідності між усіма терміналами повністю оборотні:

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

іншими словами, коли електрони однаково легко транспортуються в обидві сторони для кожної пари терміналів (m, n).

Натомість область застосовності рівняння Бюттекера (37) набагато ширша, аніж тільки нормальні взаємні електричні кола. Наприклад, (37) застосовне для провідників у магнітному полі, коли взаємної провідності вже немає:

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

Для таких ситуацій обґрунтувати застосовність рівняння Бюттекера (37) не так просто. Якщо в рівнянні Бюттекера (37) провідність $G_{m,n}$ поміняти на $G_{n,m}$, то ми просто матимемо помилкову формулу, застосовуючи яку до багатотермінальних невзаємних кіл, отримаємо помилкові результати.

Вимірювання потенціалу Холла. Звернімося, нарешті, до обчислення холлівської напруги з використанням формули Бюттекера (37) у чотирьохтермінальному експерименті, відмінному від розглянутого вище (рис. 17) розміщенням пробних зондів 1* і 2* упоперек провідника (рис. 19).

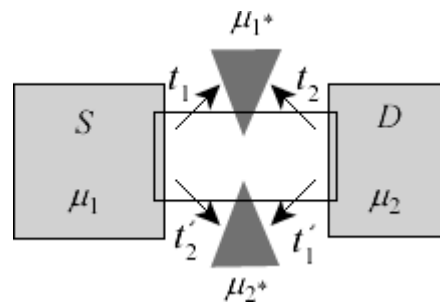


Рис. 19. Ймовірність міжконтактного транспорту при чотирьохтермінальному вимірюванні холлівської напруги.

За відсутності магнітного поля різниця зондових потенціалів нульова. При ввімкненні магнітного поля перпендикулярно до поверхні провідника (площини рисунка) електрони, що рухаються між витоком і стоком, відхиляють-

ся до бічних країв провідника (рис. 1), створюючи різницю між зондовими потенціалами μ_{1*} і μ_{2*} , яку ми і хочемо обчислити як функцію від напруги, що створює струм у провіднику.

Рівняння для зондових потенціалів залишаються попередніми (65), якщо до ймовірності міжконтактного транспорту додати значення, зображене на рис. 19. Обчислення цієї ймовірності або чисельно, або в напівкласичному наближенні дає холлівську напругу V_H

$$-qV_H = \mu_{1*} - \mu_{2*}, \quad (70)$$

у відповідності до вже отриманого раніше рівняння (22).

Рівняння (22) було отримане на основі транспортного рівняння Больцмана, але його можна отримати також з рівнянь (65), якщо переписати їх для тонкого провідника десь посередині довгого провідника, з шириною, меншою, ніж середня довжина вільного пробігу, з електронами, що рухаються від витoku з потенціалом μ^+ і від стоку з потенціалом μ^- , щоб отримати потенціали на бічних гранях у рознесених на dx точках, що імітують зонди 1* і 2* (рис. 20). Проробивши це, матимемо:

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

$$\mu(x) = \frac{t_2'}{t_1'+t_2'} \mu^+ + \frac{t_1'}{t_1'+t_2'} \mu^-. \quad (71b)$$

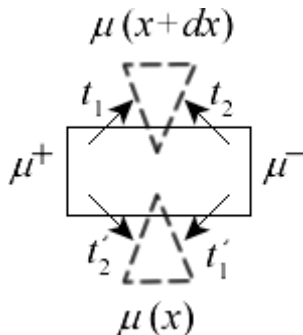


Рис. 20. До виведення рівняння (22), виходячи з ймовірності міжконтактного транспорту при чотирьохтермінальному вимірюванні холлівської напруги.

Для обчислення ймовірності за рівняннями (71) відзначмо, що за відсутності магнітного

поля електрони зі швидкостями, для яких кут θ (рис. 5) лежить у межах $0 < \theta < +\pi/2$, відхиляються вгору, а ті, для яких він лежить у межах $-\pi/2 < \theta < 0$, рухаються вниз (рис. 21).

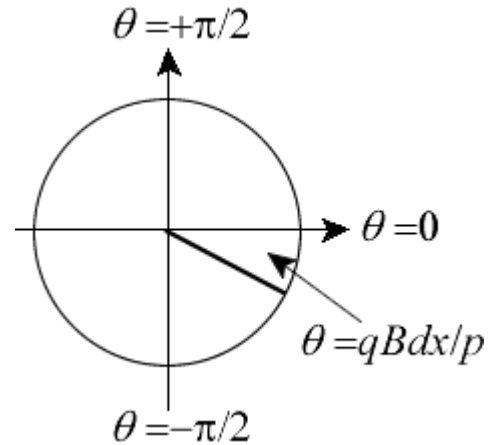


Рис. 21. До обчислення кута повороту електрона під дією сили Лоренца.

Магнітне поле закручує траєкторію електронів на кут, рівний добуткові кутової швидкості (14) на час dx/v , затрачуваній на подолання відстані dx

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

Тоді ймовірність міжконтактного транспорту буде пропорційна (\sim) кутам

$$t_1 = t_1' \sim \frac{\pi}{2} + \frac{qB}{p} dx, \quad (73a)$$

$$t_2 = t_2' \sim \frac{\pi}{2} - \frac{qB}{p} dx. \quad (73b)$$

Підстановка їх у рівняння (71) дає:

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

Звідси випливає:

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

що узгоджується з рівнянням (32), а отже і з (22).

Квантовий ефект Холла, рівні Ландау і крайові стани в графені. Одним з найефектніших застосувань підходу Бюттекера слугуватиме інтерпретація режиму квантового ефекту Холла, коли магнітне поле настільки велике, що електрони, які рухаються від витoku, не досягають зонда 2*, а електрони, що рухаються від стоку, не досягають зонда 1* (рис. 19). В результаті

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

оскільки $t_2 = t_1'$, так що холлівська напруга виявляється рівною різниці потенціалів на кінцях провідника, а холлівський опір - рівним звичайному двохтермінальному опорю.

Цікаво, що в цьому режимі опір визначається виразом (4) з найвищим ступенем точності [4]. Це можна уявити собі так, ніби ми маємо ідеальний балістичний провідник лише з межовим опором. Оскільки довжина провідників в експериментах досягала кількох сотень мікронів (субміліметрові розміри), така балістичність гідна подиву, а першовідкривач квантового ефекту Холла Клаус фон Клітцинг був відзначений Нобелівською премією з фізики 1985 року.

Звернімося до графену. В попередній нашій статті [19] був викладений метод нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) в матричному формулюванні для розв'язання модельних транспортних задач наноелектроніки. Зокрема, для графенових нанострічок були наведені результати розрахунку методом НРФГ коефіцієнта проходження і густини станів для двох конфігурацій стрічкових меж - зигзагоподібної і кріслоподібної - в наближенні сильного зв'язку в ортогональному базисі з параметричним врахуванням взаємодії лише сусідніх атомів через кулонівський ϵ і резонансний t_o інтеграли (гюккелівське наближення). Вони перебувають у цілковитій відповідності з результатами обчислень з використанням точніших модельних гамільтоніанів. У цій статті ми врахуємо зовнішнє магнітне поле для графенових стрічок у цьому ж наближенні і наведемо результати розрахунку коефіцієнта проходження і густини станів, провідності й квантованого холлівського опору в присутності магнітного поля [34].

Система, яку ми вивчаємо, є довгим 2D провідником з двома пробними зондами по обидва боки (рис. 22) для вимірювання поперечної холлівської напруги, що виникає в присутності магнітного поля, направлено перпендикулярно до поверхні 2D провідника.

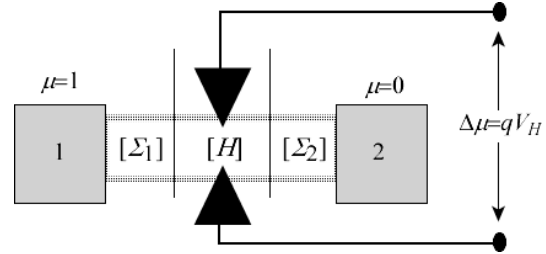


Рис. 22. До вимірювання холлівської напруги через різницю хімпотенціалів, створювану між поперечними зондами при ввімкненні перпендикулярного до провідника магнітного поля.

Спочатку врахуємо магнітне поле в гамільтоніані провідника H і в контактних матрицях Σ_1 і Σ_2 методу НРФГ.

Енергія частинки із зарядом $-q$ в полі векторного потенціалу \vec{A} дається виразом

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

Для знаходження параметрів гюккелівського гамільтоніану з урахуванням магнітного поля розглянемо однорідну атомну ґратку зі сталим значенням потенціальної енергії E_c і з постійним векторним потенціалом. Спочатку розглянемо 1D провідник, витягнутий уздовж осі x

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

Для нього дисперсійне співвідношення має вигляд

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

і може бути апроксимоване функцією косинуса

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

з гюккелівськими параметрами ε і t [19]:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= E_c - 2t \\ t &= -\hbar^2 / 2ma^2 = -t_0 \end{aligned} \quad (81)$$

де a – стала ґратки. Відмінність від однорідної ґратки без урахування поля векторного потенціалу [19] полягає лише в появі фазового множника $\exp(\pm iqA_x a/\hbar)$ у резонансних інтегралах (рис. 23).

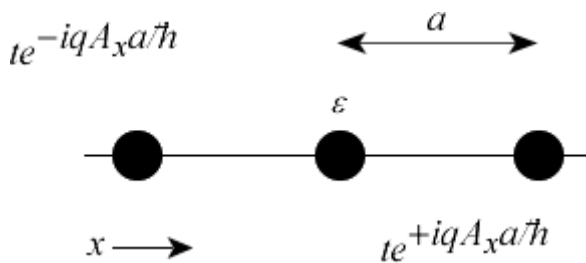


Рис. 23. Однорідний 1D провідник у полі векторного потенціалу.

Для однорідної ґратки 2D провідника у резонансних інтегралах в обох напрямках (рис. 24) з'являються фазові множники з фазами

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

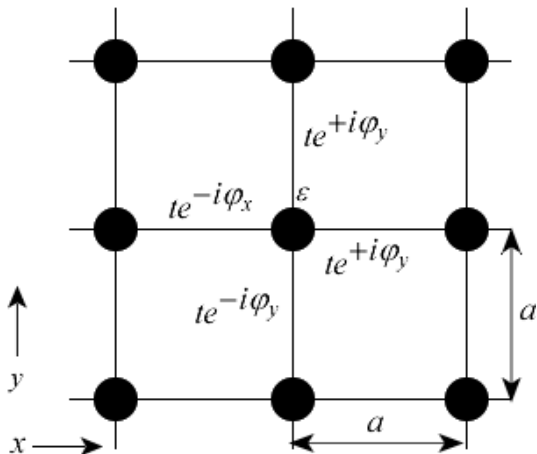


Рис. 24. Врахування магнітного поля, направленого уздовж осі z, зводиться до врахування фазових множників у резонансних інтегралах гюккелівської ґратки.

Магнітне поле записується через вектор-потенціал як:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (83)$$

Тому для магнітного поля, перпендикулярного площині 2D провідника, запишемо:

$$B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \quad (84)$$

Холлівський опір визначається відношенням холлівської напруги до струму в провіднику (9). Холлівську напругу можна обчислити двома способами. Використовуючи чотирьох-термінальну вимірювальну схему і рівняння Бюттекера, можемо обчислити різницю хімпотенціалів, створюваних на двох поперечних зондах (рис. 22). Або ж у рамках методу НРФГ [19] можемо записати слід нерівноважної функції Гріна G_n

$$2\pi N = \text{Tr}[G^n], \quad (85)$$

який пропорційний числу електронів, і спектральну функцію A

$$2\pi D(E) = A, \quad (86)$$

яка пропорційна густині станів. Звідси заселеність стану j дорівнює відношенню відповідних діагональних елементів функції Гріна і спектральної функції

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

В області лінійного відгуку заселеність пропорційна хімпотенціалові [15]. Якщо на одному контакті покласти $f=0$, а на іншому $f=1$, а різниця потенціалів між ними дорівнює qV , то заселеність $f(j)$, обчислена за (87), будучи помноженою на qV , дасть значення хімпотенціалу

$$\mu(j) = qVf(j) \quad (88)$$

На рис. 25 показані результати розрахунку холлівського опору, нормованого на квант опору h/q^2 , як функції магнітного поля.

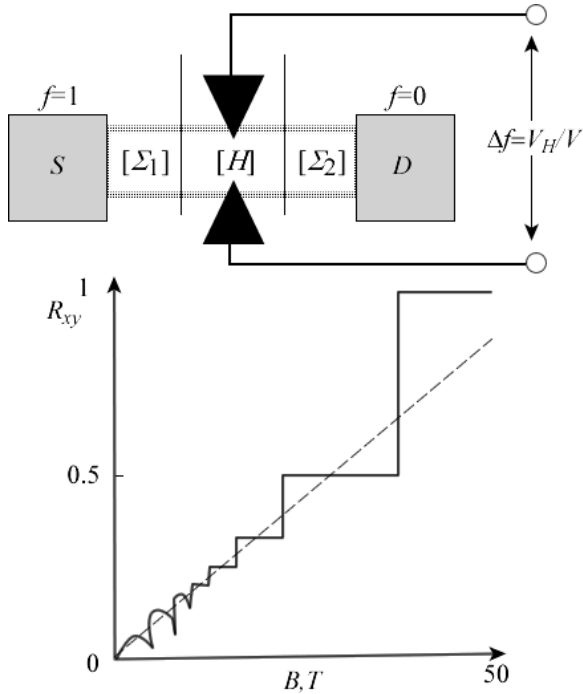


Рис. 25. Залежність нормованого холлівського опору від магнітного поля для графенової стрічки шириною $W = 65 \text{ nm}$ в гюккелівському наближенні при енергії $E = t_0$ [19].

Дивовижний результат – поява на залежності холлівського опору від магнітного поля сходинок в сильних магнітних полях – отримав назву квантового ефекту Холла. Проте, спочатку розгляньмо область слабких магнітних полів, де холлівський опір, згідно до стандартної напівемпіричної теорії ефекту Холла, залежить від магнітного поля лінійно (9):

$$R_H = B / qn. \quad (89)$$

Це й показано на рис. 25 пунктирною лінією, обчисленою для

$$n = \frac{N}{LW} = \frac{k^2}{4\pi} \quad (90)$$

при $E = t_0 = 2.7 \text{ eV}$ і $ka = \pi/3$ з $a = 2.5 \text{ nm}$ [19].

Зі зростанням магнітного поля поступово з'являється східчаста залежність холлівського опору від поля, зумовлена наявністю квантових рівнів Ландау (рис. 26). На цьому екранному знімку відкладені діагональні елементи спектральної функції $A(j,j;E)$ залежно від енергії E , обчислені методом НРФГ, що яв-

ляють собою локальну за шириною j -ї графенової стрічки густину станів для трьох рівнів Ландау (Landau Levels/LL).

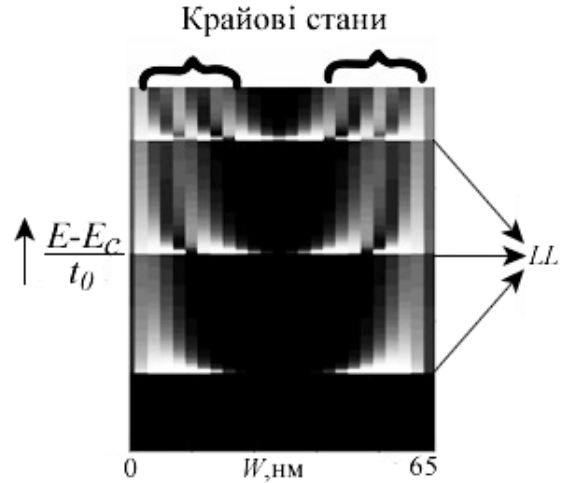


Рис. 26. Локальна за шириною графенової стрічки густина станів залежно від енергії рівнів Ландау при $B = 20 \text{ T}$.

В моделі гармонічного осцилятора енергія рівнів Ландау дорівнює

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

де n – ціле число, ω_c – циклотронна частота (15). Еквідистантні рівні Ландау розташовуються один щодо одного з інкрементом

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

вираз для якого отримано з використанням (15) і (81). Для використаних у розрахунку значень $B = 20 \text{ T}$ і $a = 2.5 \text{ nm}$ інкремент дорівнює $\hbar \omega_c \approx 0.37 t_0$, що непогано узгоджується з результатами розрахунку методом НРФГ (рис. 26).

Вираз для енергії рівнів Ландау (91) – суто квантовий результат аналітичного розв'язування рівняння Шредінгера за наявності векторного потенціалу, що лежить також в основі чисельного розв'язку методом НРФГ для конкретної геометрії графенової стрічки. Цей результат можна зрозуміти якісно, якщо звернутися до напівкласичної моделі, згідно до якої електрони рухаються по колових орбітах, роблячи одне обернення за час:

$$t_c = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi p}{qvB}. \quad (93)$$

Звідси довжина кола орбіти з радіусом r_c дорівнює:

$$2\pi r_c = vt_c = \frac{2\pi p}{qB}. \quad (94)$$

Якщо тепер врахувати квантове обмеження, згідно до якого довжина кола орбіти повинна бути такою, щоб на ній укладалося ціле число K де-Бройлівських довжин хвиль h/p , то отримаємо

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

Класичний електрон може мати будь-яку енергію $E = p^2/2m$, проте, квантова умова рівності довжини кола цілому числу K довжин хвиль веде до співвідношення:

$$p^2 = K \cdot hqB. \quad (96)$$

Тому дозволені значення енергії електрона дорівнюють:

$$E = K \frac{\hbar qB}{2m} = K \frac{\hbar \omega_c}{2}. \quad (97)$$

Це не зовсім те ж саме, що й точний результат розв'язання рівняння Шредінгера (91), але дає якісне розуміння його суті.

Якщо число крайових станів позначити K_{es} , то результуючий струм дорівнює

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

бо холлівська напруга V_H просто дорівнює напрузі V , прикладеній до кінців провідника, оскільки один край провідника знаходиться в рівновазі з витоком, а другий – із стоком.

Це веде до квантування холлівського опору

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

і породжує в нормованого холлівського опору плато при значеннях $1/4$, $1/3$, $1/2$ і 1 (рис. 25) мірою того, як магнітне поле генерує рівні Ландау, змінюючи число крайових станів K_{es} при енергії $E = t_0$ з 4-х до 3-х, до 2-х і нарешті до 1-го (рис. 26).

Відзначмо: у формулі (99) не враховано виродження рівнів Ландау. Для площин 2D кремнію, де квантовий ефект Холла вперше спостерігав фон Клітцинг [2, 3], воно дорівнює чотирьом: 2 за рахунок спіну і 2 за рахунок еквівалентних долин у площині кремнію {001}. Цю 4-ку потрібно враховувати в знаменнику (99).

Для розподілу електричного струму в 2D провіднику в режимі спостереження квантового ефекту Холла часто використовують [35, 36] напівкласичну модель руху електронів по так званих [37] відкритих орбітах (skipping orbits) (рис. 27). В результаті виникають крайові струми, що забезпечують виключно високу балістичну провідність.

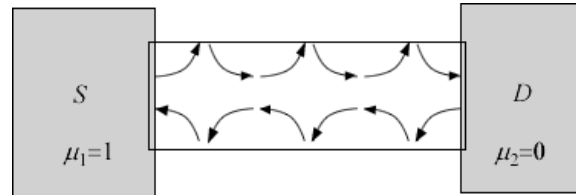


Рис. 27. Припускають, що електрони в 2D провіднику в сильному магнітному полі рухаються по відкритих орбітах, створюючи компактні траси крайових струмів, ніби локалізованих у квантовому хвилеводі [37].

Раніше ми вже наводили результати розрахунку методом НРФГ коефіцієнта проходження і густини станів графенових стрічок для двох конфігурацій стрічкових меж – зигзагоподібної ZGNR / Zigzag Graphene NanoRibbon і кріслоподібної AGNR / Armchair GNR за відсутності магнітного поля [19]. Вплив сильного магнітного поля зображений на рис. 28.

Рівні Ландау в сильних магнітних полях утворюються в таких 2D провідниках, ширина яких достатня для утворення циклотронних орбіт. Чим більша ширина провідника, тим менше потрібне магнітне поле для генерації першого рівня Ландау. В графені, де спектр електронів лінійний, енергії рівнів Ландау залежать від поля кореневим чином:

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

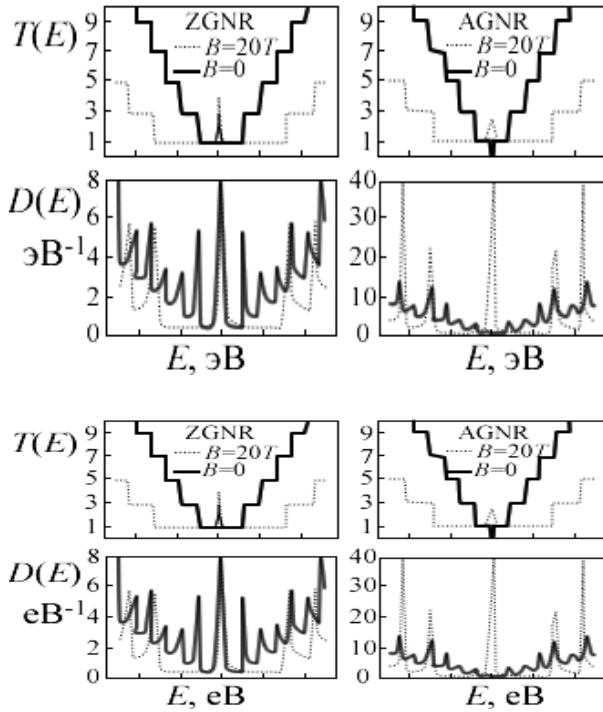


Рис. 28. Вплив сильного магнітного поля $B = 20$ Т на коефіцієнт проходження $T(E)$ і густину станів $D(E)$ графенових стрічок шириною $W = 53$ нм для двох конфігурацій меж – ZGNR і AGNR [34].

де $v_0 = 10^6$ м/с [38]. Згідно зі (100), перший і другий рівні Ландау при $B = 20$ Т мають енергії $E_1^{LL} = 0.15$ eВ і $E_2^{LL} = 0.23$ eВ. Існує також рівень Ландау при $E = 0$, це так званий нульовий рівень Ландау E_0^{LL} [39 – 41], спільний для електронів і дірок. Результати розрахунку методом НРФГ (рис. 28) повністю узгоджуються з наведеними оцінками.

Відзначмо: у великих магнітних полях у графені спостерігається незвичайний (unconventional) квантовий ефект Холла [42], при якому квантування холлівської провідності визначається співвідношенням:

$$\sigma_H = \frac{1}{R_H} = \pm \frac{4q^2}{h} \left(K_{es} + \frac{1}{2} \right). \quad (K_{es} = 0, 1, 2, \dots) \quad (101)$$

Формула для звичайного цілочисельного квантового ефекту Холла для площин кремнію, де рівні Ландау чотириразово вироджені за енергією (саме він спостерігався в експери-

ментах фон Клітцинга), відрізняється від (101) відсутністю доданку $\frac{1}{2}$ в дужках. Як ми вже зазначали вище, множник «4» є наслідком виродження рівнів Ландау: двічі за спіном, ще двічі за двома точками Дірака (у графені) чи за двома еквівалентними долинами (у площині кремнію {001}). Натомість доданок $\frac{1}{2}$ у дужках є наслідком діраківської природи електронів з нульовою ефективною масою у графені, що призводить до появи нульового рівня Ландау [41].

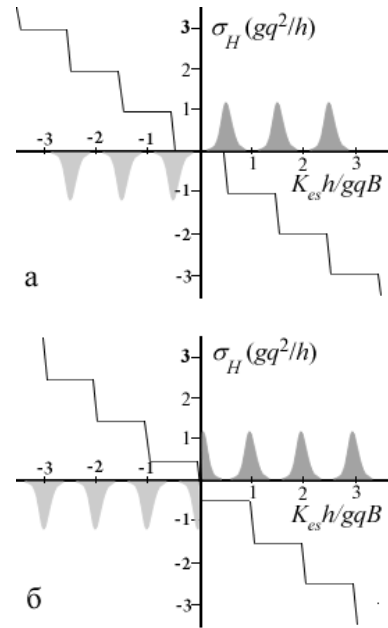


Рис. 29. Холлівська провідність, нормована на значення gq^2/h , у цілочисельному квантовому ефекті Холла в 2D кремнії (а) і в графені (б) як функція $K_{es} h/gqB$ [43] (виродження $g = 4$).

Ціле число крайових станів K_{es} і у випадку звичайного, і у випадку незвичайного квантового ефекту Холла показує, носії зі скількох саме заповнених рівнів Ландау, на які квантується в сильному магнітному полі електронний спектр, беруть участь у перенесенні струму (якщо рівень Фермі знаходиться між рівнями Ландау, то на залежності σ_H від магнітного поля спостерігається плато, висота якого визначається формулою (101)). На рис. 29 схематично зображено густини станів, що відповідають рівням Ландау. Через наявність у графені нульового рівня Ландау у формулі

(101) у дужках з'являється доданок $\frac{1}{2}$, а плато на залежності – зсунуті по осі абсцис.

Відзначмо, що отриманий Гусиніним і Шарповим [42] вигляд залежності холлівської провідності з урахуванням наявності «нульового» рівня Ландау, зображений на рис. 29б, пізніше багато разів спостережуваний експериментально, став першим прямим доказом наявності у графені ферміонів з нульовою ефективною масою [20].

За межами цієї роботи залишився спіновий квантовий ефект Холла, розгляду якого буде присвячена наступна стаття.

На завершення наголосімо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОАК) курсів лекцій «Fundamentals Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts і «Fundamentals Nanoelectronics», Part II: Quantum Models», прочитаного он-лайн в січні – квітні 2012 року проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т.Г.Шевченка.

Один з авторів (МВС) вдячний НАН України й УНТЦ за підтримку, надану в рамках виконання проекту № 5716 «Розвіток графенових технологій і дослідження базованих на графені наноструктур для наноелектроніки й оптоелектроніки».

Автори щиро вдячні Н.Ю.Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список использованной литературы

1. Hall E.H. On a New Action of the Magnet on Electric Currents // Amer. J. Mathematics. – 1879. – V. 2, N 3. – P. 287 – 292.
2. von Klitzing K., Dorda G., Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45. – P. 494 – 497.
3. фон Клитцинг К. Квантовый эффект Холла: Нобелевские лекции по физике // УФН. – 1985. – Т. 150, В. 1. – С. 107 – 126.
4. Reedtz G.M., Cage M.E. An Automated Potentiometric System For Precision Measurement Of the Quantized Hall Resistance // J. Res. Nation. Bureau Standards. – 1987. – V. 92, № 5. – P. 303 – 310.
5. Tsui D.S., Stormer H.L., Gossard A.C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit // Phys. Rev. Lett. – 1982. – V. 48, N 22. – P. 1559 – 1962.
6. Степановский Ю.П. Дробный квантовый эффект Холла // Электромагнитные явления. – 1998. – Т. 1, № 3. – С. 427 – 442.
7. Nagaosa Naoto, Sinova Jairo, Onoda Shigeki, MacDonald A.H., Ong N.P. Anomalous Hall effect // Rev. Mod. Phys. – 2010. – V. 82, № 2. – 1539 – 1592.
8. Dyakonov M.I., Perel V.I. Possibility of orientating electron spins with current // Sov. Phys. JETP Lett. – 1971. – V. 13. – P. 467.
9. Dyakonov M.I., Perel V.I. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors // Phys. Lett. A. – 1971. – V. 35, № 6. – P. 459 - 460.
10. Kane C.L., Mele E.J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95. – P. 226801/1 – 4.
11. Srinivasan S., Sarkar A., Behin-Aein B., Datta S. All-Spin Logic Device with inbuilt Non-Reciprocity // IEEE Trans. Magnetics. – 2011. – V. 47, № 10. – P. 4026 – 4032.
12. Kane C. L., Moore J. E. Topological Insulators // Physics World. – 2011. – V. 24. – P. 32 – 36: www.physics.upenn.edu/~kane/pubs/p69.pdf.
13. Datta Supriyo. Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World

- Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 473; www.nanohub.org/courses/FoN1; www.nanohub.org/courses/FoN2.
14. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: термоелектричні явища в концепції «знизу-вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, № 1. – P. 6 – 21..
 15. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2012. – V. 9, № 4. – P. 5 – 29.
 16. Ашкрофт Н., Мермін Н. Фізика твердого тела, тома 1 и 2. – М: Мир. – 1979.
 17. Rashba E.I. Spin Currents in Thermodynamic Equilibrium: The Challenge of Discerning Transport Currents // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68, № 24. – P. 241315R.
 18. Buttiker M. Symmetry of Electrical Conduction // *IBM J. Res. Dev.* – 1988. – V. 32, N 3. – P. 317 – 334.
 19. Кругляк Ю.О., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки. Метод нерівноважних функцій Гріна у матричному забраженні. I. Теорія // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, № 3. – P. 16 – 29.
 20. Стріха М.В. Фізика графену: стан і перспективи // *Сенсорна електроніка мікросис. техн.* – 2010. – Т. 1(7), № 3. – С. 5 – 13.
 21. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки. Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, N 2. – P. 5–37.
 22. Sears F.W., Salinger G.L. Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics. – Boston: Addison-Wesley. – 1975.
 23. Landauer Rolf. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Dev.* – 1957. – V. 1, № 3. – P. 223 – 231.
 24. Landauer Rolf. Electrical resistance of disordered onedimensional lattices // *Philos. Mag.* – 1970. – V. 21. – P. 863 – 867.
 25. Landauer Rolf. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *IBM J. Res. Dev.* – 1988. – V. 32. – P. 306.
 26. Landauer Rolf. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // *J. Math. Phys.* – 1996. – V. 37, № 10. – P. 5259.
 27. Buttiker M. Four-terminal phase-coherent conductance // *Phys.Rev. Lett.* – 1986. – V. 57. – P. 1761.
 28. Шарвін Ю.В. Об одном возможном методе исследования поверхности Ферми // *ЖЭТФ.* – 1965. – Т. 48, № 3. – С. 984 – 985 // *Sov. Phys. JETP.* – 1965. – V. 21. – P. 655 – 656.
 29. Sharvin Yu.V., Bogatina N.I. Investigation of Focusing of Electron Beams in a Metal by a Longitudinal Magnetic Field // *Sov. Phys. JETP.* – 1969. – V. 29, N 3 . – P. 419 – 423 // *ЖЭТФ.* – 1969. – Т. 56, № 3. – С. 772 – 779.
 30. Imry Y. in *Directions in Condensed Matter Physics*, ed. G. Grinstein, G. Mazenko. – Singapore: World Scientific. – 1986. – P. 101.
 31. Imry Y., Landauer Rolf. Conductance viewed as transmission // *Rev.Mod. Phys.* – 1999. – V. 71, № 2. – P. S306 – S312.
 32. Лесовик Г.Б., Садовский И.А. Описание квантового электронного транспорта с помощью матриц рассеяния // *УФН.* – 2011. – Т. 181, № 10. – С. 1041-1096.
 33. Stone A.D., Szafer A. What is measured when you measure a resistance? – The Landauer formula revisited // *IBM J.*

- Res. Dev. –1988. – V. 32, N 3. – P. 384 – 413.
34. *Mojarad R.G., Zainuddin A.N.M., Klimeck G., Datta S.* Atomistic non-equilibrium Green's function simulations of graphene nano-ribbons in the quantum hall regime // *J. Comput. Electron.* – 2008. – V. 7. – P. 407 – 410.
35. *Haug R.J.* Edge-state transport and its experimental consequences in high magnetic fields // *Semicond. Sci. Technol.* – 1993. – V. 8. – P. 131 – 153.
36. *Cage M.E.* Current Distributions in Quantum Hall Effect Devices // *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* – 1997. – V. 102. – P. 677.
37. *Мартинес-Дуарт Дж.М., Мартин-Палма Р.Дж., Агулло-Руеда Ф.* Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. – Москва: Техносфера. – 2007. – 368 с.
38. *Berger C., Zhimin Song, Xuebin Li, Xiaosong Wu, Brown N., Naud C., Mayou D., Tianbo Li, Hass J., Marchenkov A.N., Conrad E.H. First P.N., de Heer W.A.* Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene // *Science.* – 2006. – V. 312. – P. 1191 – 1196.
39. *Brey L., Fertig H.A.* Edge states and quantized Hall effect in Graphene // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 73. – P. 195408.
40. *Peres N.M., Castro Neto A.H., Guinea F.* // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 73. – P. 195411.
41. *Abanin D.A., Lee P.A., Levitov L.S.* Spin-filtered edge states and quantum Hall effect in Graphene // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 96. – P. 176803.
42. *Gusynin V.P., Sharapov S.G.* Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95. – P. 146801.
43. *Novoselov K.S., McCann E., Morozov S.V., Fal'ko V.I., Katsnelson M.I., Zeitler U., Jiang D., Schedin F., Geim A.K.* Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer praphene // *Nature Physics.* – 2006. – V. 2, № 3. – P. 177 – 180.

Стаття надійшла до редакції 22.02.2013 р.
Прийнята до публікації 04.11.2013 р.