Opgaven Quantumfysica II, Week 9, 1 maart 2000

Inleveren voor maandag 6 maart, 12.00 uur, bij de portier van de Diamantslijperij. Met vragen over stof en opgaven kun je terecht bij de werkcollegedocenten:

- *Alejandro Arrizabalaga (ITF kamer 333, tel. 5255006, arrizaba@wins.uva.nl)*
- *Joost Slingerland (ITF kamer 356, tel. 5255920, slinger@wins.uva.nl)*
- *Martijn Wubs (WZI kamer B045, tel 5255646, wubs@wins.uva.nl).*

Vermeld alsjeblieft de naam van je werkcollegedocent op het in te leveren werk. Succes !

Opgave 9: Elektron-tunnelling door kwantum dots

1 Inleiding

Al decennialang leren studenten kwantummechanica het probleem van een 'deeltje in een doos' op te lossen: wat zijn de energieniveaus, hoe hangt dat spectrum van de dimensie af van het probleem, en hoe gedraagt het systeem zich als je meerdere (identieke) deeltjes in die doos stopt? Als je het begrip 'doos' ruim opvat als een potentiaal die de bewegingen van een deeltje tot een deel van de ruimte beperkt, dan zijn de bekendste deeltjes-dozen wel atomen. Zie bijvoorbeeld Griffith's behandeling van het waterstofatoom, paragraaf 4.2. De energieniveaus van atomen zijn experimenteel te bepalen door te bekijken hoe hun wisselwerking met licht is (letterlijk: spectro-scopie).

De laatste jaren is er een revolutie in het maken van kunstmatige atomen, ook wel 'kwantum dots' genaamd. (De groep van Leo Kouwenhoven in Delft is er beroemd mee geworden, zie het krantenartikel op pagina 7.) Hun afmetingen zijn in de orde van tienden van micrometers en dus heel wat groter dan echte atomen (de Bohr straal is $0.529.10^{-10}$ m), maar klein genoeg om waar te nemen dat elektronen in dergelijke dozen slechts discrete energieniveaus kunnen bezetten. Eigenschappen zoals grootte, dimensie en wisselwerking met omgeving van dots kunnen worden aangepast, zodat ze de gewenste eigenschappen bezitten. Daar zullen we nog voorbeelden van zien. Er zijn ook allerlei nieuwe effecten waar te nemen in kwantum dots die in gewone atomen niet of minder geprononceerd te zien zijn zijn; daarbij moet je denken aan het effect van elektron-elektron-correlaties en de sterke invloed van magneetvelden. Op deze laatste twee zaken zullen we hier niet ingaan, maar in het bijgeleverde Nature-artikel van Ashoori kun je over deze gevorderde onderwerpen meer lezen. Zoals bij atomen het spectrum te bepalen is uit hun wisselwerking met licht, zo is bij kwantum dots het spectrum te bepalen uit elektron-transport-eigenschappen. Om precies te zijn: uit de manier waarop elektronen al dan niet door een kwantum dot heen kunnen tunnelen. Het is zelfs gelukt om afzonderlijke atomen gecontroleerd één voor één door een kwantum dot te laten tunnelen met een zelf te kiezen frequentie. Dit alles zal je nu nog niet al te veel zeggen, maar ook hier gaan we meer van zien.

2 Wanneer zie kwantum-eigenschappen van een dot?

We zullen ons de kwantum dot voorstellen als een systeem waarin elektronen slechts in een vlak kunnen bewegen (2D-elektronengas) en in dat vlak bijeengehouden worden door een centrale potentiaal (zie Ashoori figuur 1a,b). De dot is door potentiaalbarrières van de buitenwereld (naburige elektrodes etc.) gescheiden.

Er zijn nu twee grootheden waarvan we willen zien dat ze gekwantiseerd zijn: de energieniveaus van de kwantum dot, en de stroom van elektrische lading die we 'elektron voor elektron' door de kwantum dot willen zien gaan. Om met het eerste te beginnen: van een deeltje in een doos kun je alleen weten in welk energieniveau het zich bevindt, als de afstand tussen opeenvolgende energieniveaus ruim groter is dan de thermische energie van het deeltje. Nu zijn de energieniveaus van een deeltje in een vierkante tweedimensionale doos met lengte L gegeven door $E_{n_x,n_y} = \hbar^2\pi^2(n_x^2 + n_y^2)/2mL^2$, waarbij $\Delta E = \hbar^2\pi^2/2mL^2$ een goede maat is voor de afstand tussen opeenvolgende energieniveaus nabij de grondtoestand. Noem dus ΔE de 'level-spacing'.

a. Als in een kwantum dot de 'level-spacing' 5 maal zo groot moet zijn als de thermische energie om te kunnen meten in welk energieniveau een elektron zich bevindt, welke eis stelt dat aan de grootte van de kwantum dot in relatie tot de temperatuur? Is aan deze eis voldaan bij een kwantum dot met lengte 1 μm bij een temperatuur van 77K?

De eerste eis betrof dus de afmetingen van het elektronen-eilandje dat de dot is. De tweede eis die we stellen is dat afzonderlijke elektronen te 'zien' moeten zijn op de kwantum dot. Elektronen moeten dus goed gelocaliseerd zijn op de dot. Als dat niet het geval was dan zou je de dot niet in gehele veelvouden van de elektronlading kunnen opladen, omdat de lading van elk elektron verdeeld wordt over de kwantum dot *plus zijn omgeving*. Wanneer is daaraan voldaan? Een *kwalitatief* argument gaat als volgt: het aantal deeltjes op een dot verandert door een kwantum-tunnelproces: een elektron glipt weg (van of naar een kwantum dot) door een potentiaalbarrière waar ie klassiek gezien niet doorheen had gekund. Beschouw nu een dot met daarop één elektron, dat zou kunnen wegtunnelen. Met dit tunnelproces associëren we de energie-tijds onzekerheidsrelatie van Heisenberg, die luidt: $\Delta E \Delta t > \hbar/2$. De Δt is een 'tunneltijd' (eenheid: seconde), de karakteristieke tijd voor ladingsfluctuaties van de dot: dit is de tijd die de kwantum dot nodig heeft om zijn lading met één elementaire lading te doen toe- of afnemen (zie Griffiths paragraaf 3.4.3). Het omgekeerde van de tunneltijd geeft een tunnelsnelheid Γ (een 'rate' met eenheid: per seconde). De ΔE is de standaard deviatie van de energie van de dot. Als er geen tunneling was en de dot was in een energie-eigentoestand, dan was die standaard deviatie nul geweest. Nu er tunneling is, is de ΔE ongelijk nul: de dot-energieniveaus krijgen als het ware een zekere breedte ΔE. Deze breedte moet niet groter zijn dan de level-spacing van de dot, om nog over afzonderlijke energieniveaus te kunnen spreken. Als ruwe bovenafschatting voor de breedte van de energieniveaus als gevolg van het tunnelproces, nemen we daarom ΔE als bij onderdeel [a.]

b. Voor welke waarden van Γ is het aantal elektronen op een kwantum dot met lengte $1\mu m$ goed gedefinieerd?

We hebben nu gezien onder welke omstandigheden we kwantum effecten van een dot kunnen waarnemen. Toch hebben we nog geen idee wat die zojuist opgedoken tunnelsnelheid Γ voorstelt en hoe die samenhangt met de barrière waar het elektron doorheen kan tunnelen. Daarover gaat de volgende paragraaf.

3 Tunnelsnelheid door een potentiaalbarrière

De eis dat het aantal elektronen op de kwantum dot goed gedefinieerd moet zijn, liet zich vertalen in een eis dat de tunnelsnelheid van en naar de dot niet te groot is. Nu zou je de dot helemaal van de buitenwereld kunnen isoleren (tunnelsnelheid nul), maar als je de eigenschappen van een kwantum dot wilt leren kennen, zul je de dot toch moeten laten wisselwerken met zijn omgeving. Eén zo'n wisselwerking is elektron-tunneling. En kwantum dots zijn nu juist zo interessant vanwege hun tunnel-eigenschappen. Daarom gaan we nu bekijken wat belangrijke parameters zijn bij tunneling.

In een inzichtelijk ééndimensionaal model van tunneling door een dot (zie figuur 1, pagina 6), zie je dat de dot van bron en afvoer gescheiden is door twee potentiaalbarrières. We gaan nu na hoe de tunnelsnelheid van de hoogte en de breedte van een tunnelbarrière afhangt in een 1D model waarin links en rechts van de barrière de elektronen 'vrij' en dus als vlakke golven te beschrijven zijn (zie Griffiths pag. 44-50). Een elektron begint met energie E_i ('initial') en tunnelt naar rechts naar een energie E_f ('final'). De tunnelsnelheid wordt dan gegeven door:

$$\Gamma = K|T_{if}|^2 D_i D_f. \tag{1}$$

Hierin is K een constante. D_i en D_f zijn de toestandsdichtheden behorende bij energieën E_i en E_f: hoe meer toestanden er zijn van waaruit en waarnaartoe een elektron met zekere energie E kan tunnelen, hoe groter de kans dat hij ook echt gaat tunnelen. Bovenstaande formule is berekend met Fermi's zogenaamde 'Golden Rule' (voor de liefhebbers: zie Griffiths pag. 211), maar de afleiding zullen we niet nalopen. Ook de toestandsdichtheden (waarmee je niet verondersteld wordt goed bekend te zijn) laten we voor wat ze zijn. We gaan ons hier concentreren op het effect van de tunnelbarrière, en dat zit 'm alleen in de factor $|T_{if}|^2$, de *overgangswaarschijnlijkheid van de toestand E_i naar de toestand E_f door de barrière heen.*

We nemen voor het gemak aan dat de golffuncties van een electron zowel in als buiten de kwantum dot als vlakke golven kunnen worden benaderd. Als een elektron door een dot tunnelt, zijn er twee tunnelprocessen: het elektron tunnelt van de bron naar de dot, en daarna van de bron naar de afvoer. We concentreren ons nu op één zo'n tunnelproces. In Griffiths paragraaf 2.5 wordt berekend hoe een vlakke golf door een deltafunctie-potentiaal tunnelt. We bekijken nu een rechthoekige potentiaal met hoogte eV_H en breedte d (zie figuur 2, pag. 6): een golf met waarschijnlijkheidsamplitude B_1 treft een potentiaalbarrière. Een deel van de golf zal worden gereflecteerd en de rest gaat er doorheen. De waarschijnlijkheidsamplitude van het doorgelaten deel is B_3. De overgangswaarschijnlijkheid in termen van deze amplitudes luidt:

$$|T_{if}|^2 = \frac{|B_3|^2}{|B_1|^2} \tag{2}$$

Neem als Ansatz voor de drie gebieden

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) & k_1 &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} & (3)\\
\psi_2 &= A_2 \exp(k_2x) + B_2 \exp(-k_2x) & k_2 &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(eV_H - E)} & (4)\\
\psi_3 &= B_3 \exp(-ik_3x) & k_3 &= k_1. & (5)
\end{aligned}$$

Voor de randvoorwaarden in $x = 0$ en $x = d$ waarmee je ψ_1 aan ψ_2 aan ψ_3 knoopt, verwijs ik naar Griffiths pag. 54.

c. Laat zien dat de overgangswaarschijnlijkheid gegeven wordt door:

$$|T_{if}|^2 = \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{8}\left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1}\right)^2 + \frac{1}{8}\left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 \cosh(2k_2d)\right]^{-1}. \tag{6}$$

Zoals in bovenstaande formule te zien is, hangt de tunnelsnelheid af van de afstand d tussen de dot en zijn contacten, en ook van de hoogte van de potentiaal V_H aan weerzijden van de dot. In paragraaf 5 zullen we nog een leuke toepassing van de kwantum dot tegenkomen waarbij de hoogtes van die potentiaalbergen worden gevarieerd.

4 Coulomb oscillaties en Coulomb trap

Pak nu het artikel van Ashoori erbij, en lees tot en met pagina 415. In een experiment dat hij 'Gated Transport Spectroscopy' (GTS) noemt, staat een kwantum dot in tunnel-contact verbonden met twee elektroden (zie zijn figuur 2a). In de linker elektrode (source, *b*ron) hebben de elektronen de hoogste potentiële energie eV_b. Ze 'willen' naar de rechter elektrode (drain, *a*fvoer) met spanning V_a. Om van links naar rechts te gaan, moeten de elektronen door twee barrières tunnelen: eerst de dot in en dan er weer uit. Er is alleen een tunnelstroom als er één of meerdere energieniveaus E_j in de dot bestaan met $eV_b \geq E_j \geq eV_a$. We beschouwen echter de situatie van figuur 1 (pag. 6), waarin het spanningsverschil $V_{ba} \ll \Delta E/e$. Dan is er op zijn hoogst één niveau waarlangs het tunnelproces kan plaatsvinden. Als er niet zo'n niveau beschikbaar is, dan is de toestandsdichtheid D_f voor dit eerste tunnelproces gelijk aan nul. Nu kun je de dot ook onder spanning V_g (g = 'gate') zetten, met als gevolg dat alle beschikbare energieniveaus van de dot met dezelfde hoeveelheid eV_g omhoog schuiven.

d. Beredeneer, gebruik makend van formule (1), dat de tunnelstroom als functie van V_g slechts voor welbepaalde spanningen ongelijk aan nul zal zijn. Met andere woorden, verklaar het verschijnsel van de *Coulomb oscillaties* in Ashoori's figuur 2b.

Tot nu toe hebben we niet stil gestaan bij het feit dat de elektronen op een kwantum dot elkaar 'zien' via de Coulomb interactie. Maar het is niet zo dat je na het berekenen van de energieniveaus van een enkel elektron in een 2D doos weet wat de mogelijke energieën zijn die een stel elektronen in die dot kunnen hebben. Of een elektron op de dot kan tunnelen hangt met andere woorden niet alleen af van de eendeeltjes energieniveaus van de dot, maar ook van het reeds aanwezige aantal elektronen. Je voelt waarschijnlijk wel aan dat het - net als bij echte atomen! - onmogelijk is om de exacte energieniveaus van een dot met zeg 30 elektronen te berekenen. Het is gebuikelijk (en het is een mirakel dat dit simpele model zo goed werkt) om alle elektron-elektron interacties in een fenomenologische capaciteit C van de kwantum dot te stoppen, waarbij dan wordt aangenomen dat de capaciteit van de dot niet afhangt van het op de dot aanwezige aantal elektronen. De energie die het kost om een elektron op een kwantum dot te brengen bestaat in dit model uit twee delen: ten eerste moet een volgend elektron een energieniveau bezetten dat ΔE hoger ligt dan het hoogste dan reeds bezette niveau, omdat elektronen fermionen zijn. Ten tweede kost het een energie $qV = eV = e^2/C$ om het nieuwe elektron tegen de Coulomb-potentiaalberg op aan de al aanwezige elektronen toe te voegen.

e. Volgens Ashhoori in "Interpreting the spectra", kan de spanning V_g van figuur 2a direct vertaald worden naar een energieschaal (in meV) voor de kwantum dot. Neem aan dat de capaciteitsbijdrage aan de energie van het dertigste tot het negenendertigste elektron constant is en 5 maal groter dan de gemiddelde afstand ΔE_N tussen ééndeeltjes energieniveaus. Bereken hieruit ΔE_N.

Zoals gezegd bij onderdeel [a.] liggen voor een deeltje in een 2D doos de opeenvolgende energieniveaus minimaal de 'level-spacing' $\Delta E = \hbar^2\pi/2mL^2$ uit elkaar. De capaciteit van een platte ronde schijf is evenredig met zijn straal r, als $C = 8\epsilon_r\epsilon_0 r$.

f. Als je de dot kleiner maakt, is de afstand tussen de elektronen op de dot kleiner. Ook de level-spacing van de eendeeltjesniveaus verandert. Beide effecten zorgen ervoor dat het meer energie E gaat kosten om een extra elektron toe te voegen. Maar moet je de kwantum dot groter of kleiner maken om een relatief grotere bijdrage van de elektron-elektron interactie aan E te krijgen?

Je kunt de eendeeltjes-bijdrage en de capaciteitsbijdrage aan de energie E uit elkaar halen door een magneetveld aan te leggen loodrecht op de kwantum dot; de capaciteit zal niet veranderen, maar de eendeeltjes energieën wel, als functie van het magnetische veld. Dat laatste heb je vorige week uitgerekend, en de uitkomst was als het goed is Ashoori's formule (2).

In plaats van het veranderen van de spanning V_g zodat de energieniveaus een voor een langs het tunnel-venstertje tussen V_a en V_b komen lopen, kunnen we ook V_g constant houden en het tunnelvenster vergroten door V_b te vergroten. Wat je dan ziet, is de zogenaamde *Coulomb staircase* (trap), zie figuur 3, pag. 6.

g. Verklaar kwalitatief de stroom-spanningskarakteristieken van figuur 3, pag. 6. (Met de spanning die horizontaal uitstaat is bedoeld: het spanningsverschil $V_b - V_a$.)

5 Het draaihek voor afzonderlijke elektronen

Bij de Coulomb oscillaties wordt de gate spanning V_g gevarieerd en de verschilspanning V_{ab} constant gehouden. Het omgekeerde wordt gedaan bij het meten van een Coulomb trap. Nu echter houden we deze twee spanningen constant ($V_{ab} \ll \Delta E/e$) en gaan twee andere spanningen variëren, namelijk V_{H1} en V_{H2} die de hoogtes van de tunnelbarrières bepalen. Dit werd in paragraaf 3 al aangekondigd, waar het effect van tunnelbarrières is bestudeerd. De eerste tunnelbarrière V_{H1} komt een elektron tegen als hij van de bron naar de dot tunnelt, en de spanning V_{H2} moet hij passeren al tunnelend van de dot naar de afvoer.

Een fantastisch apparaatje krijg je als je de hoogte van die spanningen laat oscilleren, met elkaar in tegenfase, en over een zodanig amplitude-bereik dat bij de hoogste spanning zeker geen elektron zal tunnelen en bij de laagste waarde precies eentje. Je krijgt zo een soort draaihek: in deze zogenaamde “single elektron turnstile” (turnstile = draaiboom, tourniquet) tunnelt er tijdens een cyclus *precies één elektron* links in die er rechts weer uit tunnelt (zie figuur 4, pag. 6). Je kunt zo de stroomsterkte in je afvoer heel precies bepalen.

h. Door welke grootheden wordt dan de stroomsterkte bepaald? Weergeven in een formule.

Als het goed is, heb je een vrij eenvoudige formule gevonden. Deze eenvoud maakt het interessant om de eenheid van stroomsterkte te definiëren met behulp van de kwantum dot draaideur. Dat is een van de interessante toepassing van dit apparaatje waaraan wordt gewerkt.

i. Als we nu toch het spanningsverschil V_{ab} gaan vergroten, dan krijgen we als stroom-spanningskarakteristiek figuur 5, pag. 6. Verklaar deze karakteristiek en beschrijf wat er gebeurt tijdens een cyclus.

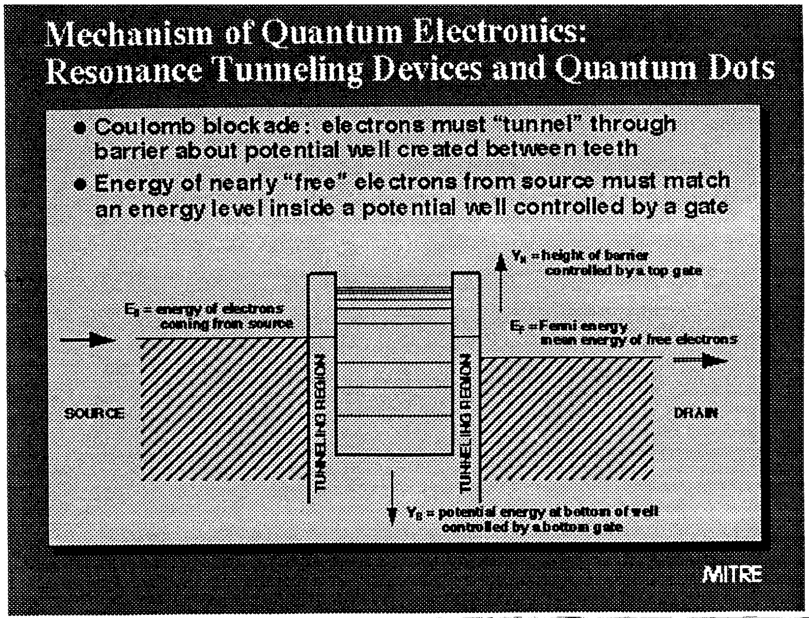
6 Meer informatie

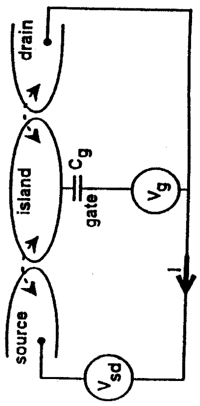
Als je meer wilt weten over kwantum dots, dan zou je met de volgende artikelen kunnen beginnen:

- *Quantum dots*, L. Kouwenhoven and Ch. Marcus, *Physics World* June 1998, 35-39.
- *Excitation Spectra of Circular Few-Electron Quantum Dots*, L.P. Kouwenhoven, T.H. Oosterkamp *et. al.*, *Science* vol. **278**, 1788-1792.

En hier zijn twee “hot quantum dot web-sites”:

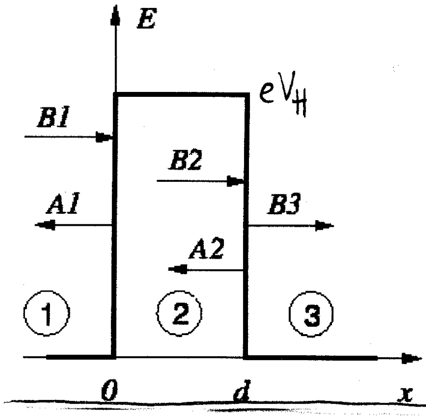
- De homepage van de groep van Leo Kouwenhoven van de TU Delft:
  `http://vortex.tn.tudelft.nl/`
- De website van Christoph Wasshuber van de TU Wenen. Hij is op kwantum dots gepromoveerd is en heeft een leesbare inleiding op het net gezet:
  `http://www.iue.tuwien.ac.at:8000/diss/wasshuber/diss/`





figuur 1

Figure 2 **:** Tunneling through a rectangular barrier with width *d* and height



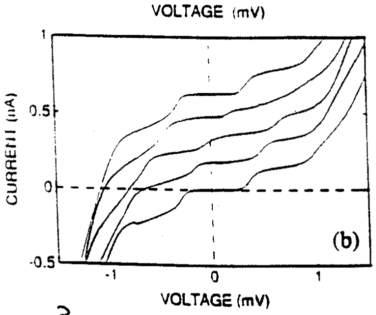


Figure 3 An example of a measurement of the Coulomb staircase in current-voltage characteristics. The different curves have an offset for clarity (I = 0 occurs at Vsd =0) and are taken for five different gate voltages to illustrate periodicity in accordance with the oscillations shown in Fig. 1.1(b) (from Kouwenhoven et al. [15]).

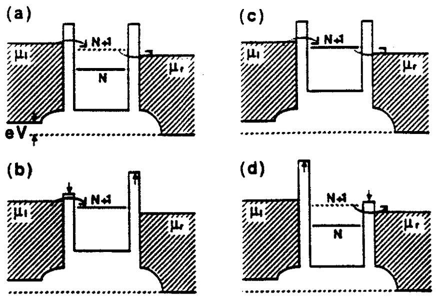


Figure 4 Schematic illustation of the four stages of operation of the single-electron turnstile. RF voltages applied to the gates are used to modify the tunneling rates through the barriers. Dashed arrows indicate that the tunneling probability is low; solid arrows indicate that it is high. (a) N electrons occupy the dot. (b) The left barrier is lowered, allowing one electron to tunnel onto the dot. (c) The left barrier is raised; the dot contains N+1 electrons. (d) The right barrier is lowered, allowing the electron to tunnel off. The net result is one electron transferred through the dot per RF cycle. (From Kouwenhoven, et al. [124])

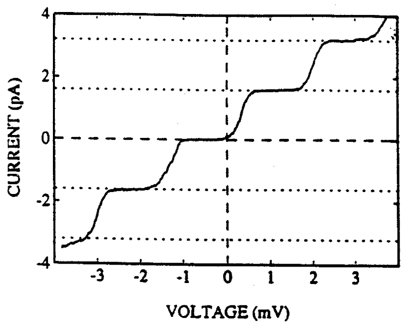


Figure 5 Current versus source-drain voltage for a single-electron turnstile operating at 10 MHz. Current steps at multiples of ef = 1.6 pA are observed, corresponding to integer numbers of electrons tunneling through the dot per RF cycle. (From Nagamune, et al. [13])