

等能谷间杂质散射对无序层状系统电导率的影响

蒋 祺¹⁾

(南京大学理论物理中心, 物理系)

龚 昌 德²⁾

(南京大学物理系)

1988年7月28日收到

本文研究了等能谷间杂质散射对无序层状系统电导率的影响, 求得了依赖于平面间耦合 t 的系统的有效维数的电导率修正。并且发现在计及等能谷间杂质散射时, 电导率修正比只考虑谷内杂质散射时小一半。我们研究了层状系统从二维过渡到三维的跨越维数效应, 发现跨越行为依赖于谷间散射时间 τ' , 当 $t < 1/\tau(\tau_0/\tau')^{1/2}$ 时, 系统具有二维行为, 反之系统具有三维特征。

一、引言

在 Anderson 局域问题的标度理论^[1]新解释的现象中, 最著名的莫过于二维无序系统在存在时间反映对称性时其所有状态都是局域态的预见了。在弱无序限即有 $k_F l \gg 1$ 时 (k_F 是 Fermi 波矢, l 是平均自由程), 具有标度依赖性质的电导率为

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{\alpha e^2}{2\pi^2} \ln(\tau_s/\tau). \quad (1)$$

其中 σ_0 是 Boltzmann 电导率, $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$, n 是电子浓度, τ 是弹性散射时间, τ_s 是表征某种非弹性散射过程的散射时间, 如 τ_s 依赖于温度 T , 则有 $\tau_s \propto T^{-\alpha}$ ^[2]. α 是一个无量纲的数值因子。一般地讲, 总有 $\tau_s \gg \tau$, 理论上考虑 $\tau_s \rightarrow \infty$, 则由(1)式知, σ 对 τ_s 的依赖存在对数型发散, 这是二维局域性质的主要特征之一。另一方面, 在弱无序限, 对于单能谷的非相互作用电子系统, (1)式中的 $\alpha = 1$ 。然而在实验中, 某些二维电子系统, 比如 Si-MOS 器件的反型层中总是存在着能谷简并^[3-5]。在 Si(100) 表面, 有两个能谷发生简并, 而在 Si(111) 表面, 有六个能谷简并。我们从标度理论知道, 在不存在能谷间杂质散射的情况下, 对 Si(100) 表面, (1)式中 α 应为 2, 而对于 Si(111) 表面, α 应等于 6。但是实验结果指出^[3], 对前者 $\alpha \approx 0.6$, 远小于理论值 2。为此有人指出^[5,6], 在存

1) 现在地址: 复旦大学物理系。

2) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心。

在能谷简并时, 能谷间的杂质散射对电导率有着重要影响, 即不仅考虑能谷内的杂质散射, 而且计及谷间的杂质散射影响, 后者将导致 α 值减小, 以与实验结果较为接近。

本文研究了等能谷间杂质散射对无序层状系统电导率的影响。无序层状系统模型在模拟实验系统性质方面具有较为实际的意义^[7-11]。在此模型中, 每一层是一个二维无序平面, 杂质的作用限于其所在平面之内, 层与层的间距为 a , 每个平面都存在两个等价的能谷, 平面间存在着耦合矩阵元 t 。我们仅考虑 $t \ll E_F$, 以保证 t 对能谷简并的影响忽略不计。我们求得了依赖于 t 的层状系统的电导率, 并且发现在计及等能谷间杂质散射时, α 因子等于 1, 即比只考虑谷内杂质散射时小一半; 通过调节耦合强度 t 的大小, 我们还研究了层状系统从二维过渡到三维的跨越维数效应, 发现在本模型中, 这种跨越行为依赖于谷间散射时间 τ' 。当 $t < \frac{1}{\tau} \sqrt{\frac{\tau_0}{\tau'}}$ 时, 系统具有二维行为。反之, 系统具有三维特征 (τ_0 是谷内散射时间)。

二、哈密顿量和图形微扰近似

针对存在二能谷简并的无序层状系统, 我们提出如下的系统哈密顿量:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_i \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\alpha=1}^2 \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha}^+ c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha} + t \sum_i \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\alpha=1}^2 (c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha}^+ c_{i+1,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha} \\
 & + c_{i+1,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha}^+ c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},\alpha}) + \sum_i \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} u_i(\mathbf{q}_{\parallel}) (c_{i,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel},1}^+ c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},1} \\
 & + c_{i,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel},2}^+ c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},2}) + \sum_i \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} v_i(\mathbf{q}_{\parallel}) (c_{i,\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel},1}^+ c_{i,\mathbf{k}_{\parallel},2} \\
 & + \text{H. c.}).
 \end{aligned} \quad (2)$$

其中 i 是平面指标, $\mathbf{k}_{\parallel}$ 是平行于平面的波矢, α 表示能谷指标, t 是平面耦合矩阵元, $u(\mathbf{q}_{\parallel})$ 和 $v(\mathbf{q}_{\parallel})$ 分别是能谷内和能谷间的杂质散射势, 注意不同平面的杂质散射统计无关, 对各种杂质分布求平均有

$$\begin{aligned}
 \langle u_i(\mathbf{q}_{\parallel}) v_{i'}(\mathbf{q}'_{\parallel}) \rangle &= 0, \\
 \langle u_i(\mathbf{q}_{\parallel}) u_{i'}(\mathbf{q}'_{\parallel}) \rangle &= \delta_{\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{q}'_{\parallel}} \delta_{ii'} \frac{1}{2\pi N(E_F) \tau_0}, \\
 \langle v_i(\mathbf{q}_{\parallel}) v_{i'}(\mathbf{q}'_{\parallel}) \rangle &= \delta_{\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{q}'_{\parallel}} \delta_{ii'} \frac{1}{2\pi N(E_F) \tau'}.
 \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $N(E_F)$ 是 Fermi 面上的电子态密度, τ_0 是能谷内杂质散射时间, τ' 是能谷间杂质散射时间。总的散射时间 τ 则有以下关系式:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2\tau} &= \frac{1}{2\tau_0} + \frac{1}{2\tau'} + \frac{1}{2\tau_s} \\
 &= n_i u^2 \pi N(E_F) + n_i v^2 \pi N(E_F) + \frac{1}{2\tau_s}.
 \end{aligned} \quad (4)$$

这是 Born 近似的结果, 其中 n_i 是杂质浓度, τ_s 是非弹性散射时间。在 Born 近似下, 可

得到系统的单粒子推迟(或超前)格林函数在动量空间的式子

$$G_{\alpha}^{R,A}(\mathbf{k}, \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}\parallel} - 2i \cos k_z a \pm \frac{i}{2\tau}}. \quad (5)$$

(5)式中已经考虑了杂质对电子自能的修正.进一步地,我们计算顶角对电导率的修正.在计及能谷间杂质散射的情况下,应考虑以下两个顶角图形的贡献(如图1所示). 注意在杂质散射中,所有的顶角都是粒子-空穴型散射. 根据 Kubo 线性响应公式,可以求得对应于图1的层状系统平行和垂直于平面的电导率修正 $\delta\sigma_{\parallel}$ 和 $\delta\sigma_{\perp}$ 为

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{\parallel} &= -8N(E_F)c^2D_{\parallel}^0\tau^2 \int_0^{(D_{\parallel}^0\tau)^{-\frac{1}{2}}} \frac{q_{\parallel}dq_{\parallel}}{(2\pi)} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dq_z}{(2\pi)} (\Gamma_0 + \Gamma_1), \\ \delta\sigma_{\perp} &= -8N(E_F)c^2D_{\perp}^0\tau^2 \int_0^{(D_{\perp}^0\tau)^{-\frac{1}{2}}} \frac{q_{\parallel}dq_{\parallel}}{(2\pi)} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dq_z}{(2\pi)} (\Gamma_0 + \Gamma_1). \end{aligned} \quad (6)$$

(6)式中 $D_{\parallel}^0$, $D_{\perp}^0$ 分别是平行和垂直于平面的裸扩散常数, $D_{\parallel}^0 = v_F^2\tau/2$, $D_{\perp}^0 = t^2a^2\tau$, Γ_0 , Γ_1 分别是能谷内和谷间的杂质散射顶角. 由弱局域限的微扰论展开可知^[12], Anderson 局域与顶角的扩散型发散 ($q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$) 存在密切的关系. 这种发散极点同样导致电导率发散,因此研究存在扩散型发散极点的某一类顶角图形是重要的. 在不可约顶角图形中,具有此类性质的最低阶的图形是对最大交叉图形^[13]的求和. 如图2所示,这

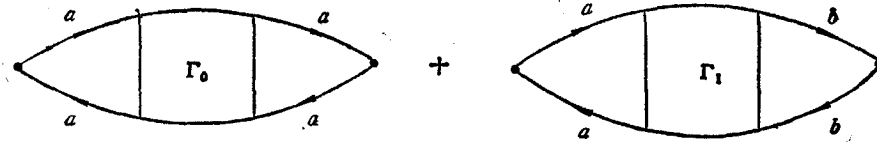


图1 两能谷时的顶角修正图 a, b 表示能谷指标,且 $a \neq b$

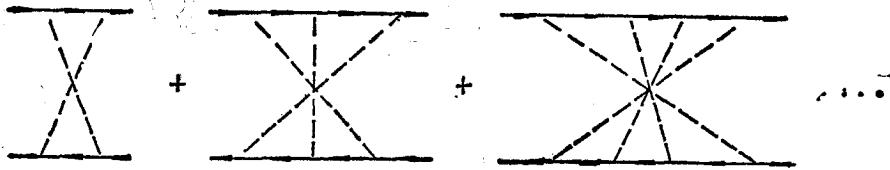


图2 最大交叉顶角图形的求和

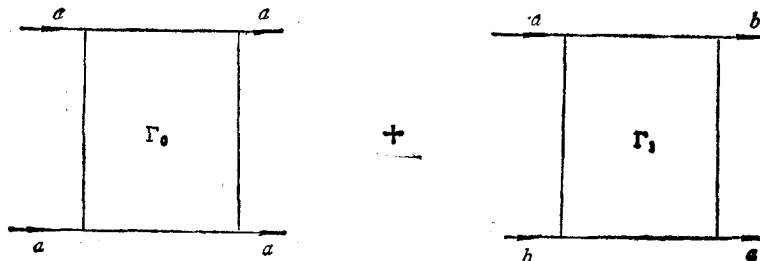


图3 粒子-空穴型散射顶角的粒子-粒子型等价表示

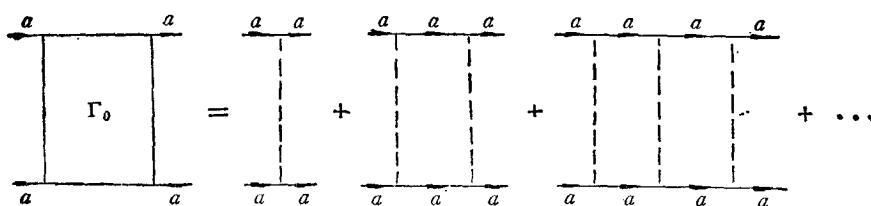


图 4 Γ_0 的粒子-粒子型阶梯图虚线表示 $n_i u^2 = 1/2\pi N(E_F)\tau_0$;
带箭头的实线表示 $G^R(k, \varepsilon_k)$

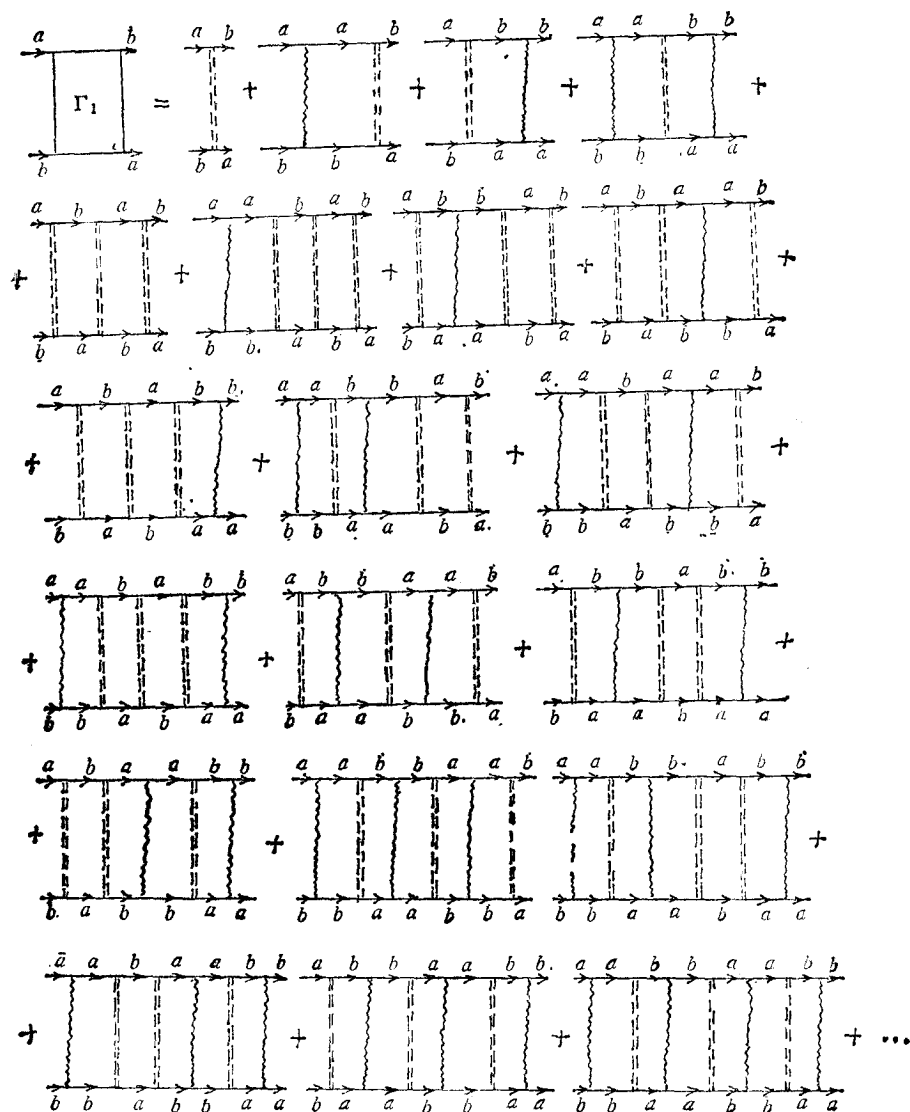
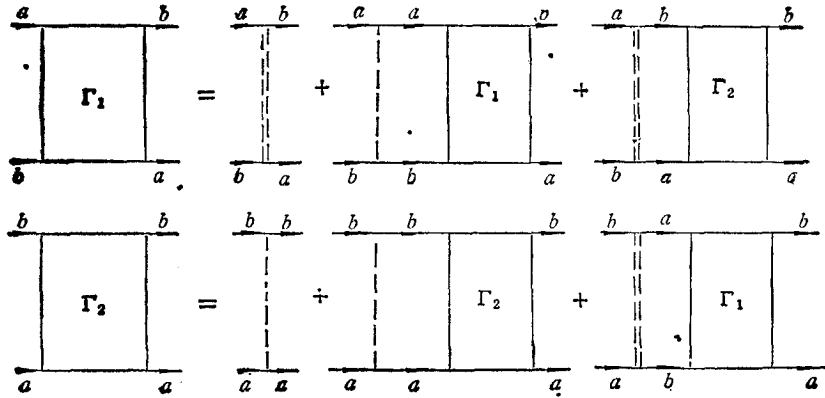


图 5 Γ_1 的粒子-粒子型散射表示 $a \neq b$, a, b 是能谷指标; 双虚线表示谷间散射
 $n_i v^2 = 1/2\pi N(E_F)\tau'$; 波浪线表示 Γ_0

种图形对 Γ_0 和 Γ_1 有主要贡献。

另一方面, 在图 1 中, 可以把顶角的粒子-空穴型散射等价表示为粒子-粒子型散射

图6 Γ_1 的图形自洽方程 虚线和双虚线的定义见图4和图5

(见图3)。由图2和图3中的 Γ_0 可表示为(如图4)由直截了当的计算可以求得

$$\Gamma_0(q, \omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)\tau^2} \frac{1}{D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau} \left(\frac{\tau_0}{\tau'} + \frac{\tau_0}{\tau_s} \right) - i\omega}. \quad (7)$$

一般地,总有 $\tau_s \gg \tau' > \tau_0$, 因此当 $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$, 且 $\tau_s \rightarrow \infty$ 时,由于谷间杂质散射时间 τ' 的存在,由(7)式可知, Γ_0 不存在发散,而系统的局域性质正是来自于这种奇异性,因此 Γ_0 对 $\delta\sigma_k(k = //, \perp)$ 是不重要的,故不再考虑 Γ_0 的贡献。

现在计算谷间杂质散射的顶角 Γ_1 , 其图形表示如图5所示。这种图形求和一直到无穷阶,实质上这等价于求解 Γ_1 的一个自洽方程,如图6所示。解此自洽方程,经过繁琐的运算可得

$$\Gamma_1 = 1 / \left\{ 2\pi N(E_F)\tau^2\tau' \left(1 - \frac{2\tau}{\tau'} \right) \left(D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s} - i\omega \right) \cdot \left(D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s} - i\omega \right) \right\}. \quad (8)$$

其中 $1/\tau_s = (2/\tau')/(1 - 2\tau/\tau')$ 。由(8)式知,在 $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$, 且 $\tau_s \rightarrow \infty$ 时, Γ_1 是发散的, Γ_1 对局域性质有主要贡献。在研究 $\delta\sigma_k$ 为温度 T (通过 τ_s) 的关系时,可令 $\omega = 0$, 注意到

$$\Gamma_1 \approx \frac{1}{4\pi N(E_F)\tau^2} \left[\frac{1}{D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s}} - \frac{1}{D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s}} \right]. \quad (9)$$

把(9)式代入(6)式,可以求得电导率修正为

$$\delta\sigma_{||} = -\frac{2e^2}{\pi} D_{||}^0 \int_0^{(D_{||}^0 \tau)^{-1/2}} \frac{q_{||} dq_{||}}{(2\pi)} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dq_{\perp}}{(2\pi)} \cdot \left[\frac{1}{D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s}} - \frac{1}{D_{||}^0 q_{||}^2 + D_{\perp}^0 q_{\perp}^2 + \frac{1}{\tau_s}} \right]. \quad (10)$$

$$\delta\sigma_{\perp} = \frac{D_{\perp}^0}{D_{\parallel}^0} \delta\sigma_{\parallel}. \quad (11)$$

完成对 q_z 的积分, 发现当平面间耦合 z 满足以下不等式时:

$$z < \frac{1}{\tau} \left(\frac{\tau_0}{\tau'} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

可以求得

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{\parallel} &\approx -\frac{e^2}{2\pi^2} \left\{ \ln \left[\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_s} \right) / \left(\frac{1}{\tau_s} \right) \right] - \ln \left[\left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_s} \right) / \left(\frac{1}{\tau_s} \right) \right] \right\} \\ &\approx -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln(\tau_s/\tau_s). \end{aligned} \quad (12)$$

即 $\delta\sigma_{\parallel}$ 对 τ_s 有对数型依赖, 这是典型的二维特征, 这意味着由于谷间杂质散射的存在, 即使平面间耦合 z 不为零, 层状系统仍表现出二维的性质。另外, 由(12)式可知, 由于 τ' 的存在, α 因子等于 1, 比不考虑谷间散射时小了一半。当 $z > \frac{1}{\tau} \sqrt{\frac{\tau_0}{\tau'}}$ 时, 由(10)式可以求得

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{\parallel} &\approx -\frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{D_{\perp}^0}{D_{\parallel}^0} \right)^{1/2} (D_{\parallel}^0 \tau_s)^{-\frac{1}{2}}, \\ \delta\sigma_{\perp} &\approx -\frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{D_{\perp}^0}{D_{\parallel}^0} \right)^{\frac{1}{2}} (D_{\parallel}^0 \tau_s)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (13)$$

由此可见, $\delta\sigma_i \propto \tau_s^{-\frac{1}{2}}$, 这是三维行为的典型特征^[12]。随着 z 的变化, 层状系统将发生维数跨越效应, (13)式表现出各向异性特征。如果考虑各向同性情况, 即令 $D_{\parallel}^0 = D_{\perp}^0$, 则可知在考虑了能谷间杂质散射的 $\delta\sigma_i$ 比仅计及能谷内杂质散射的电导率修正小一半。

综上所述, 由于不同维数的 Anderson 局域性质迥然不同, 因此研究维数跨越效应以验证局域理论的正确性是很有意义的, 无序层状系统通过调节平面间的耦合从而改变系统的有效维数, 为研究跨越效应提供了可能。我们发现在存在能谷间杂质散射时, 无序层状系统的有效维数与谷间散射时间 τ' 有密切的关系。若谷间杂质散射很弱, 即 τ' 很大, 平面间只需很小的耦合, 系统就处于三维状态。反之谷间散射很强, τ' 很小, 则需很大的平面间耦合, 系统才能由二维过渡到三维。

- [1] E. Abrahams *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979), 673.
- [2] D. J. Bishop *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 1153.
- [3] Y. Kawaguchi *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **48**(1980), 699.
- [4] T. Ando *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **54**(1982), 437.
- [5] T. Ando, *Surface Sci.*, **98**(1980), 327.
- [6] H. Fukuyama, in *Anderson Localization*, edited by Y. Nagaoka, *et al.*, Springer Series in Solid State Sci., **39** (1982), 89.
- [7] B. Y. Jin *et al.*, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 8797.
- [8] B. Y. Jin *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **57**(1985), 2543.
- [9] Jiang Qi and Gong Chang-de, *Phys. Lett.*, **A127**(1988), 105.
- [10] Jiang Qi and Gong Chang-de, *Physica B*, in press.
- [11] 蒋 祺、龚昌德, 物理学报, **37**(1988), 941.
- [12] P. A. Lee *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **57**(1985), 287.
- [13] J. S. Langer *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **16**(1966), 984.

THE INFLUENCE OF INTERVALLEY IMPURITY SCATTERING ON THE CONDUCTIVITIES OF THE DISORDERED LAYER SYSTEM

JIANG QI

(Center of Theoretical Physics, Department of Physics, Nanjing University)

GONG CHANG-DE

(Department of Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

This paper studies the influence of intervalley impurity scattering on the conductivities of the disordered layer system. The corrections of the conductivities for the effective dimensionality in the system which depend on the interlayer coupling ι are obtained. It is found that the corrections of the conductivities including the intervalley impurity scattering is half as large as those which only involving the intravalley scattering. The crossover effect of dimensionality from 2- D to 3- D in the system have been studied. It is shown that the crossover behaviour depend on the relaxation time due to the intervalley scattering τ' . For $\iota < \frac{1}{\tau} \left(\frac{\tau_0}{\tau'} \right)^{1/2}$, the system behave as a two dimensional one, for $\iota > \frac{1}{\tau} \left(\frac{\tau_0}{\tau'} \right)^{1/2}$ the system behave as though it were a 3- D one.