

表面等离子极化激元对电荷输运影响的自洽场理论研究^{*}

缪江平¹⁾²⁾ 吴宗汉²⁾ 孙承休¹⁾ 孙岳明³⁾

¹⁾ 东南大学电子工程系, 南京 210096)

²⁾ 东南大学物理系, 南京 210096)

³⁾ 东南大学化工系, 南京 210096)

(2003 年 10 月 17 日收到, 2003 年 12 月 15 日收到修改稿)

采用自洽场方法获得体系电荷密度分布, 根据激子理论分析体系电荷密度矩阵, 推导出表面等离子极化激元 (SPP) 的频谱分布, 并在原子轨道函数基上构造电流输运的矩阵等式, 然后采用 SPP 频谱规范电流输运矩阵得到电流输运多项式的表达形式. 进而提出因 SPP 影响电流输运而导致负阻现象的物理图像.

关键词: 电荷输运, 表面等离子极化激元, 电荷密度

PACC: 7320M, 7300

1. 引 言

在研究金属/绝缘体/金属 (MIM) 隧道结发光现象时, 伴随 MIM 隧道结表面等离子极化激元 (SPP) 耦合发光过程, 会出现电流电压特性的负阻现象^[1,2]. 探讨 SPP 在 MIM 隧道结负阻特性中的作用机理不仅延伸对电子输运特性的研究, 而且对改善 MIM 隧道结发光器件性能有着极其重要的作用.

SPP 是由表面电荷密度的波动和晶格振动形成的声子耦合而成的激子波, 目前对 SPP 理论和实验研究的基本内容包括了散射^[3-5]、传播^[6,7]和色散^[8], 仍采用电磁波理论和有效介电函数理论. 对 SPP 本质的物理描述应该是薛定谔方程的解, 而其精确求解是不可能的. 自洽场理论^[9]作为求解的近似方法已被广泛用于描述诸多物理性能^[10-12], 本文采用自洽场理论获得体系分子轨道波函数, 根据激子理论的研究模式^[13], 我们在这里给出了 SPP 的本征能形式.

关于电荷输运, 对于 MIM 结构, 一般采用势垒隧穿概率^[14]来描述电流大小, 这种方法只能给出对问题定性的理解. 在实际情况中对电流变化的模拟情况, 有的采用跃迁模型^[15], 通过主方程给出实际电流模拟的情况. 该方法对量子点的电荷跃迁构成电流的研究是适合的, 却不适合 MIM 结构, 因为

MIM 结构的原子簇模型结构在空间是连续的. 对于空间连续分布的原子簇结构, 我们采用原子轨道动量矩阵来模拟表征电流输运的大小, 然后分析受隧穿电子激发的 SPP 对电荷输运的影响, 描述造成负阻现象的物理图像.

本文给出理论研究结果, 具体的计算内容将在另文发表.

2. SPP 的频谱

体系密度算符为

$$\hat{\rho}(r) = \sum_{i=1}^N \hat{\delta}(r_i - r). \quad (1)$$

在由 Slater 轨道 $|k_1 \dots k_N\rangle^A$ 构成的体系多电子波函数 $|\Phi\rangle$ 中, 空间电荷密度分布函数 $\rho(r)$ 可以化简为

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \langle \Phi | \sum_{i=1}^N \hat{\delta}(r_i - r) | \Phi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \langle k_1 \dots k_N | \hat{\delta}(r_i - r) | k_1 \dots k_N \rangle^A \\ &= \sum_{i=1}^N |k_i(r)|^2 = \sum_{i=1}^n q_i |\kappa_i(r)|^2, \quad (2) \end{aligned}$$

式中 $k_i(r)$ 代表第 i 个不同自旋成分的分子轨道波函数, 而 $\kappa_i(r)$ 代表第 i 个分子轨道波函数, 具有 q_i 个电荷, 以下意义类同. q_i 是轨道电荷占据数, 在低

^{*} 国家自然科学基金(批准号 59977002)资助的课题.

能级上为自旋相反的 2 个电子,高能级上,特别是近 Fermi 能级,由于温度效应使得轨道电荷占据以概率的形式表达占据数,求和上标 n 表示占据电荷的分子轨道总数.上述推导表明,通过各分子轨道波函数 $|\kappa_i(r)$ 在该点的概率密度相加得到多电子波函数在空间点的电荷密度分布.

将分子轨道波函数 $|\kappa_i(r)$ 向原子轨道波函数基 $\{|\xi_u\rangle, u=1, 2, \dots, m\}$ 展开, m 代表原子轨道波函数的总数,得到空间电荷密度在原子轨道波函数表象中的形式

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \sum_{i=1}^n q_i |\kappa_i(r)| \delta(r_i - r) |\kappa_i(r)| \\ &= \sum_{i=1}^n q_i \left(\dots |\kappa_i| \xi_u \dots \right) \left(\xi_u | \right) \\ &\quad \times \delta(r_i - r) \left(\dots | \xi_s \dots \right) \left(\xi_s | \kappa_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^n q_i \sum_{u,s=1}^m |\kappa_i| \xi_u | \xi_s | \kappa_i | \xi_u | \delta(r_i - r) | \xi_s | \\ &= \sum_{u,s=1}^m \left[\sum_{i=1}^n q_i |\kappa_i| \xi_u | \xi_s | \kappa_i | \right] \xi_u | \delta(r_i - r) | \xi_s | \\ &= \sum_{u,s=1}^m \rho_{us} \phi_u^*(r) \phi_s(r), \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $\phi_u(r)$ 和 $\phi_s(r)$ 代表 u, s 原子轨道在 r 处的波函数值, ρ_{us} 是电荷密度在原子轨道基函数上的系数分量,由其构成的矩阵称为电荷密度矩阵,为

$$\rho_{us} = \sum_{i=1}^n q_i |\kappa_i| \xi_u | \xi_s | \kappa_i | = \sum_{i=1}^n q_i C_{iu}^* C_{is}. \quad (4)$$

由于电子集体振荡理论一般采用电荷密度的傅里叶分量随时间的变化来描述激元的集体振荡,我们采用在原子轨道函数基下的电荷密度矩阵分量随时间的变化来研究体系的激元行为,即

$$\frac{\partial \rho_{us}}{\partial t} = \sum_{i=1}^n q_i \left[\frac{\partial C_{iu}^*}{\partial t} C_{is} + C_{iu}^* \frac{\partial C_{is}}{\partial t} \right]. \quad (5)$$

由于

$$\frac{\partial C_{iu}^*}{\partial t} = \frac{\partial |\kappa_i|}{\partial t} | \xi_u | + |\kappa_i| \frac{\partial | \xi_u |}{\partial t}, \quad (6)$$

因为

$$\frac{\partial |\kappa_i|}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} |\kappa_i| \hat{H}_i = -\frac{E_i}{i\hbar} |\kappa_i|, \quad (7)$$

$$\frac{\partial | \xi_u |}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_u | \xi_u | = \frac{E_u}{i\hbar} | \xi_u |, \quad (8)$$

式中 \hat{H}_i 表示体系分子轨道的 Hamilton 量,而 \hat{H}_u 表

示原子轨道的 Hamilton 量,所以

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{iu}^*}{\partial t} &= -\frac{E_i}{i\hbar} |\kappa_i| | \xi_u | + \frac{E_u}{i\hbar} |\kappa_i| | \xi_u | \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_u - E_i) C_{iu}^*. \end{aligned} \quad (9)$$

同理,

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{is}}{\partial t} &= \frac{\partial |\kappa_i|}{\partial t} | \xi_s | + |\kappa_i| \frac{\partial | \xi_s |}{\partial t} \\ &= -\frac{E_s}{i\hbar} |\kappa_i| | \xi_s | + \frac{E_i}{i\hbar} |\kappa_i| | \xi_s | \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_i - E_s) C_{is}. \end{aligned} \quad (10)$$

把(9)和(10)式代入(5)式中,得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{us}}{\partial t} &= \sum_{i=1}^n q_i \left[\frac{\partial C_{iu}^*}{\partial t} C_{is} + C_{iu}^* \frac{\partial C_{is}}{\partial t} \right] \\ &= \sum_{i=1}^n q_i \left[\frac{1}{i\hbar} (E_u - E_i) C_{iu}^* C_{is} + \frac{1}{i\hbar} (E_i - E_s) C_{iu}^* C_{is} \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_u - E_s) \sum_{i=1}^n q_i C_{iu}^* C_{is} \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_u - E_s) \rho_{us}. \end{aligned} \quad (11)$$

因此可以得到空间电荷密度的基函数分量表达式为

$$\begin{aligned} \rho_{us} &= \sum_{i=1}^n q_i C_{iu}^* C_{is} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (E_u - E_s)t\right] \\ &= \sum_{i=1}^n q_i C_{iu}^* C_{is} \exp(-i\omega_{us}t), \end{aligned} \quad (12)$$

式中

$$\omega_{us} = \frac{(E_u - E_s)}{\hbar}. \quad (13)$$

从上述结果可以看出,SPP的振动频率仅由原子轨道能级差决定,这样根据体系原子轨道能级相互组合形成的能量差序列就可以构成了由电子集体振荡造成的SPP的频谱分布,对应SPP振荡频率的强度是由电荷密度矩阵相应的单元决定.

3. 电流输运

体系电流密度公式为

$$j_x = nev_x, \quad (14)$$

式中 j_x 是 x 方向上电流密度, n 是体积电荷数, v_x 是体系在 x 方向上的运动速度.根据量子力学的观点, x 方向速度均值在体系多电子波函数 $|\Phi\rangle$ 中为

$$\hat{v}_x = \frac{\hat{p}_x \Phi}{m}, \quad (15)$$

式中 \hat{p}_x 是动量算符.在体系多电子波函数 $|\Phi\rangle$ 下, x

方向动量的均值为

$$\begin{aligned} \hat{p}_x | \Phi \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \Phi \rangle = -i\hbar | \Phi \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| \Phi \rangle \\ &= -i\hbar \cdot A | k_1 \dots k_n \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k_1 \dots k_n \rangle^A. \end{aligned} \quad (16)$$

由于 $\frac{\partial}{\partial x}$ 对 $| k_1 \dots k_n \rangle^A$ 是全对称算符, 可以看作仅对 Slater 行列式的第一列起作用, 因而有

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} | \Phi \rangle &= \frac{1}{N!} \left[\sum_{i=1}^N (-1)^{1+i} | k_i^{(1)} \rangle \right. \\ &\quad \times \Delta^{(i,1)}(2, 3, \dots, n, N) \left. \right] \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{i=1}^N (-1)^{1+j} | k_j^{(1)} \rangle \right. \\ &\quad \times \Delta^{(j,1)}(2, 3, \dots, n, N) \left. \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

(17) 式中, $| k_i^{(1)} \rangle$ 表示第一个电子在单电子 $| k_i \rangle$ 态上; $\Delta^{(i,1)}(2, 3, \dots, n, N)$ 对应于 $| k_i^{(1)} \rangle$ 的代数余子式, 有

$$\begin{aligned} \Delta^{(i,1)}(2, 3, \dots, n, N) \Delta^{(j,1)}(2, 3, \dots, n, N) \\ = (N-1) \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (18)$$

所以(17)式化为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} | \Phi \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (-1)^{2+i+j} | k_i^{(1)} \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k_j^{(1)} \rangle \\ &\quad \times \Delta^{(i,1)}(2, 3, \dots, n, N) \Delta^{(j,1)}(2, 3, \dots, n, N) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{i,j=1}^N (-1)^{2+i+j} | k_i^{(1)} \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k_j^{(1)} \rangle (N-1) \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N | k_i \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k_i \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

将(19)式代入(16)式可以得到

$$\begin{aligned} \hat{p}_x | \Phi \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \Phi \rangle = -i\hbar \sum_{i=1}^N | k_i \rangle \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k_i \rangle \\ &= -i\hbar \sum_{i=1}^n q_i \kappa_i \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| \kappa_i \rangle \\ &\equiv -i\hbar \sum_{i=1}^n q_i \frac{\partial}{\partial x} \kappa_i, \end{aligned} \quad (20)$$

式中, Q 是总电荷数, 为 $Q = \sum_i q_i$, $| \kappa_i \rangle$ 是电荷占据的分子轨道, q_i 是在各分子轨道上的电荷分布数, 性质同前. 由(20)式可以看出, 体系基态波函数 $| \Phi \rangle$ 下的 x 方向动量的均值可以由各分子轨道波函数 $| \kappa_i \rangle$ 上的 x 方向动量均值的电荷加权平均来计算.

在原子轨道波函数上展开分子轨道波函数, 可以进一步得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \kappa_i &= \kappa_i \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| \kappa_i \rangle \\ &= (\dots C_{iu}^* \dots) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ & u \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| s \rangle & \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{is} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= \sum_{u,s}^m C_{iu}^* C_{is} P_{us}. \end{aligned} \quad (21)$$

(21) 式中, 令

$$P_{us} \equiv u \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| s \rangle \quad (22)$$

是指 x 方向动量在原子轨道 $| u \rangle$ 和 $| s \rangle$ 上的动量交叠量, 由 P_{us} 构成的矩阵称为原子轨道动量交叠阵.

将(21)式代入(20)式得

$$\begin{aligned} \hat{p}_x | \Phi \rangle &= -i\hbar \sum_{i=1}^n q_i \frac{\partial}{\partial x} \kappa_i \triangleq -\frac{\hbar}{Q} \sum_{i=1}^n q_i \sum_{u,s}^m C_{iu}^* C_{is} P_{us} \\ &= -\frac{\hbar}{Q} \sum_{u,s}^m \rho_{us} P_{us}, \end{aligned} \quad (23)$$

式中标 Δ 处的等号表示: 由于体系波函数计算采用的是实波函数, 因此将虚数单位“ i ”去掉, 得到了在实波函数下的 x 方向上动量均值. 这样, 我们发现, 体系基态波函数 $| \Phi \rangle$ 下的 x 方向动量均值是由体系电荷密度矩阵和原子轨道动量交叠阵共同构成的.

在 MIM 薄膜体系中, 我们采用下式作为描述电流密度的公式:

$$j = e \frac{Q}{S} v_{x, \Phi}. \quad (24)$$

(24) 式的物理含义是单位截面上所有分子轨道 x 方向上的电荷流动量的总和. 这样根据上述推导可以得到在原子轨道表象下电流密度表达式

$$j = \frac{eQ}{S} \frac{P_{x, \Phi}}{m} = -\frac{e\hbar}{mS} \sum_{u,s}^m \rho_{us} P_{us}. \quad (25)$$

体系 MIM 原子簇计算模型是在原子单位下进行的, 将计算单位统一在国际单位制下的关系为

$$x_{\text{SI}} = a_0 x'_{\text{a.u.}}, \quad (26)$$

式中 $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar^2}{me^2}$ 是玻尔半径, 下标 SI 代表国际单位, a.u. 代表原子单位, 如速度均值在原子单位下的形式为

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{p_x}{m} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \kappa_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \kappa_i \frac{1}{a_0} \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \kappa_i = \frac{p_{x, \text{a.u.}}}{ma_0}. \end{aligned} \quad (27)$$

体系面积 S 是指垂直于 x 轴的横截面,由原子簇计算模型的 y 方向和 z 方向长度决定, S 的形式为

$$S = L_y \cdot L_z = S_{yz} a_0^2. \quad (28)$$

所以,体系电流密度在国际单位制下的形式为

$$\begin{aligned} j &= -\frac{e\hbar}{mS} \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us} \\ &= -\frac{e\hbar}{mS_{yz}} \cdot \frac{1}{a_0^3} \cdot \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us} \\ &= -\frac{e\hbar}{mS_{yz}} \cdot \frac{m^3 e^6}{(4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^6} \cdot \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us} \\ &= -\frac{m^2 e^7}{(4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^5} \cdot \frac{1}{S_{yz}} \cdot \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us} \\ &= -\frac{1.2517 \times 10^8}{S_{yz}} \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us}. \quad (29) \end{aligned}$$

根据计算 $3 \times 3 \text{ nm}^2$ 的电流强度达到几十毫安,这与实验结果是相符的.

令

$$\sigma_0 = \frac{1.2517 \times 10^8}{S_{yz}}, \quad (30)$$

σ_0 是体系常数,所以体系电流密度简化为

$$j = -\sigma_0 \sum_{u,s}^M \rho_{us} P_{us}. \quad (31)$$

4. SPP 对电流密度影响

当体系电流密度得到以原子轨道动量矩阵的表达形式后,根据不同电压下 ρ_{us} 变化情况,就可以计算出体系的电流-电压特性曲线.很明显,需要以各电压下的 ρ_{us}^V 和 0 V 下的 ρ_{us}^0 之间的差值来准确描述体系电流随电压变化的情况.

这样,不同电压下准确的电流密度表达式为

$$\begin{aligned} j^v &= j^{(V)} - j^{(0)} \\ &= -\sigma_0 \sum_{u,s}^M [\rho_{us}^{(V)} - \rho_{us}^{(0)}] P_{us} \\ &= -\sigma_0 \sum_{u,s}^M \delta\rho_{us}^v P_{us}. \quad (32) \end{aligned}$$

在分析原子轨道动量矩阵 P_{us} 中发现 (1) 仅有不同原子轨道间的交叠量才会对电流有贡献,所以当 $u = s$ 的量可以去掉,即对角线的量都去掉. (2) 有一部分对角共轭的动量值之和很接近零,为了减少计算量,将其转置相加,消去对电流密度没有贡献的部分,得到对电流密度有主要贡献的部分 ΔP_{us} . 因而有以下过程:

令

$$\begin{aligned} A_{us} &= \delta\rho_{us}^v P_{us}, \\ j^v &= -\sigma_0 \sum A = -\frac{\sigma_0}{2} \sum (A + A^T) \\ &= -\frac{\sigma_0}{2} \sum_{u,s}^M \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us}. \quad (33) \end{aligned}$$

这样,体系电流密度的形式为

$$j^v = -\frac{\sigma_0}{2} \sum_{u,s}^M \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us}. \quad (34)$$

由于受外界刺激形成 SPP,扰动杂化态电荷占据数形成波动形式,为(这里只取实数部分)

$$\delta\rho_{us}^v = \delta\rho_{us}^v \cos(\omega_{us} t). \quad (35)$$

所以体系电流密度在 SPP 的影响下,为

$$\begin{aligned} j^v &= -\frac{\sigma_0}{2} \sum_{u,s}^M \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us} \cos(\omega_{us} t) \\ &= -\frac{\sigma_0}{2} J^v, \quad (36) \end{aligned}$$

式中

$$J^v = \sum_{u,s}^M \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us} \cos(\omega_{us} t). \quad (37)$$

将 J^v 按频谱展开得

$$\begin{aligned} J^v &= \sum_{\Omega_0} \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us} + \sum_{\Omega_1} \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us} \cos(\omega_1 t) \\ &\quad + \dots + \sum_{\Omega_i} \delta\rho_{us}^v \Delta P_{us} \cos(\omega_i t), \quad (38) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= \{u, s | E_u = E_s, u \neq s\}, \\ \Omega_1 &= \left\{u, s | \omega_1 = \frac{1}{\hbar} |E_u - E_s|\right\}, \end{aligned}$$

$$\Omega_i = \left\{u, s | \omega_i = \frac{1}{\hbar} |E_u - E_s|\right\},$$

$$\omega_1 < \omega_2 < \dots < \omega_i.$$

这里 $\Omega_0, \Omega_1, \dots, \Omega_i$ 代表原子轨道能量差满足集合条件的原子轨道 $|u\rangle, |s\rangle$ 构成的集合.当外界电场的能量足够能引起具有 ω_i 的 SPP 振动,则小于 ω_i 的 SPP 都存在,大于 ω_i 不能存在.

J^v 执行算法:

1) 将 SPP 振动按能量从低到高排列, $\omega_1 < \omega_2 < \dots < \omega_{45}$;

2) 判断电压,当电压足够激发 SPP 的 ω_i 振动时,就将该项系数清零,表明该杂化态对电荷输运已无贡献;

3) 电压越高,激发的 SPP 振动就越多.

当外界电场引起 $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_i$ 的 SPP 振动,那

么它们对电流的贡献从式中可明显看出为零,即没有贡献,负阻现象就产生了。

5. 结 论

MIM 体系的电荷输运在 SPP 振荡影响下,形成这样一个物理图像:在较低的电场下,不存在杂化态被干扰,引起杂化态振动,每个杂化态都在对电流输运作贡献,这时电荷输运有多种通道,只是由于电场原因各通道的电荷占据数很少而致使通道内电荷输运量少,随着电场逐渐上升各通道内电荷占据数逐渐增多,而使得电荷输运量逐渐加大,电流就上升。当电场加到足够的电压,具有高能量的隧穿电子通过绝缘层/金属层(IM)界面层时,刺激了一些杂化态产生振动跃迁,导致该种杂化态在形成杂化态的纯态之间跃迁而失去对电荷输运的贡献,电荷输运通

道消失;当电压继续增高,隧穿电子能量继续升高,原有的杂化态振动已然存在,同时又产生新的高能量杂化态振荡,继续影响体系电荷输运的能力。当隧穿电子刺激到对电荷输运具有重大贡献的杂化态时,该杂化态由于产生跃迁而消失了对电荷输运的贡献时,电荷输运就大大减退了,导致电流的下降。随着电压的不断增加,致使具有足够能量同时激发全部低能量的 SPP 振荡时,这时电流下降到最低点。随着电压的进一步增加,主要传输电荷的通道上升的幅度逐渐占据主要地位时,电流开始由该主要通道传输而明显上升,这时电荷传输不再是多种通道共存,而只是一些通道存在,但流量占主要地位,其他通道由于 SPP 振荡而失去了传输电荷的能力。当然,通道还包括一些由于刺激能量低而不能被激发的杂化态通道,当能量足够高时该杂化态依然要受到影响。

-
- [1] Wang M X *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1159 (in Chinese) [王茂祥等 2000 物理学报 **49** 1159]
- [2] Zhou L X *et al* 2002 *J. Appl. Sci.* **20** 296
- [3] Pack A *et al* 2001 *Opt. Commun.* **194** 277
- [4] Sergey I *et al* 2001 *Opt. Commun.* **198** 241
- [5] Hooper I R *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **66** 205408
- [6] Puygranier B A F *et al* 2001 *Surf. Sci.* **490** 85
- [7] Maradudin A A *et al* 2001 *Physca B* **296** 85
- [8] Masten A *et al* 2001 *Appl. Surf. Sci.* **179** 68
- [9] Xiao S X , Wang C Y , Chen T L 1998 *The Application of the Discrete Variational Method in the Density Function Theory to Chemistry and Material Physics* (Beijing : Science Press) p25 (in Chinese) [肖慎修、王崇愚、陈天朗 1998 密度泛函理论的离散变分方法在化学和材料物理学中的应用(北京:科学出版社)第 25 页]
- [10] Fan X J *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1685 (in Chinese) [樊锡君等 1998 物理学报 **47** 1685]
- [11] Tian S F *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 140 (in Chinese) [田淑芬等 1999 物理学报 **48** 140]
- [12] Zhang G Y *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1344 (in Chinese) [张国英等 2000 物理学报 **49** 1344]
- [13] Li Z Z 1985 *Solid Theory* (Beijing : Education Press) p113 (in Chinese) [李正中 1985 固体理论(北京:教育出版社)第 113 页]
- [14] Zhang Y D 2002 *Quantum Mechanics* (Beijing : Science Press) p65 (in Chinese) [张永德 2002 量子力学(北京:科学出版社)第 65 页]
- [15] He H B *et al* 2000 *Res. Progr. SSE* **20** 169

The self-consistent theoretical study of the effect of surface plasmon and polariton on electronic transport^{*}

Miao Jiang-Ping^{1,2)} Wu Zong-Han²⁾ Sun Cheng-Xiu¹⁾ Sun Yue-Ming³⁾

¹⁾*(Department of Electronic Engineering , Southeast University , Nanjing 210096 , China)*

²⁾*(Department of Physics , Southeast University , Nanjing 210096 , China)*

³⁾*(Department of Chemistry and Chemical Engineering , Southeast University , Nanjing 210096 , China)*

(Received 17 October 2003 ; revised manuscript received 15 December 2003)

Abstract

The system charge density distribution was investigated by the self-consistent theory. Using the exciton theory , the frequency spectrum of surface plasmon and polariton (SPP) was derived by analyzing charge density matrix . Then , the electric transport matrix formed on the basis of atom orbit functions was classified into polynomial by the frequency spectrum of SPP . Moreover , the physics mechanism of negative resistance caused by the effect of SPP on electric transport was discussed .

Keywords : electronic transport , surface plasmon and polariton , charge density

PACC : 7320M , 7300

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.59977002).