

金属薄膜的量子输运理论^{*}

董正超¹⁾²⁾ 盛 利¹⁾ 邢定钰¹⁾³⁾ 董锦明¹⁾

¹⁾(南京大学物理系, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

²⁾(淮阴师范专科学校物理系, 淮阴 223001)

³⁾(中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室, 北京 100080)

(1996 年 2 月 27 日收到)

运用格林函数方法和久保公式研究金属薄膜中的电子输运. 考虑了量子尺寸效应及来自杂质和两个粗糙表面的散射, 计算单粒子格林函数和平行电导率. 计算结果表明: (1) 在薄膜系统中, 电子数密度、平均自由程以及来自杂质和表面散射的电导率都以 π/k_F (k_F 为费密波矢的数值) 为周期随厚度 d 振荡; (2) 在薄膜和厚膜的两种极限、以及取表面粗糙度的最低阶近似下的结果可以推出用半经典和量子方法所得的金属薄膜的电导公式.

PACC: 7210; 7215; 7360D

1 引 言

近年来随着各类纳米材料和纳米结构器件制备技术的迅速发展, 以及以金属薄膜为构元组成的具有巨磁阻效应的磁多层结构的研究进展^[1-5], 人们对金属薄膜系统的研究产生了极大的兴趣. 金属薄膜的显著特征是量子尺寸效应和表面效应, 这两种效应对系统的各种物理性质都将产生重要影响.

研究金属薄膜的电子输运理论可分为两种. 一种是半经典的方法^[6,7], 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, 它不适用于极薄的薄膜, 只适用于厚膜的情形. 另一种是近期发展起来的量子方法^[8-10], 该理论充分考虑了量子尺寸效应, 但在表面散射的量子处理上, 或把金属薄膜的两个表面看作为一个是粗糙的, 另一个是理想(光滑)的^[8,9], 或认为两表面的粗糙度是相同的^[10]. 因此没有把薄膜系统的两个粗糙表面散射的物理特征清楚地表现出来, 诸如两表面散射是否存在相干效应、两表面散射引起的散射率是否能简单相加等.

本文在文献[8-10]的理论模型基础上, 考虑到薄膜系统的杂质散射, 以及两个具有不同粗糙度的表面散射, 运用量子统计的格林函数方法, 较为详细地讨论了金属薄膜中电子输运特性, 并得到一个普遍适用的金属薄膜电导公式. 通过对该电导公式的讨论可分别给出只来自杂质散射的电导公式、来自两个不同粗糙表面散射的电导公式及两种薄膜极限下的电导公式, 数值计算表明: 金属薄膜系统中, 电子数密度、平均自由程以及只来自杂质散射、表面散射的电导率都以 π/k_F (k_F 为费密波矢的值) 为周期随膜厚度 d 振荡. 讨论

^{*} 国家自然科学基金和国家攀登计划资助的课题.

还发现 Matthiessen 规则不完全适用于金属薄膜系统.

2 量子模型和格林函数方法

考虑一个厚度为 d 的理想金属薄膜(暂不考虑杂质和表面粗糙引起的散射), 两个表面位置为 $z_1=0$ 和 $z_2=d$. 限制在理想薄膜系统中的电子哈密顿量可写为

$$H_0 = P^2/2m + V[\theta(-z) + \theta(z-d)], \quad (1)$$

式中 V 是束缚势阱的深度, θ 是单位阶跃函数. 考虑在低温下(取 $T=0$), 金属薄膜中的电子不能逸出金属表面, 可认为电子是处于无限深势阱中. 由此得到(1)式的电子能谱为 $E_{kn} = (\mathbf{k}_{\parallel}^2 + q_n^2)/2m$, 其中 $\mathbf{k}_{\parallel}$ 是 x - y 平面上的二维动量, $q_n = n\pi/d$ 是垂直于薄膜方向的量子化动量, 其对应的波函数是 $\phi_n = (2/d)^{1/2} \sin q_n z$, 由此构成的单粒子格林函数为^[1]

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

式中 $\bar{k} = (k_F^2 - k_{\parallel}^2)^{1/2}$. 由于低温下对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(2)式中单电子能量取定为费密能值: $k_F^2/2m$ ($\hbar$ 取为 1). 为了将(2)式演化为能反映电子在 z 方向的一维传播, 可把它转化到混合的 Bloch-Wannier 表象, 则(2)式为

$$G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z, z') = 2m \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(z) \phi_n(z')}{\bar{k}^2 - q_n^2}. \quad (3)$$

由留数定理计算(3)式可得两点格林函数表达式

$$G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z, z') = \frac{m}{i\bar{k}[1 - \exp(2i\bar{k}d)]} \{ \exp[i\bar{k}|z - z'|] + \exp[i\bar{k}(2d - |z - z'|)] - \exp[i\bar{k}|z + z'|] - \exp[i\bar{k}(2d - |z + z'|)] \}, \quad (4)$$

在 $V \rightarrow \infty$ 的极限情况下, 两表面位置的波函数为零, 即 $\phi_n(z_l) = 0$, z_l 表示第 l 个表面位置. 由简单的量子力学计算可知 $V^{1/2} \phi_n(z_l) \neq 0$, 其值为

$$\lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} \phi_n(z=0) = q_n/(md)^{1/2}, \quad (5)$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} \phi_n(z=d) = (-1)^{n-1} q_n/(md)^{1/2}.$$

从(4)式还可看出, $G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z_l, z_l) = G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z_1, z_2) = G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z_2, z_1) = G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z, z_l) = G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z_l, z) = 0$. 将(5)式代入(3)式, 再用留数定理可得如下一些关系式:

$$\lim_{V \rightarrow \infty} VG_0(\mathbf{k}_{\parallel}, 0, 0) = \lim_{V \rightarrow \infty} VG_0(\mathbf{k}_{\parallel}, d, d) = \bar{k} \operatorname{ctg}(\bar{k}d),$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} VG_0(\mathbf{k}_{\parallel}, 0, d) = \lim_{V \rightarrow \infty} VG_0(\mathbf{k}_{\parallel}, d, 0) = -\bar{k}/\sin(\bar{k}d),$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z, 0) = \lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, 0, z) = \frac{-(2m)^{1/2} \sin[\bar{k}(d-z)]}{\sin(\bar{k}d)}, \quad (6)$$

$$\lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, z, d) = \lim_{V \rightarrow \infty} V^{1/2} G_0(\mathbf{k}_{\parallel}, d, z) = \frac{-(2m)^{1/2} \sin(\bar{k}z)}{\sin \bar{k}d}.$$

格林函数(4)式作为杂质散射和表面散射微扰计算的出发点, 将其定义为零阶格林函数.

关系式(5)和(6)对下面的计算也是有用的.

3 杂质和表面散射

考虑到薄膜系统的杂质和表面散射,其散射哈密顿量为

$$H' = \sum_{\alpha} U \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}) + \sum_{l=1,2} V f_l(\mathbf{r}_{//}) \delta(z - z_l), \quad (7)$$

式中等号右端第一项描述杂质或缺陷的散射^[9], U 为杂质散射势强度, $\mathbf{r}$ 为空间坐标, $\mathbf{R}_{\alpha}$ 为第 α 个杂质或缺陷所处的坐标位置. 第二项描述两个粗糙表面的散射^[8], $f_l(\mathbf{r}_{//})$ 表示第 l 个表面的无规粗糙, $\mathbf{r}_{//}$ 表示在 x - y 平面内的坐标. 下面分两步讨论杂质和表面散射的微扰计算. 首先考虑杂质散射, 由杂质散射的哈密顿量, 运用 Dyson 方程求和方法, 并对杂质的无规分布取平均, 可得杂质散射的正规自能. 自能项包括实部与虚部, 可把自能中的实部归结到重新定义的能级参考面中去, 杂质散射的自能虚部为^[1]

$$-\text{Im} \Sigma_i = \frac{\epsilon_F}{k_F \lambda}, \quad (8)$$

式中 Σ_i 表示杂质散射自能, λ 为杂质散射的平均自由程, 由玻恩近似方法可得^[9]

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \frac{k_F d}{\pi(n_c + 1/2)}, \quad (9)$$

λ_0 为大块金属的平均自由程, $n_c = \text{Int}(k_F d/\pi)$, 表示取 $k_F d/\pi$ 的整数部分, 由(8)式, 容易得到含有杂质散射的格林函数为

$$G_i(\mathbf{k}_{//}, n) = \frac{2m}{k^2 - q_n^2}, \quad (10)$$

式中 k 为复数, 其表达式为

$$k = (\bar{k}^2 + i k_F/\lambda)^{1/2}. \quad (11)$$

将(10)式转化到混合的 Bloch-Wannier 表象, 得到

$$G_i(\mathbf{k}_{//}, z, z') = \frac{m}{i k [1 - \exp(2i k d)]} \{ \exp[i k |z - z'|] + \exp[i k (2d - |z - z'|)] \\ - \exp[i k |z + z'|] - \exp[i k (2d - |z + z'|)] \}. \quad (12)$$

由于 k 为复数, 因此上式的传播函数中存在杂质散射引起的衰减因子.

下面再利用(12)式进行表面散射的微扰计算. 由(7)式的表面散射哈密顿量和 Dyson 方程可得

$$G(\mathbf{k}_{//}, z, z') = G_i(\mathbf{k}_{//}, z, z') + \iint d z_1 d z_2 G_i(\mathbf{k}_{//}, z, z_1) \Sigma_s(\mathbf{k}_{//}, z_1, z_2) G(\mathbf{k}_{//}, z_2, z'), \quad (13)$$

式中 $\Sigma_s(\mathbf{k}_{//}, z_1, z_2)$ 表示表面散射的正规自能,

$$\Sigma_s(\mathbf{k}_{//}, z, z') = \sum_l \int \frac{d \mathbf{q}_{//}}{(2\pi)^2} V^2 |f_l(\mathbf{k}_{//} - \mathbf{q}_{//})|^2 \delta(z - z_l) \delta(z' - z_l) G(\mathbf{q}_{//}, z, z'), \quad (14)$$

对表面粗糙的无规分布取平均得到

$$\Sigma_s(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}') = -i V \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}') \sum_l Q_l \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_l), \quad (15)$$

式中

$$Q_l = -\text{Im} \int \frac{d\mathbf{q}_{//}}{(2\pi)^2} < |f_l|^2 > V G(\mathbf{q}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z}_l). \quad (16)$$

在推导(15)式时取得的是自能虚部, 它的实部亦被合并到重新定义的能级参考面中去. 另外, 在推导(16)式时, 利用了白噪声(white noise)假定^[2,8-10], 即认为 $< |f_l(\mathbf{k}_{//} - \mathbf{q}_{//})|^2 >$ 与动量无关, 取 $< |f_l(\mathbf{k}_{//} - \mathbf{q}_{//})|^2 > = < |f_l|^2 >$ 为一常数. 作为低阶近似, (16) 式积分中的 G 可用零阶推迟格林函数 G_0 代替, 考虑到(5) 式可得如下关系式:

$$V G_0(\mathbf{k}_{//}, 0, 0) = V G_0(\mathbf{k}_{//}, d, d) = \frac{2}{d} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{q_n^2}{k^2 - q_n^2 + i\eta}, \quad (17)$$

式中对 n 求和取到 n_c , 这是由于能量取费密能值时, 所对应的分立能级的子能带指标数最大只能取到 n_c . 将(17)式代入(16)式得

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{\pi^2 < |f_1|^2 > n_c(n_c + 1)(2n_c + 1)}{12d^3}, \\ Q_2 &= \frac{\pi^2 < |f_2|^2 > n_c(n_c + 1)(2n_c + 1)}{12d^3}. \end{aligned} \quad (18)$$

把(15)式代入(13)式得

$$G(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}') = G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}') + \sum_{l=1,2} G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}_l)(-i V Q_l) G(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z}'). \quad (19)$$

对上式的 $\mathbf{z}$ 分别取 0 和 d 可得下面两个方程:

$$G(\mathbf{k}_{//}, 0, \mathbf{z}') = G_i(\mathbf{k}_{//}, 0, \mathbf{z}') + \sum_{l=1,2} G_i(\mathbf{k}_{//}, 0, \mathbf{z}_l)(-i V Q_l) G(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z}'), \quad (20)$$

$$G(\mathbf{k}_{//}, d, \mathbf{z}') = G_i(\mathbf{k}_{//}, d, \mathbf{z}') + \sum_{l=1,2} G_i(\mathbf{k}_{//}, d, \mathbf{z}_l)(-i V Q_l) G(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z}').$$

作类似于(6) 式的推导, 可相应得到 $V G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_m, \mathbf{z}_n)$, $V^{1/2} G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}_l)$ 和 $V^{1/2} G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z})$ 的表示式, 这里只需用 k 去代替(6) 式中的 $\bar{k}$ 即可. 将 $V G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_m, \mathbf{z}_n)$ 代入到(20) 式, 通过解方程组(20), 可得 $G_i(\mathbf{k}_{//}, 0, \mathbf{z}')$ 和 $G_i(\mathbf{k}_{//}, d, \mathbf{z}')$, 然后再将 $G_i(\mathbf{k}_{//}, 0, \mathbf{z}')$, $G_i(\mathbf{k}_{//}, d, \mathbf{z}')$ 及 $V^{1/2} G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}_l)$, $V^{1/2} G_i(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}_l, \mathbf{z})$ 代入(19) 式, 经化简得到

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{z}, \mathbf{z}') &= \frac{m}{ik[1 - R_1^{1/2} R_2^{1/2} \exp(2ikd)]} \{ \exp[ik|\mathbf{z} - \mathbf{z}'|] \\ &+ R_1^{1/2} R_2^{1/2} \exp[ik(2d - |\mathbf{z} - \mathbf{z}'|)] - R_1^{1/2} \exp[ik|\mathbf{z} + \mathbf{z}'|] \\ &- R_2^{1/2} \exp[ik(2d - |\mathbf{z} + \mathbf{z}'|)] \}, \end{aligned} \quad (21)$$

式中

$$\begin{aligned} R_1^{1/2} &= \frac{1 - kQ_1}{1 + kQ_1}, \\ R_2^{1/2} &= \frac{1 - kQ_2}{1 + kQ_2}. \end{aligned} \quad (22)$$

仔细地分析(21), (12)和(4)式, 不难确定 $R_1^{1/2}$ 和 $R_2^{1/2}$ 分别表示了金属薄膜左右两表面的反射波波幅, 由于 k 为复数, 则对应金属薄膜两表面的镜面反射系数分别为 $|R_1^{1/2}|^2$, $|R_2^{1/2}|^2$. 从 k 和 Q_1, Q_2 的表达式可看出, 这里所得到的两表面的镜面反射系数, 依赖于粒子的入射角, 以及两表面的各自粗糙度参数, 这完全不同于文献[6, 7], 把表面的镜面反射系数简单地当作一常数处理. 从(21)式可看出, 粒子两点传播格林函数表示式包含四项, 而在这四项分别表示粒子两点传播的四个过程, 如图 1 所示.

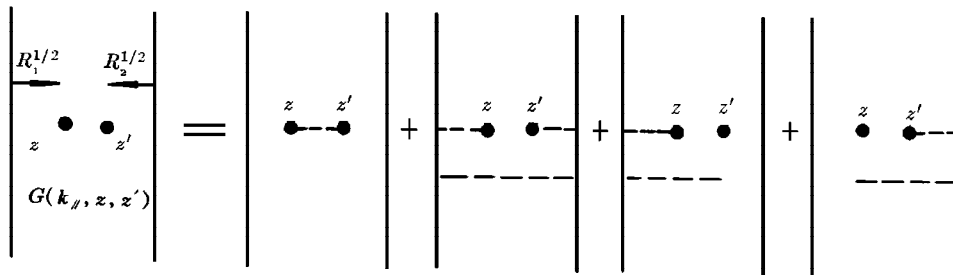


图 1 金属薄膜中电子的两点传播过程

(21)式等号右边的第一项表示电子从 z 点到 z' 点(或是从 z' 点到 z 点)的直接传播, 它对应图 1 等号右边的第一个图. 第二项表示电子从 z 点直接传播到左表面经其反射又传播到右表面, 再经其右表面反射传播到 z' 点的过程, 或是从 z' 点直接传播到右表面经其反射又传播到左表面, 再经左表面反射传播到 z 点, 该过程对应图 1 等号右边的第二个图. 第三项表示电子从 z 点直接传播到左表面经其反射又传播到 z' 点, 或是从 z' 点直接传播到左表面经其反射又传播到 z 点的过程, 它对应图 1 等号右边的第三个图. 同样可分析(21)式等号右边的第四项, 它表示电子从 z 点直接传播到右表面经其一次反射又传播到 z' 点, 或从 z' 点直接传播到右表面经其反射又传播到 z 点的过程, 该过程对应图 1 最右一个图. 另外, (21)式等号右边大括号中各传播因子前的系数来源是: 电子每经过表面的一次反射, 其传播因子前就要乘上一个该表面反射波波幅的负值. 有了以上的讨论, 就可更好地理解(21)式中电子的两点传播行为, 并可看出较之用一般波函数来表征粒子传播有更多的优点, 它能把电子的具体传播过程清楚地表现出来.

4 电导率的计算

考虑到外电场沿薄膜的平面方向, 由久保公式^[11], 可得实空间两点电导率

$$\sigma(z, z') = \frac{e^2}{2m^2} \int_{k_{\parallel} \leq k_F} \frac{dk_{\parallel}}{(2\pi)^3} \cdot k_{\parallel}^2 [A(k_{\parallel}, z, z')]^2, \quad (23)$$

式中 $A(k_{\parallel}, z, z') = i[G(k_{\parallel}, z, z') - G^*(k_{\parallel}, z, z')]$ 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(23)式求平均, 即

$$\sigma = \frac{1}{d} \int_0^d dz \int_0^d dz' \sigma(z, z'), \quad (24)$$

可以证明 A^2 中的 GG , $G^* G^*$ 两项对电导率无贡献, 仅剩 $2GG^*$ 项对电导率有贡献. 作积分变量变换 $k_{\parallel} \rightarrow \bar{k}$, 则(24)式为

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^2 m^2 d} \int_0^{k_F} d\bar{k} \int_0^d dz \int_0^d dz' \bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2) |G(k_{\parallel}, z, z')|^2. \quad (25)$$

考虑到 $k_F \lambda \gg 1$, 可把 $G(k_{\parallel}, z, z')$ 表式中所有传播因子中的 k 近似用 $\bar{k} + i k_F / (2 \bar{k} \lambda)$ 代替, 即 $\exp(ikz) \approx \exp(i\bar{k}z) \cdot \exp\left(-\frac{k_F z}{2 \bar{k} \lambda}\right)$, 而对其他处的 k (包括 $R_1^{1/2}$, $R_2^{1/2}$ 中) 近似用 $\bar{k}$ 代替^[1]. 另外, $G(k_{\parallel}, z, z')$ 中包含四项传播行为, 这样可把(25)式积分中的 $|G(k_{\parallel}, z, z')|^2$ 展开后分为两部分, 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, 可以证明所有交叉干涉项对积分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^[10]. 通过以上近似, 得

$$\sigma = \frac{e^2 \lambda}{2\pi^2 k_F d} \int_0^{k_F} d\bar{k} (k_F^2 - \bar{k}^2) \left\{ (1 - R_1 R_2 E_d^2) d + \frac{\bar{k} \lambda}{k_F} (E_d - 1) \left[(1 - R_1 R_2 E_d) + \frac{(E_d - 1)(R_1 + R_2)}{2} \right] \right\} \times \frac{1}{1 - 2 R_1^{1/2} R_2^{1/2} E_d \cos 2 \bar{k} d + R_1 R_2 E_d^2}, \quad (26)$$

式中 $E_d = \exp[-k_F d / (\bar{k} \lambda)]$. 仔细地分析上式的被积函数, 可发现它是周期为 π/d 的振荡函数, 且在 $\bar{k} = q_n$ 时, 被积函数有极大值. 为了方便地计算上式的积分, 可将其被积函数分为 n_c 个积分小区间, 每个小区间的积分范围是 $[q_n - \pi/2 d, q_n + \pi/2 d]$, 于是(26)式

的积分将变为 $\sum_{n=1}^{n_c} \int_{q_n - \pi/2 d}^{q_n + \pi/2 d} d\bar{k}$. 在每个小区间里, 除了 $\cos 2 \bar{k} d$ 函数变化很快外, 其余的一些变量函数, 诸如 $E_d(\bar{k})$, $R_1(\bar{k})$, $R_2(\bar{k})$ 都是变化很慢的, 可把这些函数中的变量 $\bar{k}$ 近似用 q_n 代替而视作常量, 有了以上的近似, 最后得到电导率为

$$\sigma = \sigma_i \left\{ 1 - \frac{\lambda}{4\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \times \frac{(1 - E_d)[2(1 - R_1 R_2 E_d) - (1 - E_d)(R_1 + R_2)]}{1 - R_1 R_2 E_d^2} \right\}, \quad (27)$$

式中

$$\sigma_i = N_e e^2 \lambda / k_F, \quad (28)$$

$$N_e = \frac{1}{2\pi d} \sum_{n=1}^{n_c} (k_F^2 - q_n^2). \quad (29)$$

(27) 式是本文得到的主要结果. 从该式的解析表达式看出当 $R_1 = R_2 = 1$ 时, 即不考虑两表面的粗糙散射, 易得 $\sigma = \sigma_i$, 所以(28)式的 σ_i 表示金属薄膜系统的杂质散射电导率公式. 通过比较大块金属的杂质散射电导率公式和电子数密度式, 即 $\sigma_0 = n_0 e^2 \lambda_0 / k_F$, $n_0 = k_F^3 / (3\pi^2)$, 发现(29)式的 N_e 表示金属薄膜的电子数密度. 另外当 $R_1 = R_2 = R$ 时, (27)式将成为

$$\sigma = \sigma_i \left\{ 1 - \frac{\lambda}{2\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \frac{(1-R)(1-E_d)}{1-RE_d} \right\}, \quad (30)$$

这即为文献[10]的结果.

从解析表达式(28), (29)和(9), 我们可分别作出杂质散射的电导率、电子数密度和电子的平均自由程随薄膜厚度 d 的变化曲线, 如图 2—图 4 所示. 从中可看出它们都是以 π/k_F 为周期随薄膜厚度 d 振荡. 另外, 通过比较它们曲线的振荡特征, 还可看出, 杂质散射电导率振荡主要由电子自由程振荡引起, 其根源在于电子的态密度的振荡^[12].

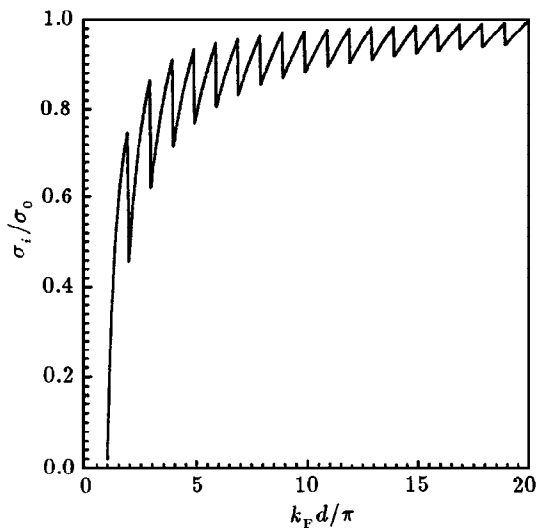


图 2 杂质散射的电导率 σ_i (以 σ_0 为单位) 随 $k_F d/\pi$ 变化曲线

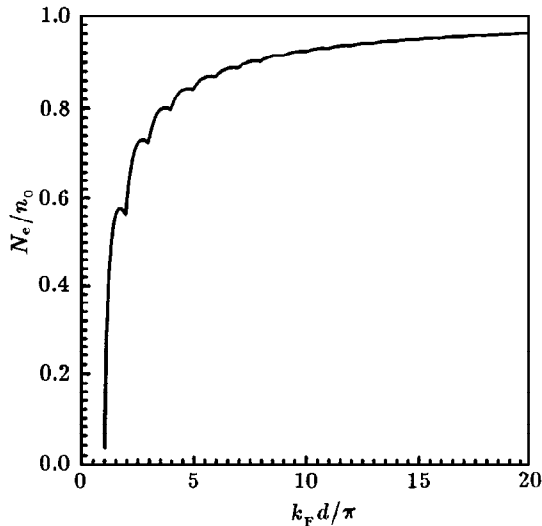


图 3 电子的数密度 N_e (以 n_0 为单位) 随 $k_F d/\pi$ 变化曲线

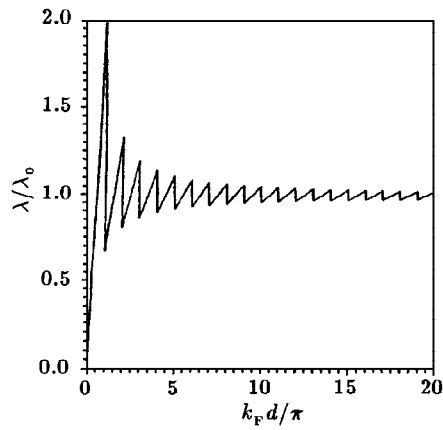


图4 电子的平均自由程 λ (以 λ_0 为单位)随 $k_F d/\pi$ 的变化曲线

在金属薄膜中,如不考虑杂质散射,认为 $\lambda \rightarrow \infty$,由(27)式可得仅有表面散射的电导公式:

$$\sigma_s = \frac{e^2}{4\pi} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{q_n} \frac{(1 + R_1)(1 + R_2)}{1 - R_1 R_2}. \quad (31)$$

从上式可作出表面散射电导率随膜厚的变化曲线,如图5所示.从图5可看出曲线也是以 π/k_F 为周期随薄膜厚度振荡,并且还发现随着表面粗糙度的降低,一方面表面散射的电

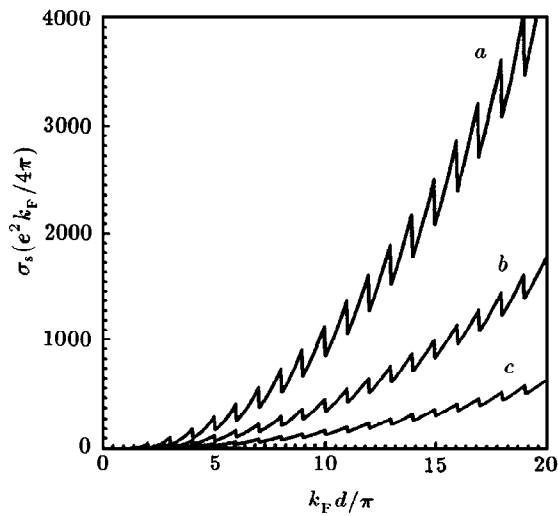


图5 表面散射的电导率(以 $e^2 k_F/4\pi$ 为单位)随 $k_F d/\pi$ 变化曲线 取 $k_F = 5.3 \text{ nm}^{-1}$; a 为 $\langle |f_1|^2 \rangle k_F^2 = 0 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle k_F^2 = 0.1 \text{ nm}^2$; b 为 $\langle |f_1|^2 \rangle k_F^2 = 0.05 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle k_F^2 = 0.2 \text{ nm}^2$; c 为 $\langle |f_1|^2 \rangle k_F^2 = 0.3 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle k_F^2 = 0.4 \text{ nm}^2$

导在加强,另一方面振荡的幅度亦在加强.随着 d 的增大,表面散射电导率振荡的幅度增大,这和杂质散射的电导振荡趋势是相反的.为了能看出整个系统的电导所表现出的物理特征,可从(27)式相应地作出在表面粗糙度取不同情况下,整个系统的电导率随薄膜厚度的变化曲线,如图6所示.

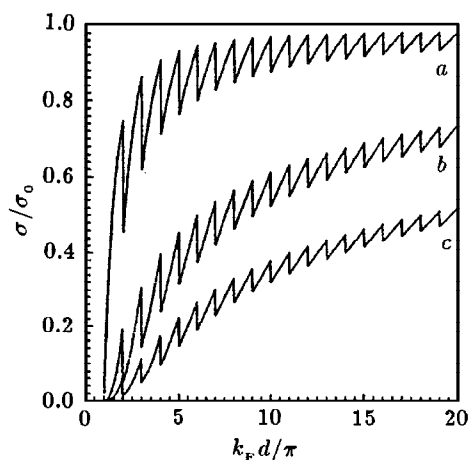


图6 来自杂质和表面散射的电导率 σ (以 σ_0 为单位) 随 $k_F d/\pi$ 的变化曲线 取 $\lambda_0 = 50 \text{ nm}$, $k_F = 5.3 \text{ nm}^{-1}$; a 为 $\langle |f_1|^2 \rangle > k_F^2 = 0 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle > k_F^2 = 0 \text{ nm}^2$; b 为 $\langle |f_1|^2 \rangle > k_F^2 = 0.08 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle > k_F^2 = 0.1 \text{ nm}^2$; c 为 $\langle |f_1|^2 \rangle > k_F^2 = 0.35 \text{ nm}^2$, $\langle |f_2|^2 \rangle > k_F^2 = 0.37 \text{ nm}^2$

5 讨 论

我们得到了薄膜系统的各种散射的电导公式,由于考虑了量子尺寸效应,所以各种散射电导都具有周期性的振荡特征.下面针对(27)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,电子的能级由原来的分立能级变为连续谱.令 $\mu = q_n/k_F$, 作为连续变量,(27)–(30)式对 n 的求和将变成对 μ 的积分,其积分区间近似为从 0 到 1.这样容易得到 $N_e = k_F^3/(3\pi^2) = n_0$, $\sigma_i = e^2 k_F^2 \lambda_0/(3\pi^2)$ 的经典电子论的结果.同时(27)式变为

$$\sigma = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{3\lambda_0}{2d} \int_0^1 d\mu (1 - \mu^2) \mu \frac{(1 - E_d)[2(1 - R_1 R_2 E_d) - (1 - E_d)(R_1 + R_2)]}{2(1 - R_1 R_2 E_d^2)} \right\}, \quad (32)$$

式中 $E_d = \exp[-d/(\lambda_0 \mu)]$, $R_1 = \left(\frac{1 - \mu k_F Q_1}{1 + \mu k_F Q_2} \right)^2$, $R_2 = \left(\frac{1 - \mu k_F Q_2}{1 + \mu k_F Q_1} \right)^2$. 当 $R_1 = R_2 = R$ 时,即两表面的粗糙度相同时,(32)式成为

$$\sigma = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{3\lambda_0}{2d} \int_0^1 d\mu (1 - \mu^2) \mu \frac{(1 - R)(1 - E_d)}{1 - R E_d} \right\}. \quad (33)$$

上式和 Fuchs-Sondheimer^[6,7]用半经典方法所得的结果一致,唯一不同的是(33)式中的 R 依赖于粒子的入射角、表面粗糙度参数与薄膜的厚度,而文献[6,7]中则作为常数.

对于 $d \ll \lambda$ 情形,这时可以作近似 $E_d \approx 1 - \frac{k_F d}{q_n \lambda} + \frac{1}{2} \left(\frac{k_F d}{q_n \lambda} \right)^2$. 另外我们还考虑到表面粗糙度很小,把 Q_1, Q_2 视为小量,取 R_1 和 R_2 的最低阶近似,即 $R_1 \approx 1 - 4 q_n Q_1, R_2 \approx 1 - 4 q_n Q_2$. 在这些近似下, (27) 式成为

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi k_F d} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{\lambda^{-1} + 2 q_n^2 (Q_1 + Q_2) / (k_F d)}. \quad (34)$$

这一结果表明,在薄膜极限和表面散射的最低阶近似下,系统的总电导率等于各个子能级通道的电导率之和,而每个子能级通道的散射率是杂质和两个不同粗糙表面分别引起的散射率相加的结果. 这里 λ 是杂质散射导致的平均自由程,而参量 Q_1, Q_2 分别是两个表面粗糙的表征. 这样由(34)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和两个粗糙表面分别导致的电阻串联而成. 这里电阻率相加的 Matthiessen 规则只适用于每个子能级通道,而不适用于系统的整个电阻率,故(34)式可视为 Matthiessen 规则的推广形式.

(34)式所表示出的散射率简单相加的结果,是取薄膜极限和表面散射的最低阶近似的结果. 事实上,薄膜系统中还存在杂质与两个表面,以及两个表面之间散射的相干涉效应,表现为电导公式(27)中包含 λ, Q_1, Q_2 之间的交叉项. 一般情形下,电导公式(27)不能约化为(34)式的简单形式,系统总电阻也就不能等价简单的电阻串、并联网络. 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 Matthiessen 规则的完全失效.

由于本文所得的电导率公式是运用量子统计的格林函数方法推出的,该公式跟其他量子方法所得的电导公式^[8,9]有着必然的联系. 为了使这点清楚起见,将(18)式代入(34)式可得

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi k_F d} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{\frac{1}{\lambda} + \frac{\pi^4 n_c (n_c + 1) (2 n_c + 1) (\langle |f_1|^2 \rangle + \langle |f_2|^2 \rangle)}{6 k_F d^6} n^2}. \quad (35)$$

通过比较(35)式和文献[9]的(4.13)式,可发现当取(35)式中的 $\langle |f_1|^2 \rangle = 0, \langle |f_2|^2 \rangle = \langle |f|^2 \rangle$, $k_F d / \pi = n_c$ 及 $\langle |f|^2 \rangle k_F^2 = (\Delta \delta)^2$, (35)式就过渡到文献[9]的(4.13)式. 进一步令 $\lambda \rightarrow \infty$, 它过渡到文献[9]的(4.12)式(仅有表面散射的电导率表示式). 另外,我们也发现同样的极限情况下(35)式可以过渡到文献[8]的(13)式. 因此,文献[8,9]中的结果仅是本文所得的(27)式在 $d \ll \lambda$ 极限和取表面散射的最低阶近似下的结果. 本文的讨论表明,文献[6—10]中的一系列金属薄膜的电导公式是本文所得的电导公式在特殊情形下的结果.

- [1] H. E. Camblong and P. M. Levy, *Phys. Rev. Lett.*, **69**(1992), 2835.
- [2] P. M. Levy, S. Zhang and A. Fert, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 1643; S. Zhang, P. M. Levy and A. Fert, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 8689.
- [3] L. Sheng and D. Y. Xing, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 1001.

- [4] M.N.Baibich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 2474.
- [5] G.Binasch *et al.*, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 4828.
- [6] K.Fuchs, *Proc. Cambridge. Philos. Soc.*, **34**(1983), 100.
- [7] E.H.Sondheimer, *Adv. Phys.*, **1**(1952), 1.
- [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), 7325.
- [11] G.D.Maham, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 1981), p. 602.
- [12] M.L.Elinson *et al.*, *Thin Solid Films*, **12**(1972), 383.

QUANTUM TRANSPORT THEORY IN METALLIC FILMS

DONG ZHENG-CHAO^{a)b)} SHENG LI^{a)} XING DING-YU^{a)c)} DONG JIN-MING^{a)}

^{a)}(Department of Physics, State Key Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093)

^{b)}(Department of Physics, Huaiyin Teacher's College, Huaiyin 223001)

^{c)}(State Key Laboratory of Magnetism, Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080)

(Received 27 February 1996)

ABSTRACT

Using Green's function approach and the Kubo formula, have studied the electronic transport in metallic films. Taking into account the quantum size effects and the scattering of impurities and two rough surfaces, we calculate the one-particle Green's functions and the in-plane conductivity. It is found that (1) the density of electrons, the impurity mean free path, and the conductivity in a metallic film show oscillations as a function of its thickness with a period of half the Fermi wavelength; (2) under the approximation of the lowest order in the surface scattering, the conductivity formula obtained can reduce to the quasiclassical result suitable for thick films as well as the previous quantum formula for thin films.

PACC: 7210; 7215; 7360D