

介观尺寸金属点接触中的量子化电导^{*}

戴振宏 孙金祚 余亚宾

(烟台大学物理系, 烟台 264005)

(1996 年 10 月 3 日收到; 1996 年 11 月 4 日收到修改稿)

用三维-准一维-三维(3D-准 1D-3D)模型, 描述扫描隧道显微镜探头与金属间的点接触, 研究这种微结构的电子输运特性. 利用单电子近似和传输矩阵方法求解三维体系的电子波函数, 并用量子力学方法计算电导, 得出了以 $2e^2/h$ 和 $2 \times 2e^2/h$ 为单位的量子化电导. 对电导随收缩区的横截面积和延伸量的变化规律进行了研究.

PACC: 7340; 0780; 7320; 7260

1 引 言

近年来, 由于低温技术、超真空技术以及微加工技术的迅速发展, 使某些电子器件和人工微结构的制作工艺进入了一个崭新的阶段, 使这些器件和人工微结构的尺寸达到了介观物理体系尺寸的范围. 这些微型器件的电子和光学性质已不符合经典规律, 或偏离了经典机制的支配. 特别是随着半导体技术的发展, 利用分子束外延、电子束刻蚀等技术制成的小量子系统, 尺度比电子的平均自由程还小, 电子在其中的输运进入弹道输运区, 其运动主要受量子机制而非经典机制的支配. 由于其未来的广阔应用前景, 这类新的物理体系已引起了人们的广泛关注.

二维电子气中窄收缩区电导量子化的发现^[1,2], 是介观体系弹道区电子输运性质研究的一个突破. 人们发现, 当导体的长度小于电子的平均自由程时, 电子的散射主要发生在导体的边界, 其电导与具体的材料性质无关, 只决定于样品的几何形状和电子密度; 当样品的侧向尺度与电子的费密波长可比时, 在传导区可观察到电导的量子化现象. 在半导体中, 电子的平均自由程约为几个微米, 而电子费密波长也在微米和亚微米数量级, 这种小尺度内的器件易于实现, 因此这方面的实验工作已做得比较成熟^[1,2], 理论工作也比较成功, 并可以与实验进行对比^[3-5]. 对于某些形状的通道中电导量子化性质以及外加磁场和声子、杂质等对电导的影响, 也已做了许多工作^[15-27]. 但由于这类系统的尺寸较大, 能级间隔只在 10^{-1} K 数量级, 所以只有在低温下才可以进行电导量子化的研究. 金属中的电子费密波长比半导体中的电子费密波长小两个数量级, 电子的平均自由程也仅在纳米范围内, 因此对金属中的弹道输运的实验研究较为困难. 可它有自己的优点, 就是能级间隔较大, 在 10^3 K 数量级, 所以可在室温下进行研究.

^{*} 山东省自然科学基金资助的课题.

90年代以来,随着新的微加工刻蚀技术的应用,像解理边生长、光场调制外延生长^[28],特别是扫描隧道显微镜(STM)刻蚀^[7,8,12,14]和机械控制断裂(MCB)技术^[6,9]的应用,人们可以做成尺寸更小的纳米、亚纳米量级的小量子系统,从而使金属中的弹道电子输运的研究成为可能.在此类系统中,温度效应已经显得不十分重要.到目前为止,人们已经在许多不同的环境和温度条件下对金属中弹道电子输运进行了研究,如 4.2K、低温^[10]、室温^[11]、室温超高真空^[12]等等.但是,目前人们仍无法严格控制金属线的形成过程,每条金属线形成的形状是随机的,至今的实验数据都是一些统计结果^[7,8].据我们所知,迄今尚未见直接的实验信息说明金属点接触的形状和内部结构.正是由于实验信息的缺乏,造成了对金属点接触中是否存在电导量子化,以及电导量子化存在的原因有许多争论.例如,一些人认为金属点接触中的电导量子化是由于收缩区横向能级量子化引起的^[7,9,12],而有些人则认为这是由于收缩区形状突变^[13]所致.对 STM 形成的金属点接触的实验研究表明,低温和室温下存在电导量子化现象^[7,11,12],但是用 MCB 技术实验方法仅观察到低电导处的电导量子化,且室温比低温更明显^[6].针对为什么金属点接触中会出现电导量子化,以及为什么实验数据中仅在电导值较低的地方才发现几个量子化电导台阶,电导台阶是量子线截面积突变引起的还是横向能级量子化造成的等一系列问题,人们进行了广泛的研究.当前某些研究者所采用的理论模型是运用分子动力学模拟,利用有效中介理论(effective-medium theory)^[8]抽象出来的相互作用势,来计算金属线的截面积和边界形状^[14].计算电导运用的理论计算方法,有自由电子近似图像、紧束缚图像等,但大多研究者是采用 Landauer-Büttiker 公式和有效势近似的半经典方法^[12,16].然而,在金属线的实际形成过程中,由于机械不稳定性或原子重排等因素会导致不同金属线的宽度、长度、粗糙度及形状各不相同,因此理想的原子模拟和电导计算价值不大.我们已经运用一种简单的 2D-准 1D-2D 模型对金属点接触的电导进行了计算,并得到了十分有意义的结果.现在的工作是根据实验过程和动力学模拟图像,建立一种更接近于实际情况的 3D-准 1D-3D 理论模型.为了克服利用 Landauer-Büttiker 公式和有效势近似^[12,14]使得收缩区形状对电导的影响不够明显的缺点,采用直接求解不规则收缩区内电子薛定谔方程的方法,对点接触中的电导进行了数值研究,其中包括考虑到边界散射和收缩区内部形状变化造成的散射以及内部模式耦合.我们的结果一方面支持金属点接触存在电导量子化的结论,另一方面也支持这种量子化是由于收缩区侧向能级量子化引起的观点.

2 理论模型与计算方法

利用如图 1 所示的 3D-准 1D-3D 模型,描述由 STM 探头刺入金属单晶体表面后再回拉形成的点接触.

考虑到点接触收缩区的不均匀性,将其分成 $2N+1$ 个均匀区,且这些均匀区关于中心区 C 对称,收缩区两边是三维自由电子气(3DEG),如图 1 所示.在每个区域中电子都是弹道式地沿着 Z 轴方向传输,而在垂直 Z 轴方向受到圆柱形硬壁势垒的限制.以上模型除中间区域 C 外,其余各区域的长度相同.在图 1 中, L 表示收缩区总长度; h 表示每一均匀区截面半径的依次收缩量; ρ_0 表示两端区域 1 和 1' 的截面半径,且在拉伸过程中(即

$$M(i, i+1) = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A^{-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} P^i & P^i \\ Q^i & -Q^i \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} P^{i+1} & P^{i+1} \\ Q^{i+1} & -Q^{i+1} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

其中 a_1^+ , a_1^- 是系数矢量, 其元素是 $\{a_{mn}^{+1}\}$, $\{a_{mn}^{-1}\}$, A 是对角矩阵, 元素是

$$(A)_{mn} = e^{iq_{mn}^1 d}, \quad P^i = \delta_{mm'} \delta_{nn'}, \quad Q^i = \delta_{mm'} \delta_{nn'} q_{mn}^i, \\ P^{i+1} = M_{mm'nn'}^{i+1}, \quad Q^{i+1} = q_{mn}^{i+1} M_{mm'nn'}^{i+1},$$

$$M_{mm'nn'}^{i+1} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_{i+1}} \phi_{mn}^i(\rho, \varphi)^* \phi_{mn}^{i+1}(\rho, \varphi) \rho d\rho d\varphi.$$

只需将 i 换为 i' , $i+1$ 换为 $i'-1$, 即可得出 $M(i', i'-1)$. 从以上公式可以看到, 除了收缩区的结构参数外, 传输矩阵 $M_{11'}$ 仅与能量有关.

考虑一个能量为 ϵ_k 的电子从左边入射, 开始时, 两边的电子源内处于热力学平衡, 化学势分别为 μ_1 , μ_2 . 假定电子源完全混乱了从导体传入其中的电子相位, 因此入射和反射流在源内无相干效应, 且源与导体匹配较好, 到源中的电子不在连接处返回.

由通道左边入射到收缩区内的电子波函数为

$$\Psi_K^L(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\substack{k'_x k'_y}} A_k^L e^{-ik'_z(z-z_0)} \Phi_{k'_x k'_y}^{3D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (5)$$

其中

$$k'_z = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \epsilon_k - k_\sigma^2 \right)^{1/2}.$$

由通道右边出射的电子波函数为

$$\Psi_K^R(\mathbf{r}) = \sum_{\varphi_k' k'_\sigma} A_k^R e^{ik'_z(z-z_1)} e^{ik'_\sigma \cos(\varphi - \varphi'_k)}, \quad (6)$$

其中求和遍及所有的横向动量 k'_σ 和角度 φ'_k .

利用收缩区与两边三维自由电子气的边界条件, 得到系数矢量的矩阵方程为

$$S(1) \begin{bmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_+^1 & T_-^1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{T} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$S(1') \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1'}^+ \\ a_{1'}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ T_-^{1'} & T_+^{1'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1'}^+ \\ a_{1'}^- \end{bmatrix} = 0. \quad (8)$$

($T_\pm^i$) = $\sum_{mn} T_{mm'nn'}^i$, ($\mathcal{T}$) $_{mn} = M_{kmn}$, (A) $_{mn} = e^{iq_{mn}^1 d}$, $T_{mm'nn'}^i$, M_{kmn} 的具体计算可见文献 [29]. 利用(3), (7), (8)式, 求得通道 1 内的波函数系数矢量 a_1^+ , a_1^- 的矩阵方程为

$$[S(1) + S(1') M_{11'}^{-1}] \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{T} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

利用方程(9), 可求得系数矢量 a_1^+ , a_1^- , 波函数即可得出. 利用概率流密度公式, 得到第一均匀区内对应于每一入射态 Ψ_K 的电流为

$$j_k(x, y, z) = \langle \Psi_K | j_z | \Psi_K \rangle \\ = \frac{-\hbar e}{m^*} \left[\sum_{mn}^R q_{mn}^1 (a_{mn}^{+*} a_{mn}^+ - a_{mn}^{-*} a_{mn}^-) + \sum_{mn}^L q_{mn}^1 (a_{mn}^{-*} a_{mn}^+ - a_{mn}^{+*} a_{mn}^-) \right], \quad (10)$$

其中求和 $\sum_{mn}^R \sum_{mn}^L$ 遍及所有的 m, n , 以便包括 q_{mn} 为实的或虚的, 第二项表示耗散分波对电流的贡献. 总电流可以通过 $T=0K$ 时对所有入射态求和得到. 如果在收缩区两边加上小偏压 V , 根据泡利不相容原理, 只有能量在 $(u_2 - u_1 = eV)$ 能级范围的电子才允许通过收缩区, 因而当 eV 远比费密能 u_1 和 u_2 小时, 总电流近似为

$$J_z = \frac{2m^*}{h^2} [eV] \int_{-\alpha}^{\alpha} j_k(x, y, z) dk, \quad (11)$$

其中 $\alpha = (2m^* E_F / \hbar^2)^{1/2}$. 由总电流可以求出电导表达式^[19,22]

$$G = -\frac{2m^*}{h^2} e \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi J(k) \Big|_{|K|=K_F}. \quad (12)$$

利用传输矩阵方法求解波函数, 原则上应是基于无限维的, 但在实际的数值计算中, 必须利用截断技术, 只取有限的模式数. 计算实践表明, 为了得到较好的收敛结果和避免求解方程时可能出现病态方程, 以便使程序能顺利运行, 只需在每个均匀区内取低于费密能的所有模式数, 再加上两个模式数来反映耗散分波即可.

3 数值结果与分析

当温度 $T=0K$ 时, (12) 式中的电导 G 在硬壁势垒下与下述几个变量有关: 标准 3DEG 费密能 $\hat{E}_F = \frac{E_F}{E_1}$, 其中 E_F 是电子的费密能,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 x_1^2}{2m^* \rho_0^2}$$

是图 1 中 1 和 1' 区的第一子带能量, m^* 是电子的有效质量, 计算时令 $\xi = \hat{E}_F^{1/2}$; 1 和 1' 区域的宽度 ρ_0 ; 中间区域 C 的长度 D_0 及其他各均匀区长度 D ; 各均匀区域的依次收缩量 h ; 均匀区的个数 $2N+1$. 在实验上研究金属点接触电导的过程中, 电导的测量是随着金属线的拉伸而进行的. 为了表现此过程, 以 N 值由小到大的变化来模拟.

为了确定电导与拉伸量和收缩量的关系, 首先研究当收缩区的总拉伸量以及 1 和 1' 均匀区的截面半径 ρ_0 一定时, 即 N, D, D_0, ρ_0 取定值时, 对应于收缩量 h 的不同值电导随费密能的变化. 图 2 示出 $N=5, D=0.150 \text{ nm}, D_0=0.300 \text{ nm}, \rho_0=0.600 \text{ nm}$, h 取不同值时电导随费密能的变化.

从图 2 可以看出, 对应于收缩量 h 较小的曲线 b, 电导平台基本上与直通通道 ($h=0.000 \text{ nm}$) 时的曲线 a 相似, 只是平台的位置向高能级处移动. 对应于收缩量 h 较大的曲线 c, 高能级的电导平台遭到破坏. 由图 1 所示的结果可以得到这样的结论, 即通道的不均匀性将对电导产生一定的影响. 通道的不均匀性影响电导的原因可以这样解释: 随着收缩量 h 的增大, 整个通道的不均匀性增加, 使通道内电子能谱的外层子带 (横向量子能级) 受到影响. 这样通道内处于高能级或处于外层子带的传输电子将主要受量子隧穿效应和量子反射效应的影响, 从而直接影响高能量区的电导, 使高能量区电导的量子化平台遭到破坏, 同时使未受到破坏的量子化电导平台外移.

在保持通道长度和均匀区个数不变的情况下,对应 h 较大的通道,电导在高能级处的量子化现象被破坏,且电导的量子化台阶明显地移向大 ξ 值,表明要达到同样的电导值,费密能必须增大.不同通道长度时电导随费密能的变化情况,已在文献[29]给出.

为了进一步研究电导量子化的破坏情况,固定费密能,研究其中一电导平台在拉伸过程中随收缩量的变化情况,结果由图 3 给出.

图 3 所示曲线是在以下条件下得出的:在图 1 所示模型中,取 $D=0.125$ nm, $\rho_0=0.5$ nm, $\xi=2.050$, N 由 0 变化到 5,对应每一个 N 值, D_0 由 0.125 nm 变化到 0.250 nm.由图 3 可以看出,当通道的总收缩量很小时(如曲线 a),即使收缩区拉伸,电导也不发生变化,但当总收缩量达到一定值时(如曲线 c),会出现电导跃变.由图 3 所示的结果可以得这样的结论,在 ρ_0 保持一定时,电导的跃变与拉伸量无关而与总收缩量和费密能有关.

为了确定电导对收缩区面积的依赖关系,我们研究了在总拉伸量相同而费密能不同的情况下,收缩区拉伸时电导与通道最小截面积的关系,结果由图 4 给出.

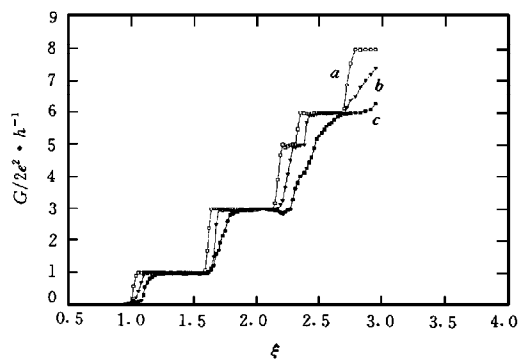


图 2 收缩量 h 取不同值时电导 G 随费密能的变化

横轴 $\xi = \hat{E}_F^{1/2}$, $\hat{E}_F$ 是标准 3DEG 费密能,曲线 a, b, c 分别对应于收缩量 $h = 0.000, 0.006, 0.012$ nm

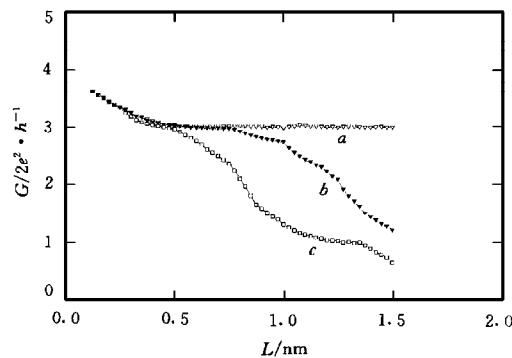


图 3 对应于不同收缩量,电导 G 随拉伸量 L 的变化

曲线 a, b, c 分别对应于收缩量 $h = 0.005, 0.028, 0.055$ nm

从图 4 可以看出,每一个平台的下降不是突变的,而是有个缓变过程.这主要是由于在收缩区拉伸时,收缩区形状的变化会对电子产生一定的散射作用,且即使关闭某一能级,电子仍有一定的概率贯穿过去.由图 4 还可以看出,收缩区拉伸时,最初的几个电导平台不明显,这是由于开始时收缩区较短,电子的隧道贯穿起着重要作用,电导几乎是随最小截面积的减小呈线性变化的.三维情况与二维情况的重要区别在于,三维情况下会出现两个台阶的电导跳跃.此外,能级平方根的变化间隔不是均匀的,从而导致随通道最小截面积的变化、电导台阶宽度的变化不同,在高能级处由于能级间隔较密而使台阶变得很窄.由图 4 还可以发现,在拉伸量一定时,台阶的出现及台阶的宽度不仅与通道的最小截面积的变化有关,而且与费密能有关.由于带与费密能的关系得出,当 $\epsilon_F \geq \epsilon_{mn}$ 时,将有 mn 子带及其以下子带打开.

经过简单推导,可以给出电导随通道最小截面半径收缩量变化的半定量关系

$$\frac{\Delta}{\rho_0} \leq 1 - \frac{x_n^m}{x_1^0 \xi}, \quad (13)$$

其中 Δ 表示通道最小截面半径的总变化量. 当取 $\xi=2.8$ 时, 利用(13)式可计算出 5, 4, 3, 2, 1 台阶对应的最小截面面积分别为 $0.785-0.703 \text{ nm}^2$, $0.703-0.528 \text{ nm}^2$, $0.528-0.475 \text{ nm}^2$, $0.475-0.254 \text{ nm}^2$, $0.254-0.101 \text{ nm}^2$, 这些结果与我们的数值计算结果符合很好.

下面研究电导与截面积缩进量和拉伸量的关系. 首先给出相同截面积缩进量时, 不同拉伸量下电导随通道最小截面积的变化曲线, 结果如图 5 所示.

由图 5 可以看出, 电导量子化的出现与通道的长度有关. 对应于较短通道, 电导台阶

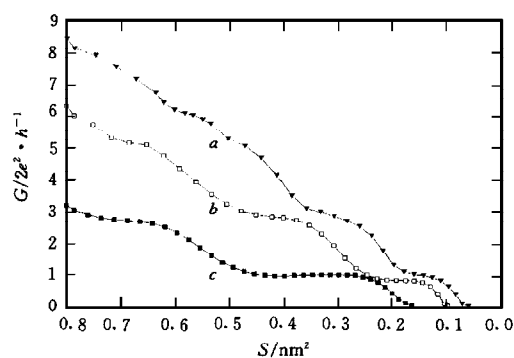


图 4 收缩区拉伸时电导 G 随通道最小截面积 S 的变化 $N=45$, $\rho_0=0.5 \text{ nm}$, 曲线 a, b, c 分别对应于收缩量 $h=0.0125, 0.011, 0.008 \text{ nm}$, $\xi=2.8, 2.4, 1.8$

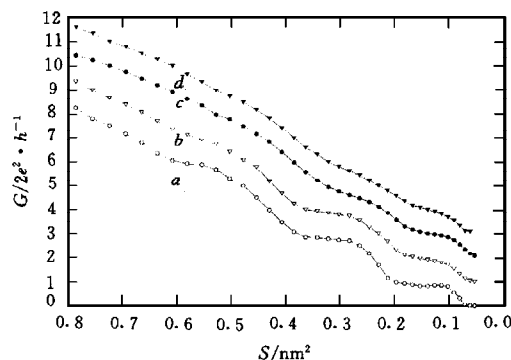


图 5 拉伸过程中电导 G 随通道最小截面积 S 的变化 $\xi=2.8$, 曲线 a, b, c, d 分别对应于拉伸量 $L=3.55, 2.19, 1.125, 0.533 \text{ nm}$. 为了使图像明显, b, c, d 曲线分别相应上移了一个单位量子台阶

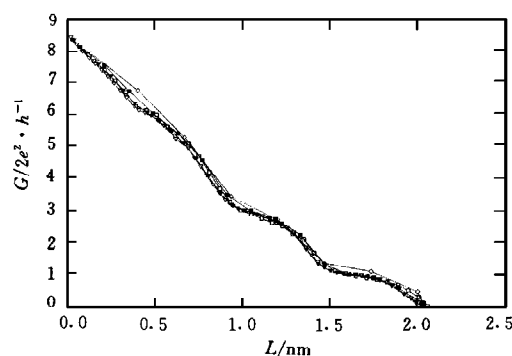


图 6 拉伸过程中电导随收缩区拉伸量的变化 $\xi=2.8$, 金属线的最小截面积 S 由 0.785 nm^2 开始减小, 直至最后断裂. $\nabla, \square, \blacktriangledown$ 表示对应于收缩量 h 值较小, 电导量子化台阶处于正常位置; $\blacksquare$ 表示对应于收缩量 h 值稍大, 电导量子化台阶稍稍偏离正常位置; $\diamond$ 表示对应于收缩量 h 值较大, 电导量子化台阶偏离正常位置较大

基本上不出现; 通道较长时, 较低的几个电导台阶很明显. 所以要研究金属点接触中电导量子化随拉伸量的变化, 必须选取那些长度至少与通道最大截面直径之比大于 1 的金属线, 即使这些金属线仅有较低的几个电导台阶出现. 其原因在于: 一是由于准三维金属线中电子气的能级间隔较准一维中的要密得多, 因而高能级台阶变得非常密而难以观察到; 二是在金属线形成的初期金属线很短, 隧穿效应较强. 以上两个方面的因素是仅能发现金属线最低几个电导台阶的主要原因. 所以并非每条金属线都能观察到电导量子化现象, 这是显然的.

由以上分析可以看出, 在金属点接触的拉伸过程中, 电导的变化是由于收缩区截面

积的变化,从而关闭某些横向能级造成的。

在实际拉伸过程中,收缩区截面积的总收缩量是拉伸量的函数,即由于拉伸而引起截面积的缩小,因而电导随拉伸量的变化而变化。在实验过程中^[7,8],由于目前还无法精确地控制纳米尺寸量级的金属点接触的大小和形状,在每次拉伸过程中,收缩区的收缩量和拉伸量是随机的,因而研究者得到的实验结果是统计结果。为了反映这一事实,在保持总拉伸量、总收缩量不变的情况下,我们研究了拉伸过程中对应于不同收缩量 h ,金属线电导随拉伸量的变化,数值计算结果示于图 6。图 6 所示各条曲线是五次计算的结果。

由图 6 可以看出,收缩区最小截面半径的收缩量 h 会直接影响金属点接触中的电导量子化,所以可以判断,收缩区内形状的变化对电导也有重要的影响。我们总结图 5、图 6 中的结果得出,要使金属点接触中的电导量子化明显,必须使所选金属线满足以下要求:

(1) 金属线尽可能长,但长度不能超过弹道传输区的范围,其长度与截面直径相等或数倍于截面直径。

(2) 金属点接触的结构较为稳定,内部变化较为平缓且无杂质。

以上的分析是针对点接触的形状和长度等方面对电导量子化的影响。当然金属线内杂质和其他短波长散射源也会严重破坏电导的量子化现象。

4 结 论

我们利用一种简化的 3D-准 1D-3D 模型和传输矩阵方法,研究了纳米尺寸点接触中的电子传输问题。得到了与 2D-准 1D-2D 模型明显不同的结果。主要表现在以下几个方面:(1)3D-准 1D-3D 模型与 2D-准 1D-2D 模型相比,有时会出现以两个 $2e^2/h$ 为单位的电导量子化跳跃。(2)与 2D-准 1D-2D 模型的情况比较,3D-准 1D-3D 模型中的电导量子化台阶的宽度变得很不均匀。(3)3D-准 1D-3D 模型中,由于电子态的横向能级较密,与 2D-准 1D-2D 模型相比,点接触仅能发现最低的几个电导台阶。这种模型可较为成功地解释实验中以两个 $2e^2/h$ 为单位的电导量子化跳跃。

由于点接触的形成过程目前尚无法精确控制,每次形成的金属线不可能都是严格的圆形截面,而会出现一些无规形状的截面,结果解除了由于圆截面而造成的方位角简并,只出现以 $2e^2/h$ 为单位的单个台阶的跳跃。总而言之,我们采用的模型较好地反映了实验的主要特征,即以 $2e^2/h$ 或两个 $2e^2/h$ 为单位的电导量子化。数值结果与实验结果不仅定性相符,对实验结果的主要方面也能够给予定量解释。这说明所建立的模型和使用的计算方法是成功的。另外需要指出的是,虽然实验是在室温下进行,而我们的数值计算是采用零温度近似,但不会给结果带来显著影响。对于纳米尺寸的点接触,量子能级间隔约为 0.2—1 eV,而室温 T 约等于 300 K,即约等于 0.026 eV。根据电导对温度的依赖公式^[3]

$$G_T(u) = - \int G_0(\epsilon) \frac{\partial f}{\partial \epsilon} d\epsilon,$$

其中 $f = (e^{(\epsilon - u)/k_B T} + 1)^{-1}$ 是费密分布函数,可以看出,对于大的量子能级间隔而言,温度效应并不明显。

- [1] B. J. Van Wees, H. Van Houten, C. W. J. Beenakker *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 848.
- [2] D. A. Wharam, J. T. Thornton, R. Newbury *et al.*, *J. Phys.*, **C21**(1988), 209.
- [3] G. Kirczenow, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 10452.
- [4] K. F. Berggren, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 6390.
- [5] Hongqi Xu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 15630.
- [6] C. J. Wuller, J. M. Krams, T. N. Todorov *et al.*, *Phys. Rev.*, **B53**(1993), 1022.
- [7] Zheng Gai, Yi He, Hongbin Yu, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 1042.
- [8] M. Brandbyge, L. Olesen, E. Laegsgaard *et al.*, *Phys. Rev.*, **B52**(1995), 8499.
- [9] C. J. Muller *et al.*, *Physica*, **C191**(1992), 485.
- [10] N. Agrait, J. G. Rodrigo, C. Sirvent *et al.*, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 8499.
- [11] J. I. Pascual, J. Mndez, J. Gómez-Hespero *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 1852.
- [12] L. Olesen, E. Langsgaard, I. Schiotz *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2251.
- [13] T. N. Todorov, A. P. Sutton, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 2138.
- [14] A. M. Bratkovsky, A. P. Sutton, T. N. Todorov, *Phys. Rev.*, **B52**(1995), 5036.
- [15] A. G. Scherbakov, E. N. Bogachek, U. Andman, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 4054.
- [16] J. A. Toores, J. I. Pascual, J. J. Sáenz, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 16581.
- [17] L. Olesen, E. Langsgaard, I. Stensgaard *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **74**(1995), 2174.
- [18] Hongqi Xu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 15630.
- [19] Chuankui Wang, K. F. Berggren, Zhenli Ji, *J. Appl. Phys.*, **77**(1995), 2564.
- [20] Hong Zhou Tsunghan Lin, *Phys. Rev.*, **53**(1996), 2051.
- [21] F. R. Waugh, M. J. Beny, K. L. Compman *et al.*, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 1413.
- [22] Chuankui Wang, *Semicond. Sci. Technol.*, **10**(1995), 1131.
- [23] K. F. Berggren, Zhenli Ji, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 4760.
- [24] Hongqi Xu, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 8878.
- [25] Hongqi Xu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 9537.
- [26] Hua Wu, D. W. L. Sprung, J. Martorell, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 6351.
- [27] J. M. Krams, C. J. Muller, I. K. Yanson *et al.*, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 14721.
- [28] 阎守胜、甘子钊, 介观物理学(北京大学出版社, 北京, 1994), 第 222 页.
- [29] 戴振宏、孙金祚、余亚宾, 烟台大学学报(自然科学工程版), **10**(1)(1997), 15.

QUANTIZED CONDUCTANCE IN THE MESOSCOPICS-SIZED METALLIC POINT CONTACTS

DAI ZHEN-HONG SUN JIN-ZUO YU YA-BIN

(Department of Physics, Yantai University, Yantai 264005)

(Received 3 October 1996; revised manuscript received 4 November 1996)

ABSTRACT

Using a three dimensional-quasi-one dimensional-three dimensional model to depict the point contact between a scanning tunneling microscope tip and a metal crystal, by indenting the tip into a metal surface and then withdrawing we have studied the electron transport properties of the microstructure. By means of the single electron approximation and the transfer matrix method, we solve the Schrödinger equation for this three dimensional system, and calculate the variation regularity of its conductance by quantum mechanics method. The variation of the conductance with constricting and stretching of the constriction is studied, and the quantization of the conductance in units of $2e^2/h$ and $2 \times 2e^2/h$ are obtained.

PACC: 7340; 0780; 7320; 7260