

# 基于自洽输运理论的介观体系动态电导的研究\*

全 军<sup>1)2)</sup> T. C. Au Yeung<sup>2)</sup> 邵乐喜<sup>1)†</sup>

1) (湛江师范学院物理科学与技术学院, 湛江 524048)

2) (南洋理工大学电子电气工程学院, 新加坡 639798)

(2010年11月9日收到; 2011年3月16日收到修改稿)

基于介观体系电子动态输运的自洽理论, 讨论了介观结构的动态电导. 作为该理论的应用, 采用一介观相干平行板电容器模型来进行研究. 结果表明: 体系的动态电导与外场频率和体系费米能有关, 为一复数且有有限虚部. 当外场频率较小时, 动态电导随费米能的变化所呈现的特性和直流情形非常相似, 但是随着外场频率的增加, 两者差异就变得非常明显, 体系动态电导随外场频率的变化呈现一些峰值结构. 在给定体系费米能时, 动态电导随着外场频率的变化而产生振荡, 并且出现了负的电导虚部, 电导虚部的正负表明了体系的电容特性和电感特性.

**关键词:** 自洽输运理论, 相干平行板电容器, 电导, 介观体系

**PACS:** 72.10.-d, 73.23.-b

## 1. 引言

介观体系中的电子动态输运特性, 因其重要的理论意义和潜在的应用价值而引起了越来越多研究者的兴趣<sup>[1-6]</sup>. 对于动态输运情形, 电子间的相互作用扮演着十分重要的角色<sup>[1-3, 7-12]</sup>, 然而在大多数文献中, 对于这些相互作用的处理往往都是基于低频极限或靠唯象地引入与频率无关的几何电容方案<sup>[2, 3]</sup>, 因此很多有关介观体系动态电导的理论结果与实验不符或未被实验所证实, 特别是外场(或外部电压)频率较高时. 另外, 许多理论研究表明介观体系电导不仅仅由材料和几何尺度等因素来决定<sup>[1, 2, 12]</sup>, 而需要考虑量子修正, 并且电导的量子修正主要受电极中载流子的有限态密度和电子间相互作用的有限屏蔽长度影响<sup>[1, 10-12]</sup>. 最近, Gabelli等<sup>[13]</sup>从实验上得到了“两板”电容器系统的交流电导, 其结果与 Büttiker等<sup>[2, 3]</sup>所预言的一致, 但是 Gabelli等在计算和讨论时所引入的几何电容参数和量子电容都与频率无关. 随着现代微加工技术的快速发展, 微型电子器件的加工尺度已达到纳米级, 应用在电子技术上的电子器件将来往往都是处在交流电压或电流等

动态工作环境, 因而非常有必要研究电子器件等介观体系在动态情形下的输运机制, 特别是动态电导的研究对高速电子器件的设计更为重要. 在我们的早期工作中<sup>[14]</sup>, 基于无规相近似和标准的线性响应理论, 利用动态自洽场方法得到了一般的介观体系电子动态输运的自洽理论, 给出了介观体系对外场的动态响应以及对内部势的非局域响应而不需要其他额外的参数, 而且电流(电荷)守恒和电势平移下的规范不变性很自然地满足. 运用该理论, 我们讨论了介观相干平行板电容器的电荷和内部特征势、体系动态电容等<sup>[14-16]</sup>. 本文的主要目的就是在我们以前工作的基础上进一步讨论介观电子器件中的动态电导特性, 并采用介观相干平行板电容器模型来进行研究. 结果表明: 外场频率和体系费米能对动态电导有明显的影响, 并且电导为一复数且有有限虚部; 当外场频率很低时, 所得结果和直流情形比较一致, 但随着外场频率的变化, 电导呈现一系列的峰值结构. 另外, 在给定费米能时, 体系电导随外场频率的变化而有一定的振荡, 和直流情形不同的是电导矩阵的非对角元不为零, 并且电导虚部可以为负数, 电导虚部的正负表明了体系的电容特性和电感特性.

\* 广东省高等学校优秀青年创新人才培养计划(批准号:LYM10098)和湛江师范学院博士科研基金(批准号:ZL1004)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: ntu\_submit@yahoo.cn

## 2. 基本理论与模型

### 2.1. 基本理论

当在介观体系某一电极或引线  $\alpha$  上施加一与频率有关的电压  $V_\alpha(\omega)$  时, 体系内部特征势函数  $u_\alpha(\mathbf{r}, \omega)$  可表示为<sup>[14]</sup>

$$\begin{aligned} \Delta u_\alpha(\mathbf{r}, \omega) + \frac{1}{\varepsilon_0} \int d\mathbf{r}' \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) u_\alpha(\mathbf{r}', \omega) \\ = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho_\alpha^{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \\ = e^2 \int dK dK' \frac{\psi_K^*(\mathbf{r}) \psi_{K'}(\mathbf{r}) \psi_{K'}^*(\mathbf{r}') \psi_K(\mathbf{r}')}{(E_{K'} - E_K)(\hbar\omega + E_K - E_{K'} + i0^\dagger)} \\ \times [f(E_K) - f(E_{K'})] \end{aligned} \quad (2)$$

为 Linhard 函数. 这里  $\psi_K(\mathbf{r})$  为电子本征波函数. (2) 式中的积分表示对连续能量积分, 对离散量子态求和, 并且

$$\begin{aligned} \rho_\alpha^{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega) \\ = i\hbar e^2 \int dK dK' \frac{\psi_K^*(\mathbf{r}) \psi_{K'}(\mathbf{r}) I_{KK'}(\beta)}{(E_{K'} - E_K)(\hbar\omega + E_K - E_{K'} + i0^\dagger)} \\ \times [f(E_K) - f(E_{K'})] \end{aligned} \quad (3)$$

是由外场所引起电荷密度响应. 这里  $I_{KK'}(\beta)$  为引线  $\beta$  中沿电子传播方向上的粒子数密度, 即

$$\begin{aligned} I_{KK'}(\beta) = \frac{\hbar}{i2m} \int dy_\beta \left[ \psi_K^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_\beta} \psi_{K'}(\mathbf{r}) \right. \\ \left. - \psi_{K'}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_\beta} \psi_K^*(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

引线  $\beta$  中对电压  $V_\alpha(\omega)$  的响应, 即体系总动态电导  $G_{\alpha\beta}(\omega)$  可表示为

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = G_{\alpha\beta}^{\text{ext}}(\omega) + \int_\Omega d\mathbf{r} g_\alpha(\mathbf{r}, \omega) u_\beta(\mathbf{r}, \omega). \quad (5)$$

(5) 式等号右边第一项为介观体系对外场的电流响应(一般称之为无相互作用电导), 可表示为

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{\text{ext}}(\omega) = i\hbar e^2 \int dK dK' I_{KK'}(\alpha) I_{KK'}(\beta) \\ \times \frac{f(E_K) - f(E_{K'})}{(E_{K'} - E_K)(\hbar\omega + E_K - E_{K'} + i0^\dagger)}; \end{aligned} \quad (6)$$

第二项为介观体系对内部势的电流响应(一般称之为相互作用电导), 其中

$$g_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = e^2 \int dK dK' I_{KK'}(\alpha) \rho_{KK'}(\mathbf{r})$$

$$\times \frac{f(E_K) - f(E_{K'})}{\hbar\omega + E_K - E_{K'} + i0^\dagger} \quad (7)$$

为局域电流响应函数.

### 2.2. 介观相干平行板电容器模型

如图 1 所示, 考虑两相干且表面积足够大的导体, 各占据半空间  $x < 0$  和  $x > a$  区域, 其等价于一介观相干平行板电容器模型. 假设图 1 中区域  $\Omega$  (虚线所围内部区域) 包含了整个相干导体以及部分理想导线(电子库), 并且相对于相干平行板电容器尺寸而言足够大, 以致包含了体系所有的势函数和电荷的变化, 这就意味着所有电场线从该区域出发而终止于该区域; 忽略边缘效应, 将其视为一维问题来处理, 那么体系内部特征势函数所满足的方程(1)可化为

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_1(\omega, x)}{dx^2} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_\Omega dx' \Pi(x, x', \omega) u(\omega, x') \\ = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho_1^{\text{ext}}(\omega, x), \end{aligned} \quad (8)$$

边界条件

$$u_1(\omega, x) = \begin{cases} 1 & (x = -X), \\ 0 & (x = X + a), \end{cases} \quad (9)$$

其中  $X$  为屏蔽区域边界.

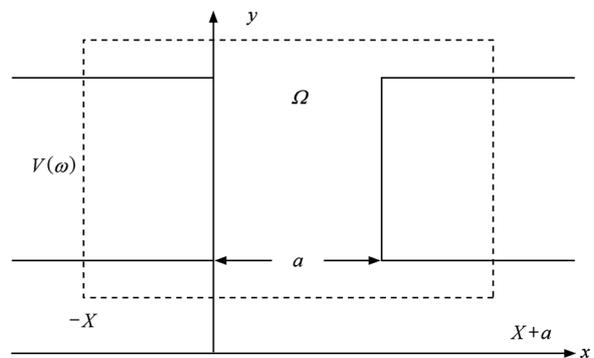


图 1 介观相干平行板电容器模型 虚线所围  $\Omega$  为屏蔽区域

对于上述模型, 假设从左、右两边入射的电子本征波函数分别为

$$\begin{aligned} \psi_{km}^L(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2\phi_m(y, z) \sin(kx) & (x \leq 0), \\ 0 & (x > 0), \end{cases} \\ \psi_{km}^R(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2\phi_m(y, z) \sin(k(x-a)) & (x \geq a), \\ 0 & (x < a), \end{cases} \end{aligned} \quad (10)$$

其中  $\phi_m(y, z)$  为电子的横向波函数,  $k$  和  $m$  分别为波数和可能的离散量子态.

将(10)式代入(2)式,那么当  $x < 0, x' < 0$  且温度  $T = 0$  时, Linhard 函数的虚部为

$$\begin{aligned} & \text{Im}\Pi(x, x', \omega) \\ &= \frac{m^* e^2 A k_F^2}{h^2} \int_0^{k_F} dk \left\{ \left[ \theta(k^2 - \omega) \frac{1}{\nu} \sin \nu x \sin \nu x' \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{1}{\mu} \sin \mu x \sin \mu x' \right] \right. \\ & \quad \left. \times (k_F^2 - k^2) \sin kx \sin kx' \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中  $\theta$  和  $k_F$  分别为阶跃函数和费米波数,  $A$  为电容

器两极板正对面积,

$$\begin{aligned} \mu &= \sqrt{k^2 + \hbar\omega}, \\ \nu &= \sqrt{k^2 - \hbar\omega}. \end{aligned}$$

由 Kramers-Krönig 关系有

$$\text{Re}\Pi(x, x', \omega) = -\frac{2\omega P}{\pi} \int \frac{\nu \text{Im}\Pi(x, x', \nu)}{\nu^2 - \omega^2} d\nu, \quad (12)$$

其中  $P$  为积分主值.

当  $x > a, x' > a$  时, Linhard 函数可根据体系对称性而得到.

将(10)式代入(3)和(4)式,则有

$$\text{Im}\rho_1(x, \omega) = \begin{cases} \frac{m^* A e^2}{h^2} \int dE d\varepsilon_m \left[ \frac{I_m(E, E + \hbar\omega) \rho_m(E, E + \hbar\omega, x)}{v_m(E) v_m(E + \hbar\omega)} \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \right] & (x < 0), \\ 0 & (x > 0), \end{cases} \quad (13)$$

$$\text{Re}\rho_1(x, \omega) = -\frac{2\omega P}{\pi} \int \frac{\nu \text{Im}\rho_1(x, \omega)}{\nu^2 - \omega^2} d\nu, \quad (14)$$

这里  $\varepsilon_m$  和  $m^*$  分别为电子横向能量本征值和有效质量,

$$\begin{aligned} & I_m(E, E + \hbar\omega, X) \\ &= [v_m(E) - v_m(E')] X \\ & \quad \times \sin(k_m(E) + k_m(E')) X \\ & \quad - [v_m(E) + v_m(E')] \\ & \quad \times \sin(k_m(E) - k_m(E')) X, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & \rho_m(E, E', x) \\ &= \cos[(k_m(E) - k_m(E'))x] \\ & \quad - \cos[(k_m(E) + k_m(E'))x], \end{aligned} \quad (16)$$

式中

$$\begin{aligned} k_m &= \frac{\sqrt{2m^*(E - \varepsilon_m)}}{\hbar}, \\ v_m &= \sqrt{\frac{2(E - \varepsilon_m)}{m^*}}. \end{aligned}$$

(11), (13)式中,利用了

$$\sum_m (\cdot) \rightarrow \frac{m^* A}{2\pi\hbar} \int (\cdot) d\varepsilon_m.$$

联立(4), (6), (10), (15)式,则外部电导(或无相互作用电导)的实部和虚部分别为

$$\begin{aligned} & \text{Re}G_{\text{al}}^{\text{ext}}(\omega) \\ &= \frac{\pi m^* A e^2}{h^2} \delta_{\text{al}} \int dE \int d\varepsilon \frac{I_m^2(E, E + \hbar\omega, X)}{v_m(E) v_m(E + \hbar\omega)} \\ & \quad \times \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} & \text{Im}G_{\text{al}}^{\text{ext}}(\omega) \\ &= -\frac{2\omega P}{\pi} \int \frac{\text{Re}G_{\text{al}}^{\text{ext}}(\omega)}{v^2 - \omega^2} dv. \end{aligned} \quad (18)$$

同样,联立(4), (7), (10), (15)和(16)式,则局域电流响应函数  $g_\alpha(x, \omega)$  ( $\alpha = 1, 2$ ) 的实部和虚部分别为

$$\text{Reg}_1(x, \omega) = \begin{cases} \frac{m^* A e^2}{h^2} \int dE d\varepsilon_m \left\{ \frac{I_m(E, E + \hbar\omega) \rho_m(E, E + \hbar\omega, x)}{v_m(E) v_m(E + \hbar\omega)} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \right\} & (x < 0), \\ 0 & (x > 0), \end{cases} \quad (19)$$

$$\text{Reg}_2(x, \omega) = \begin{cases} \frac{m^* A e^2}{h^2} \int dE d\varepsilon_m \left\{ \frac{I_m(E, E + \hbar\omega) \rho_m(E, E + \hbar\omega, x - a)}{v_m(E) v_m(E + \hbar\omega)} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \right\} & (x < a), \\ 0 & (x > a), \end{cases} \quad (20)$$

$$\text{Img}_\alpha(x, \omega) = -\frac{2\omega P}{\pi} \int \frac{\text{Reg}_\alpha(x, \omega)}{v^2 - \omega^2} dv. \quad (21)$$

由于整个体系是对称结构,因此只需考虑  $G_{11}(\omega), G_{21}(\omega)$ , 那么有

$$G_{11}(\omega) = G_{11}^{\text{ext}}(\omega) + \int_{-X}^0 g_1(x, \omega) u_1(x) dx, \quad (22)$$

$$G_{21}(\omega) = \int_a^{a+X} g_2(x, \omega) u_1(x) dx. \quad (23)$$

### 3. 数值结果及讨论

本文运用自洽的动态输运理论主要讨论了介观相干平行板电容器的动态电导与体系费米能、外场频率之间的关系. 为了数值计算的方便,文中分别以玻尔半径  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m^*e^2}$ ,  $\Delta = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*a_0^2}$  和  $\frac{2e^2}{h}$  作为长度、能量和电导的单位.

#### 3.1. 动态电导与体系费米能的关系

图 2 给出了不同的外场频率下体系电导  $G_{11}$  随费米能  $E_F$  的变化关系,其中图 2(a) 是外场频率较小的结果(此时  $\omega = 0.1$ ). 从图 2 可以看出:  $\text{Re}G_{11}$  在费米能为  $\Delta$  整数倍位置呈阶梯状变化,并且变化幅度正好为  $\frac{2e^2}{h}$  的整数倍,此结果与 Landauer-Büttiker 电导公式给出的结果一致. 与直流情形不同的是,  $\text{Im}G_{11}$  不为零,并且随费米能的增加而在  $\Delta$  的整数倍位置也有阶跃性变化. 但是随着外场频率的增大,交流情形下的电导与直流情形的差异就变得非常明显,如图 2(b) 所示(此时  $\omega = 0.5$ ),随着费米能的增加,  $G_{11}$  出现一定的振荡,并且在  $\Delta$  的整数倍位置出现一系列的共振峰结构.

#### 3.2. 动态电导与外场频率的关系

图 3 所示为在费米能  $E_F = 1.2$  时体系电导  $G_{11}(\omega)$  与外场频率  $\omega$  的变化关系. 此时费米能稍大于第一个电子横向准量子化能级. 从图 3 可以看出:当外场频率较小时,  $\text{Re}G_{11}(\omega)$  迅速减小,但随着外场频率的增加,  $\text{Re}G_{11}(\omega)$  呈现一定的振荡;而  $\text{Im}G_{11}(\omega)$  在频率较小时与  $\text{Re}G_{11}(\omega)$  正好相反,但随着外场频率的增加,  $\text{Im}G_{11}(\omega)$  也呈现一定的振荡并出现负的虚部. 这表明在外场频率较小时,由外场所引起的位移电流和传导电流反向,从而导致电导实部的减少,但是当外场频率增加时,电子吸收光子而跃迁到较高子带从而使电导实部有明显增加. 另外一个重要特性是电流的相位,电导虚部的正负表明了该体系的电容和电感特性.

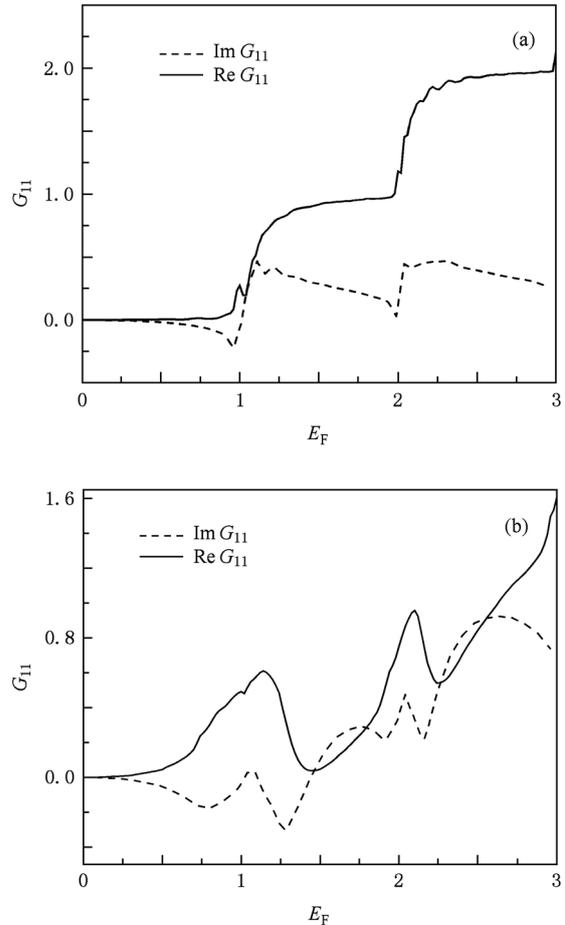


图 2  $G_{11}$  随体系费米能  $E_F$  的变化  $a=10$ , 极板面积  $A = 100$ . (a) 外场频率  $\omega = 0.1$ , (b) 外场频率  $\omega = 0.5$

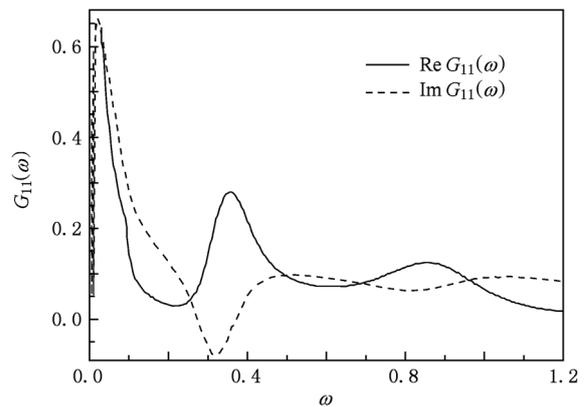


图 3  $G_{11}$  随外场频率  $\omega$  的变化  $a=10$ , 费米能  $E_F = 1.2$ , 极板面积  $A = 100$

对于交流情形,由于位移电流的存在,使得反映电子输运性质的各种物理量应该和直流情形不一样,因而可以预计  $G_{21}(\omega)$  的实部和虚部应该不都为零. 图 4 给出了体系费米能为一定值的情况下  $G_{21}(\omega)$  随

外场频率变化的结果. 从图 4 可以看出,  $G_{21}(\omega)$  确实不为零, 并且随外场频率的变化而振荡.

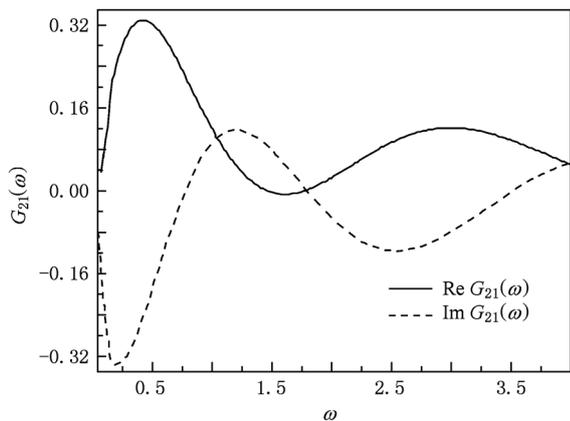


图 4  $G_{21}$  随外场频率  $\omega$  的变化  $a = 10$ , 费米能  $E_F = 1.2$ , 极板面积  $A = 100$

## 4. 结 论

基于介观体系电子动态运输的自治理论, 讨论了介观结构依赖外场频率的动态电导. 通过对介观相干平行板电容器这一理论模型的研究发现, 介观结构的电导除了与其本身材料、尺寸等因素有关外, 还强烈依赖外场频率和体系费米能. 数值结果表明, 当外场频率较低时, 体系电导随费米能的变化和直流情形非常相似, 在费米能为电导单位的整数倍位置处呈阶梯状变化, 但是随着外场频率的增加, 在这些位置出现峰值结构; 在给定费米能时, 体系电导随外场频率的变化有一定的振荡, 和直流情形不同的是电导矩阵的非对角元不为零, 并且电导虚部可以为负.

- [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 *Acta Phys. Sin.* **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、宋祎璞 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. Matter* **5** 9361
- [13] Gabelli J, Fève G, Berroir J M, Placais B, Cavanna A, Etienne B, Jin Y, Glatli D C 2006 *Science* **313** 499
- [14] Yu Y B, Liu Q H, Quan J, Tang Y H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 115329
- [15] Quan J, Liu Y X, Yu Y B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1237 (in Chinese) [全 军、刘一星、余亚斌 2010 物理学报 **59** 1237]
- [16] Quan J, Yu Y B, Au Yeung T C 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 163116

# Investigation on the dynamic conductance of mesoscopic system based on the self-consistent transport theory<sup>\*</sup>

Quan Jun<sup>1)2)</sup> T. C. Au Yeung<sup>2)</sup> Shao Le-Xi<sup>1)†</sup>

1) (*School of Physics Science and Technology, Zhanjiang Normal University, Zhanjiang 524048, China*)

2) (*School of Electrical and Electronic Engineering, Nanyang Technological University, Singapore 639798, Singapore*)

(Received 9 November 2010; revised manuscript received 16 March 2011)

## Abstract

According to the self-consistent electronic dynamic transport theory of mesoscopic system, we present the dynamic conductance of mesoscopic structure. As an application of this theory, we employ a coherent mesoscopic parallel-plate capacitor model in the present study. The results show that the dynamic conductance of system depends on the frequency of external field and Fermi energy of system, and is a complex with a finite imaginary part. For a smaller frequency, the conductance shows a similar feature to dc case, but with the increase of the frequency of external fields, substantial deviations between dc case and ac case are observed, the dynamic conductance of system presents a peak structure with Fermi energy varying. For a given Fermi energy, the dynamic conductance is oscillatory with frequency varying, moreover some negative imaginary parts of conductance are observed. The negative imaginary part implies the capacitive behavior, and positive imaginary part refers to the inductive behavior.

**Keywords:** self-consistent transport theory, coherent parallel-plate capacitor, conductance, mesoscopic system

**PACS:** 72.10.-d, 73.23.-b

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Cultivation Program of Innovation Talents in Institution of Higher Education of Guangdong Province, China (Grant No. LYM10098) and the Scientific Research Foundation for Doctor of Zhanjiang Normal University, China (Grant No. ZL1004).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: ntu\_submit@yahoo.cn