

# 金属超晶格中的电子输运过程\*

杨瑞青 熊诗杰  
(南京大学固体物理研究所)

蔡建华  
(上海交通大学物理系, 南京大学固体物理研究所)

1985 年 1 月 23 日收到

## 提 要

本文借助文献 [1] 的方法解出在存在温度梯度和外磁场时金属超晶格的电子系统 Boltzmann 方程, 并以 Nb-Ti 超晶格系统为例计算出其电子热导率、热电功率、Thomson 系数和 Hall 系数随调制周期变化的曲线, 以此说明这种人造材料的电子输运性质与其微观结构关系的基本物理特性。

## 一、引 言

文献 [1] 中, 借助于对金属超晶格能带结构的物理特征的分析, 我们解出它的电子系统在弱的恒定外电场下的 Boltzmann 方程, 得到其直流电导率随调制周期变化的关系曲线, 这一结果与实验测得的 Nb-Ti 超晶格的直流电导率的结果一致, 从而解释了这种金属超晶格系统在一定的调制周期下的特殊导电行为。

本文借助于文献 [1] 的方法, 对更一般的情况, 即存在外磁场及温度梯度的情况, 讨论了金属超晶格电子系统的 Boltzmann 方程的求解问题。我们仍以 Nb-Ti 超晶格系统为例, 计算出其电子热导率、热电功率、Thomson 系数和 Hall 系数随调制周期变化的关系曲线, 试图以此说明这种材料的电子输运过程的基本物理特征, 引起进一步实验和理论研究的兴趣。

## 二、电子系统 Boltzmann 方程的求解

设调制周期为  $\lambda$  的金属超晶格由厚度相同的  $A, B$  两种金属薄膜交替叠合组成。我们取各界面的法向, 即调制方向为  $z$  轴, 以某一金属层的中心平面为  $x-y$  平面。

令  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  为电子的分布函数,  $\mathcal{E}$  和  $\mathbf{B}$  分别为电子受到的电场和磁场, 可写出其 Boltzmann 方程

\* 中国科学院科学基金资助的课题。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \cdot \nabla f - \frac{e}{\hbar} \left( \mathcal{E} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{collision}}, \quad (1)$$

式中  $E$  是电子的能量,  $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E = \mathbf{v}$  为电子的群速. 设  $f_0 \equiv f_0(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  是平衡态下的电子分布函数, 又设  $\bar{f}_0 \equiv \bar{f}_0(\mathbf{k})$  是  $f_0$  的空间平均值. 电场  $\mathcal{E}$  可分为金属超晶格自身存在的内静电场和外加电场两部分

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{ext}} + \mathcal{E}_{\text{int}},$$

当无外加电磁场和温度梯度时, 电子系统处于平衡态, 我们有

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \cdot \nabla f_0 - \frac{e}{\hbar} \mathcal{E}_{\text{int}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0 = 0. \quad (2)$$

很明显, 金属超晶格有很强的各向异性. 这里, 我们主要对平行于界面方向的输运性质感兴趣, 为此, 加上沿  $x$ - $y$  平面的弱电场  $\mathcal{E}_{\text{ext}} = \mathcal{E}_x \mathbf{i} + \mathcal{E}_y \mathbf{j}$ , 这里  $\mathbf{i}$  和  $\mathbf{j}$  为沿  $x$ ,  $y$  方向的单位向量, 再加上沿  $z$  方向的外磁场, 并假设只存在沿  $x$  轴方向的温度梯度. 在外场和温度梯度不大的情况下, 可以采用线性近似, 即只保留小量  $f_1 \equiv f - f_0$  的线性项. 对于碰撞项  $\left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{collision}}$ , 我们采用弛豫时间近似. 那么, 考虑到 (2) 式, 我们可写出关于  $f_1$  的方程

$$\begin{aligned} & \frac{e}{\hbar} \left[ \left( \mathcal{E}_x + \frac{T}{e} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu}{T} \right) + \frac{E}{eT} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} + \mathcal{E}_y \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_y} \right] \\ & + \frac{eB}{\hbar^2} \left( \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial f_1}{\partial k_x} - \frac{\partial E}{\partial k_x} \frac{\partial f_1}{\partial k_z} \right) \\ & - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial f_1}{\partial z} = \frac{f_1}{\tau}. \end{aligned} \quad (3)$$

以上已考虑到  $f_1$  及  $f_0$  仅是  $z$  的函数, 与  $x$ ,  $y$  坐标无关, 因为只存在  $z$  方向的调制, 其次, 对于平衡态的分布函数, 我们利用了关系式

$$\nabla_{\mathbf{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_{\mathbf{k}} E,$$

$\mu$  是电子系统的化学势,  $\tau$  是弛豫时间,  $T$  是温度. 引入辅助量  $\varphi$ , 令  $f_1 = \varphi \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial E}$ , 则 Boltzmann 方程化为

$$\begin{aligned} & \frac{eB}{\hbar^2} \left( \frac{\partial E}{\partial k_y} \frac{\partial \varphi}{\partial k_x} - \frac{\partial E}{\partial k_x} \frac{\partial \varphi}{\partial k_y} \right) + \frac{e}{\hbar} \left( \frac{\partial E}{\partial k_x} \mathcal{E}'_x + \frac{\partial E}{\partial k_y} \mathcal{E}_y \right) \\ & - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\varphi}{\tau}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $\mathcal{E}'_x \equiv \mathcal{E}_x + \frac{T}{e} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu}{T} \right) + \frac{E}{T} \frac{\partial T}{\partial x}$ . 在线性近似下, 我们只取  $\varphi$  对  $\mathcal{E}'_x$ ,  $\mathcal{E}_y$  及  $B$  的升幂展开式中的线性项, 但关于  $\varphi$  的方程 (4) 中凡是涉及到  $\mathcal{E}'_x$ ,  $\mathcal{E}_y$  及  $B$  的项都含有  $\frac{\partial E}{\partial k_x}$  或  $\frac{\partial E}{\partial k_y}$  的一次因子, 因此, 在做如上升幂展开时可把  $\frac{\partial E}{\partial k_x}$  或  $\frac{\partial E}{\partial k_y}$  收缩到外场  $\mathcal{E}'_x$ ,  $\mathcal{E}_y$  和  $B$  中, 从而得到的  $\varphi$  也应是  $\frac{\partial E}{\partial k_x}$  和  $\frac{\partial E}{\partial k_y}$  的一次函数. 这样, 可令

$$\varphi = \frac{1}{\hbar} g(E, z, k_z) \frac{\partial E}{\partial k_x} + \frac{1}{\hbar} h(E, z, k_z) \frac{\partial E}{\partial k_y}, \quad (5)$$

以此代入(4)式,令  $\frac{\partial E}{\partial k_x}$  及  $\frac{\partial E}{\partial k_y}$  的系数分别相等,并只取有效质量的对角元,可得

$$\begin{aligned} \frac{eB}{m^*} h + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial g}{\partial z} + \frac{1}{\tau} g &= e \mathcal{E}'_x, \\ \frac{eB}{m^*} g - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial h}{\partial z} - \frac{1}{\tau} h &= -e \mathcal{E}'_y. \end{aligned} \quad (6)$$

引入复数量  $G = g + ih$ ,  $\mathcal{F} = \mathcal{E}'_x + i \mathcal{E}'_y$ , 则可将(6)式改写成

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{\partial G}{\partial z} - \frac{ieB}{m^*} G + \frac{1}{\tau} G = e \mathcal{F}. \quad (7)$$

我们将单独处理界面碰撞效应,因此可将(7)式在A或B金属层内分别求解,得到

$$\begin{aligned} G_{a(b)} &= C_{a(b)} \exp \left[ -\hbar z (\tau_{a(b)}^{-1} - i\omega_c) / \left( \frac{\partial E}{\partial k_z} \right) \right] \\ &\quad + e \tau_{a(b)} \mathcal{F} / (1 - i\omega_c \tau_{a(b)}), \end{aligned} \quad (8)$$

式中  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$  是电子的迴旋频率<sup>[2]</sup>,下标 a 或 b 分别对应于 A 或 B 金属层,  $C_{a(b)}$  是待定的积分常数。

类似于文献[1],考虑到界面散射效应的分布函数的连续条件,可将系数  $C_{a(b)}$  定出:

$$\begin{aligned} [f_{1a}]_{z=\lambda/4, v_z < 0} &= (1-p)[f_{1b}]_{z=\lambda/4, v_z < 0}, \\ [f_{1b}]_{z=\lambda/4, v_z > 0} &= (1-p)[f_{1a}]_{z=\lambda/4, v_z > 0}, \\ [f_{1a}]_{z=-\lambda/4, v_z > 0} &= (1-p)[f_{1b}]_{z=-\lambda/4, v_z > 0}, \\ [f_{1b}]_{z=-\lambda/4, v_z < 0} &= (1-p)[f_{1a}]_{z=-\lambda/4, v_z < 0}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $p$  是电子在界面上受到散射的几率。将(8)式代入(9)式(考虑到  $G$  及  $\varphi$  的定义),就可得到待定系数  $C_a$  和  $C_b$  的表达式。

### 三、输运系数与调制周期的关系

定义复数电流密度  $J = J_x + iJ_y$  和复数能量流密度  $Q = Q_x + iQ_y$ , 则

$$J = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar^2} \sum_j \left[ \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right)^2 g + i \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_y} \right) h \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k, \quad (10a)$$

$$Q = \frac{1}{4\pi^3 \hbar^2} \sum_j \left[ \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right)^2 g + i \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_y} \right) h \right] E_j \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k, \quad (10b)$$

其中  $j$  是能带标号,积分对第一 Brillouin 区进行。将(10a)和(10b)式对  $z$  求平均后得到

$$\begin{aligned} J &= -\frac{e}{4\pi^3 \hbar^2} \sum_j \left[ \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right)^2 \text{Re} U_j + i \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_y} \right)^2 \text{Im} U_j \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k, \\ Q &= \frac{1}{4\pi^3 \hbar^2} \sum_j \left[ \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right)^2 \text{Re} U_j + i \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_y} \right)^2 \text{Im} U_j \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} E_j d^3 k, \end{aligned} \quad (11)$$

式中

$$U_i = \frac{e\tau\mathcal{E}}{1 - i\omega_c\tau} \left\{ 1 - \frac{2p\tau}{\hbar\lambda(1 - i\omega_c\tau)} \left| \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right| \right. \\ \cdot \left[ \exp\left(\frac{\hbar\lambda(1 - i\omega_c\tau)}{2\tau|\partial E_j/\partial k_x|}\right) - 1 \right] \\ \cdot \left. \left[ \exp\left(\frac{\hbar\lambda(1 - i\omega_c\tau)}{2\tau|\partial E_j/\partial k_x|}\right) + p - 1 \right]^{-1} \right\}.$$

这里为方便计,忽略  $\tau_a$  与  $\tau_b$  之间的差别,并取作它们的平均值  $\tau = \frac{\tau_a + \tau_b}{2}$ . 这并不失去一般性.

为计算 Hall 效应,可令金属超晶格的温度梯度为零,于是有  $\mathcal{E}'_x = \mathcal{E}_x$ ,  $j_x = \text{Re}J$ ,  $j_y = \text{Im}J$ . 霍尔系数为<sup>[2]</sup>

$$R_{H1} = \mathcal{E}_y / (Bj_x). \quad (12)$$

由于  $y$  方向开路,有

$$\text{Im}J = 0, \quad (13)$$

将 (11) 式代入方程 (13), 即可得到  $\mathcal{E}_y$  与  $j_x$  的关系,从而求出  $R_H$ .

对于热输运过程,因为外磁场取为零,我们可将 (11) 式写成

$$J_x = e \left\{ \zeta_1 \left[ e\mathcal{E}_x + T \frac{\partial}{\partial x} (\mu/T) \right] + \frac{\zeta_2}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \right\}, \\ Q_x = -\zeta_2 \left[ e\mathcal{E}_x + T \frac{\partial}{\partial x} (\mu/T) \right] - \frac{\zeta_3}{T} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (14)$$

式中

$$\zeta_n = -\frac{1}{4\pi^3\hbar^2} \sum_j \int E_j^{n-1} \left( \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right)^2 (\tau + \tau_j) \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3k \quad n = 1, 2, 3, \\ \tau_j = \frac{\tau^2}{\alpha_j} p(1 - e^{\alpha_j/\tau}) (e^{\alpha_j/\tau} + p - 1)^{-1}, \\ \alpha_j = \hbar\lambda \left/ \left( 2 \frac{\partial E_j}{\partial k_x} \right) \right. \quad (15)$$

在开路测量情况下,  $j_x = 0$ , 可得

$$Q_x = -K_x \frac{\partial T}{\partial x}, \quad K_x = \frac{1}{T} (\zeta_3 - \zeta_2^2/\zeta_1), \quad (16)$$

$K_x$  就是电子热导率<sup>[2]</sup>. Lorentz 比<sup>[2]</sup>为

$$L = K_x / (\sigma_x T) = \frac{\zeta_1 \zeta_3 - \zeta_2^2}{e^2 T^2 \zeta_1^2}. \quad (17)$$

从 (17) 和 (15) 式可看出, Lorentz 比不再是一个常数,它与界面散射及弛豫时间都有关.

热电效应的系数则可由  $\zeta_n$  来表达. 如 Thomson 系数为<sup>[2]</sup>

$$\sigma_T = -\frac{T}{e} \frac{d}{dT} \left( \frac{\zeta_2}{T\zeta_1} - \frac{\mu}{T} \right) = T \frac{dS}{dT}, \quad (18)$$

其中

$$S = \frac{1}{eT} [\mu - (\zeta_2/\zeta_1)] \tag{19}$$

为绝对热电功率。而绝对珀尔帖系数

$$\Pi = TS = \frac{1}{e} [\mu - (\zeta_2/\zeta_1)]. \tag{20}$$

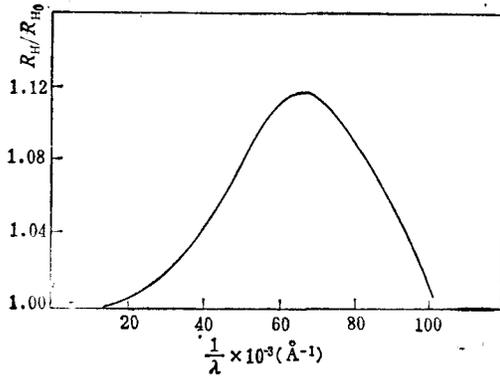


图1 Nb-Ti 超晶格的 Hall 系数随调制周期变化的关系曲线

$E_{aB} = -0.037 \text{ Ryd}$ ;  $E_{bT} = 0.743 \text{ Ryd}$ ;  $T = 300 \text{ K}$ ;  
 $\rho = 0.7$ ;  $\tau_1 = \tau_2 = 1.29 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ ;  $R_{H0}$  是  $\lambda \rightarrow \infty$  时的数值

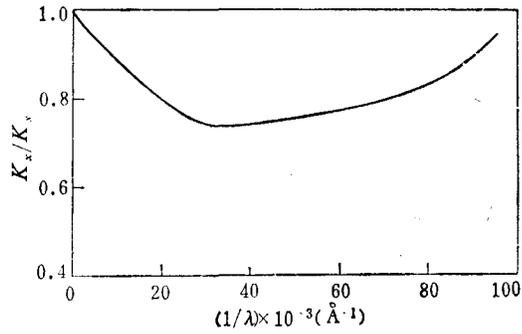


图2 Nb-Ti 超晶格的电子热导率(相对值)随调制周期变化的关系曲线 参数同图1

下面我们将给出热电功率随调制周期变化的关系曲线。

很显然，上述运输系数的计算与超晶格的电子能带结构有关。为了避免巨大的计算工作量，我们将利用文献 [1] 和 [3] 中对金属超晶格能带结构分析的结果，将参与运输的电子分为扩展的和面局域的两类，分别计算它们对运输过程的贡献。如同文献 [1]，两

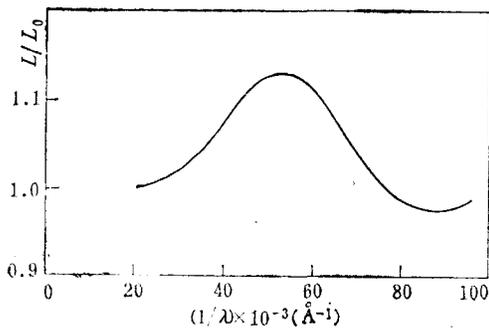


图3 Nb-Ti 超晶格的 Lorentz 比(相对值)随调制周期变化的关系曲线 参数同图1

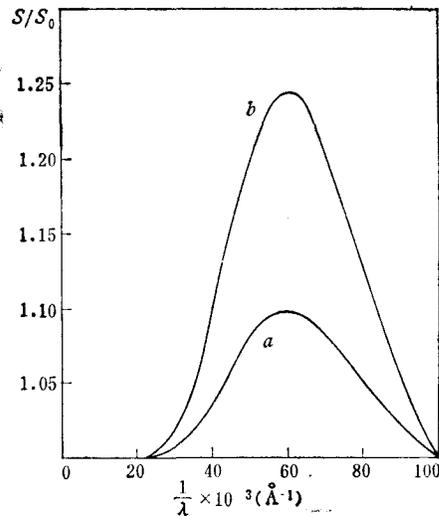


图4 Nb-Ti 超晶格的热电功率(相对值)随调制周期变化的关系曲线 a 为  $\tau_1 = 1.288 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\tau_2 = 1.292 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ ; b 为  $\tau_1 = 1.285 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\tau_2 = 1.295 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ ; 其余参数同图1

类电子态在能带中的边界由下式给出：

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{bT} + v_b(1 - e^{-\gamma_1 \lambda}), \\ E_2 &= E_{aB} - v_a(1 - e^{-\gamma_2 \lambda}). \end{aligned} \quad (21)$$

这里  $E_{aB}$  是 A 类金属的导带底,  $E_{bT}$  是 B 类金属的导带顶,  $v_a$  和  $v_b$  分别是 A 金属与 B 金属的导带中心与超晶格的能带中心之间的能量差,  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  分别是表征在超晶格中 A 金属层和 B 金属层由于扩散、静电屏蔽等效应在界面附近能带弯曲程度的参数。

对于 Nb-Ti 超晶格, 我们用类似于文献 [1] 中的方法进行了数值计算, 得到了 Hall 系数、电子热导率、Lorentz 比、热电功率以及 Thomson 系数随调制周期变化的关系曲线如图 1—图 5 所示。所用的参数在图中给出。除  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  外, 其余参数与文献 [1] 相同。

从这些计算曲线可以看出, 与大块金属相比, 金属超晶格的输运性质表现了一定程度的反常。例如, Lorentz 比随调制周期的变化而改变, 不符合 Wiedemann-Frantz 定律; 大部分输运系数都在某个调制周期上出现峰值; 出现峰值的调制周期都在  $15-30 \text{ \AA}$  的范围内; 等等。这是因为两种不同的电子态受界面散射的影响是各不相同的, 对不同的调制周期两者的贡献也不同, 它们相互补偿的结果往往造成输运系数在某一调制周期上出现峰值。这些峰值的位置大致符合实验报道的金属超晶格性质出现反常的调制周期范围<sup>9)</sup>。

值得注意的是, 从图 4 可以看出,  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  的较小的变化, 也都引起热电功率相对值的较显著的变化。从上面的分析可知,  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  实际上是反映超晶格能带结构的参数, 因此, 可以通过热电功率的测量, 定性地检测金属超晶格的能带结构。即使是由同样的材料组成的同样调制波长的超晶格, 由于界面上的结构不一致, 对不同的样品,  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  仍可不一致。因此对热电功率的测量亦可为我们提供某些样品的结构方面的信息。这种情况与 Friedman 对于半导体超晶格的热电功率所做的结论<sup>[4]</sup>大体相似。在文献 [5] 中给出了对 Cu-Ni 调制薄膜所测得的热电功率的曲线, 亦可看到明显的峰值, 定性行为与我们的计算结果相似。

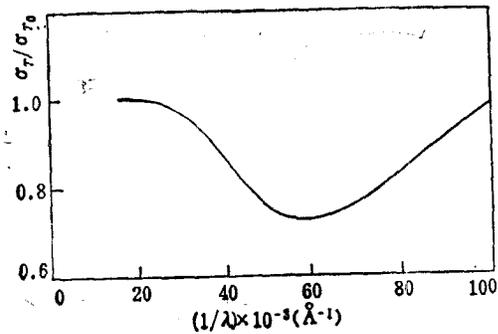


图 5 Nb-Ti 超晶格的 Thomson 系数 (相对值) 随调制周期变化的关系曲线 参数同图 4 a

### 参 考 文 献

- [1] 熊诗杰、蔡建华, 物理学报, **33**(1984), 352.
- [2] J. Callaway, Quantum Theory of the Solid State, Academic Press, New York, (1976), p. 598; p. 609.
- [3] 熊诗杰、蔡建华, 物理学报, **31**(1982), 474.
- [4] L. Friedman, J. Phys., **C17** (1984), 3999.
- [5] D. Baral and J. E. Hilliard, Appl. Phys. Lett., **41** (1982), 154.

1) 在我们完成对 Hall 系数的计算后, 收到 Schuller 来信称 Agonne 实验室完成对 Mo-Ni 超晶格的 Hall 电势测量, 其结果的定性行为与我们计算结果一致。

## ON ELECTRONIC TRANSPORT PROCESSES IN METALLIC SUPERLATTICES

YANG RUI-QING XIONG SHI-JIE

*(Institute of Solid State Physics, Nanjing University, Nanjing)*

CAI JIAN-HUA (CHIEN-HUA TSAI)

*(Department of Physics, Chiao-tung University, Shanghai and  
Institute of Solid State Physics, Nanjing University, Nanjing)*

### ABSTRACT

The electronic transport processes in metallic superlattices are studied by solving Boltzmann's equation with inclusion of a temperature gradient as well as an external magnetic field and by adopting the treatment of interface scattering processes in our previous interpretation of electric conduction characteristics. Variations with modulation wavelength of the thermoelectric power, the electronic thermal conductivity, the Thomson and Hall coefficients are derived for Nb/Ti superlattices. Further experimental investigations on the transport properties of metallic superlattices are expected to help the understanding of the electronic processes in such artificial materials.