Письма в ЖЭТФ, том 11, стр. 222 – 226 *20 февраля 1970 г.*

ДИФФУЗНОЕ ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

Л.А.Фальковский

В теории аномального скин-эффекта [1] существенную роль играет граничное условие, которому должна удовлетворять на границе металла функция распределения:

$$f(p_x, p) = (1 - \rho) f(-p_x, p) + \rho f_0(\epsilon) . \qquad (1)$$

Здесь $f(\pm p_x, p)$ – функция распределения для электронов, летящих от поверхности и в обратном направлении соответственно, f_0 равновесная функция, ρ – так называемый коэффициент диффузности, $p = \{p_y, p_z\}$ тангенциальная по отношению к поверхности составляющая импульса электрона.

Феноменологическое граничное условие (1) усовершенствовалось разными способами: ρ считался зависящим от угла падения, последнее слагаемое в (1) подбиралось из условия отсутствия тока через поверхность и т. д. Однако рассмотрение оставалось либо феноменологическим [2], либо слишком общим [3].

Настоящая работа посвящена микроскопическому выводу граничного условия, справедливого при достаточно низких температурах, когда невозможна " термолизация" электронов на границе за счет излучения и поглощения фононов ("термолизация" описывается в (1) f_0). Диффузность отражения рассматривается как следствие случайной шероховатости поверхности и в этом смысле производится статистическое усреднение. Относительно величины шероховатости предполагается следующее (рис. 1). Пусть a – средняя величина шероховатости, d – средний размер плоских участков поверхности, вообще говоря, это величины атомного масштаба. Здесь предполагается что $(a\, p_x)^2/(p d)^{1/2} \ll 1$

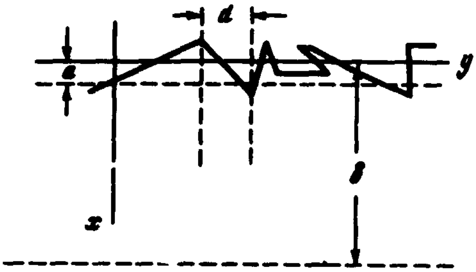

Рис. 1

для всех существенных, т. е. вносящих вклад в ток, электронов (см. обсуждение результатов).

Оставляя детали вывода до подробной статьи, приведем результат [1)] :

$$f(p_x, p) = f(-p_x, p)\left[1 - p_x \int \frac{d^2p'}{\pi^2}\, p'_x\, \xi_2(p - p')\right] +$$

$$+ p_x \int \frac{d^2p'}{\pi^2}\, p'_x\, \xi_2(p - p')\, f(-p'_x, p), \qquad (2)$$

где $p_x = (2m\epsilon - p^2)^{1/2}$, $p'_x = (2m\epsilon - p'^2)^{1/2}$, $\xi_2(p)$ – фурье-компонента бинарной корреляционной функции $\xi_2(s - s') = \langle \xi(s)\, \xi(s') \rangle$, $\xi(s) = x$ – уравнение шероховатой границы, для простоты спектр электронов считается квадратичным и изотропным. Функция $\xi_2(p)$ является характеристикой поверхности. Размер области, где она отлична от нуля есть d^{-1}, ее величина здесь порядка: $a^2 d^2$; ξ_2 определяет импеданс, затухание поверхностных уровней, открытых Хайкиным (этот вопрос рассматривается в [4]), коэффициент отражения света и т. д.

---

1) В промежуточных выражениях $\hbar = e = c = 1$.

Условие (2), как легко видеть, автоматически приводит к равенству нулю потока электронов через поверхность в любом интервале энергий $\Delta\epsilon$ и тождественно удовлетворяется для функции $f(\epsilon)$, зависящей только от энергии. Множитель p_x обеспечивает приближение к зеркальности для малых углов падения. Зеркальность улучшается и в пределе $p_0 d \gg 1$ (p_0 – фермиевский импульс), поскольку при этом взаимно компенсируются слагаемые с ξ_2.

Рассмотрим задачу об аномальном скин-эффекте. Решение уравнения

$$v_x \frac{df}{dx} + \nu(f - f_0) = -vE(x)\frac{df_0}{d\epsilon} \qquad (\nu = \tau^{-1} + i\omega = v_0/\ell,$$

ℓ – эффективная длина свободного пробега) с граничным условием (2) позволяет найти связь тока $j(x)$ с полем $E(x)$, которая после разложения Фурье по координате (используется четное продолжение на область $x < 0$) имеет вид:

$$j(k) = \sigma(k)\mathcal{E}(k) + \int \frac{dk'}{2\pi}\, \sigma(kk')\mathcal{E}(k'), \tag{3}$$

где

$$\sigma(kk') = \frac{m^2\nu^2}{2\pi^5}\int d^2p\, d^2p' \frac{p_x p_x' p_y \xi_2(p-p')}{(kp_x)^2 + (m\nu)^2}\left[\frac{p_y'}{(k'p_x')^2 + (m\nu)^2} - \frac{p_y}{(k'p_x)^2 + (m\nu)^2}\right], \tag{4}$$

$\sigma(k)$ – электропроводность при зеркальном отражении [1], поле считаем направленным по оси y, интегрирование проводится по $p, p' < p_0$.

Приведем асимптотику $\sigma(kk')$ для $k \sim k' \gg \ell^{-1}$ и $p_0 d \gg 1$:

$$\sigma(kk') \sim -(ap_0^2)^2/(p_0 d)^{1/2}\ell kk'(k+k'), \qquad |k\ell| \gg (p_0 d)^{1/2}\ln p_0 d$$
$$\sigma(kk) \sim -(a p_0 \ell/d)^2 \ln|p_0 d/k^2\ell^2|, \qquad |k\ell| \ll (p_0 d)^{1/2}\ln p_0 d. \tag{5}$$

Поле $\mathcal{E}(k)$ находится с помощью (3) и уравнения Максвелла

$$k^2\mathcal{E}(k) + 2E'(0) = 4\pi i\omega j(k). \tag{6}$$

На эксперименте измеряется импеданс

$$Z = 4\pi i\omega E(0)/E'(0). \tag{7}$$

Эта формула позволяет определить импеданс по известному решению уравнений (3, 6). Однако, *примерно* с той же точностью, с которой записано условие (2), можно разложить Z по $\sigma(kk')$ [1]. Получающаяся добавка ΔZ к импедансу

---

[1] В предельных случаях (5) уравнение (3, 6) можно решить точно методом Хартмана – Латинжера.

Z_0, вычисленному при зеркальном граничном условии, зависит от соотношения между эффективной длиной свободного пробега ℓ и глубиной скин-слоя δ, а также от величины $p_0 d$.

При аномальном скин-эффекте [2] $\left(|\delta/\ell| << 1;\ \delta = \left(\frac{c^2\hbar^3}{i e^2 p_0^2 \omega}\right)^{1/3};\ Z_0 \sim \omega\delta \right)$

$$\frac{\Delta Z}{Z_0} \sim \begin{cases} (p_0^2 a d)^2 \delta/\ell, & p_0 d << 1 \qquad (8.1) \\ \dfrac{(a p_0)^2}{(p_0 d)^{1/2}} \dfrac{\delta}{\ell}, & 1 << (p_0 d)^{1/2} << |\ell| / |\delta| \ln p_0 d \qquad (8.2) \\ \left(\dfrac{\ell a}{\delta d}\right)^2 \ln|\delta^2 p_0 d/\ell^2|, & |\ell/\delta| << (p_0 d)^{1/2} \ln p_0 d \qquad (8.3) \end{cases}$$

При нормальном скин-эффекте [1] $\left(|\delta/\ell| >> 1;\ \delta = \left(\frac{3\pi c^2\hbar^3}{4 e^2 p_0^3 \omega\ell}\right)^{1/2};\ Z_0 \sim \omega\tilde{\delta} \right)$

$$\frac{\Delta Z}{\tilde{Z}_0} \sim \begin{cases} (p_0^2 a d)^2 \ell/\tilde{\delta}, & p_0 d << 1 \qquad (9.1) \\ \dfrac{a^2\ell}{d^2\delta} \ln p_0 d, & p_0 d >> 1 \qquad (9.2) \end{cases}$$

График зависимости $\Delta Z / Z_0$ от ℓ/δ (т. е. от частоты ω при $\omega\tau >> 1$) изображен на рис. 2.

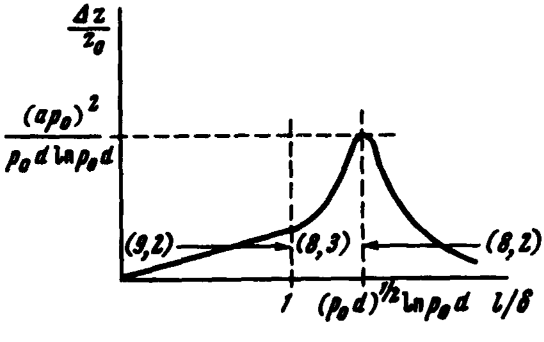

Рис. 2

В области $|\ell| < |\delta|$ главный вклад определяется электронами, не сталкивающимися с поверхностью, для вычисления $\tilde{Z}_0$ граничное условие разумеется не требуется. Добавка ΔZ связана с электронами, находящимися от поверхности на расстоянии меньшем $|\ell|$ и движущимися в основном вдоль поверх-

[1] Берутся те значения корней, которые соответствуют положительной вещественной части импеданса.

ности, т. е. с $p_x < p_0$. Сильного неравенства здесь нет, что позволяет вычислить коэффициент в (9) лишь при $\frac{(a p_0)^2}{(p_0 d)^{1/2}} << 1$.

При аномальном скин-эффекте добавка из-за диффузности начинает падать, когда $|\frac{\ell}{\delta}| >> (p_0 d)^{1/2} \ln p_0 d$ что связано с малостью угла скольжения $\frac{p_x}{p_0} \sim |\frac{\delta}{\ell}| << 1$ электронов, участвующих в токе. Такие электроны "видят" поверхность под малым углом, благодаря чему ослаблено влияние шероховатости. Именно по этой причине результат (8.1, 8.2) противоречит тому известному факту, что имеется численное различие (8/9 и 1) в значении импеданса при $\rho = 0$ и $\rho = 1$.

В области $|\frac{\ell}{\delta}| \sim (p_0 d)^{1/2} \ln p_0 d$ добавка ΔZ максимальна и для итераций по $\sigma(k k')$ недостаточно уже использовавшихся условий $p_0 d >> 1$, $p_x a \sim |\frac{\delta}{\ell}|\ a p_0 << (p_0 d)^{1/4}$. Необходимо, чтобы выполнялось более сильное неравенство $\Delta Z / Z_0 \sim (a p_0)^2 / p_0 d \ln p_0 d << 1$ (что объясняется наличием резкого пика у $f(p)$ при $p_x = 0$ (см. (4)), которое можно получить, если учесть, что шероховатость оказывает малое влияние лишь при $\frac{a}{d} << \frac{p_x}{p_0} \sim |\frac{\delta}{\ell}|$.
В противном случае $\Delta Z \sim Z_0$.

Трудности экспериментальной проверки рис. 2 кроются в необходимости выделять ΔZ, но при известной зависимости $Z_0(\omega)$ это не должно служить серьезным препятствием. Таким образом можно определить электронные характеристики (даже изотропные – идея Пиппарда) по Z_0 и параметры a, d, ϵ_0 по ΔZ.

Пользуюсь случаем поблагодарить А.А.Абрикосова, М.Я.Азбеля, А.И.Ларкина, Э.И.Рашбу и М.С.Хайкина за многократные дискуссии и важные замечания.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 декабря 1969 г.
После переработки
29 декабря 1969 г.

Литература

[1] G.E.Reuter, E.H.Sondheimer. Proc. Roy. Soc., A195, 336, 1949.
[2] Дж. Займан. Электроны и фононы. М., ИИЛ, 1962.
[3] R.F.Greene. Phys. Rev., 141, 687, 1966.
[4] Л.А.Фальковский. ЖЭТФ, 58, вып. 5, 1970.
[5] L.E.Hartmann. J.M.Luttinger. Phys. Rev., 151, 430, 1966.