

第 4 章 低维系统电子态

三维固体如果在一个或两个维度上对称破缺,就成为低维系统,包括表面界面和二维电子系统、一维导电聚合物以及零维原子团簇等,这是近年来发展迅速的研究领域。研究低维系统不仅有重要的理论意义,是全面探索物质结构的不可缺少的一个组成部分,而且低维系统有重大的应用前景,与近代新科技直接联系在一起。例如聚合物的长分子链形成准一维系统,其中导电机理不同于电子或空穴的运动,研究发现一维导体中的载流子是一种新的元激发——孤子(Soliton),而孤子的产生又起因于一维系统所特有的结构相变二聚化及随之发生的 Peierls 相变。至于二维电子气所特有的物理现象——量子 Hall 效应更是近年来凝聚态物理中的热门课题。本章着重讨论 Peierls 相变、孤子以及量子 Hall 效应等低维系统的新物理现象的机理。

§ 4.1 低维系统电子态的一些特点

1. 低激发态密度之间的差异

低维系统的某些特性不同于三维固体,其中直接的原因是低激发态的态密度形式不同。态密度的定义为

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} \quad (4.1.1)$$

假定周期性边界条件成立,系统在一个维度上长度为 L ,则电子的波数 k 等于

$$k = \frac{n}{L}2\pi \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4.1.2)$$

我们计算从 k 到 $k+dk$ 范围内(dk)的状态数 dn ,

$$dn = dk / \frac{2\pi}{L} = \frac{L}{2\pi} dk \quad (4.1.3)$$

其中 $\frac{2\pi}{L}$ 为一个态所占有的 k 空间范围(长度或面积或体积),系统的低激发态可作为理想气体

处理,能量与波数关系呈二次型,设为 $E(k) = ak^2$ (对于自由电子 $a = \frac{\hbar^2}{2m}$)

$$\rho_1(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{dn}{dk} \cdot \frac{1}{\frac{dE}{dk}} = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2ak} = \frac{L}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (4.1.4)$$

上式为一维系统(1- d)低激发态的态密度,正比于能量的($-\frac{1}{2}$)次方。

二维(2- d) k 空间中从 k 到 $k+dk$ 的范围为 $2\pi k dk$, $dn = 2\pi k dk \cdot L^2 \frac{1}{4\pi^2}$,于是可求得

$$\rho_2(E) = \frac{kL^2}{2\pi} \frac{1}{2ak} = \frac{L^2}{4\pi a} = \text{常数} \quad (4.1.5)$$

同样可得三维(3- d)固体激发态密度

$$\rho_3(E) = \frac{k^2 L^3}{2\pi^2} \frac{1}{2ak} = \frac{kL^3}{4\pi^2 a} = \frac{\sqrt{E}}{4\pi^2} \left(\frac{L^2}{a}\right)^{3/2} \quad (4.1.6)$$

三种维度对应的低激发态态密度曲线示于图 4.1.1。我们来分析低能时的行为,对于 3- d 系统, $E \rightarrow 0, \rho(E) \rightarrow 0$, 低温起伏很小,所以三维系统可保持有序状态。对于 2- d 系统,态密度为常数,存在一定的热起伏,当 $V \rightarrow \infty$ 时,不能保持有序化,所以若 2- d 系统能谱中无能隙,则不能在大范围内保持有序,即没有长程序。1- d 系统情况与上述不同,当 $E \rightarrow 0$ 时,态密度 $\rightarrow \infty$,在任何温度下,热起伏非常剧烈。除非 $T=0\text{K}$,1- d 系统不能保持有序,即有序排列的 1- d 系统是不存在的。

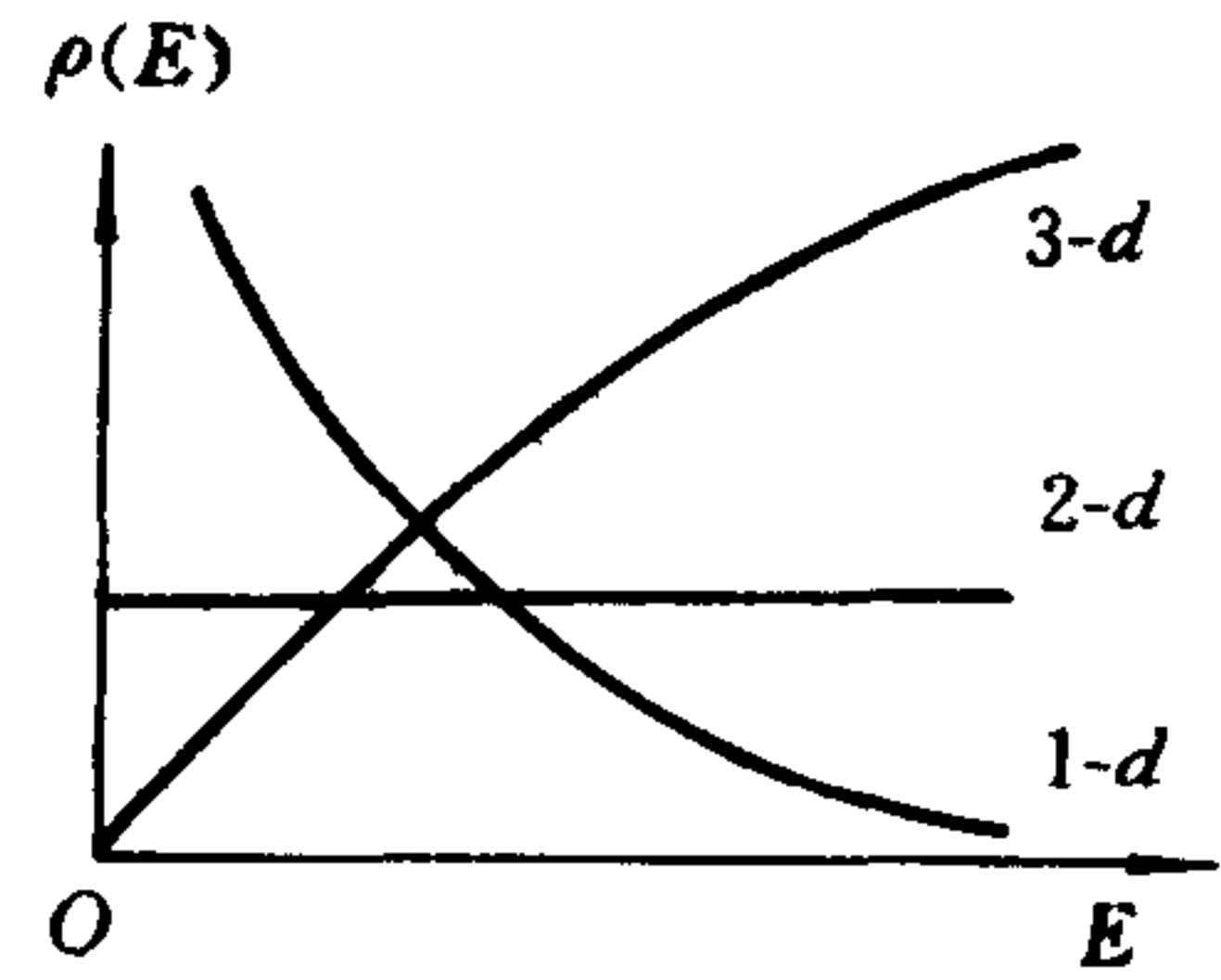


图 4.1.1 不同维度系统的激发态密度

实际 1- d 和 2- d 系统在一定范围内可保持有序排列,这是由于在链与链之间或面与面之间总存在微弱的耦合,这对维持 1- d 和 2- d 系统的热力学稳定性是必要的,我们可以看到有序的低维系统原因就在于此。但是即使存在侧向弱耦合,1- d 系统仍然不稳定,它会发生 Peierls 相变,导致“二聚化”的结构变化。

2. 一维系统的 Fermi 面

晶体的 Brillouin 区的定义和形状已在第 1 章中描述过,这是倒空间中一些规则的多面体。晶体的能量是波矢 k 的函数 $E(k)$,在倒空间中电子能量由低向高的状态逐一填充,最高填充状态的电子能量称 Fermi 能,用 E_F 表示,对应 E_F 的波矢 k_F 称 Fermi 波矢。于是我们可以用方程

$$E(k) = E(k_x, k_y, k_z) = E_F \quad (4.1.7)$$

来描述 Fermi 面,一般这是一个复杂的曲面,Fermi 面与 Brillouin 区的边界可以相交或相切,但二者总不重合,因为不同 k 的方向 $E(k)$ 的函数形式不同,电子的填充情况也各异。

1- d 系统的 k 只是一条直线(图 4.1.2), Brillouin 区的边界退化为 $\pm k_B$ 两点(关于原点 O 对称),电子填充从 O 点开始向外对称延伸。在 N 个原子且每个原子只有一个电子的情况下,考虑电子自旋,可知电子填充到第一 Brillouin 区的一半为止,即 $k_F = \frac{1}{2} k_B$ 。假如 1- d 系统由于某种原因发生结构相变,晶格常数扩大一倍,由 a 变为 $2a$,则 Brillouin 区边界向内缩一半, $k'_B = \frac{1}{2} k_B$ 。但是电子填充并不改变,结果导致 $k_F = k'_B$, Fermi 面(在 $\pm k_F$ 处的两点)与新的 Brillouin 区边界($\pm k'_B$ 两点)重合。这说明只有 1- d 系统 Fermi 面与 Brillouin 区边界才可能完全重合。因为 Brillouin 区边界上的点不稳定,这就是 1- d 系统会发生 Peierls 相变的原因。2- d 和 3- d 系统 Fermi 面与 Brillouin 区不重合,不会发生 Peierls 相变。

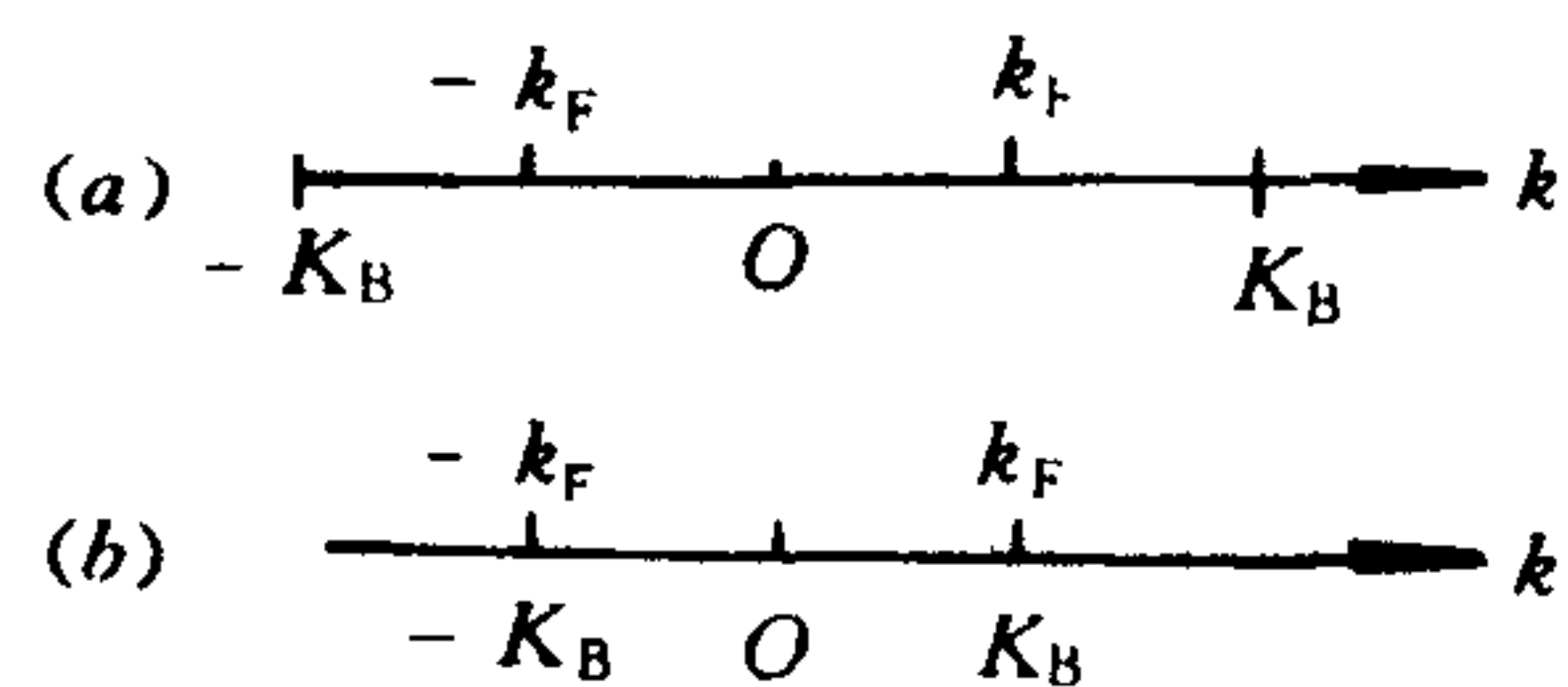


图 4.1.2 1- d 系统的 Fermi 面和 Brillouin 区边界
(a)二聚化前;(b)二聚化以后

3. 磁场中的 2- d 系统

若对 3- d 晶体加上外磁场 B ,则电子的运动由两部分合成,在磁场方向电子保持原来的运

动,而在垂直 B 的平面内电子作圆周运动,能量是量子化的,称 Landau 能级:

$$E_n = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c, \quad \omega_c = \frac{eB}{mc} \quad (4.1.8)$$

因为沿磁场方向运动的电子能量是连续的,所以 3- d 晶体中电子运动的总能量也是连续的。

在 2- d 系统中的情形不同,设磁场方向垂直 2- d 系统所在平面,此时电子只存在平面圆周运动,且是量子化的,公式(4.1.8)成立。所以在外磁场中的 2- d 系统的电子运动能量是分立的,电子处于一系列 Landau 能级中,这是 2- d 系统会出现整数量子 Hall 效应而三维系统无此量子效应的物理原因。

§ 4.2 1-维系统和 Peierls 相变^[1-3]

1. Peierls 不稳定性和二聚化(Dimerization)

N 个原子等距地排成 1- d 链,组成 1- d 晶格。设晶格常数为 a ,1- d 链长度等于 $L=Na$, Brillouin 区的边界点处于

$$k_B = \pm \frac{n\pi}{a} \quad (4.2.1)$$

在 Brillouin 区边界上能带是不连续的。我们首先求出这些点的能隙大小,考虑方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi_n(kx) = E_n\psi_n(kx) \quad (4.2.2)$$

对晶体势 $V(x)$ 作 Fourier 展开:

$$V(x) = \sum_n V_n(k)e^{i\frac{n}{a}x} \quad (4.2.3)$$

$V(x)$ 作为微扰,零级波函数为平面波

$$\psi_0(k, x) = Ae^{ikx} \quad (4.2.4)$$

对应能量

$$E_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.2.5)$$

微扰 $V(x)$ 的矩阵元为

$$\langle \psi_0(k) | V(x) | \psi_0(k') \rangle = \sum_n V_n \delta(k', k - \frac{n\pi}{a}) \quad (4.2.6)$$

可见 V 的矩阵元是非对角的,对角元为零,即一级能量修正值为零,只有二级能量修正值不等于零,

$$E(k) = E_0(k) + E_2(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_{k'} \frac{|V_{kk'}|^2}{E_0(k) - E_0(k')}. \quad (4.2.7)$$

$E_0(k)$ 若关于 k 和 k' 是简并时,则必须计算简并微扰,在 Brillouin 区边界点正是如此。令

$$\psi_0 = A\psi_{k_n}^0 + B\psi_{-k_n}^0, \quad (4.2.8)$$

可求得久期方程

$$\begin{vmatrix} E - E_{k_n}^0 & -V_n \\ -V_n^* & E - E_{-k_n}^0 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.2.9)$$

$$\text{解出能量 } E(K_n) = E_{k_n}^0 \pm \Delta_n \quad (4.2.10)$$

$$\Delta_n = \sqrt{|V_K|^2} \quad (4.2.11)$$

$2\Delta_n$ 就是处于 Brillouin 区边界上的点(K_n)的能隙。

在考虑自旋以后, N 个价电子在第一 Brillouin 区中只填充一半, 即 Fermi 波矢落在 $\pm \frac{\pi}{2a}$ 的位置, 这种能带应该显示金属特性。

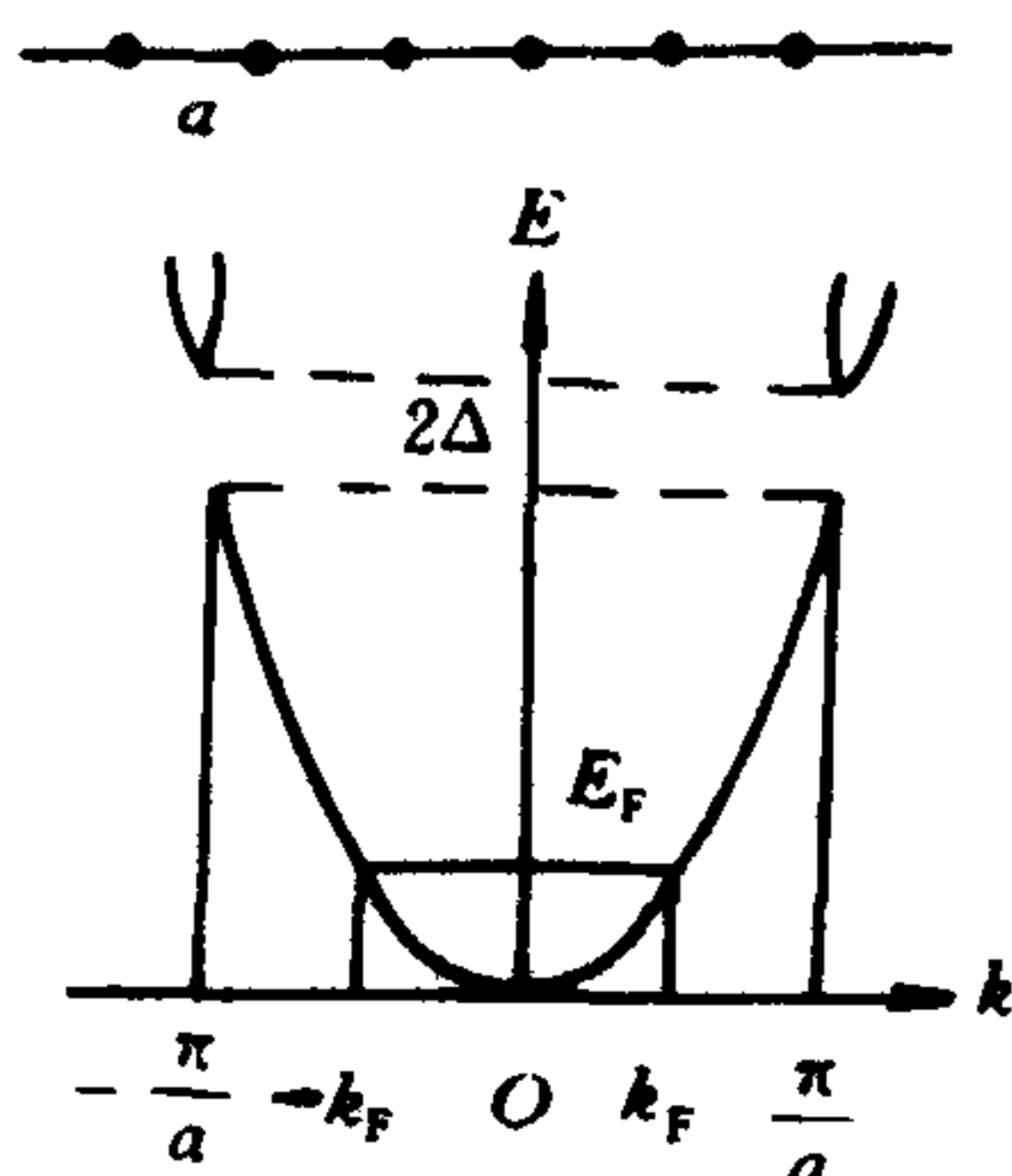


图 4.2.1 1-d 系统在二聚化前处于金属态

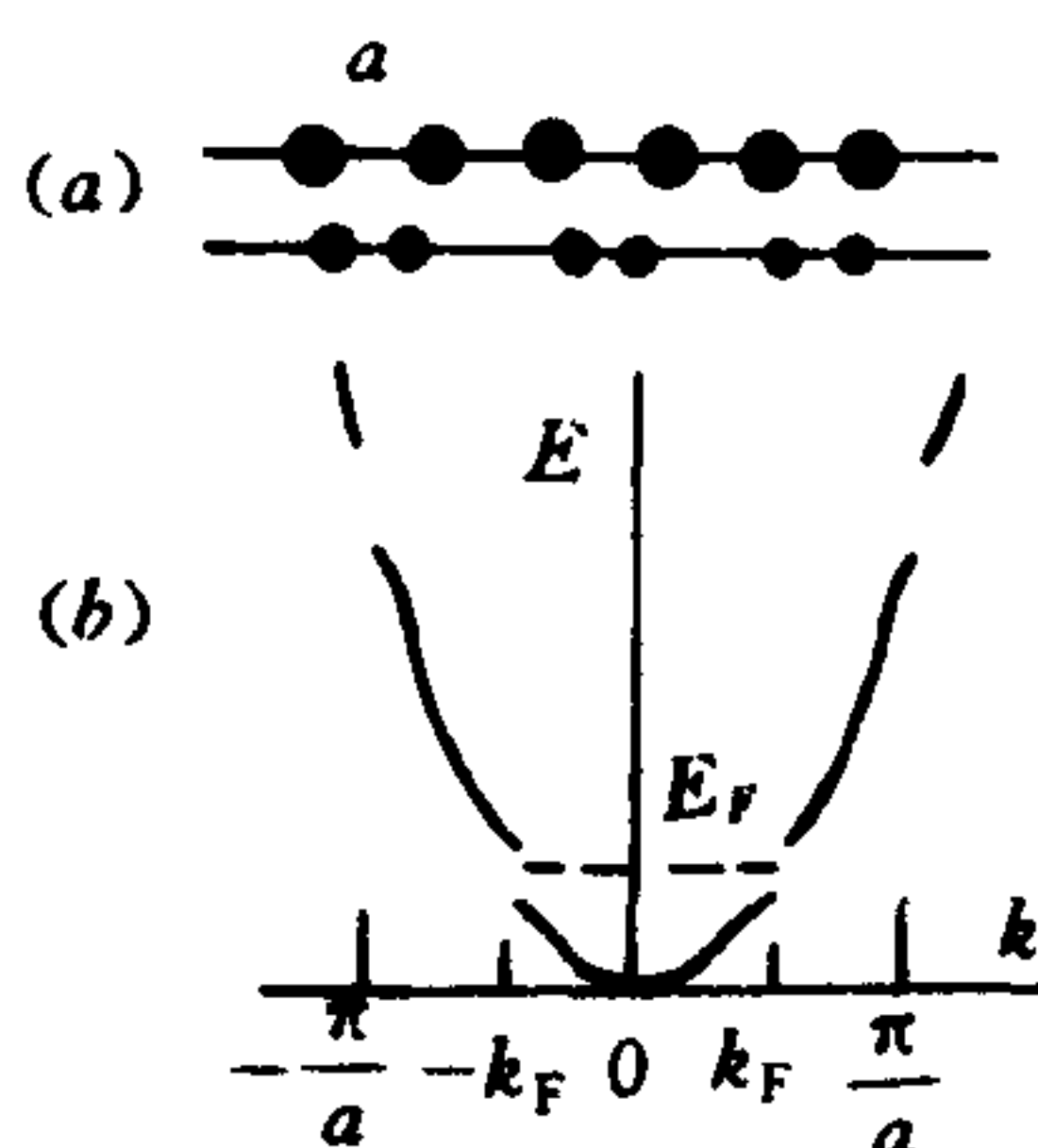


图 4.2.2

(a) 二聚化; (b) 二聚化以后呈半导体特性

Peierls 首先指出: 原子等距排列的 1-d 晶格是不稳定的。如果奇数位原子向右移动 u , 偶数位原子向左移动 u , 1-d 晶格畸变, 相邻原子两两结合, 畸变后的晶格常数变化, 这样 Brillouin 区边界内缩, E_F 与 K_F 重合, 此时原来的一个能带分裂成两个(见图 4.2.2)。从能量角度来说, 晶格畸变后电子的能量降低了, 其降低的量大于由于晶格畸变而增加的弹性能, 所以畸变后系统总能量降低, 是稳定的组态。1-d 系统中这种相邻原子两两配对的结构相变, 称作“二聚化”。二聚化正是 Fermi 面与 Brillouin 区边界重合的结果, 是 1-d 系统电子态的特性所决定的。二聚化以后, Fermi 能 E_F 以下为价带, E_F 以上为导带, E_F 处存在 2Δ 的能隙, 1-d 系统能带呈半导体特性。

2. Peierls 相变和一维导体

在绝对零度时, 1-d 系统因二聚化而处于半导体基态。随着温度升高, 1-d 链上原子振动加剧, 当振幅增大到与引起二聚化的原子位移 u 可以比拟时, 晶格畸变变得模糊。一维系统存在临界温度 T_P , 当 $T > T_P$ 时, 二聚化作用不复存在, 1-d 系统重又呈现导体特性, 这种从半导体转变为导体的相变称为 Peierls 相变, Peierls 相变是 1-d 系统所特有的, 2-d 和 3-d 系统由于受其激发态密度的特性所限制不会发生 Peierls 相变。表 4.2.1 列出了三类一维导体的相变温度 T_P 及有关特性。

一维导体的空间结构是三维的, 但存在一个紧密排列的原子或分子链, 电子沿链方向迁移率很高, 而链与链之间原子距离比较大, 所以在平行链的方向电导率比垂直链方向上的大几个数量级, 这种材料仅在一个方向上导电, 故称一维导体(或准一维导体)。

表 4.2.1 一维导体的特性

名称	TTF-TCNQ	KCP	TaS ₃	NbSe ₃
分子式		K ₂ Pt(CN) ₄ Br _{0.3} · 3H ₂ O		
类型	电荷转移有机化合物	混合价态化合物	三硫化金属	
$\sigma_{//} [\Omega \cdot \text{cm}]^{-1}$	10 ³	10 ²	10 ⁴	
$\sigma_{\perp} [\Omega \cdot \text{cm}]^{-1}$	5	10 ⁻²	10 ²	10 ³
CDW 波长 晶格常数	3.76	6.0	4.0	4.16
T _p (K)	54	300	215	144
Peierls 相变还是 CDW	Peierls	Peierls	Peierls	CDW

混合价态化合物 KCP 中存在金属原子 Pt 的链结构,其它原子和原子团沿着 Pt 链的方向线性堆积,Pt 链上原子间距 0.288nm,与金属 Pt 中原子间距 0.278nm 非常接近,而不同链上 Pt 原子间距为 0.987nm,因此 KCP 具有准一维结构,平行于链方向的电导率 $\sigma_{//}$ 比垂直方向的 σ_{\perp} 大 4 个数量级。图 4.2.3 中描绘了 KCP 的一个结构单元。

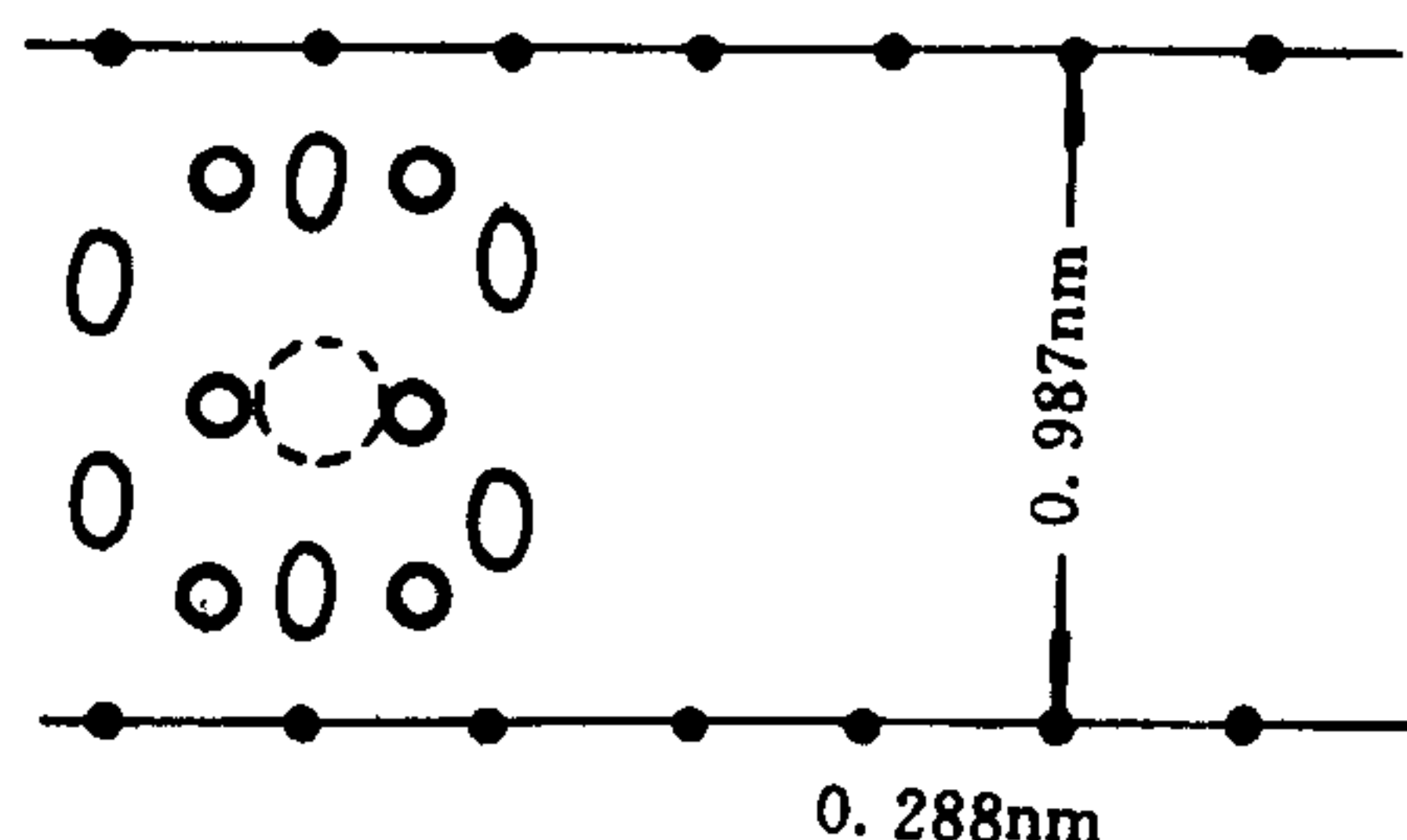


图 4.2.3 KCP 中的 Pt 链及链间原子分布;
· 表示 Pt, ○ 表示 K, ○ 表示 CN, ○ 表示 Br。
(链间原子只画出一个结构单元)

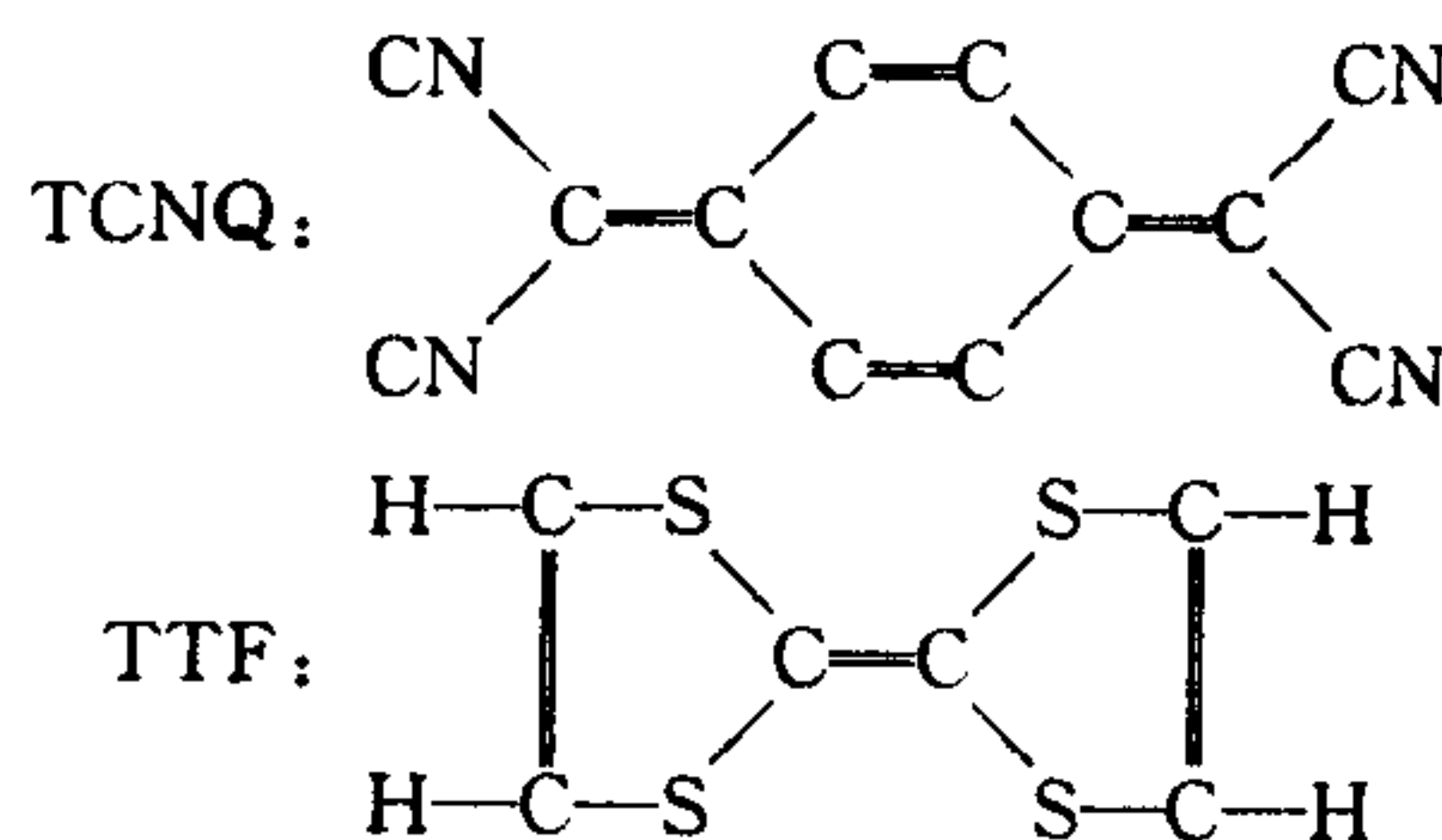


图 4.2.4 TTF-TCNQ 分子式

TTF-TCNQ 分子式示于图 4.2.4,它是电荷转移有机化合物,由施主分子和受主分子组成,TTF 是施主分子,TCNQ 为受主,电子从 TTF 向 TCNQ 转移,平均每个分子转移 0.6 个电子。TTF-TCNQ 组成单斜晶体, a, b 和 c 三个晶格常数分别为 1.230,0.382 和 1.847nm,其中 b 轴是密堆积方向, b 方向的电导率比 a 和 c 方向上的大 10³ 倍,因此也属准一维导体。

聚乙炔、聚噻吩(H₂C₄S)等导电聚合物是近年来受重视的一维导体,随着掺杂浓度变化,聚乙炔的电导率可以从绝缘体的范围变化到金属的范围,增大 12 个数量级以上。苏武沛、Schrieffer 和 Heeger 提出孤子(Soliton)导电理论,我们在下面讨论。

3. Peierls 相变理论

(1) Hamilton 量

在紧束缚近似下考虑聚乙炔的 Peierls 相变, 设每个原子只有一个自由电子, Hamilton 量为

$$H = - \sum_n t_{n+1,n} (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}) + \sum_n \frac{1}{2} K (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} \sum_n M \dot{u}_n^2 \quad (4.2.12)$$

其中 C_n^+ 和 C_n 分别是格点 n 处电子的产生和消灭算符, u_n 代表原子偏离平衡位置的位移, \dot{u}_n 就是对应的原子速度, $t_{n+1,n}$ 是第 n 个原子和第 $n+1$ 个原子间的相互作用矩阵元, 当 u_n 比晶格常数小得多时, 可将 $t_{n+1,n}$ 在平衡位置处展开:

$$t_{n+1,n} = t_0 + \alpha(u_{n+1} - u_n) \quad (4.2.13)$$

其中 α 为原子位移引起的相互作用 (t) 的变化率。对于聚乙炔, $t_0 = 2.5\text{eV}$, $\alpha = 410\text{eV/nm}$ 。晶格弹性系数 $K = 2100\text{eV/nm}^2$ 。将 (4.2.13) 式代入 (4.2.12) 式:

$$H = - \sum_n t_0 (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}) - \alpha \sum_n (u_{n+1} - u_n) (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}) + \sum_n \frac{1}{2} K (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} \sum_n M \dot{u}_n^2 \quad (4.2.14)$$

上述 Hamilton 量中第一项是电子运动能量, 第二项是电子-晶格相互作用能, 第三、四项分别是晶格弹性能和原子动能。

讨论 Peierls 不稳定性, 必须计算二聚化前后电子晶格相互作用能量与晶格弹性能的变化, 比较这两项能量在二聚化过程中谁的变化大, 由此可决定二聚化前后总能量是增加还是减少了。

(2) 晶格畸变以前的能带

下面作静态讨论, 令 $\dot{u}_n = 0$, $u_n = 0$, Hamilton 量简化为

$$H_0 = - \sum_n t_0 (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}) \quad (4.2.15)$$

对 C_n 作 Fourier 变换

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikna} C_k \quad (4.2.16)$$

利用 (4.2.16) 式可使 H_0 对角化:

$$H_0 = - \sum_k \epsilon(k) C_k^+ C_k \quad (4.2.17)$$

其中

$$\epsilon(k) = -2t_0 \cos ka \quad \left(-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}\right) \quad (4.2.18)$$

上述能带用虚线描绘在图 4.2.5 中。

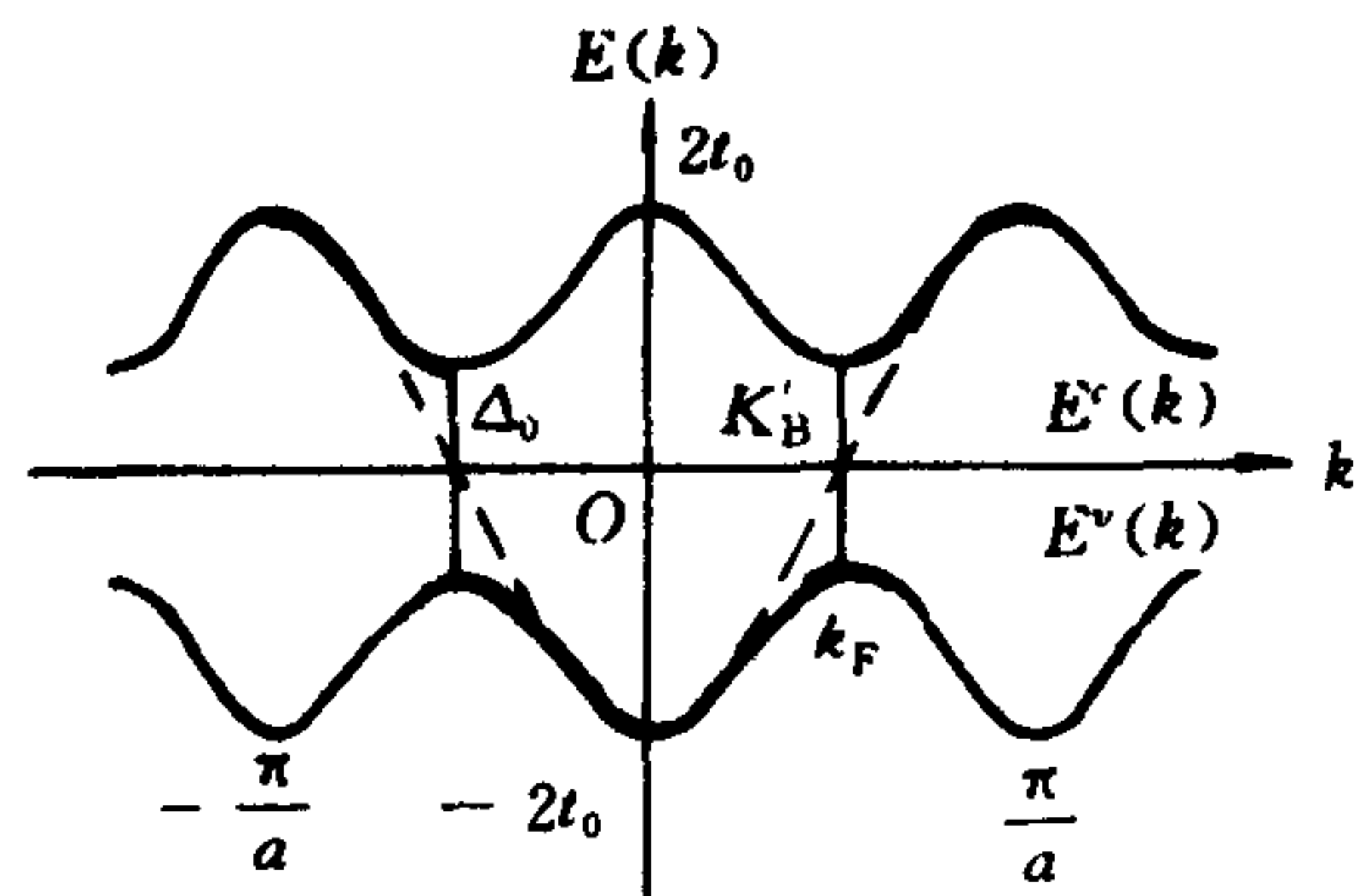


图 4.2.5 二聚化前(虚线)与后(粗实线)能带的比较, 导带 $E^c(k)$ 和价带 $E^v(k)$ 均用细实线表示, 能隙 $2\Delta_0$ 出现在 $K_B = \pm \frac{\pi}{2a}$ 处。

(3) 晶格二聚化

设偶数原子移动 $+u$, 奇数原子移动 $-u$, 即

$$u_n = (-1)^n u \quad (4.2.19)$$

Hamilton 量变为

$$H = - \sum_n [t_0 + 2(-1)^n au] (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}) + 2NKu^2 \quad (4.2.20)$$

对奇数和偶数原子分别作 Fourier 变换,

$$\left. \begin{aligned} \text{(奇)} \quad C(n_o) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (C_k^c + C_k^v) e^{-ikan(o)} \\ \text{(偶)} \quad C(n_e) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (C_k^v - C_k^c) e^{-ikan(e)} \end{aligned} \right\} \quad (4.2.21)$$

其中 C_k^c 和 C_k^v 分别为导带和价带的电子消灭算符, 上式代入(4.2.20)式得:

$$H = \sum_k \epsilon(k) (C_k^{+v} C_k^v - C_k^{+c} C_k^c) + i \sum_k \Delta(k) (C_k^{+v} C_k^c - C_k^{+c} C_k^v) + 2NKu^2 \quad (4.2.22)$$

$$\Delta(k) = 4ausinka \quad (4.2.23)$$

变换(4.2.21)式并未使 Hamilton 量完全对角化, 第二项仍存在 C_k^v 与 C_k^c 之间的耦合, 需再作么正变换, 同时求得使 H 对角化的条件, 并从这个条件解出这个么正变换的系数 α_k 和 β_k , 变换表示式如下:

$$\left. \begin{aligned} a_k^v &= -i\alpha_k C_k^v + \beta_k C_k^c \\ a_k^c &= \alpha_k^* C_k^c + i\beta_k^* C_k^v \end{aligned} \right\} \quad (4.2.24)$$

$$|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2 = 1 \quad (4.2.25)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_k &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\epsilon(k)}{E(k)}} \\ \beta_k &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k}{|k|} \sqrt{1 - \frac{\epsilon(k)}{E(k)}} \end{aligned} \right\} \quad (4.2.26)$$

$$E(k) = \pm \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta^2(k)} \quad (4.2.27)$$

最后对角化的 H 为

$$H = - \sum_{k,v} E(k) (a_k^{+v} a_k^v - a_k^{+c} a_k^c) + 2NKu^2 \quad (4.2.28)$$

我们求得二聚化后的电子能带, 它分成导带和价带两支, 中间出现能隙 $2\Delta_0$:

$$\left. \begin{aligned} \text{(导带)} \quad E^c(k) &= + \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta^2(k)} \\ \text{(价带)} \quad E^v(k) &= - \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta^2(k)} \end{aligned} \right\} \quad (4.2.29)$$

$$2\Delta_0 = 8au \quad (\text{位于 } K'_B = k_F = \frac{\pi}{2a} \text{ 处}) \quad (4.2.30)$$

图 4.2.5 示出二聚化前后的能带和能隙位置。

在一个原子只有一个 π 电子的假定下, 由 Hamilton 量(4.2.28)式求得基态能, 其中 $n_k^c = 0, n_k^v = 1$,

$$\epsilon_0(u) = -2 \sum_{k < k_F} E(k) + 2NKu^2 \quad (4.2.31)$$

将求和改为积分,

$$\begin{aligned}
\varepsilon_0(u) &= -\frac{2L}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2a}} [(2t_0 \cos ka)^2 + (4a \sin ka)^2]^{\frac{1}{2}} dk + 2NKu^2 \\
&= -\frac{4Nt_0}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [1 - (1 - Z^2) \sin^2 ka]^{\frac{1}{2}} dk + 2NKu^2 \\
&= -\frac{4Nt_0}{\pi} E(1 - Z^2) + \frac{NKt_0^2 Z^2}{2a^2}
\end{aligned} \tag{4.2.32}$$

其中 $Z = \frac{2au}{t_0}$, $E(1 - Z^2)$ 为椭圆积分, 当 Z 很小时, 有

$$E(1 - Z^2) \approx 1 + \frac{1}{2} \left(\ln \frac{4}{|Z|} - \frac{1}{2} \right) Z^2 + \dots \tag{4.2.33}$$

将(4.2.33)式代入(4.2.32)式, 求得基态能:

$$\varepsilon_0(u) = - \left[\frac{4Nt_0}{\pi} + \frac{8N\alpha^2 u^2}{\pi t_0} \left(\ln \frac{2t_0}{au} - \frac{1}{2} \right) \right] + 2NKu^2 \tag{4.2.34}$$

这个能量公式包含物理意义不同的两项: 第一项为电子能量的降低, 第二项与 u^2 成正比, 代表晶格弹性的增加。由此式可知, 当位移 u 很小时, 畸变后的总能量降低, 有利于二聚化的发生。利用聚乙炔的常数 t_0 (2.5eV), α (410eV/nm) 以及 K (2100eV/nm²), 由 $\varepsilon(u)$ 的极小条件求得原子的稳定位移和能隙,

$$u_0 = 0.004 \text{ nm} \tag{4.2.35}$$

$$2\Delta_0 = 1.4 \text{ eV} \tag{4.2.36}$$

理论值 u_0 和能隙 $2\Delta_0$ 与实验值符合。还可由(4.2.34)式求得凝聚能

$$\varepsilon_c = \frac{1}{N} [\varepsilon(u_0) - \varepsilon(0)] = -0.015 \text{ eV} \tag{4.2.37}$$

证实二聚化使总能降低。

§ 4.3 聚乙炔中的孤子(Solitons in Polyacetylene)^[2-9]

1. 聚乙炔

单个乙炔分子式为 C_2H_2 , 其中有一个碳—碳三键容易降为双键和单键, 并与邻近乙炔分子聚合成为线状长链的聚乙炔, 图 4.3.1 为其示意图, 它存在两种同素异构体, 即顺式(Cis)和反式(Trans)聚乙炔, 前者两个氢原子位于双键的一边, 后者 H 分开位于双键两边。两种聚乙炔中只有反式能成为有机导体, 所以下面只讨论反式聚乙炔。

从电子态来分析容易了解聚合的物理实质。碳原子中四个价电子为 $2s^2 2p^2$ 组态, 聚合后成为 $\{sp^2 \text{ 杂化} + p_z\}$ 组态, 这里 s , p_x 和 p_y 杂化结合成局域平面共价 σ 键, 而在垂直方向上 p_z 轨道沿长链方向(z)均匀交叠, 形成离域的 π 键, 这就是在链上运动的自由电子即聚乙炔晶体中的 π 能带电子。图 4.3.2 描绘了反式聚乙炔的原子键合图象。

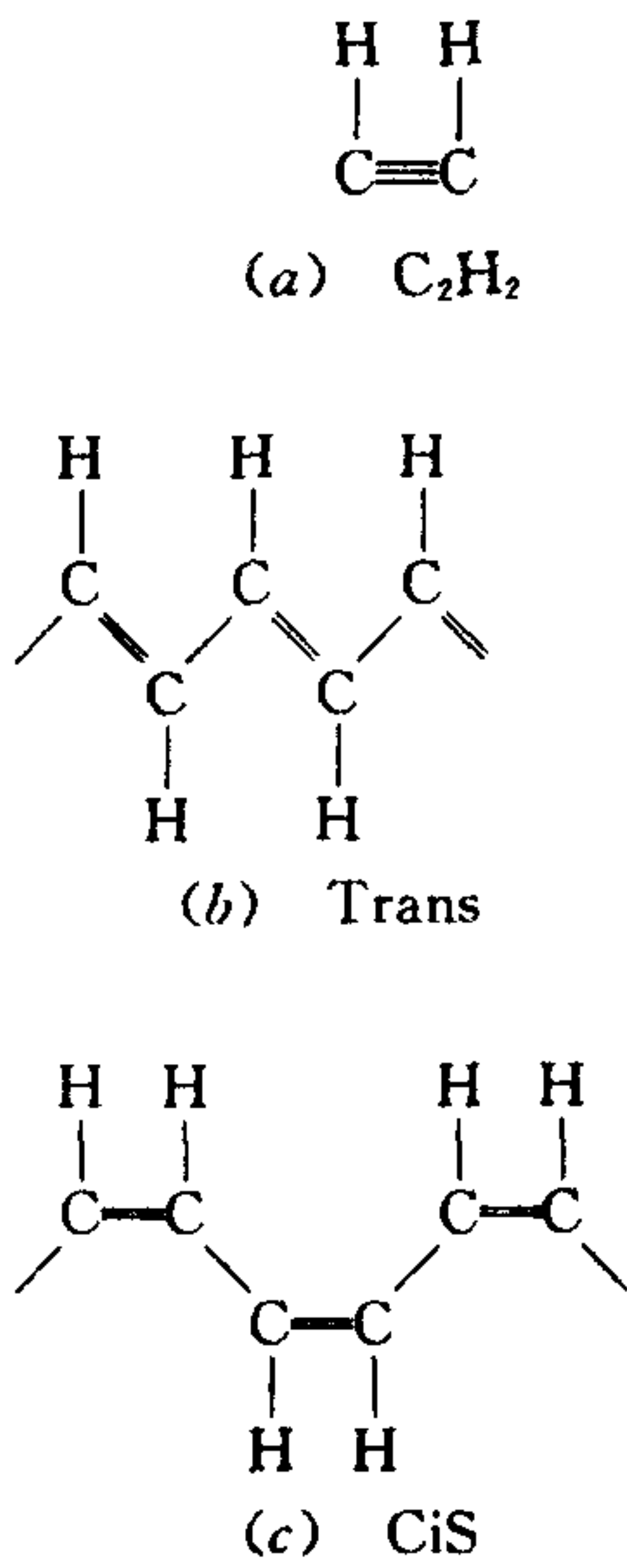


图 4.3.1
 (a)乙炔,
 (b)反式聚乙炔,
 (c)顺式聚乙炔示意图

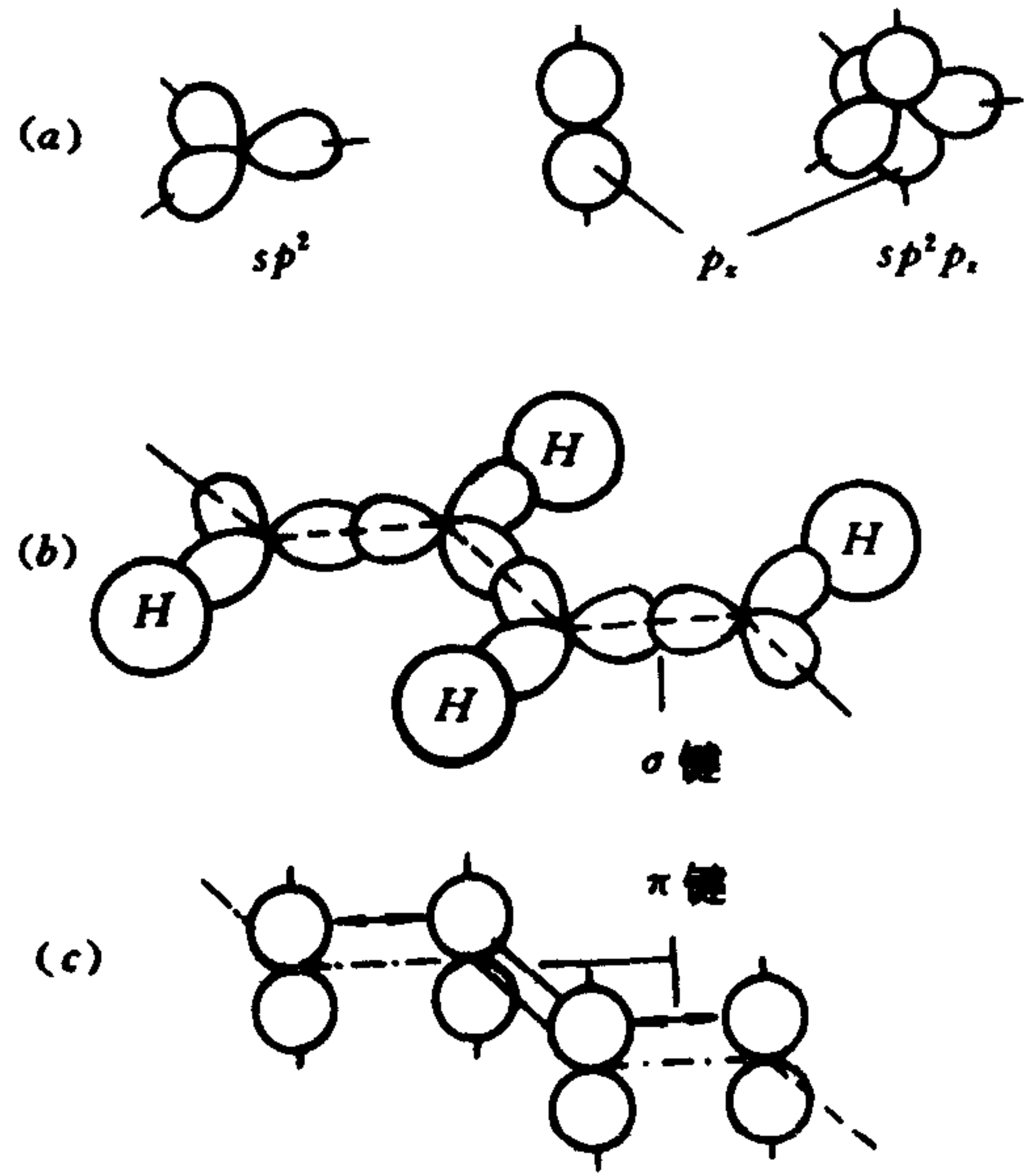


图 4.3.2 Trans 的碳原子键合图
 (a)表示 sp^2 杂化轨道和 p_z 轨道的叠加;
 (b) sp^2 轨道对形成 σ 键的贡献;
 (c) p_z 轨道形成 π 键的方向

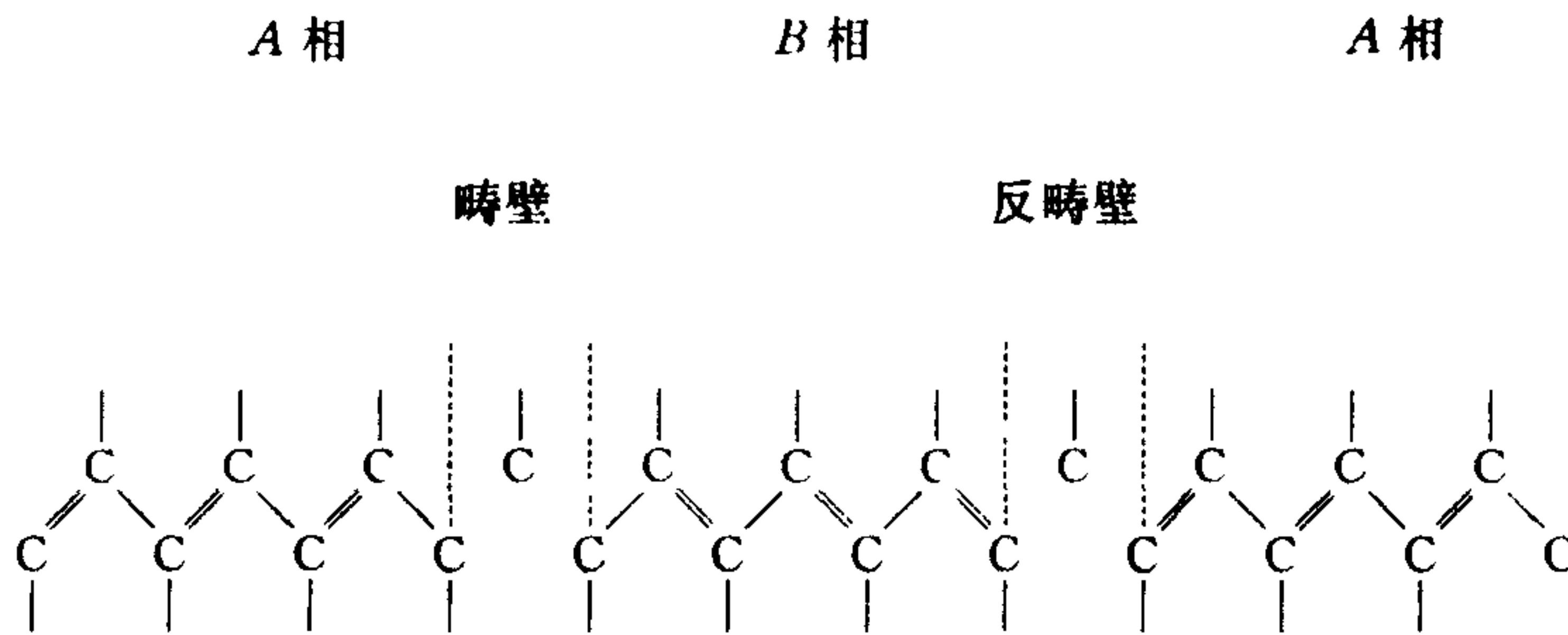


图 4.3.3 聚乙炔 $(CH)_n$ 中的更键缺陷

因为每个碳原子只贡献一个 π 电子, π 能带是半满的, 聚乙炔应处于金属态。实际上聚乙炔为半导体, Fermi 能级处出现能隙有利于电子能量的降低, 从化学结构上看, $(CH)_n$ 链上形成单、双键交替排列, 两种键长之差约 0.004nm , 即上面所说的二聚化。反式聚乙炔存在二重结构简并度, 并导致更键缺陷 (bond alternation defects) 的产生, 它从一个区域内双键处于奇数位变到另一区域的单键处于奇数位, 在晶体学上这对应两个畴壁 (domain wall), 在数学方程上看对应孤子解。通常认为掺杂聚乙炔导电的机制就在于存在孤子和反孤子, 图 4.3.3 所示为 $(CH)_n$ 中更键缺陷的产生及畴壁与反畴壁的形成。下面我们先介绍孤子对应的微分方程式及它的解, 以此作为基础来理解聚乙炔中的孤子方程。

2. 孤子

考虑如下的非线性方程

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \quad (4.3.1)$$

将此方程简写为

$$\varphi_t + \varphi \varphi_x = 0 \quad (4.3.2)$$

其中的 $\varphi \varphi_x$ 即为非线性项。方程(4.3.2)有波动解

$$\varphi = \varphi(x - vt) \quad (4.3.3)$$

将(4.3.3)式代入方程(4.3.2),容易求得此解的特征:

$$v = \varphi \quad (4.3.4)$$

即 φ 在数值上与速度 v 相等。这种波动解的状态是不能保持恒定的,在 φ 数值大处速度 v 也大,反之, φ 小处 v 也小,结果波形随时间而变,例如图 4.3.4(a)中 $t=0$ 时, A, B 两点在 t 时刻到达 A', B' 位置。这说明非线性方程的解一般是不稳定的。

相似地,线性色散方程

$$\varphi_t - \varphi_{xxx} = 0 \quad (4.3.5)$$

的解由于色散存在,如果 φ 代表一个波包,则波包随时间会塌缩,即色散导致波包的不稳定性。但是 KdV 方程(Korteweg-de Vries)

$$\varphi_t - 6\varphi\varphi_x + \varphi_{xxx} = 0 \quad (4.3.6)$$

既包含非线性项 $6\varphi\varphi_x$ 也包含色散项 φ_{xxx} ,而它的解却是一个稳定的波包,KdV 方程中色散项

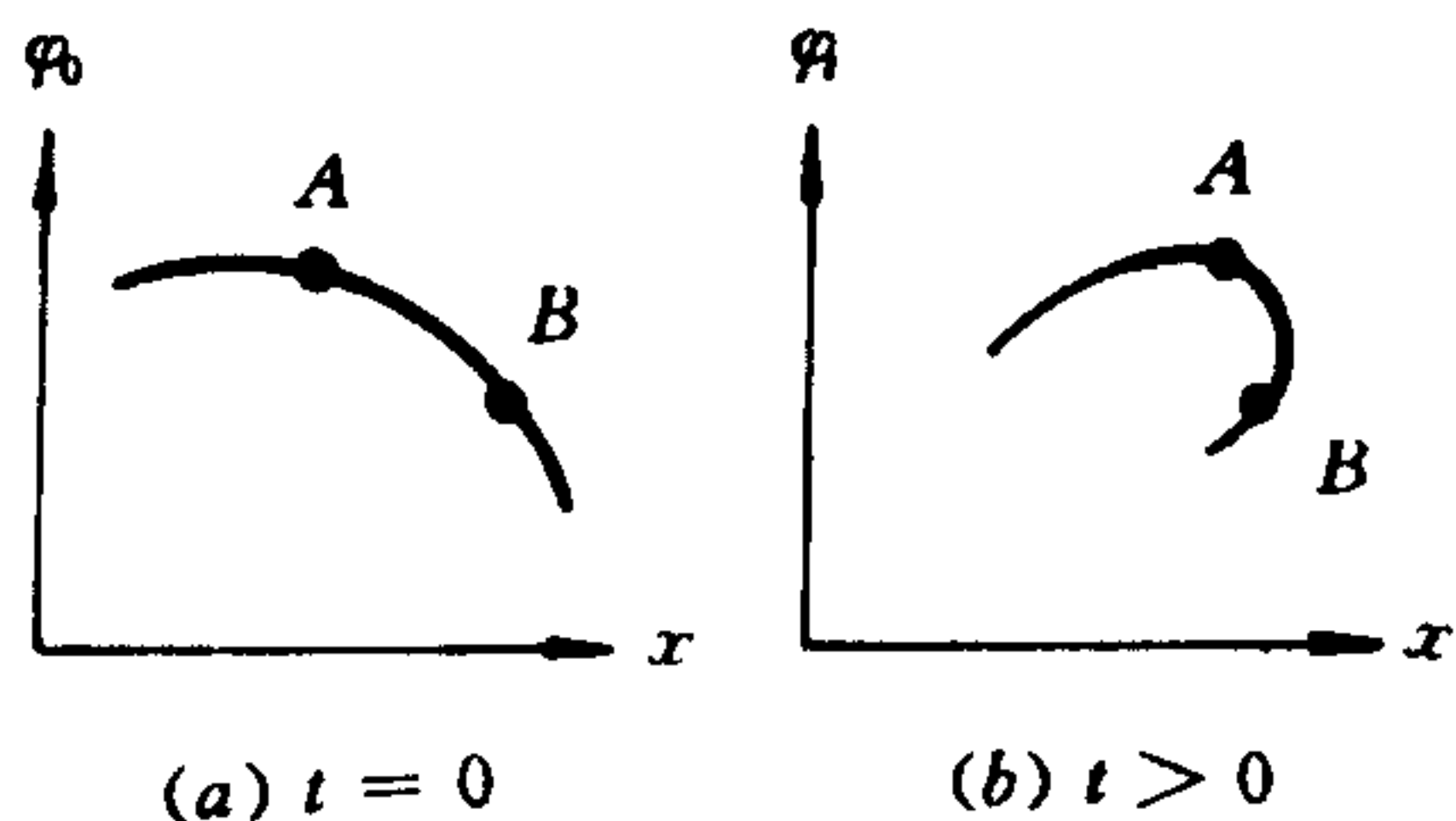


图 4.3.4 非线性方程 $\varphi_t + \varphi\varphi_x = 0$ 解的不稳定性

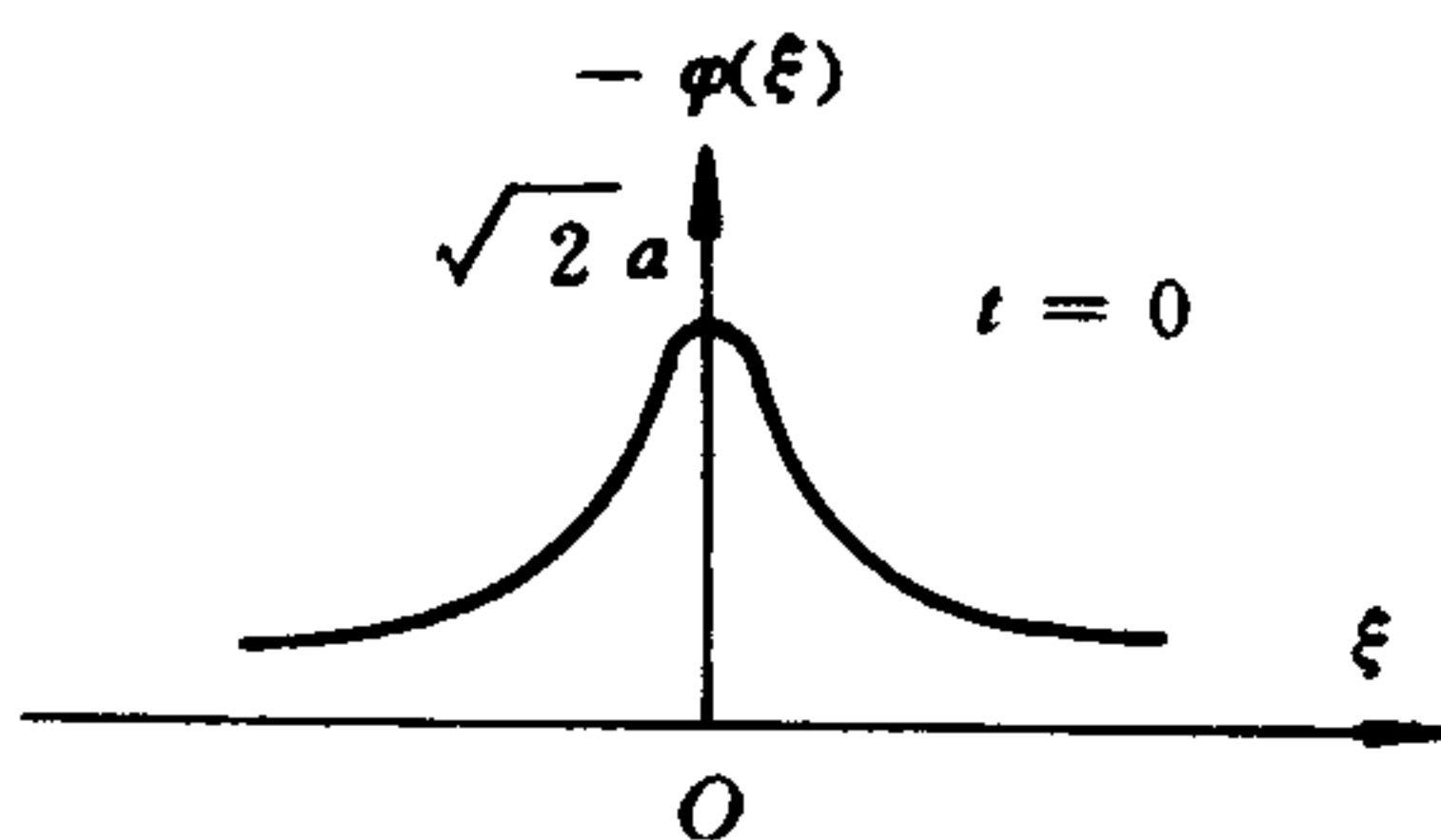


图 4.3.5 KdV 方程的孤子解 (图中 $\xi = a(x - x_0)$)

的作用正好遏制了非线性项造成的解的不稳定性,这是它的显著特点。KdV 方程是 Korteweg 和 de Vries 在 1894 年建立的,开始时只用它描述流体力学中浅水波的运动,1960 年以后在物理学中得到了广泛的应用。可以证明 KdV 方程有如下的不变行波解:

$$\varphi = -2a^2 \operatorname{sech}^2[a(x - 4a^2t - x_0)] \quad (4.3.7)$$

图 4.3.5 描述了这个行波解,通常称为“孤立波”(Solitary Wave)或“孤子”(Solitons)。从物理学的观点来看,孤子是能量有限的,在空间具有局域性的非线性波,即不随时间流逝而弥散的非线性方程的解,当两个孤子接近而相互作用时呈现出两个粒子弹性散射的规律。图 4.3.6 示出了孤子的四种类型,它们是波包、倒波包、畴壁和反畴壁。

除了 KdV 方程以外,还有两类重要的非线性方程能给出孤子解,即非线性 Schrödinger 方程(NLS)和 Sine-Gordon 方程。NLS 方程为

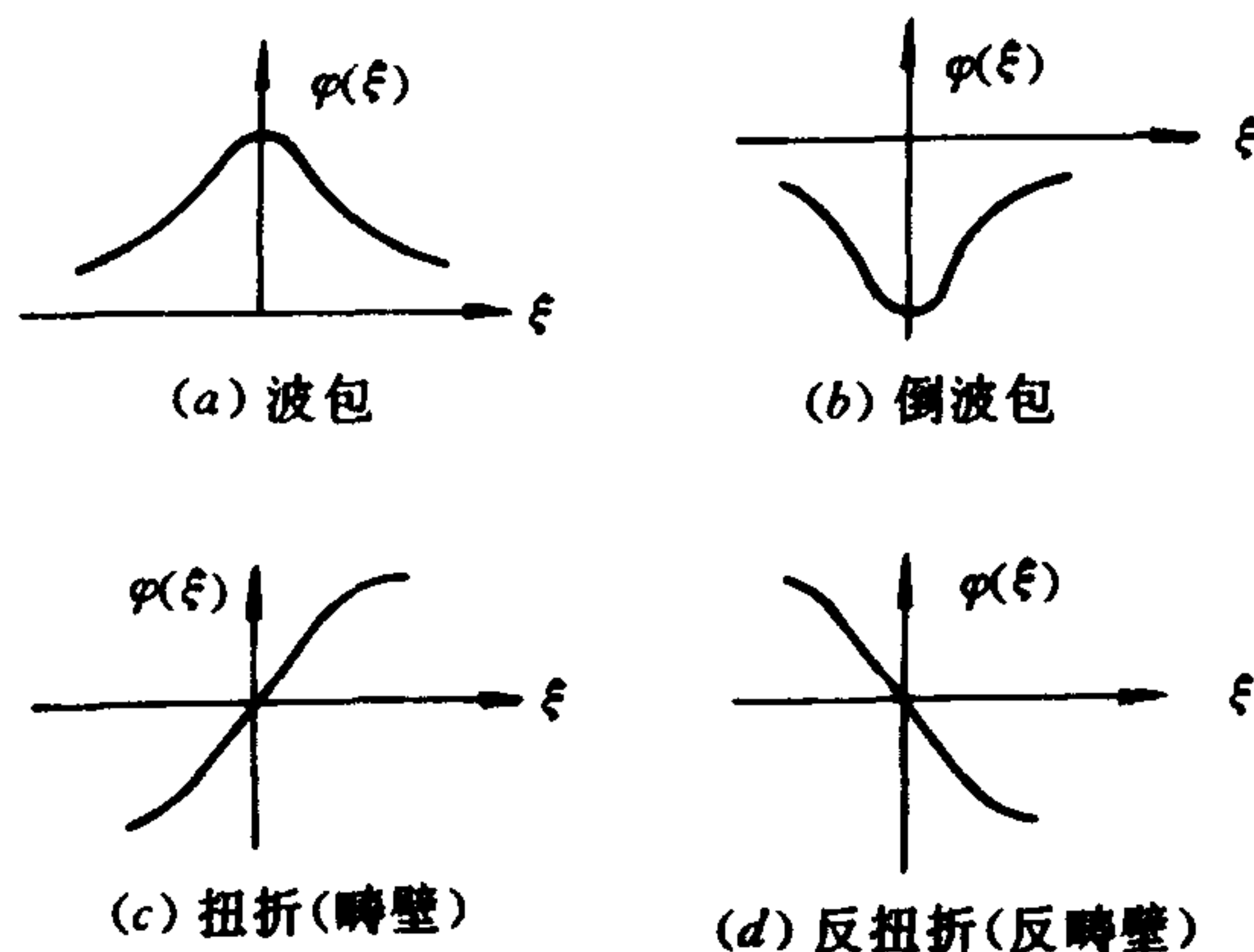


图 4.3.6 四种类型的孤立波(孤子)

$$i\varphi_t + \alpha\varphi_{xx} + \beta|\varphi|^2\varphi = 0 \quad (4.3.8)$$

此方程的非线性项中 $\beta|\varphi|^2$ 起了势能的作用,此时(4.3.8)式具有 Schrödinger 方程的形式。当 $\alpha\beta > 0$ 时,NLS 方程给出孤子解。

Sine-Gordon 方程具有如下的形式:

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} = \sin\varphi \quad (4.3.9)$$

当 φ 很小时,作近似 $\sin\varphi \approx \varphi - \frac{1}{3!}\varphi^3$,Sine-Gordon 方程变为非线性场方程:

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} = \varphi - \frac{1}{3!}\varphi^3 \quad (4.3.10)$$

Sine-Gordon 方程给出正、反扭折孤子解,可用来描述铁磁体和铁电体中畴壁的运动、超导体中 Josephson 结的磁通量子线的传播以及一维电荷密度波、表面电子吸附等物理现象。

3. 聚乙炔中的孤子

(1) 孤子方程

讨论反式聚乙炔,(图 4.3.3)在二聚化基态中 A 相与 B 相是简并的,相邻两个碳原子的位移 u_n 与 u_{n+1} 大小相等方向相反,可统一用 Φ_n 来表示:

$$u_n = (-1)^n \Phi_n, \quad \Phi_n^A = -u_0, \quad \Phi_n^B = +u_0 \quad (4.3.11)$$

当碳链上产生更键缺陷时,A 相转变为 B 相,并在两相之间产生一个过渡区,称为正畴壁,反之,从 B 相转变为 A 相,中间产生一个反畴壁。在每一相中, Φ_n 是常数,即所有原子的位移数值相等(u_0),但在畴壁中 Φ_n 不再为常数。例如,在正畴壁中, Φ_n 由 $-u_0$ 变为 $+u_0$,而在反畴壁中, Φ_n 则由 $+u_0$ 变为 $-u_0$ 。于是畴壁中 Φ_n 是原子位置的函数 $\Phi(x_n)$,整个链的能量 E 就成为 $\Phi(x_n)$ 的泛函 $E[\Phi(x_n)]$ 。由变分原理可知 $E[\Phi(x_n)]$ 的极值条件可决定畴壁中原子的稳定位移分布,即

$$\frac{\delta E[\Phi(x_n)]}{\delta \Phi(x_n)} = 0 \quad (4.3.12)$$

在 Landau-Ginzberg 平均场理论中,系统的能量泛函具有如下的形式(Φ^4 场):

$$E[\Phi(x_n)] = \int dx \left[\frac{1}{2} A^2 \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)^2 - B\Phi^2(x) + C\Phi^4(x) \right] \quad (4.3.13)$$

这里 $\Phi(x)$ 就是系统的序参量, A 、 B 和 C 都为正数, 为简单起见, 用连续的 x 代替分立的原子位置 x_n 。

由 $\frac{\partial E}{\partial \Phi} = 0$ 求得基态

$$\Phi = \pm \sqrt{\frac{B}{2C}} \quad (\text{对应 } B \text{ 相和 } A \text{ 相}) \quad (4.3.14)$$

令

$$u_0 = \sqrt{\frac{B}{2C}}, \quad \beta^2 = \frac{A^2}{4C}, \quad D = -\frac{B^2}{16C^2} \quad (4.3.15)$$

改写(4.3.13)式:

$$E[\Phi(x)] = 4C \int dx \left[\frac{\beta^2}{2} \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)^2 + \frac{1}{4} (\Phi^2 - u_0^2)^2 + D \right] \quad (4.3.16)$$

完成变分:

$$\beta^2 \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + u_0^2 \Phi - \Phi^3 = 0 \quad (4.3.17)$$

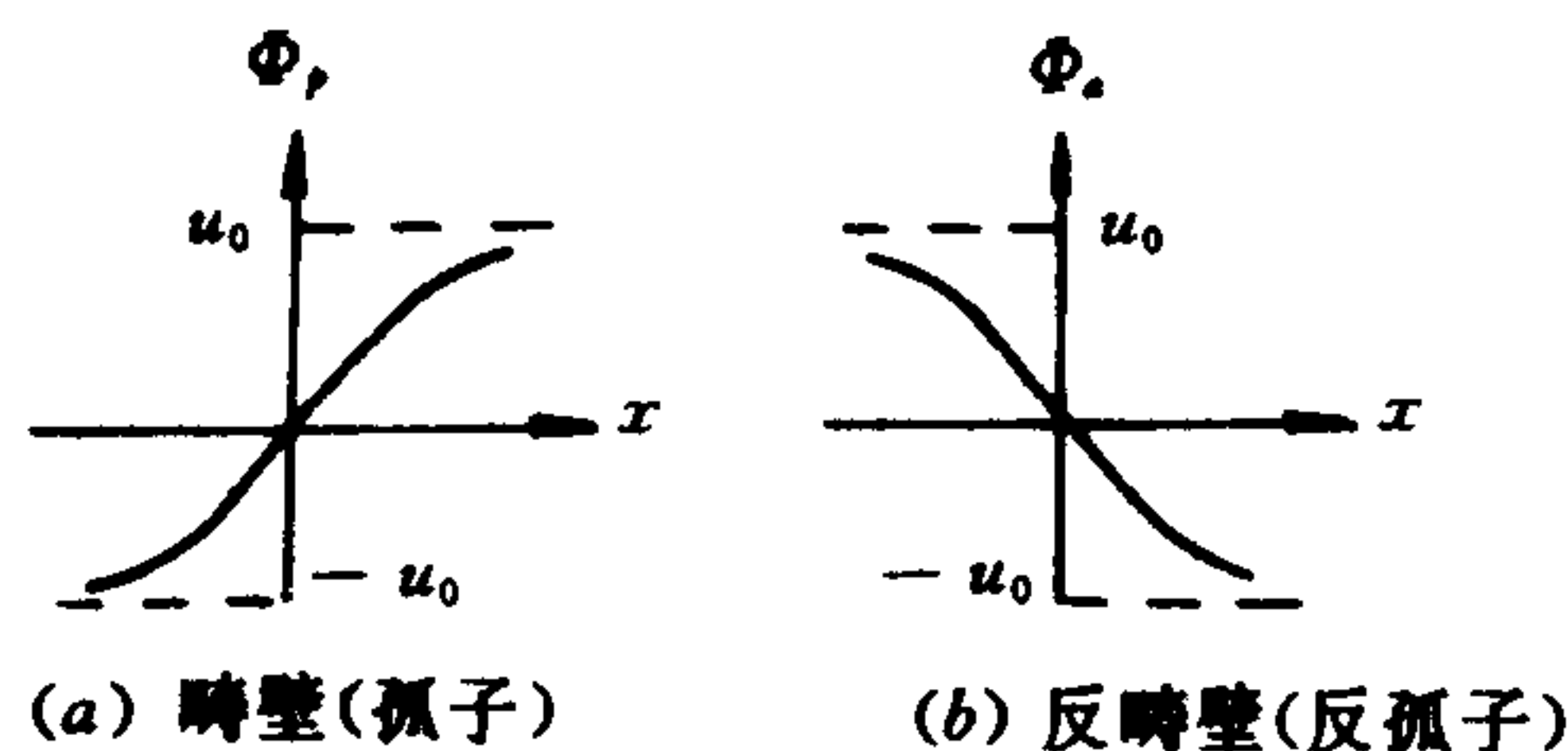


图 4.3.7 聚乙炔的孤子解

非线性方程(4.3.17)就是给出系统激发态稳定位移的方程, 这个方程有扭折型孤子解:

$$\Phi_p = u_0 \tanh \frac{x}{\xi} \quad (4.3.18)$$

$$\Phi_a = -u_0 \tanh \frac{x}{\xi} \quad (4.3.19)$$

式中 $\xi = \frac{\sqrt{2}\beta}{u_0}$; Φ_p 描述了正畴壁, 自左而右逐渐从 A 相转变为 B 相; Φ_a 描述反畴壁, 系统由 B 相转变为 A 相。注意振幅为 u_0 , 到达 u_0 后相变就实现了。由以上讨论可知, Φ 服从的方程为非线性的, 其解 Φ_p 和 Φ_a 分别称为正孤子和反孤子解(如图 4.3.7 所示)。

(2) 孤子能级

在二聚化的基态 A 相或 B 相中, 电子在周期为 $2a$ 的周期性势场中运动, 能带如图 4.2.5 所示, 导带和价带都是扩展态, 二带中间存在 $2\Delta_0$ 的能隙。在更键缺陷产生后, 正反畴壁中激发起正反孤子, 畴壁中原子位移 $\Phi(x)$ 不为常数, 破坏了原来的周期性势场, 因此畴壁中存在畸变势场, 电子在此局域场作用下形成局域电子态, 波函数只局域于畴壁范围, 而对应分立能级好象半导体中杂质深能级一样只位于能隙之中。聚乙炔的导带与价带是对称的, 所以孤子对应的局域能级位于能隙中间的 E_F 位置上。图 4.3.8 描绘了 $(CH)_x$ 的孤子能级, 孤子能级与 E_F 重合。在实验上分析掺 AsF_5 反式聚乙炔的吸收光谱时, 发现了位于禁带中间的孤子能级, 对应能量为 0.75eV , 而 1.5eV 处的吸收峰则对应从价带到导带的跃迁。图 4.3.9 示出了这两个吸

收峰随掺杂量的变化,未掺杂时孤子能级不出现。

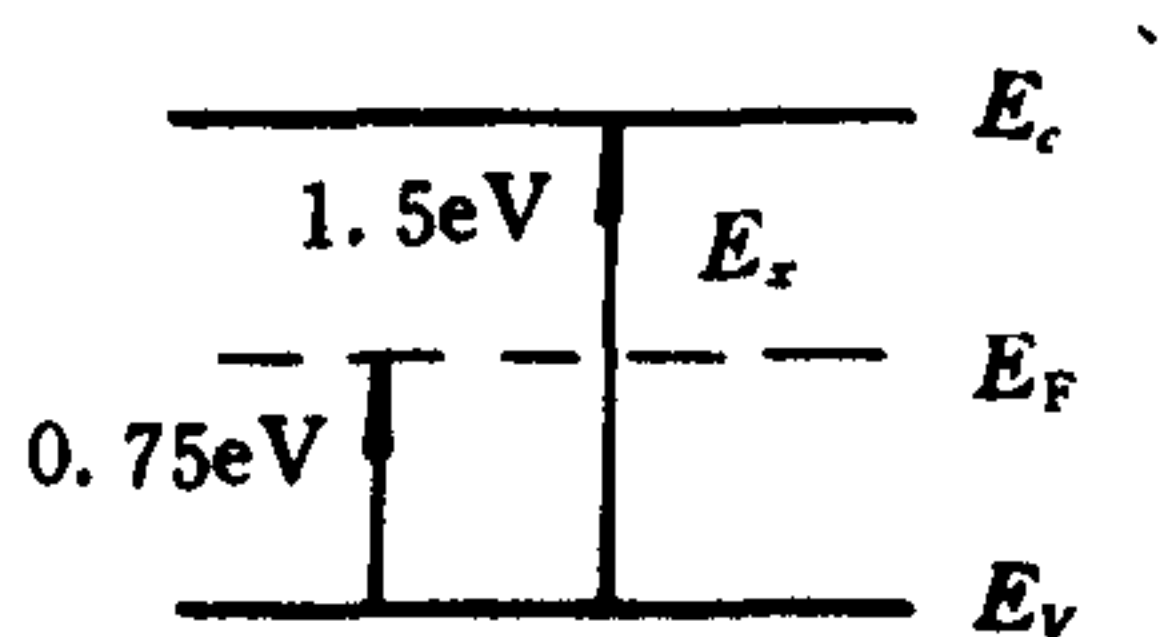


图 4.3.8 聚乙炔中的孤子能级

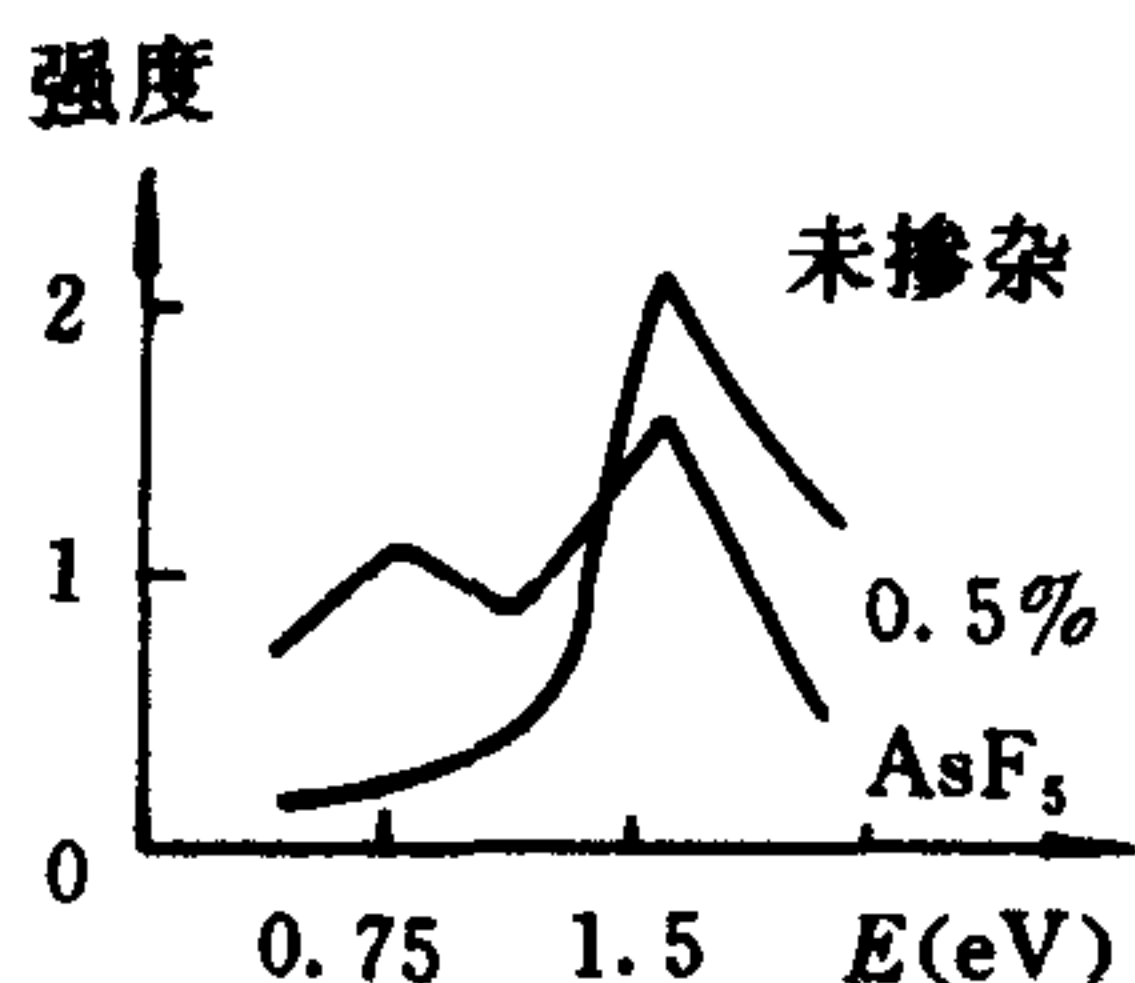


图 4.3.9 反式聚乙炔吸收光谱

(3) 三种孤子

研究反式聚乙炔掺杂电导率 σ 和 Pauli 自旋磁化率 χ 实验时发现 σ 和 χ 没有必然的联系,一般情况下电导率上升时,表征自由电子存在的 Pauli 磁化率也上升。聚乙炔的 σ - χ 实验结果示于图 4.3.10,由图可知,当掺杂量增加时,电导率 σ 上升了 12 个数量级,但 Pauli 磁化率 χ 几乎不变。这说明载流子的电荷与自旋是分离的,与电子(空穴)导电机制不同。实验还发现具有自旋的中性载流子。研究证实反式聚乙炔中参与导电的载流子是孤子,现已发现存在三种孤子,它们有三种荷电状态($\pm e$ 和 0),同时具有三种自旋状态($\pm \frac{1}{2}$ 和 0),表 4.3.1 列出三种孤子的电荷和自旋数值。

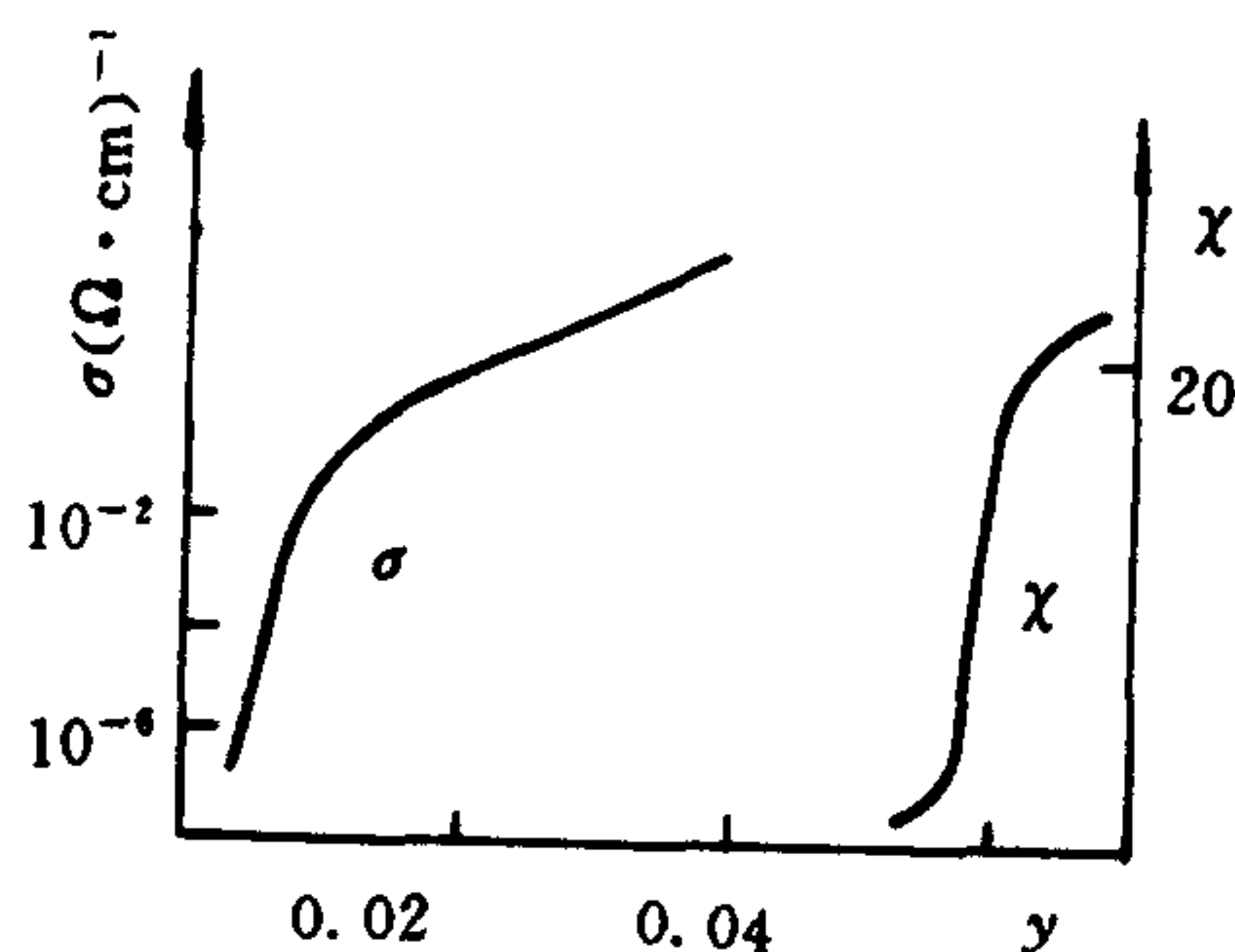


图 4.3.10 聚乙炔 σ 和 χ 随杂质含量 y 的变化

表 4.3.1 反式聚乙炔的三种孤子

孤子种类	电荷 q	自旋 s
中性孤子	0	$\pm \frac{1}{2}$
正孤子	$+e$	0
负孤子	$-e$	0

未掺杂的 $(CH)_x$, 二聚化前后都为电中性,设碳链中有 N 个 π 电子。在孤子激发后,1 个电子处于禁带中的分立能级上, $N-1$ 个电子仍处于价带中。禁带中这个电子的自旋状态可以是 $+\frac{1}{2}$, 也可以是 $-\frac{1}{2}$, 这就是电荷中性、自旋为 $\pm \frac{1}{2}$ 的孤子。(图 4.3.11(a))

在中等掺杂程度,设施主杂质交给 $(CH)_x$ 一个电子,这个电子只能位于禁带中的分立能级上,但原来已经有一个电子在该能级上,由于 Pauli 原理,施主杂质施与的电子与原来禁带中电子自旋必为反向,结果总自旋为零,但施主给予一个电子使 $(CH)_x$ 中的电中性条件破坏,这

种孤子带负电而自旋为零(图 4.3.11(b))。碱金属元素(Na, K 等)是常用的施主杂质,而 AsF₅ 和 I₂ 等为常用受主杂质。当(CH)₂ 中掺进受主中心后受主将禁带中的电子移走,电中性条件也被破坏,这时孤子带正电荷 e,但自旋为零(图 4.3.11(c))。

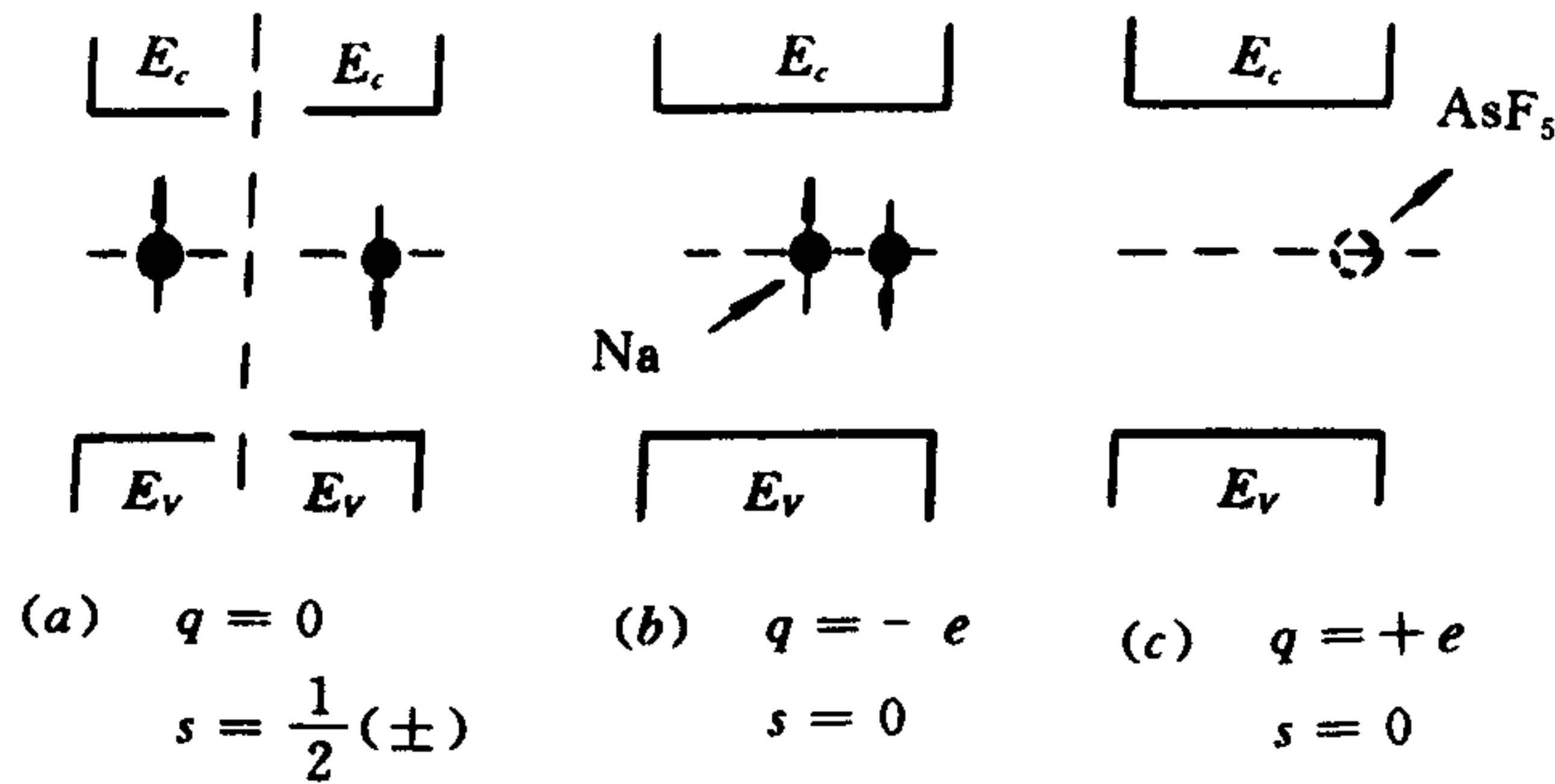


图 4.3.11 反式聚乙炔中存在三种孤子

§ 4.4 电荷密度波和自旋密度波^[10-11]

上面讨论了一维系统的 Peierls 相变和二聚化,在反式聚乙炔中二聚化导致一种新的载流子——孤子参与导电。一般认为二聚化的根源是 Peierls 相变,但近年来也有提出电子相关假设,认为是在位电子相关引起二聚化。二聚化改变了原来的晶格周期势场,造成新的周期势,电子在新的势场中运动时,其密度分布也跟着变化,形成波长 $\lambda = \frac{1}{2k_F}$ 的电荷密度波 (Charge Density Wave, 简称 CDW)。在表 4.2.1 中我们已经列出一维导体的特性, TaS₃ 的 CDW 波长是晶格常数的 4 倍,对于 KCP 则为 6 倍,这些材料称“公度 CDW”,而 NbS₃ 和 TTF-TCNQ 则为非公度 CDW,前者 CDW 波长是晶格常数的 4.16 倍,对于后者为 3.76 倍。特别对于 NbSe₃,它成为 1-维导体的机理正是由于产生了 CDW 而非 Peierls 相变。

二聚化除了形成 CDW 以外,还可形成自旋密度波 (Spin Density Wave, 简称 SDW)。在考虑凝聚模型时,通常认为电子系统基态的电荷密度和自旋密度都是均匀分布的,但 Overhauser 指出,在考虑电子系统的交换能和关联能以后,基态电荷和自旋分布并非均匀,而呈周期性起伏的波动状态,波长为

$$\lambda = \frac{1}{2k_F} \quad (4.4.1)$$

考虑电子-电子交换相互作用时,需要将自旋向上与向下的电子分开来考虑,假定自旋向上和向下的电子密度分别为 ρ_{\uparrow} 和 ρ_{\downarrow} :

$$\rho_{\uparrow} = \frac{1}{2}\rho_0 [1 + A \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \varphi_{\uparrow})] \quad (4.4.1)$$

$$\rho_{\downarrow} = \frac{1}{2}\rho_0 [1 + A \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \varphi_{\downarrow})] \quad (4.4.2)$$

其中 φ_{\uparrow} 和 φ_{\downarrow} 分别为它们的位相, ρ_0 是平均电子密度, A 为密度起伏的相对振幅。 φ_{\uparrow} 和 φ_{\downarrow} 可以相关,也可以不相关,现分三种情况来讨论。

1) 自旋向上和向下的电子具有相同的位相 $\varphi_{\uparrow} = \varphi_{\downarrow}$, 总电荷密度为 ρ_{\uparrow} 与 ρ_{\downarrow} 之和:

$$\rho = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow} = \rho_0 [1 + A \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \varphi)] \quad (4.4.3)$$

自旋向上与向下相互抵消,总自旋为零, $s=0$ 。空间只有电荷起伏,没有自旋起伏,即只有 CDW,不存在 SDW,如图 4.4.1(a)所示。

2) $\varphi_{\uparrow} = \varphi_{\downarrow} + \pi$ 。正负自旋电子的电荷密度波反位相,总电荷密度为常数: $\rho = \rho_0$,自旋密度相加,

$$S = S_{\uparrow} - S_{\downarrow} = \frac{\hbar}{2} \rho_0 A \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \varphi) \quad (4.4.4)$$

此时只有自旋密度波,空间电荷分布是均匀的,即只有 SDW 而无 CDW。

3)CDW 与 SDW 共存。当 φ_{\uparrow} 与 φ_{\downarrow} 之差既不为零,也不等于 π 时,CDW 和 SDW 同时存在。

我们在 1-维系统中讨论 CDW,但并非只有 1-维系统才存在 CDW,现在已看到 2-维系统中的 CDW,至于 3-维系统中是否存在 CDW,目前正在研究。

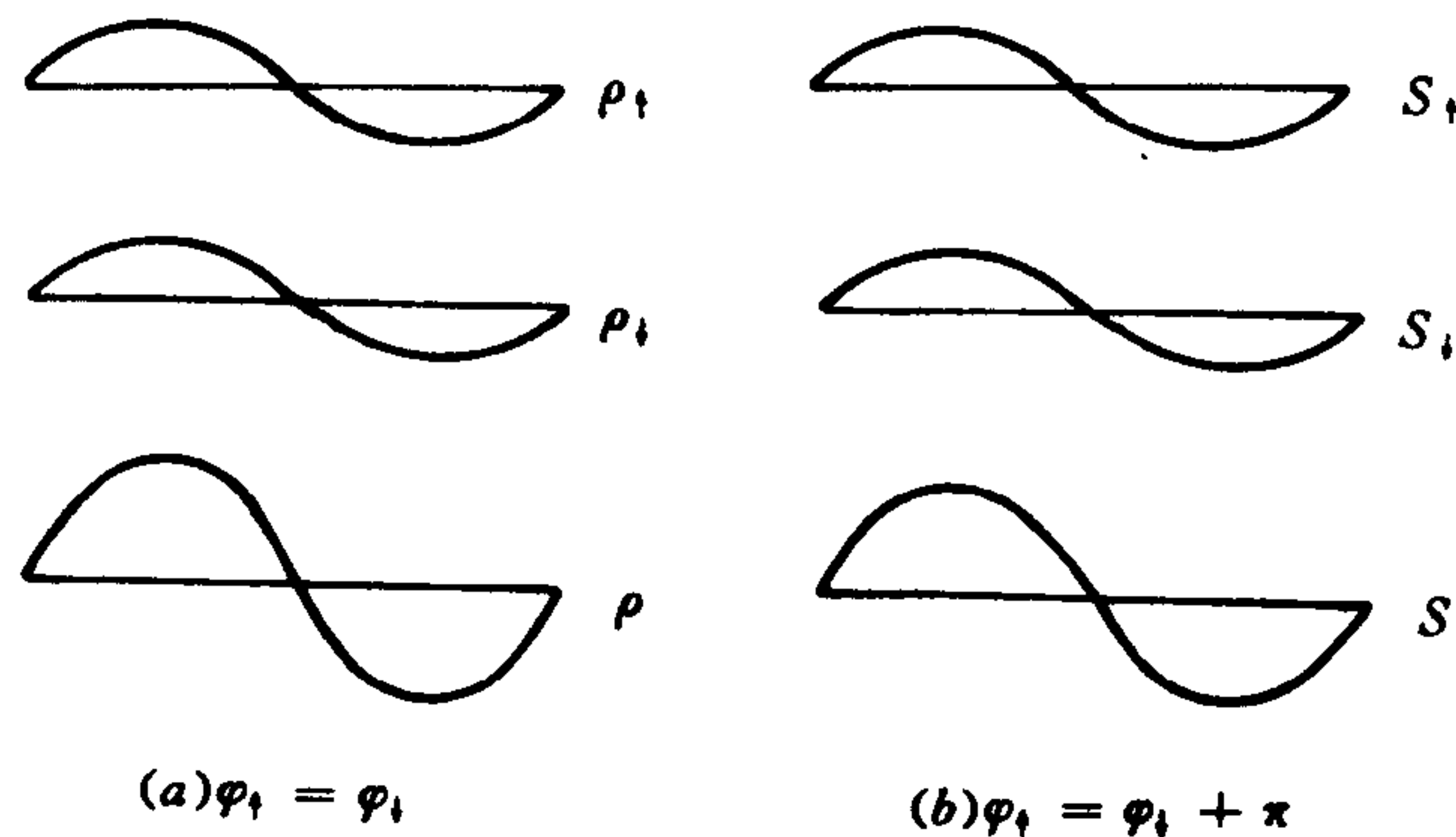


图 4.4.1 电荷密度波(CDW)(a)和自旋密度波 SDW(b)

§ 4.5 量子 Hall 效应^[12-15]

1. 量子 Hall 效应的发现

Hall 效应是 1879 年发现的,Hall 系数是固体物理学中经常测量的物理量,特别对于半导体,由 Hall 系数的测量可断定其中载流子的电荷符号,结果发现有带负电的,也有带正电的,这就是半导体中的电子和空穴。

图 4.5.1 是 Hall 效应实验示意图。在样品上所加电流 I 沿 x 方向,磁场 B 沿 z 方向,样品是薄片(2-d),两接触点之间长为 L ,宽为 W ,厚度假定等于 1,于是样品的横截面积就等于 W 。实验中测量纵向电势差 V_l 和横向电势差 V_H (就是 Hall 电势差),由此就可求得样品的 Hall 系数。电子在垂直磁场的 XY 平面中运动,电子处于 Landau 能级之中。

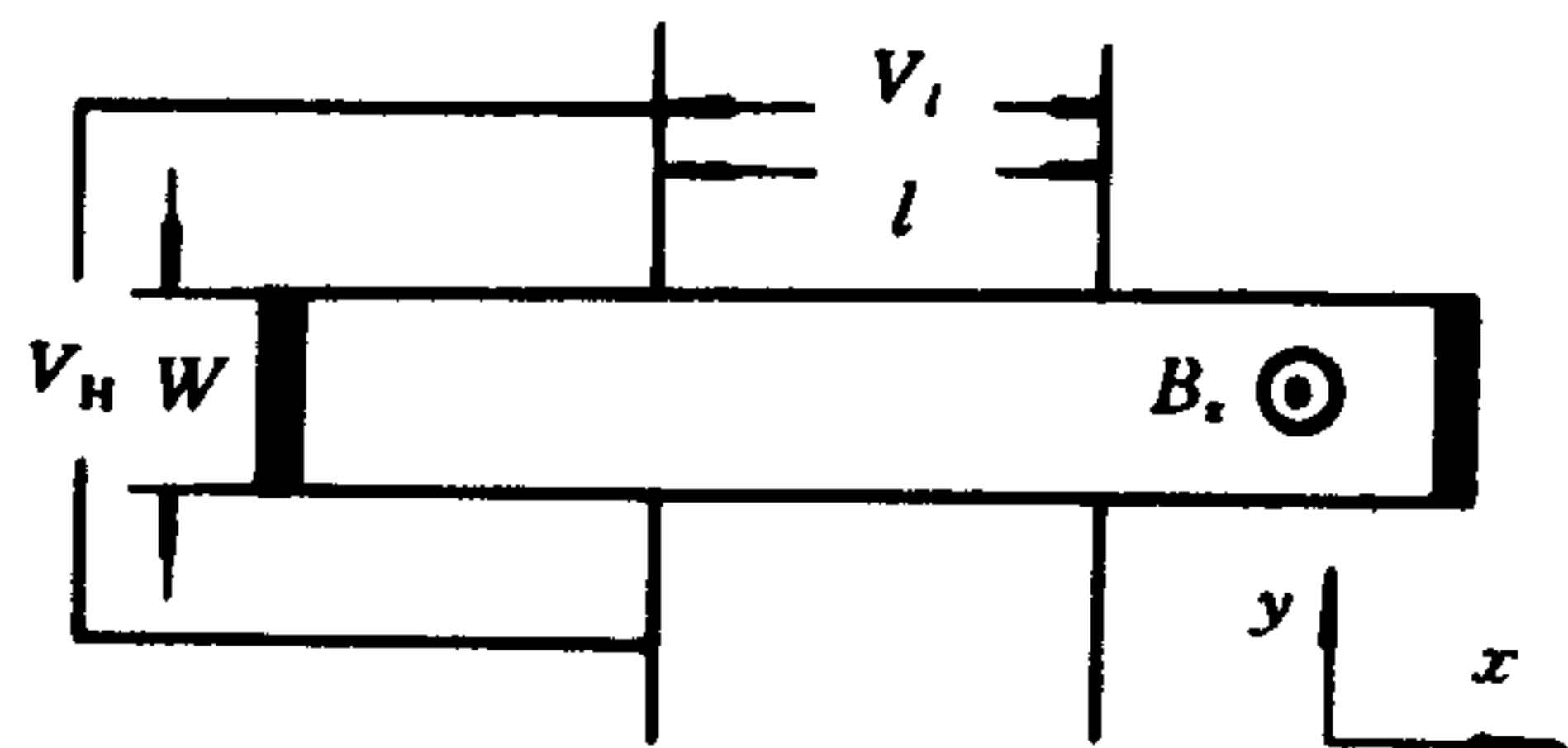


图 4.5.1 Hall 效应实验示意图

样品加上磁场后电导率和电阻率都是张量,

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}, \quad \rho = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \quad (4.5.1)$$

电流密度和电场强度的关系为

$$\mathbf{j} = \sigma \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \rho \cdot \mathbf{j} \quad (4.5.2)$$

假定杂质散射引起的弛豫时间为 τ , 在电场和磁场中电子的运动方程为

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m}(\mathbf{E} + \mu_0 \mathbf{v} \times \mathbf{H}) - \frac{\mathbf{v}}{\tau} \quad (4.5.3)$$

在稳定状态下, $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$, $\mathbf{j} = -nev$. 无磁场时的经典电导率为

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (4.5.4)$$

在磁场中电子的回转频率为

$$\omega_c = \frac{\mu_0 e H}{m} = \frac{eB}{m} \quad (4.5.5)$$

从方程(4.5.3)可以导出如下方程组

$$\begin{aligned} \sigma_0 E_x &= \omega_c \tau j_y + j_x \\ \sigma_0 E_y &= -\omega_c \tau j_x + j_y \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

由以上诸式不难求得下列关系

$$\begin{aligned} \rho_{xx} = \rho_{yy} &= \frac{1}{\sigma_0}, & \rho_{xy} = -\rho_{yx} &= \frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} = \frac{B}{ne} \\ \sigma_{xx} = \sigma_{yy} &= \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2}, & \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} &= \frac{-\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

纵向电导率和横向电导率分别与电阻率相联系:

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (4.5.8)$$

改写(4.5.7)式:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{-\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} = \frac{\sigma_0 - \sigma_0 - \sigma_0 \omega_c \tau \omega_c \tau}{[1 + (\omega_c \tau)^2] \omega_c \tau} = \frac{\sigma_0}{[1 + (\omega_c \tau)^2] \omega_c \tau} - \frac{\sigma_0 [1 + (\omega_c \tau)^2]}{[1 + (\omega_c \tau)^2] \omega_c \tau} \\ &= \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau} - \frac{\sigma_0}{\omega_c \tau} = \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau} - \frac{ne}{B} \end{aligned} \quad (4.5.9)$$

当 $\sigma_{xx} = 0$ 时, 有 $j_x = \sigma_{xy} E_y$, 其中 σ_{xy} 就是 Hall 电导率:

$$\sigma_H = \sigma_{xy} = -\frac{ne}{B} \quad (4.5.10)$$

我们可以由(4.5.10)式来求 Hall 电导率 σ_H , 其中 n 为电子密度, 当电子填充到第 l 个 Landau 能级时,

$$n = l \frac{eB}{2\pi\hbar} \quad (4.5.11)$$

于是 Hall 电导率为

$$\sigma_H = -\frac{ne}{B} = -l \frac{e^2}{2\pi\hbar} \quad (l \text{ 为整数}) \quad (4.5.12)$$

对应的 Hall 电阻率可由(4.5.7)式和上式求得

$$R_H = \rho_{xy} = \frac{B}{ne} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \cdot \frac{1}{l} \quad (4.5.13)$$

一般情况下, Si MOS 场效应管中电子浓度 n 与栅极电压 V_G 成正比, 也就是说 σ_H 与 V_G 有线性关系。但 1980 年 Von Klitzing 在低温 (1.5K) 强场 (18T) 下发现 Hall 电阻率 R_H 出现量子化平台, 公式 (4.5.13) 中的 l 为整数, 此时纵向电阻率 $R_{xx}(\rho_{xx})$ 消失, 这就是整数量子 Hall 效应, 简称 IQHE。图 4.5.2 为 Si MOSFET 上观察到的 IQHE。图中纵坐标是纵向和横向电阻率, 当 $R_{xx}=0$ 时, $R_{xy}(R_H)$ 达到一个平台, 随着栅极电压不断增加, R_H 平台对应数值 ($\frac{1}{l}$) 跟着变化, 其中整数 l 值不断增大。

量子 Hall 效应的发现使二维电子系统的研究进入了一个新的阶段, 在基础研究方面具有重要意义。IQHE 在实验上提供了一个绝对标准电阻, 即 (4.5.13) 式中的因子 $\frac{2\pi\hbar}{e^2} = 25812.806\Omega$, 这是只与电子电荷 e 以及 Planck 常数 \hbar 有关的数。此外 IQHE 还校正了光谱的精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c\epsilon_0} = 137.036$$

研究量子 Hall 效应的样品主要为半导体, 除上面所述的 Si-MOSFET 以外, 还有 GaAs-GaAlAs 异质结, 1982 年崔琦等人意外发现了分数量子 Hall 效应 (Fractional quantized Hall effect, 简称 FQHE), Landau 能级的填充因子可取 $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{5}{3}, \frac{1}{5}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \dots$ 分数, 开辟了研究分数电荷的新方法。

2. 量子 Hall 效应理论

(1) 定性分析

分析图 4.5.2 的 Si MOSFET 的 Hall 电阻率曲线可知 R_{xy} 平台的中心对应两个 Landau 能级的中间位置, 而这里又正好是 $R_{xx}=0$ 的地方, 此时纵向电流等于零, 说明电子在这区间是局域化的。通过这区域, R_{xx} 增加电子又可以迁移, 电子从局域态又变为扩展态。我们在图 4.5.3 中描绘了 Landau 能级的展宽, 这是由于二维电子系统中存在杂质和界面的粗糙性, 形成无规势能, 从而引起电子态的变化。Landau 能级展宽成为子能带, 扩展态位于 Landau 能级附近, 而局域态在两个 Landau 能级之间。当电子密度增加时, 电子逐步填充局域态, 局域态不能提供电流, 局域态的形成减少了扩展态的数目, 使电流不再变化。

在磁场 B 变化时, 包含在 Landau 子能带中电子态的数目变化, Fermi 能级 E_F 随之移动, 当 E_F 如图 4.5.3 那样处在能隙位置时, 或处于局域态, 载流子受散射的几率大为减少, 纵向电导率很小。只要 Fermi 能级仍落在扩展态区域以外, 扩展态中填充数不变, 电流保持不变, Hall 电阻保持不变, 成为上面所说的电阻率平台, 这样定性解释了量子 Hall 效应的机理。

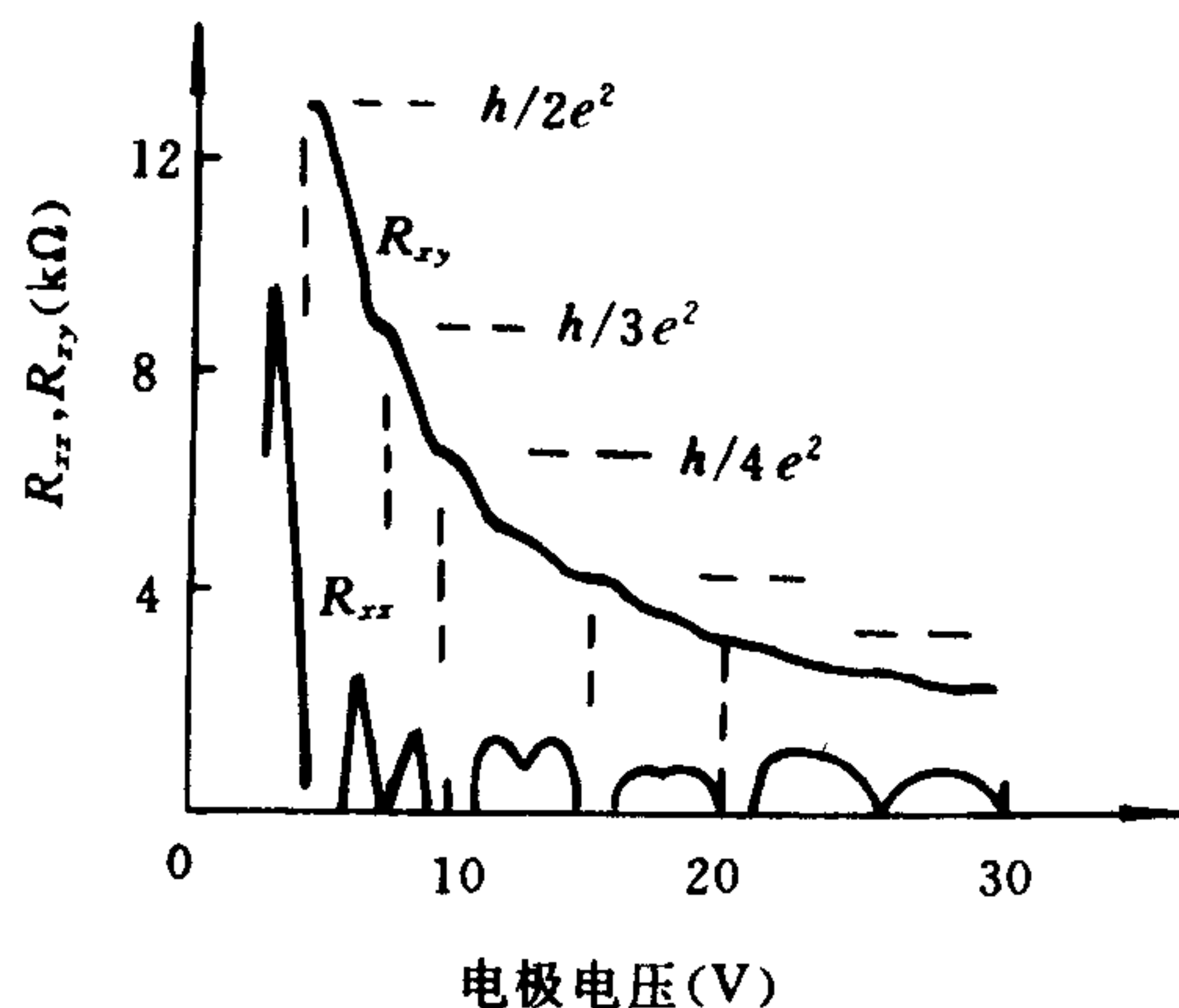


图 4.5.2 在 Si MOSFET 上观察到的量子 Hall 效应

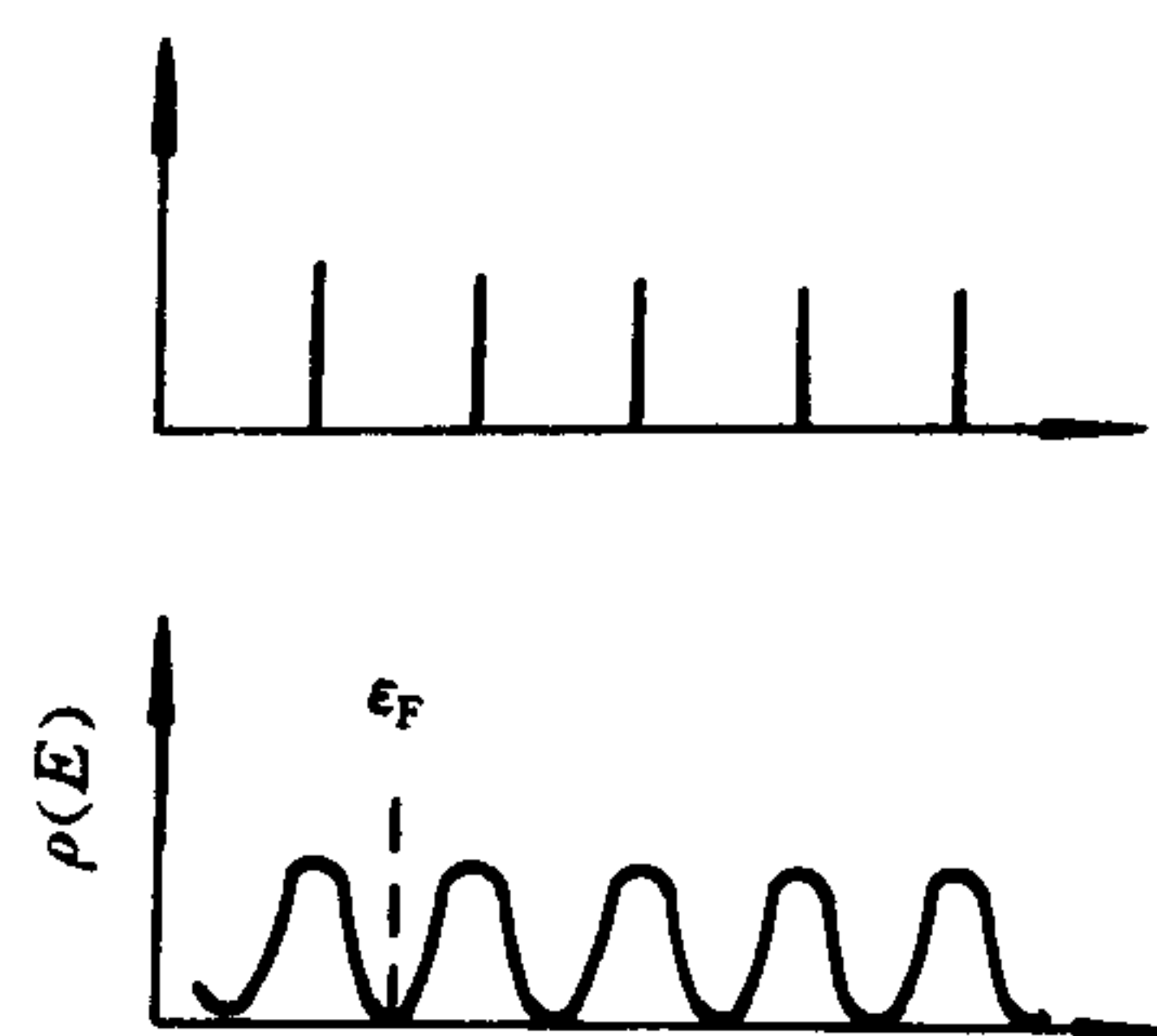


图 4.5.3 存在无规势时 Landau 能级的展宽

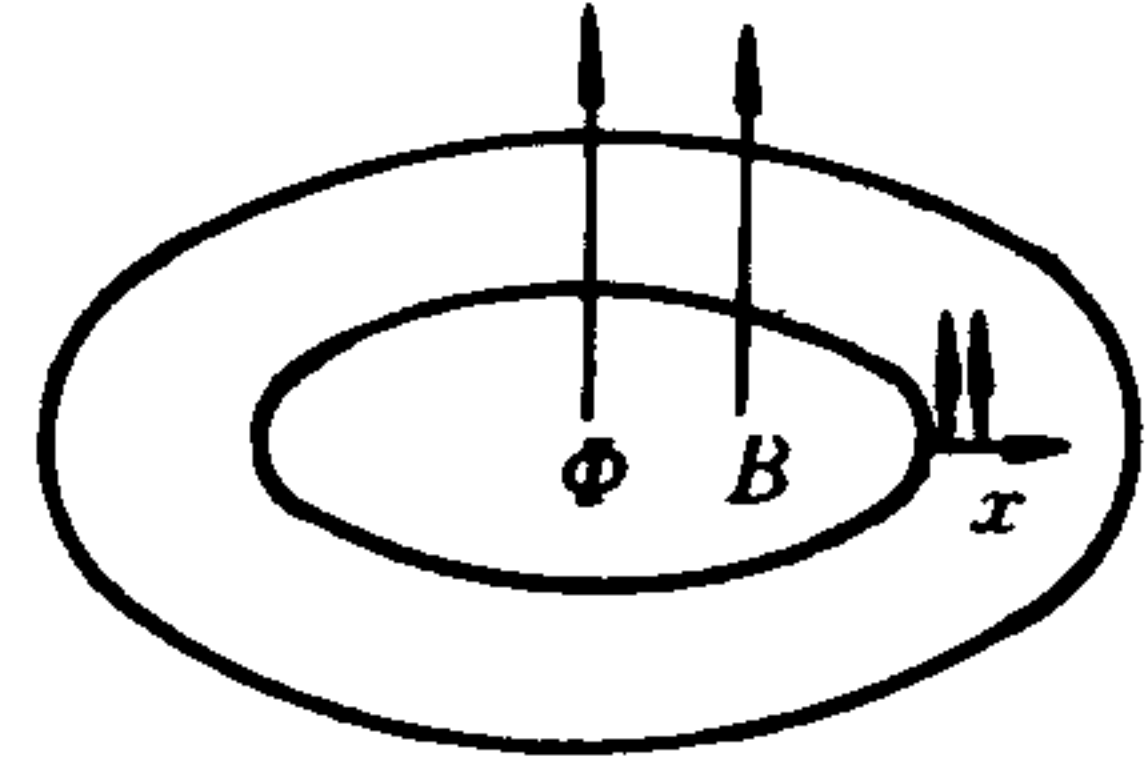
(2) IQHE 理论

下面的讨论主要根据 Laughlin 的一篇论文及随后的发展。在 x - y 平面上放置一个半径 R 很大的金属圆盘 (Corbino 盘), 磁场与金属表面垂直, 电子波函数是扩展的, 电子绕盘一周后通过电子的封闭轨道的磁通是量子化的, 设

$$L_1 \Phi_0 = \pi R^2 B, \quad L_1 \text{ 为整数} \quad (4.5.14)$$

在盘中心放一个内部磁通量为 Φ 的细螺线管, 它的磁场不影响管外, 但存在矢势 A , 电子的运动受到矢势 A 的影响, Schrödinger 方程和波函数都包含 A , 但我们可利用规范变换消去它, 作变换

$$\psi(\theta) \rightarrow \psi(\theta) e^{i \frac{\Phi}{\Phi_0} \theta} \quad (4.5.15) \quad \text{图 4.5.4 量子 Hall 效应: Corbino 盘}$$



在电子绕盘一周后, 波函数变为

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi e^{2\pi i \Phi / \Phi_0} \quad (4.5.16)$$

由于波函数要求是单值的, Φ 应为 Φ_0 的整数倍,

$$\Phi = L_2 \Phi_0, \quad L_2 \text{ 也为整数} \quad (4.5.17)$$

Corbino 盘磁通量子化的条件可表示为

$$\pi R^2 B + \Phi = L \Phi_0, \quad L = L_1 + L_2 \quad (4.5.18)$$

于是在 L 确定后, Φ 增加必然导致 R 减少, 电子运动半径内缩, 假定 Φ 增加一个 Φ_0 , 则 $\pi (R_1)^2 B$ 应减少一个 Φ_0 变为 $(L_1 - 1) \Phi_0$, 若电场 E 沿着 x 方向, 则电子内缩 x 时将因电场存在而改变势能 $\Delta U = e E_x x$, 相应电流密度 j_v 等于

$$j_v = \frac{c}{x} \frac{\partial U}{\partial \Phi} = \frac{c}{x} \frac{\Delta U}{\Phi_0} \quad (4.5.19)$$

以磁通量子

$$\Phi_0 = \frac{hc}{e} \quad (4.5.20)$$

及势能变化 ΔU 代入 (4.5.19) 式, 求得

$$j_v = \frac{e^2 E_x}{h} \quad (4.5.21)$$

电荷转移发生在 l 个 Landau 能级上, 故 Hall 电流密度 $j_v = l j_v = l \frac{e^2 E_x}{h}$ 。再由 $j = \sigma \cdot E$, 有

$$j_v = \sigma_{vv} E_x + \sigma_{v\perp} E_v = -\sigma_H E_x \quad (4.5.22)$$

比较上述两个 j_v 表示式, 我们求得 Hall 电导率

$$\sigma_H = -l \frac{e^2}{h} \quad (l \text{ 为整数}) \quad (4.5.23)$$

Hall 电导率等于 $\frac{e^2}{h}$ 的整数倍, 这就是整数量子 Hall 效应。

习 题

4.1 为使 1-d 晶格二聚化以后的哈密顿量对角化, 必须作一次么正变换:

$$\begin{cases} a_k &= -i\alpha_k c_k + \beta_k c_k \\ a_k &= \alpha_k c_k + i\beta_k c_k \end{cases}$$

(a) 求出逆变换表示式;

(b)为使 a_i^* 与 a_i 的交叉项等于零,系数 α_k 和 β_k 等必须满足什么关系式?

4.2 Corbino 盘中在垂直磁场中运动的电子因磁通变化产生的横向电流为

$$j_y = \frac{c}{x} \frac{\partial U}{\partial \Phi},$$

试证明上式。

参考文献

- [1] Peierls R E. *Quantum Theory of Solids*. London:Oxford University Press(1955)
- [2] 孙鑫. 物理学进展 5(1985)467; 6(1986)1
- [3] 孙鑫. 高聚物中的孤子和极化子. 成都:四川教育出版社,1987
- [4] Su W, Schrieffer J, Heeger A. *Phys Rev Lett*, 42(1979)1698
- [5] Su W, Schrieffer J, Heeger A. *Phys Rev*, B 22(1980)2099
- [6] Kagoshima S, et al. *One-dimensional Conductors*. Berlin: Springer-Verlag(1988)
- [7] Ikehata S, et al. *Phys Rev Lett*, 45(1980)1123
- [8] 冯端,金国钧. 凝聚态物理新论. 上海:上海科技出版社,1994
- [9] Kivelson S, et al. *Phys Rev B*,25(1982)4173
- [10] Konig G and Stollhoff G. *Phys Rev Lett*, 65(1990)1239
- [11] Overhauser A. *Phys Rev B*,9(1974)2441
- [12] Von Klitzing K, et al. *Phys Rev Lett*, 45(1980)494
- [13] Tsui D C, et al. *Phys Rev Lett*, 48(1982)1559
- [14] Laughlin R B. *Phys Rev B*,23(1981)5632
- [15] Willett R L, et al. *Phys Rev Lett*, 59(1987)1776