

相干平行板电容器对外场的动态响应^{*}

全 军¹⁾ 刘一星²⁾ 余亚斌^{1)†}

1) (湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082)

2) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

(2009 年 5 月 17 日收到; 2009 年 6 月 12 日收到修改稿)

基于介观体系动态响应的自洽理论, 讨论了介观相干平行板电容器的电容. 结果表明相干电容器的电容对外场频率有很强的依赖关系, 并且是随频率变化的复变函数. 该电容随频率的变化关系呈现出一个非常有意义的特性, 即电容虚部曲线有一个较尖锐的峰, 它正好与电容实部的极小位置相对应, 而进一步研究发现它们与该电容体系中的类等离子体激发相联系. 另外, 也讨论了介观电容的尺寸效应, 发现当极板间距很大时, 电容值和宏观的几何电容结果趋于一致.

关键词: 相干平行板电容器, 类等离子体激发, 尺寸效应

PACC: 7210, 7335

1. 引言

纳米体系中的动态输运特性, 因其重要的理论意义和潜在的应用价值而引起了广大研究者的兴趣^[1-11]. 对于动态输运特性来说, 电子之间的相互作用扮演着十分重要的角色^[1-3, 12]. 然而, 对于电子间相互作用的处理往往都是基于低频极限, 或借助引入与频率无关的几何电容系数来描述^[1, 2]. 在文献[13]中, 我们利用动态自洽场方法处理电子间相互作用, 得到了一组描述系统内电荷密度和内部势函数对交变外场响应的理论公式. 在宏观和微观情形下, 平行板电容器的电容由其几何条件和极板间的介电常数决定, 但是对于介观系统, 由于受量子相干性影响^[1, 2, 12], 其电容不再仅仅由这两个参数决定. 理论研究表明该电容的量子修正主要受电极中载流子的有限态密度和电子与电子相互作用的有限屏蔽长度影响^[1, 13-15]. Büttiker 等^[2, 12, 16]得到了低频情形下的电容微观表达式. Gabelli 等^[17]从实验上测量了‘两板’电容器系统的交流电导, 其结果与 Büttiker 所预言的一致. 和 Büttiker 一样, Gabelli 等在计算时所引入的几何电容参数和量子电容都是与频率无关的. 最近, Wang 等^[18]报道了有关 Gabelli 等实验中电容系统的理论研究, 并计算了依赖于外

场频率的量子电容. 然而在他们的计算中, 仍然引入了与频率无关的几何电容参数.

本文的主要目的是在我们以前工作^[13]基础上进一步研究介观电子器件中的电容特性. 计算了电容与外加交变电场频率的依赖关系, 表明即使这样一个简单的平行板电容器, 其电容与该频率仍然有较强的依赖关系. 为了研究电容器的尺寸效应, 我们还讨论了该电容与其极板距离的关系, 并且发现在极板间距很大时, 其值趋近于宏观几何电容. 此外, 我们还可以从电容随频率变化的曲线中得到一些重要特性: 对应于电容的实部的最小值处, 其虚部呈现一个峰值, 两者与电容体系中类等离子体激发相关联, 虚部的峰值和实部的最小值的位置接近类等离子体激元的振动频率.

2. 理论模型与计算方法

考虑如图 1 所示的相干平行板电容器, 该电容器可简化为两相干的且表面积很大的导体, 各占据半空间 $x < 0$ 和 $x > a$ 的区域, 我们假设图中区域 Ω (图中虚线所示) 包含整个介观电容器以及部分理想导线(电子库), 该区域相对于该电容器而言尺寸充分大, 以致包含体系所有的势函数和电荷的变化, 这就意味着所有电场在该区域出发且终止于该

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10774041)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: apybyu@hnu.cn

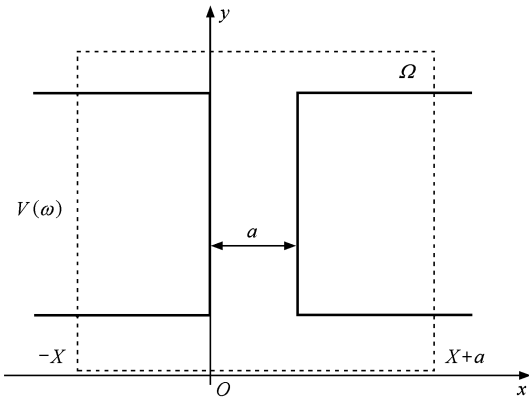


图1 相干平行板电容器示意图

区域,同时忽略边缘效应,把该系统视为一维问题来处理.

该相干平行板电容器的电容 $C_\mu(\omega)$ 定义为^[13]

$$C_\mu(\omega) = \frac{\delta Q(\omega)}{\delta V(\omega)} = A \int_{-\infty}^0 \rho(x, \omega) dx$$

$$= A \int_a^\infty \rho(x, \omega) dx, \quad (1)$$

式中, $\delta Q(\omega)$ 为体系内积累的电荷, $\rho(x, \omega)$ 是当该电容器上外加偏电压 $\delta V(\omega)$ 时其极板上的感应电荷密度, ω 为该电压的频率, a, A 分别为该电容器两极板间的距离和极板面积. 将泊松方程 $\rho(x, \omega) = -\varepsilon_0 \frac{\partial^2 u(\omega, x)}{\partial x^2}$ 代入(1)式,那么电容又可表示为

$$C_\mu(\omega) = -\varepsilon_0 A \frac{du(\omega, 0)}{dx} = \varepsilon_0 A \frac{du(\omega, a)}{dx}, \quad (2)$$

式中, $u(x, \omega)$ 为与外场频率有关的特征势且满足下列方程:

$$\frac{d^2 u(\omega, x)}{dx^2} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_\Omega dx' \Pi(x, x', \omega) u(\omega, x')$$

$$= -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho^{\text{ext}}(\omega, x), \quad (3)$$

其边界条件为

$$u(\omega, x) = \begin{cases} 1 & (x = -X), \\ 0 & (x = X + a). \end{cases}$$

(3) 式中, $\rho^{\text{ext}}(\omega, x)$ 表示由外场所引起的电荷密度, $\Pi(x, x', \omega)$ 为 Lindhard 函数. 为与宏观或微观电容相比较,我们将电容用如下约化, $C_\mu(\omega)/C_0 \rightarrow C_\mu(\omega)$, 其中 $C_0 = \varepsilon_0 A/a$ 为平行板电容器电容的经典定义式. 为简化计算,我们在后续讨论中采用有效玻尔半径 $a_0 = 4\pi\varepsilon_0 \hbar^2/m^* e^2$, $\Delta = \hbar^2/2m^* a_0^2$, $\Delta/\hbar$ 和 $1/a_0$ 分别作为长度、能量、频率以及波矢的单位. m^* 是电子有效质量.

对于上述模型,从左边和右边的入射电子本征波函数分别表示为

$$\psi_{km}^1(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2\varphi_m(y, z) \sin(kx) & x < 0, \\ 0 & \text{其他}, \end{cases} \quad (4)$$

$$\psi_{km}^2(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2\varphi_m(y, z) \sin(k(x-a)) & x > a, \\ 0 & \text{其他}, \end{cases}$$

其中 $\varphi_m(y, z)$ 为电子横向波函数. 由文献[13]可知, $\rho^{\text{ext}}(\omega, x)$, $\Pi(x, x', \omega)$ 这两个量的虚部和实部分别表示为

$$\text{Im} \rho^{\text{ext}}(x, \omega) = \begin{cases} \frac{e^2}{\hbar} \int dE \int d\varepsilon_m \left[\frac{m^* A \rho_m(E, E + \hbar\omega, x)}{2\pi \hbar v_m(E) v_m(\hbar\omega + E)} \right. \\ \left. \times I_m(E + \hbar\omega, E, x) \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \right] & (x < 0), \\ 0 & (x \geq 0), \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{Re} \rho^{\text{ext}}(x, \omega) = \frac{2}{\pi} P \int \frac{v \text{Im} \rho^{\text{ext}}(x, \omega)}{v^2 - \omega^2} dv. \quad (6)$$

$$\text{Im} \Pi(x, x', \omega) = \begin{cases} \int dE \int d\varepsilon_m \left\{ \frac{m^* A}{2\pi \hbar v_m(E) v_m(\hbar\omega + E)} \rho_m(E, E + \hbar\omega, x) \right. \\ \left. \times \rho_m(E + \hbar\omega, E, x') [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \right\} & (x \leq 0 \text{ 或 } x' \leq 0), \\ \int dE \int d\varepsilon_m \left\{ \frac{m^* A}{2\pi \hbar v_m(E) v_m(\hbar\omega + E)} \rho_m(E, E + \hbar\omega, x-a) \right. \\ \left. \times \rho_m(E + \hbar\omega, E, x'-a) [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \right\} & (x \leq a \text{ 或 } x' \leq a), \\ 0 & (\text{其他}), \end{cases} \quad (7)$$

$$\text{Re}\Pi(x,x',\omega) = \frac{2}{\pi}P\int v \frac{\text{Im}\Pi(x,x',\omega)}{v^2 - \omega^2}dv. \quad (8)$$

上述各式中, $\rho_m(E,E',x)$ 和 $I_m(E,E',X)$ 为

$$\rho_m(E,E',x) = \cos\{[(k_m(E) - k_m(E'))x]\} - \cos\{[(k_m(E) + k_m(E'))x]\}, \quad (9)$$

$$I_m(E,E',X) = [v_m(E') - v_m(E)] \times \sin\{[k_m(E) + k_m(E')]X\} - [v_m(E') + v_m(E)] \times \sin\{[k_m(E) - k_m(E')]X\}, \quad (10)$$

其中 $k_m(E) = \sqrt{2m^*(E - \varepsilon_m)/\hbar}$, $v_m(E) = \sqrt{2(E - \varepsilon_m)/m^*}$, ε_m 为横向能量本征值. 联立上述各式, 可求得体系的电容.

3. 数值结果与讨论

3.1. 电容与外场频率的关系

图 2 表示在不同的费米波数 $k_F = 0.2, 0.3, 0.4$ 下电容随外场频率的变化曲线, 此时极板间距 $a = 10$.

图 2 (a), (b) 分别对应电容的实部 $C_R = \text{Re}[C_\mu(\omega)]$ 和虚部 $C_I = \text{Im}[C_\mu(\omega)]$. 从图中曲线来看, 随着外场频率的变化, C_R 呈现一定的振荡且有最大值和最小值, 而虚部 C_I 有一个峰值. 但是当外场频率较大时, C_R 基本保持不变, 而 C_I 趋近于零. 同时, 随着费米能的增加, 电容实部的最大值、最小值以及电容虚部的峰值的位置都向高频端移动. 值得注意的是, 电容虚部峰值的位置非常接近电容实部的最小值所在位置, 我们认为该现象应该和屏蔽区域的等离子体振荡相关联, 在本文后面我们将接着讨论该问题. 我们得到的结果和文献[18]给出的很相似, 但是对于简单的平行板电容器的电容而言, 我们的结果中电容的实部没有负值(负电容)出现. 另外, 我们的结果还表明, 随着费米能的增加, 电容的实部单调增加, 这是因为费米能增加, 相当于增加系统的电子密度, 但是电容的虚部没有该特性. 由此我们得到如下结论: 随着载流子的态密度增加, $C_R(\omega)$ 亦增加, 但载流子态密度的变化对 $C_I(\omega)$ 影响不大. 实际上, 增加电子密度, 屏蔽效应增强, 屏蔽长度变小. 为了解释该特性, 我们在图 3 中给出了在外场频率($\omega = 0.1$)一定的情形下电

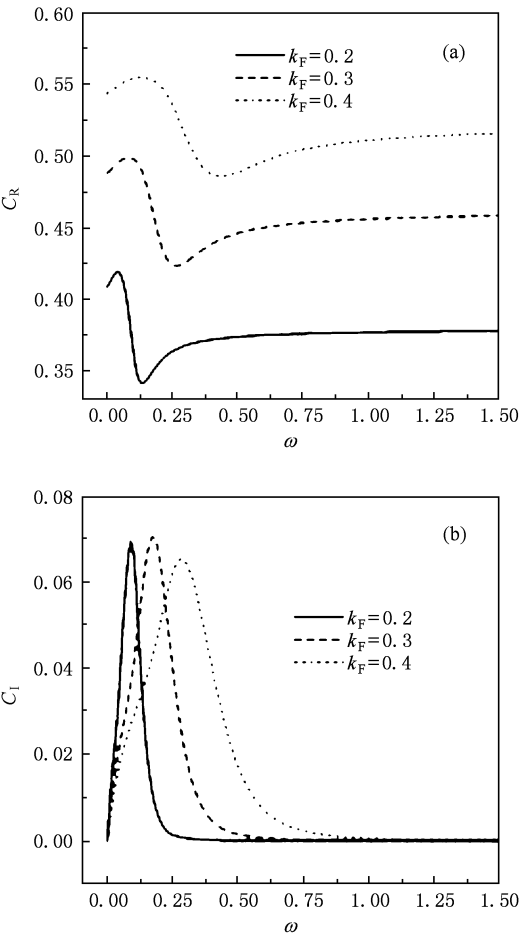


图 2 电容随外场频率的变化曲线 (a) 实部, (b) 虚部

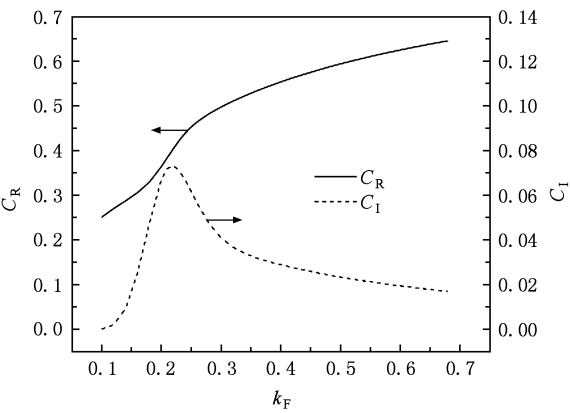


图 3 外场频率 $\omega = 0.1$ 时, 体系电容随费米波数的变化曲线

容随费米波数的变化曲线.

此外, 如上所述, 对于每个给定的费米波数, $C_R(\omega)$ 都将会有一个最大值和最小值出现, 由此将会有两个特征频率 $\omega_{l_1}, \omega_{l_2}$ 对应于最强或最弱的电子屏蔽. 为了更详尽地说明与频率有关的屏蔽效

应,和文献[12]中讨论的一样,我们按如下公式也定义有效屏蔽长度 $\lambda_{\text{eff}}(\omega)$:

$$C_{\text{R}}(\omega) = \frac{\varepsilon_0 A}{a + 2\lambda_{\text{eff}}(\omega)}. \tag{11}$$

图 4 中,我们给出了不同的费米波数 k_{F} 下有效屏蔽长度 $\lambda_{\text{eff}}(\omega)$ 随外场频率的变化曲线. 如预期结果一样,该值随费米波数的增加而减小,而需要着重指出的是,该有效屏蔽长度曲线中确实有峰值出现,我们相信该峰值位置对应一与等离子体激发类似的准粒子激发. 值得注意的是,最强屏蔽效应并没有出现在频率为零的情况,而是出现在一个有限频率处.

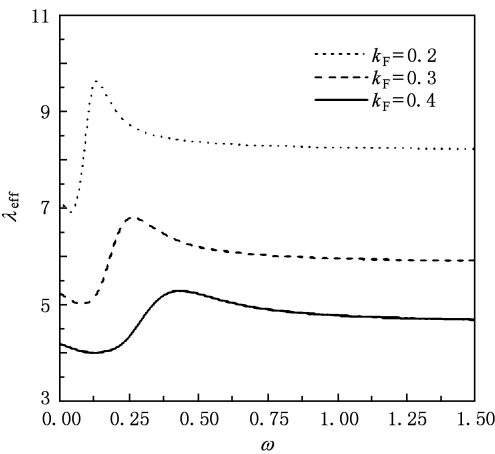


图 4 有效屏蔽长度 λ_{eff} 随外场频率 ω 的变化曲线

以上计算结果也可以等价为一个经典的 RC 电路. 在该 RC 电路中, 电容 $C(\omega)$ 与电荷弛豫电阻 $R_{\text{q}}(\omega)$ 串联, 其动态电导定义为

$$G(\omega) = -\frac{i\omega C}{1 - i\omega R_{\text{q}} C} = -\frac{C + i\omega R_{\text{q}} C^2}{1 + \omega^2 R_{\text{q}}^2 C^2}. \tag{12}$$

比较(12)式与 $G(\omega) = -i\omega C_{\mu}(\omega)$ 式可得

$$C(\omega) = C_{\text{R}} \left(1 + \frac{C_{\text{I}}^2}{C_{\text{R}}^2} \right),$$
$$R_{\text{q}}(\omega) = \frac{C_{\text{I}}}{\omega C_{\text{R}}^2 \left(1 + \frac{C_{\text{I}}^2}{C_{\text{R}}^2} \right)}. \tag{13}$$

图 5 表示等价电容 C 和电荷弛豫电阻 R_{q} 随外场频率的变化曲线, 此时费米波数 $k_{\text{F}} = 0.3$, 极板间距 $a = 10$. 这里我们取 $\hbar/C_0\Delta$ 和 $\hbar/\Delta$ 分别为电阻和时间的单位.

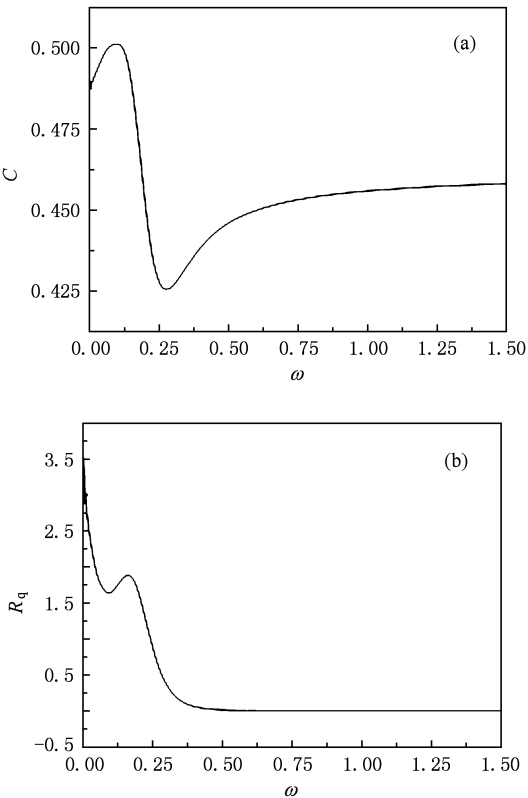


图 5 等价电容 C 和电荷弛豫电阻 R_{q} 随外场频率的变化曲线
(a) 等价电容随外场频率的变化, (b) 电荷弛豫电阻随外场频率的变化

3.2. 电容与极板距离的关系

为了详尽说明相干电容的尺寸效应, 我们讨论了在不同外场频率下电容随极板间距的变化情况, 结果如图 6 所示. 从图中可以看出当极板间距与有效屏蔽长度 $\lambda_{\text{eff}}(\omega)$ 接近时, 其实部 $C(\omega)$ 与经典的电容 $C_0 = \varepsilon_0 A/a$ 有很大的区别, 但当极板间距远大

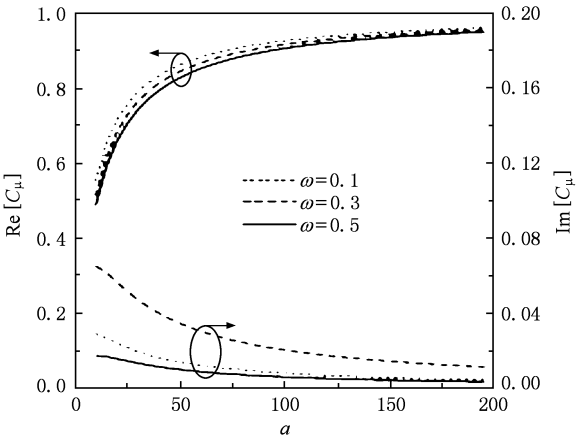


图 6 体系电容随平行板电容器极板间距的变化曲线

于有效屏蔽长度时,其值比较接近经典值.图 6 表明电容的实部随着极板间距增加而增加,而且当极板间距远大于有效屏蔽长度时接近经典电容 $C_0 = \varepsilon_0 A/a$. 电容虚部随着极板间距增加而减小,而且当极板间距远大于有效屏蔽长度时趋近零.这表明当极板间距很大时,相干电容即为几何电容.

3.3. 相干平行板电容器中的等离子体振荡

众所周知,在体材料中相互作用的电子气存在等离子体激发,然而在我们所讨论的相干平行板电容器里面是否也有和电子集体运动相关联的准粒

子激发? 为了讨论这个问题,我们从没有外场时的(3)式出发,即

$$\frac{d^2 u(\omega, x)}{dx^2} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_{\Omega} dx' \Pi(x, x', \omega) u(\omega, x') = 0,$$

(14)

以及边界条件

$$u(\omega, -X) = u(\omega, X + a) = 0.$$

(15)

将(14)式离散化,可得

$$\sum_{k'} M(x_k, x_{k'}, \omega) u(\omega, x_{k'}) = 0,$$

(16)

式中

$$M(x_k, x_{k'}, \omega) = \begin{cases} (\Delta x)^3 \Pi(x_k, x_{k'}, \omega) / \varepsilon_0 - 2 & (k = k'), \\ (\Delta x)^3 \Pi(x_k, x_{k'}, \omega) / \varepsilon_0 + 1 & (k = k' \pm 1), \\ (\Delta x)^3 \Pi(x_k, x_{k'}, \omega) / \varepsilon_0 & (\text{其他}). \end{cases}$$

(17)

类等离子体激发的频率近似地由方程 $\det[M(x_k, x_{k'}, \omega)] = 0$ 决定. 由于一般情况下 $\text{Im}\{\det[M(x_k, x_{k'}, \omega)]\}$ 都不为零,该激发是衰减的. 原则上我们可以运用式 $\det[M(x_k, x_{k'}, \omega - i\gamma_p)] = 0$ 得到等离子体激发频率 ω_p 和衰减率 γ_p . 然而该方程不易求解,因为当 ω 为复数时,(7)式所给出的 Lindhard 函数不再适用. 而且这里我们也并不试图得到 ω_p 和 γ_p 的严格解,而只是定性讨论该等离子体激发及其对电容系统的动态电导所起的作用. 这样我们可利用下面的式子求出 ω_p 和 γ_p 的近似值,即

$$\text{Re}\{\det[M(x_k, x_{k'}, \omega)]\} = 0,$$

(18)

$$\gamma_p = \left\{ \frac{\partial \text{Re}[\det(M(x_k, x_{k'}, \omega))]}{\partial \omega} \right\}^{-1} \times \text{Im}[\det(M(x_k, x_{k'}, \omega))].$$

(19)

在给定费米波数的条件下,我们通过求解(18)式并得到了两个零点 $\omega_1, \omega_2 (\omega_1 < \omega_2)$,但是当频率为 ω_1 时, $\gamma_p(\omega_1) < 0$,这个解没有物理意义,因为其对势函数 $u(t, x)$ 是发散的. 而 $\gamma_p(\omega_2) > 0$,故 ω_2 即为近似的等离子体振荡频率 ω_p . 在图 7 中,我们给出了 ω_p, γ_p 随费米波数 k_F 变化的曲线. 比较图 2, 4 和 7, 我们发现在给定费米能时, $C_1(\omega)$, $\lambda_{\text{eff}}(\omega)$ 的峰值和最小值正好对应 ω_p . 这充分说明这些峰值与系统中的类等离子体激发有关. 因此,对于介观纳米体系,电子气的类等离子体振荡对于

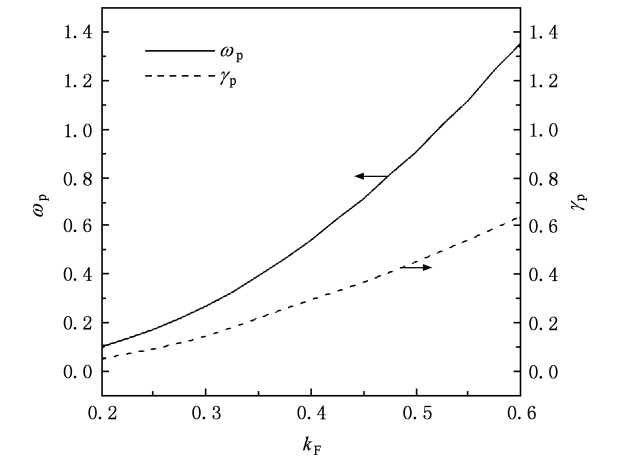


图 7 ω_p, γ_p 随费米波数 k_F 变化曲线

高频交流动态输运起着重要作用,因而应该引起更多的关注.

4. 结 论

基于介观体系动态输运的自洽理论,进一步研究了介观相干电容器对外场的动态响应. 所得计算结果表明,即使对于简单的平行板电容器,电容与外场的频率也有着很明显的依赖关系. 我们从电容随频率变化关系的曲线中可以得到一个很重要的特性:电容虚部的峰值位置正好对应电容实部的最

小位置,而且两者都和类等离子体振荡相关,电容虚部的峰值和电容实部的最小值位置都近似等于等离子体振荡频率 ω_p . 而这类等离子体振荡是衰减的,并且寿命很短. 我们对介观电容器的尺寸效应

也进行了讨论,并且发现:当极板间距与有效屏蔽长度接近时,电容器的电容与宏观几何电容值有很大差别;而在极板间距离远大于有效屏蔽长度时,其值趋近于宏观几何电容.

-
- [1] Christen T, Büttiker M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 143
 - [2] Büttiker M, Prêtre A, Thomas H 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 4114
 - [3] Prêtre A, Thomas H, Büttiker M 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8130
 - [4] Fernando C L, Frensley W R 1995 *Phys. Rev. B* **52** 5092
 - [5] Wang J, Guo H 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7572
 - [6] Liu H C 1991 *Phys. Rev. B* **43** 12538
 - [7] Zhao X A, He J H 2004 **53** 1201 (in Chinese) [赵学安、何军辉 2004 物理学报 **53** 1201]
 - [8] Dong Z C 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 511 (in Chinese) [董正超 1999 物理学报 **48** 511]
 - [9] Xu H, Song W P 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1798 (in Chinese) [徐 慧、宋伟璞 2002 物理学报 **51** 1798]
 - [10] Jauho A P, Wingreen N S, Meir Y 1994 *Phys. Rev. B* **50** 5528
 - [11] Büttiker M 2000 *J. Low Temp. Phys.* **118** 519
 - [12] Büttiker M 1993 *J. Phys.: Condens. Mat.* **5** 9361
 - [13] Yu Y B, Liu Q H, Quan J, Tang Y H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 115329
 - [14] Wang J, Guo H, Mozos J S, Wan C C, Taraschi G, Zheng Q R 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4277
 - [15] Zhao X, Wang J, Guo H 1999 *Phys. Rev. B* **60** 16730
 - [16] Büttiker M, Martin A M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2737
 - [17] Gabelli J, Fève G, Berroir J M, Placais B, Cavanna A, Etienne B, Jin Y, Glatthi D C 2006 *Science* **313** 499
 - [18] Wang J, Wang B G, Guo H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 155336

Dynamic response of the coherent parallel-plate capacitor to the external field^{*}

Quan Jun¹⁾ Liu Yi-Xing²⁾ Yu Ya-Bin^{1)†}

1) (School of Physics and Microelectronics Science, Hunan University, Changsha 410082, China)

2) (School of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 17 May 2009; revised manuscript received 12 June 2009)

Abstract

We discuss the capacitance of a coherent mesoscopic parallel-plate capacitor based on the self-consistent theory of dynamic response for mesoscopic systems. The results show that the capacitance is a complex function of frequency which is strongly dependent on the frequency of the external field. The capacitance-frequency curve shows a significant characteristic that a peak in the imaginary part of the capacitance corresponds to the minimum in the real part, and further study shows that they are related to a plasmon-like excitation. In addition, we discuss the size effect of the capacitor, and find that the capacitance approaches geometric capacitance when the distance between two plates of the capacitor is very large.

Keywords: coherent parallel-plate capacitor, plasmon-like excitation, size effect

PACC: 7210, 7335

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774041).

[†] Corresponding author. E-mail: apybyu@hnu.cn