

# 金属双层膜中量子输运的表面和 界面散射效应<sup>\*</sup>

董正超<sup>1)</sup> 盛 利 邢定钰 董锦明

(南京大学固体微结构物理国家重点实验室和固体物理研究所,

南京 210093)

(1995年2月10日收到)

运用格林函数的解析方法研究金属双层膜的电子输运. 考虑了量子尺寸效应和来自杂质、粗糙表面和粗糙界面三方面的散射, 计算单粒子格林函数和平行电导率, 得到了金属双层膜的电导公式. 计算结果表明, 在薄膜极限和表面及界面散射的最低阶近似下, 系统总电导率等于各子能级通道的电导率之和, 而各子能级通道中杂质、表面和界面产生的散射率是可相加的.

PACC: 7210; 7360D; 7340

## 1 引 言

近年来各类纳米材料和纳米结构器件制备技术的迅速发展促使和推动了凝聚态理论中介观物理的研究<sup>[1]</sup>. 纳米系统通常指的是小尺寸系统, 其空间尺度至少在一个方向限制在 100 nm 以下, 包括准二维的薄膜、准一维的量子线、以及零维的量子点. 限制在这些小尺寸系统中的电子形成离散的量子化能级和相应的束缚态波函数, 对系统的各种物理性质都有影响, 产生量子尺寸效应. 小尺寸系统的另一个显著特征是表面效应. 由于小尺寸系统的表面原子数占总原子数的比例远大于大块系统的情形, 其表面效应将对系统产生重要影响. 最近以这些小尺寸系统(薄层、细线或微粒)为构元组成的纳米结构材料有很大发展<sup>[1]</sup>, 如具有巨磁阻效应的磁多层结构<sup>[2,3]</sup>和磁异质颗粒膜<sup>[4,5]</sup>. 这类纳米结构材料包含大量的界面原子, 其界面效应对系统性质起着举足轻重的作用.

早期的薄层系统的电子输运理论是建立在弛豫时间近似下的玻耳兹曼输运方程的基础上<sup>[6]</sup>. 该半经典理论用玻耳兹曼方程中引进的弛豫时间或电子平均自由程表征杂质散射, 同时假定一个常数镜面反射系数描述表面粗糙引起的散射, 处理为输运方程的边界条件. 由于该理论没有考虑量子尺寸效应, 而且对表面散射的处理过于简化, 它不能正确描述薄膜极限下的电子输运, 只适合于膜厚大于平均自由程的厚膜情形. 近年来, 适合于薄膜的量子输运理论已取得进展<sup>[7-10]</sup>, 其中包含了量子尺寸效应和对表面散射采用量子处

<sup>\*</sup> 国家科学技术委员会攀登计划资助的课题.

<sup>1)</sup> 现在通讯地址: 江苏省淮阴师范专科学校.

理. Tešanović 等<sup>[7]</sup> Fishman 和 Calecki<sup>[8]</sup>发展量子理论分别解释了膜层薄至 6.0 和 1.0 nm 的  $\text{CoSi}_2$  薄膜的电导实验, 得到理论与实验一致的结果. Trivedi 和 Ashcroft 等<sup>[9]</sup>分别考虑了杂质散射和表面散射, 计算了随薄膜厚度变化产生的电导振荡行为. 最近, 盛利、邢定钰和汪子丹等<sup>[10]</sup>运用量子统计的格林函数方法建立了一个同时适用于薄膜和厚膜情形的电导统一公式, 研究了半经典理论与量子理论之间的联系和过渡.

本文着重研究量子输运理论中的界面散射作用. 在磁多层结构的巨磁阻效应中, 界面散射已被认为起着决定性的作用<sup>[11-13]</sup>. 为了同时考虑量子尺寸效应、表面散射和界面散射的作用, 本文讨论一个由两个不同金属薄层组成的界面模型系统. 如图 1 所示, 该系统包含一个界面 ( $z = a$ ) 和两个表面 ( $z = 0$  和  $z = d$ ), 两个金属薄层的厚度分别为  $a$  和  $b = d - a$ . 将运用格林函数理论和久保 (Kubo) 公式计算系统的电导, 其格林函数运用微扰论和戴逊 (Dyson) 方程方法求得. 在下一节中, 略去各种散射, 考虑限制在厚度为  $d$  的理想薄膜中的电子离散能级和相应的波函数, 由此建立零阶格林函数. 给出杂质散射、表面散射和界面散射的微扰哈密顿量. 有关杂质散射和表面散射的微扰计算已在文献<sup>[10]</sup>中给出, 这里将不再重复计算步骤, 只给出计算结果和作一些简要的说明. 第三节集中进行界面散射的微扰计算, 得到与空间位置有关的两点格林函数. 第四节运用实空间形式的久保公式计算两点电导率以及位置平均的电导率. 在第五节中对所得的计算结果作物理讨论, 包括量子尺寸效应、不同子能带之间的散射跃迁、以及各种散射机制引起的散射率能否简单相加等问题.

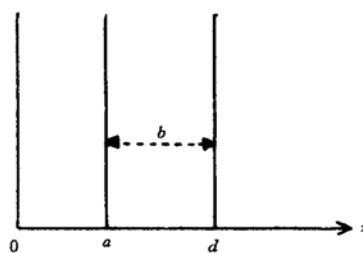


图 1 界面模型系统

## 2 量子模型与格林函数方法

考虑图 1 所示的界面模型系统, 其单电子哈密顿量可由下面几部分组成:

$$H = H_0 + H_i + H_s + H_l, \quad (1)$$

其中等号右端后三项分别表示杂质、表面和界面引起的散射哈密顿量,  $H_0$  表示限制在一个厚度为  $d$  的理想薄膜中的自由电子哈密顿量,

$$H_0 = P^2/2m + V[\epsilon(-z) + \epsilon(z-d)], \quad (2)$$

其中势能项表示电子处于一个宽度为  $d$  的一维势阱中,  $V$  为势阱的深度,  $\epsilon(z)$  为单位阶跃函数. 两种不同化学势的金属形成的界面系统具有拉平了的费密能, 但能带底有一个二者化学势之差的台阶. (2) 式中势能项没有计及这一台阶势差, 适合于台阶势差远小于费密能的数值情形, 该近似已广泛用于两种金属薄膜交替排列的磁多层结构的电导计算<sup>[11-13]</sup>. 在无限大  $V$  的极限, 哈密顿量 (2) 式的电子能谱是  $E_{kn} = (k_{11}^2 + q_n^2)/2m$ , 其中  $k_{11}$  是平面内方向的二维动量,  $q_n = n\pi/d$  是垂直于薄膜方向的量子化动量, 其对应的波函数  $\phi_n = (2/d)^{1/2} \sin q_n z$ , 由此构成的零阶推迟格林函数为<sup>[14]</sup>

$$G_0(\mathbf{k}_{11}, n) = \langle \mathbf{k}_{11}, n | \hat{G} | \mathbf{k}_{11}, n \rangle = \frac{2m}{\bar{k}^2 - q_n^2 + i\eta}, \quad (3)$$

其中  $\bar{k}^2 = k_F^2 - k_{11}^2$ . 由于对低温下电导起主要贡献的是处于费密面附近的电子, 故在电子格林函数(3)式中单电子能量已取定为费密能值  $k_F^2/2m$ .

杂质和表面散射哈密顿量分别为<sup>[10]</sup>

$$H_i = \sum_{\alpha} U \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}), \quad (4)$$

$$H_s = \sum_{l=1,2} V f_l(\mathbf{r}_{11}) \delta(z - z_l), \quad (5)$$

其中  $U$  为杂质散射势,  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{11}, z)$  为电子坐标,  $\mathbf{R}_{\alpha}$  为第  $\alpha$  个杂质的位置. (5)式的求和表示考虑  $z_1 = 0$  和  $z_2 = d$  两个表面,  $f_l(\mathbf{r}_{11})$  表示表面粗糙度参数<sup>[7-10]</sup>. 由微扰哈密顿量(4)和(5)式容易计算它们对格林函数的自能贡献, 进而运用戴逊方程求和方法, 和对杂质的无规分布取平均, 以及对表面粗糙起伏取平均, 最后可以得到有杂质和表面散射作用时单粒子格林函数在混合的 Bloch-Wannier 表象中的表达式<sup>[10]</sup>

$$G(\mathbf{k}_{11}, z, z') = \frac{m}{i\bar{k}[1 - RT(2d)]} \{ T(|z - z'|) + RT(2d - |z - z'|) - R^{1/2} [T(z + z') + T(2d - z - z')] \}, \quad (6)$$

其中

$$R = \left( \frac{1 - \bar{k}Q}{1 + \bar{k}Q} \right)^2 \quad (7)$$

为一个描述表面散射的有效镜面系数,  $Q$  为一个依赖于表面粗糙的物理量, 由一个自治方程决定<sup>[10]</sup>. (7)式中给出的  $R$  是计算推导出的, 并且与动量有关. 它与半经典理论<sup>[6]</sup>中的镜面反射系数完全不同, 后者是唯象引入的常数, 且假定与动量无关. (6)式中包含的函数  $T(z)$  定义为<sup>[10]</sup>

$$T(z) = \exp(i\bar{k}z) \cdot \exp[-k_F z / 2\bar{k}\lambda], \quad (8)$$

其中  $\lambda$  为杂质导致的平均自由程.  $T(z - z')$  表示电子从  $z'$  点到  $z$  点的传播函数, 其衰减因子来源于杂质散射. 格林函数(6)式将作为下节界面散射微扰计算的出发点.

### 3 界面散射

由于界面粗糙引起的界面散射哈密顿量为

$$H_I = V_I g(\mathbf{r}_{11}) \delta(z - a), \quad (9)$$

其中  $V_I$  表示界面散射势,  $g(\mathbf{r}_{11})$  表示界面无规起伏. 由戴逊方程, 可确定其格林函数

$$G_I(\mathbf{k}_{11}, z, z') = G(\mathbf{k}_{11}, z, z') + \iint dz_1 dz_2 G(\mathbf{k}_{11}, z, z_1) \sum_i(\mathbf{k}_{11}, z_1, z_2) \times G_I(\mathbf{k}_{11}, z_2, z'), \quad (10)$$

其中  $\sum_i$  表示界面散射的正规自能, 参考文献[15]可得

$$\sum_i(\mathbf{k}_{11}, z, z') = \int \frac{d\mathbf{q}_{11}}{(2\pi)^2} V_I^2 |g(\mathbf{k}_{11} - \mathbf{q}_{11})|^2 \delta(z' - a) \delta(z - a) G_I(\mathbf{q}_{11}, z, z'). \quad (11)$$

再对界面的无规分布取平均后得

$$\sum_{\mathbf{l}}(\mathbf{k}_{11}, z, z') = -iP\delta(z - z')\delta(z - a), \quad (12)$$

其中

$$P = -\text{Im} \int \frac{d\mathbf{q}_{11}}{(2\pi)^2} \langle |g|^2 \rangle V_1^2 G_1(\mathbf{q}_{11}, a, a). \quad (13)$$

在推导(12)式时取的是自能虚部, 它的实部可被合并到重新定义的能级参考面中去, 另外在推导(13)式时利用白噪音(white noise)假定<sup>[7-10]</sup>, 认为  $\langle |g(\mathbf{k}_{11} - \mathbf{q}_{11})|^2 \rangle$  与动量无关, 所以取  $\langle |g(\mathbf{k}_{11} - \mathbf{q}_{11})|^2 \rangle = \langle |g|^2 \rangle$ . 将(12)式代入(10)式得到

$$G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z') = G(\mathbf{k}_{11}, z, z') - iP \frac{G(\mathbf{k}_{11}, z, a)G(\mathbf{k}_{11}, a, z')}{1 + iPG(\mathbf{k}_{11}, a, a)}. \quad (14)$$

(13)和(14)式构成闭合的方程组, 原则上可以自洽地求解  $P$  和  $G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z')$ . 作为最低阶近似, (13)式等号右边的  $G_1(\mathbf{k}_{11}, a, a)$  可以用零阶格林函数  $G_0(\mathbf{k}_{11}, a, a)$  代替<sup>[10]</sup>, 其中  $G_0(\mathbf{k}_{11}, z, z')$  是格林函数(3)式在混合的 Bloch-Wannier 表象中的表达式

$$G_0(\mathbf{k}_{11}, z, z') = 2m \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(z)\phi_n(z')}{k^2 - q_n^2 + i\eta}, \quad (15)$$

这样就容易算得

$$P = \frac{m}{d} \langle |g|^2 \rangle V_1^2 \left[ \frac{n_c}{2} - \frac{(\cos(n_c + 1)\pi a/d) \sin n_c \pi a/d}{2 \sin \pi a/d} \right], \quad (16)$$

其中  $n_c = \text{Int}(k_F d/\pi)$ , 表示  $k_F d/\pi$  的整数部分<sup>[9]</sup>.

将格林函数  $G(\mathbf{k}_{11}, z, z')$  (6)式代入(14)式, 经过运算得到

当  $z < a$  和  $z' < a$  时,

$$G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z') = \frac{m}{i\bar{k}[1 - R^{1/2}S_- T(2a)]} \left\{ T(|z - z'|) + R^{1/2}S_- T[2a - |z - z'|] \right. \\ \left. - R^{1/2}T(z + z') - S_- T[2a - (z + z')] \right\}; \quad (17a)$$

当  $z > a$  和  $z' > a$  时,

$$G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z') = \frac{m}{i\bar{k}[1 - R^{1/2}S_+ T(2b)]} \left\{ T(|z - z'|) + R^{1/2}S_+ T[2b - |z - z'|] \right. \\ \left. - S_+ T[(z + z') - 2a] - R^{1/2}T[2d - (z + z')] \right\}; \quad (17b)$$

当  $z$  和  $z'$  分居在界面两侧时,

$$G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z') = \frac{mt}{i\bar{k}[1 - R^{1/2}rT(2a)][1 - R^{1/2}S_+ T(2b)]} \left\{ T(|z - z'|) \right. \\ \left. + RT[2d - (|z - z'|)] \right. \\ \left. - R^{1/2}T(z + z') - R^{1/2}T[2d - (z + z')] \right\}. \quad (17c)$$

在推导(17c)式时还有一恒等关系式

$$[1 - R^{1/2}rT(2a)][1 - R^{1/2}S_+ T(2b)] = [1 - R^{1/2}rT(2b)][1 - R^{1/2}S_- T(2a)],$$

(17)式中的参数  $r, t, S_-, S_+$  的形式为

$$r = \frac{Pm}{\bar{k} + Pm}, \quad (18a)$$

$$t = \frac{\bar{k}}{\bar{k} + Pm}, \quad (18b)$$

$$S_- = \frac{r + R^{1/2}(t - r)T(2b)}{1 - R^{1/2}rT(2b)}, \quad (18c)$$

$$S_+ = \frac{r + R^{1/2}(t - r)T(2a)}{1 - R^{1/2}rT(2a)}. \quad (18d)$$

简单分析一下(18)式各参数的物理意义,以加深对(17)式给出的两点传播的格林函数的理解.如(12)式所示,具有界面粗糙的散射作用相当于一个有效势  $-iP\delta(z-a)$ . 由简单的量子力学计算容易得到入射到该界面粒子的反射波和透射波振幅分别为(18)式给出的  $r$  和  $t$ . 因而  $|r|^2$  和  $|t|^2$  分别表示粒子通过界面的镜面反射系数和透射系数. 由于界面粗糙产生的散射作用,镜面反射系数与透射系数之和不等于 1. 实际上,  $|r|^2 + |t|^2 = 1 - 2Pm\bar{k}/(\bar{k} + Pm)^2$ , 其散射部分跟  $P$  有关. 为了看清  $S_-$  的物理意义,可对其表式(18c)作幂级数展开

$$S_- = r + t^2 R^{1/2} T(2b) + t^2 R r T(4b) + t^2 R^{3/2} r^2 T(6b) + \dots,$$

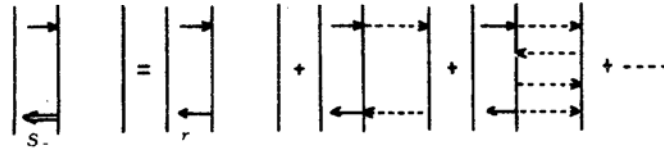


图 2

其各项代表的物理过程如图 2 所示. 上式等号右边第一项  $r$  表示从界面左边入射的粒子在界面被反射的振幅. 第二项可写成  $tT(b)R^{1/2}T(b)t$ , 如图 2 所示, 表示从界面左边入射的粒子透射过界面, 在界面右边薄膜中经过一次反射, 再透射回到界面左边的波幅. 同理, 可写成  $tT(b)R^{1/2}T(b)rT(b)R^{1/2}T(b)t$  的第三项表示在界面右边薄膜中经过二次反射, 再透射回界面左边的物理过程, 如图 2 中的最后一个图所示. 因而从  $S_-$  的幂级数展开式可看出它表示从界面左边入射粒子的有效反射波的波幅. 同样的分析可看出  $S_+$  表示从界面右边入射粒子的有效反射波波幅. 在界面两侧薄膜厚度不同的情形,  $S_+$  和  $S_-$  有不同数值, 但它们的表达式具有对称形式. 有了以上的讨论, 就容易理解(17)式中粒子的两点传播行为. 该方法可以推广到金属多层结构的格林函数计算, 将不在本文中讨论.

#### 4 电导率的计算

考虑外电场沿薄膜的平面方向, 由久保公式<sup>[15]</sup>可得实空间两点电导率<sup>[10]</sup>

$$\sigma(z, z') = \frac{e^2}{2m^2} \int \frac{d\mathbf{k}_{11}}{(2\pi)^3} k_{11}^2 [A(\mathbf{k}_{11}, z, z')]^2, \quad (19)$$

其中  $A(\mathbf{k}_{11}, z, z') = i[G_1(\mathbf{k}_{11}, z, z') - G_1^*(\mathbf{k}_{11}, z, z')]$  是单粒子格林函数的谱函数, 由

于电导率表现的是宏观效应, 所以应对(19)式求平均, 即

$$\sigma = \frac{1}{d} \int_0^d dz \int_0^d dz' \sigma(z, z'). \quad (20)$$

可以证明在弱表面和界面散射情形下,  $A^2$  里的  $G_1 G_1, G_1^* G_1^*$  两项对电导率无贡献, 仅剩  $2G_1 G_1^*$  项有贡献<sup>[10]</sup>. 作积分变量变换  $k_{11} \rightarrow \bar{k}$ , 则有

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^2 m^2 d} \int_0^{k_F} d\bar{k} \int_0^d dz \int_0^d dz' \bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2) |G_1(k_{11}, z, z')|^2. \quad (21)$$

从(17)式可看出, 每一区间的两点传播格林函数都包含四项传播行为. 这样可以把积分中的  $|G_1(k_{11}, z, z')|^2$  分为两部分: 一部分来自各项独立的模方和, 另一部分来自各项之间交叉干涉项的和. 可证明所有交叉干涉项的贡献比模方项的贡献要小很多, 作为近似可以略去这些干涉项<sup>[10]</sup>. 把(17)式代入电导公式(21), 将可得到计算电导率的解析表达式.

一般情形下( $a \neq b$ )的电导计算没有什么原则困难, 只是计算公式过于冗长. 为了比较简明地给出计算步骤和解析结果, 我们只讨论  $a = b = d/2$  的对称情形. 联立(17)和(21)式, 完成对  $z$  和  $z'$  的积分后, 得到

$$\sigma = \frac{e^2 \lambda^2}{2\pi^2 k_F^2 d} \int_0^{k_F} d\bar{k} \frac{\bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2)}{4R^{1/2} E_a (1-r) [1 + (1-2r)RE_a^2]} \left[ \frac{u - \alpha v}{\alpha + \cos kd} + \frac{u + \beta v}{\beta - \cos kd} \right], \quad (22)$$

其中  $E_a = \exp[-k_F a / (\bar{k}\lambda)]$ ,  $E_d = E_a^2$ ,

$$\begin{aligned} u = & \frac{k_F d}{k\lambda} \left[ 1 - R^2 E_d^2 (1-2r)^2 \right] + \left[ (E_a - 1)^2 R + 2(E_a - 1) \right] \left[ 1 + Rr^2 E_a^2 \right] \\ & + \left[ (E_a - 1)^2 - 2(E_a - 1)RE_a \right] \left[ r^2 + R(1-2r)^2 E_a^2 \right] \\ & + \left[ (1-r)(E_a - 1)(1 + RE_a) \right]^2, \end{aligned} \quad (23a)$$

$$\begin{aligned} v = & 2R^{1/2} r E_a \left\{ \left[ (E_a - 1)^2 - 2(E_a - 1)RE_a - \frac{k_F d}{k\lambda} RE_a^2 \right] (1-2r) \right. \\ & \left. - \left[ \frac{k_F d}{k\lambda} + 2(E_a - 1) + (E_a - 1)^2 R \right] \right\}, \end{aligned} \quad (23b)$$

$$\alpha = \frac{(1-2r)^2 RE_a^2 + 1}{2R^{1/2} E_a (1-2r)}, \quad (23c)$$

$$\beta = \frac{RE_a^2 + 1}{2R^{1/2} E_a}. \quad (23d)$$

(22)式的积分表达式, 包括两项积分, 可写为  $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ , 为了下面的进一步计算, 重新写出这两项积分表达式

$$\begin{aligned} \sigma_1 = & \frac{e^2 \lambda^2}{2\pi^2 k_F^2 d} \int_0^{k_F} d\bar{k} \frac{\bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2)}{4R^{1/2} E_a (1-r) [1 + (1-2r)RE_a^2]} \frac{u - \alpha v}{\alpha + \cos kd}, \\ \sigma_2 = & \frac{e^2 \lambda^2}{2\pi^2 k_F^2 d} \int_0^{k_F} d\bar{k} \frac{\bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2)}{4R^{1/2} E_a (1-r) [1 + (1-2r)RE_a^2]} \frac{u + \beta v}{\beta - \cos kd}. \end{aligned}$$

仔细分析上两式的被积函数, 可发现它们都是周期为  $2\pi/d$  的振荡函数, 为了计算它们的

积分值,可将其分为很多小区间来积分,然后再对这些小区间积分求和.在 $\sigma_1$ 中,考虑到积分限以及当 $\bar{k} = (2n-1)\pi/d$ 时分母有极小值,可将其分为 $\text{Int}[(n_c+1)/2]$ 个小区间,每个小区间的范围是 $[(2n-1)\pi/d - \pi/d, (2n-1)\pi/d + \pi/d]$ ,这样 $\sigma_1$ 中的积分就变

为 $\sum_{n=1}^{n_c} \int_{q_n - \pi/d}^{q_n + \pi/d} d\bar{k}$ ,求和号上的一撇表示对 $n$ 的求和仅取奇数求和,在每个小区间里,除了 $\cos \bar{k}d$ 函数变化很快外,其余的一些变量函数诸如 $E_a, R, r$ 都是变化很慢的,可把这些函数中的变数 $\bar{k}$ 近似用 $q_n$ 代替而作为常量.同样的方法计算 $\sigma_2$ ,考虑到 $\sigma_2$ 表示式的特点,可将其分为 $\text{Int}(n_c/2)$ 个小区间,每个小区间范围为 $[2n\pi/d - \pi/d, 2n\pi/d + \pi/d]$ , $\sigma_2$ 的积分将转变为 $\sum_{n=2}^{n_c} \int_{q_n - \pi/d}^{q_n + \pi/d} d\bar{k}$ ,求和号上的两撇表示对 $n$ 的求和仅取偶数项.通过上面这种近似处理<sup>[10]</sup>,最后得电导率为

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{\lambda}{2\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \frac{(1-R)(1-E_d)}{1-RE_d} - \frac{\lambda}{2\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \frac{4r(1-r)(1-E_a)^2(1+RE_a)^2}{[1-(1-2r)^2 RE_d][1-RE_d]}, \quad (24)$$

其中 $\sigma_0 = N_e e^2 \lambda / k_F$ ,  $N_e = \frac{1}{2\pi d} \sum_{n=1}^{n_c} (k_F^2 - q_n^2)$ ,上面方程等号右边第二项的求和是对所有奇偶部求和.从(24)式可清楚地看到,前两项就是在文献[10]中得到的结果,第三项的出现是由于界面散射导致电导的减小.因为我们取的界面位置是处在薄膜的中间 $a = d/2$ ,在界面处的电子波函数为 $\phi_n = (2/d)^{1/2} \sin n\pi/2$ ,当 $n$ 取偶数时, $\phi_n(a) = 0$ ,所以在界面处,就没有对 $n$ 取偶数的那些电子态的界面散射,因而出现了(24)式等号右端第三项对 $n$ 的求和仅对奇数求和.在 $a \neq b$ 的一般情形,界面效应对 $n$ 为偶数的子能级项也有贡献,但电导率有比(24)式复杂得多的形式.

## 5 讨 论

上节中(24)式是本文得到的主要结果,下面对这些结果作简短讨论.

首先取 $r=0$ ,即无界面散射情形,此时(24)式就为

$$\sigma/\sigma_0 = 1 - \frac{\lambda}{2\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \frac{(1-R)(1-E_d)}{1-RE_d}, \quad (25)$$

即文献[10]中得到的结果,这一结果已成功地将用于薄膜的量子结果与适用于厚膜的经典结果联系起来.针对(24)式的量子结果讨论 $d \gg \lambda$ 和 $d \ll \lambda$ 的两种极限情况.对 $d \gg \lambda$ 的厚膜情形,可忽略量子尺寸效应,能级由原来的离散能级变为连续谱.令 $\mu = q_n/k_F$ 作为连续变量,(24)式中对 $n$ 求和将变成对 $\mu$ 的积分,其积分区间近似为从0到1,这样可以得到 $N_e = k_F^3/(3\pi^2)$ , $\sigma_0 = e^2 k_F^2 \lambda/(3\pi^2)$ .这就是熟知的经典电子论的结果, $N_e$ 对应电子的体密度, $\sigma_0$ 对应金属中由于受体散射而得出的电导率.在 $d \gg \lambda$ 的极限下,可略去因

子  $E_a(q_n) = \exp(-a/\mu\lambda)$  和  $E_d(q_n) = \exp(-d/\mu\lambda)$ , 同时(7)式给出的  $R(q_n)$  可近似为  $(1 - 4\mu k_F Q)$ , 这样(24)式约化为

$$\sigma/\sigma_0 \approx 1 - \frac{6\lambda k_F Q}{d} \int_0^1 u^2(1-u^2)du - \frac{3\lambda k_F Pm}{d} \int_0^1 \frac{u^2(1-u^2)}{(k_F u + Pm)^2} du. \quad (26)$$

对上式进行积分, 略去  $Pm/k_F$  的高次项, 则

$$\sigma/\sigma_0 \approx 1 - \frac{4}{5} \frac{\lambda k_F Q}{d} - \frac{2\lambda Pm}{k_F d}. \quad (27)$$

上式近似号右端第二项与表面散射的经典结论是一致的, 最后一项表示界面散射导致电导率的减小. 为了突出(24)式中量子尺寸效应, 再讨论  $d \ll \lambda$  的情形, 这时可以作近似

$E_a \approx 1 - \frac{k_F d}{2q_n \lambda} + \frac{1}{8} (k_F d/q_n \lambda)^2$ ,  $E_d \approx 1 - \frac{k_F d}{q_n \lambda} + \frac{1}{2} (k_F d/q_n \lambda)^2$ . 同时考虑到表面粗糙和界面粗糙的微扰处理, 把  $Q$  和  $P$  视为小量, 取它们的最低阶近似, 即  $R \approx 1 - 4q_n Q$ ,  $r \approx Pm/q_n$ . 在这些近似下, (24)式经运算得到

$$\lambda = \frac{e^2}{2\pi k_F d} \left[ \sum_{n=1}^{n_c} \frac{(k_F^2 - q_n^2)}{\lambda^{-1} + 4q_n^2 Q/k_F d + 4Pm/k_F d} + \sum_{n=2}^{n_c} \frac{(k_F^2 - q_n)^2}{\lambda^{-1} + 4q_n^2 Q/k_F d} \right]. \quad (28)$$

这一结果表明在薄膜极限以及表面和界面散射的最低阶近似下, 系统的总电导率等于各个子能级电子通道的电导率之和. 每个电子通道的电子散射率是杂质、表面和界分别引起的散射率相加的结果, 因为  $\lambda$  是杂质散射导致的平均自由程, 而参量  $Q$  和  $P$  分别是表面粗糙和界面粗糙的表征. 如上面讨论, 在  $a = b = d/2$  的对称结构情形, 界面粗糙对于  $n$  为偶数的子能级没有散射作用, 因而这些通道中电子所受的界面散射率不出现在(28)式中, 或可视为零. 这样由(28)式描述的电阻网络是由  $n_c$  个子能级通道对应的电阻并联构成, 其中每一个通道的电阻又由杂质、表面和界面分别导致的电阻串联而得. 这里电阻率相加的马蒂森(Matthiessen)规则只适用于每个子能级通道, 而不适用系统的整个电阻率<sup>[9]</sup>, 故(28)式可视为马蒂森规则的推广形式.

最后, 指出表面和界面散射与杂质散射一样, 都属于电子的弹性散射过程. 散射前后电子能量  $(k_{11}^2 + q_n^2)/2m$  保持不变, 但伴随着电子平行动量  $k_{11}$  的改变,  $q_n$  也要随之变化, 可以发生子能级之间的跃迁散射. 这是量子尺寸限制引起的重要效应, 其平均效果已包含在(28)式的参量  $P$  和  $Q$  中. 此外, 还存在杂质、表面和界面散射的相干效应, 表现为电导公式中应包含  $\lambda$ ,  $P$  和  $Q$  之间的交叉项. (28)式是在薄膜极限下忽略了这些交叉项的近似结果. 一般情形下, 电导公式(24)不能约化为(28)式的简单形式, 系统总电阻也不能等价为一个简单的电阻串、并联网路. 因而, 从严格意义上讲在薄膜电子的量子输运理论中, 量子尺寸效应会导致马蒂森规则的完全失效.

[1] R. W. Siegel, *Phys. Today*, **46**(Oct., 1993), 64.

[2] M. N. Baibich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 2474.

[3] G. Binasch *et al.*, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 4828.

[4] A. E. Berkowitz *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992), 3745.

[5] J. Q. Xiao, J. S. Jiang and C. L. Chien, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992), 3749.

- [6] K. Fuchs, *Proc. Cambridge. Philos. Soc.*, **34**(1938), 100; E. H. Sondheimer, *Adv. Phys.*, **1**(1952), 1.
- [7] Z. Tešanović, M. V. Jarić and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2760.
- [8] G. Fishman and D. Calecki, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 1302.
- [9] N. Trivedi and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 12298.
- [10] L. Sheng, D. Y. Xing and Z. D. Wang, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), to be published.
- [11] R. E. Camley and J. Barnás, *Phys. Rev. Lett.*, **63**(1989), 664.
- [12] P. M. Levy, S. Zhang and A. Fert, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 1643.
- [13] M. Liu and D. Y. Xing, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 12272; L. Sheng and D. Y. Xing, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 1001.
- [14] H. E. Camblong and P. M. Levy, *Phys. Rev. Lett.*, **69**(1992), 2835.
- [15] G. D. Mahan, *Many-Partical Physics* (Plenum, New York, 1981), p. 602.

## SURFACE AND INTERFACE SCATTERING EFFECTS ON QUANTUM TRANSPORT IN BIMETALLIC FILMS

DONG ZHENG-CHAO SHENG LI XING DING-YU DONG JIN-MING

(State Key Laboratory of Solid State Microstructures and Institute of Solid State Physics,  
Nanjing University, Nanjing 210093)

(Received 10 February 1995)

### ABSTRACT

An analytical Green's function approach to the study of the electrical transport in bimetallic films is presented. Taking into account the quantum size effects and considering three types of scattering from bulk impurities, rough surfaces and a rough interface, we calculate the one-particle Green's functions and the in-plane conductivity, yielding a new formula for conductivity in bimetallic films. It is found that in the thin-film limit and to the lowest order in the surface and interface scattering, the total conductivity is given by a sum of conductivities of all the subbands and for each subband the scattering rates due to the impurities, surfaces and interface are additive.

**PACC:** 7210; 7360D; 7340