

强磁场中库仑相互作用的少体 二维电子气的能量*

熊 小 明 周 世 勋

(复旦大学物理系)

1986 年 9 月 30 日收到

提 要

本文建立了一种计算强磁场中二维电子气少体问题能量的理论方法,对最低 Landau 能级上有限电子体系作了数值计算,得到了一些新的结果,并且把计算方法推广到较高的 Landau 能级,给出了第二 Landau 能级的数值结果。

一、引 言

实验上 Klitzing 等人发现的量子 Hall 效应^[1]和 Tsui 等人发现的分数量子 Hall 效应^[2]吸引着许多理论工作者对强磁场中二维电子气的研究。为了解释这些实验,掌握二维电子在强磁场中的运动行为,有相当一部分工作是对有限个相互作用电子的体系进行精确的数值计算^[3-5]。人们希望当电子的数目趋向热力学极限时,能从有限电子体系的计算中得到真实物理体系的信息。由于电子计算机的限制,精确的数值计算与各种有根据的外推相辅相成。

本文建立一种计算有限电子体系基态能的方法,计算了最低 Landau 能级上有限电子的能谱。从我们的计算结果中看到了一些新的有趣的关系。由于以前文献报道的工作大多限于最低 Landau 能级,并且很多结论也是来自于最低能级的计算,因此,我们接着考虑第二 Landau 能级的情况。本文的计算方法不难推广到任何较高能级。

二、计算公式的推导

在对称规范下,强磁场中二维电子的正交归一单体波函数为

$$\phi_{KL}(\mathbf{r}) = A_{KL} P_{KL}(r) e^{-\frac{r^2}{4}} e^{i(K-L)\theta}, \quad (1)$$

式中 A_{KL} 是归一化系数, $P_{KL}(r)$ 是 r 的多项式。

$$A_{KL} = \sqrt{K!L!/2\pi},$$

* 中国科学院科学基金资助的课题。

$$P_{KL}(r) = \sum_s' \frac{(-1)^s}{(K-S)!(L-S)!S!} \left(\frac{r}{\sqrt{2}}\right)^{K+L-2s}, \quad (2)$$

式中求和从 $S=0$ 到 $S=\min(K, L)$, K 表示 Landau 能级, L 是 Landau 能级内部本征态的标记. K 和 L 取非负整数. 式中长度以 $a_0 = (\hbar c/eB)^{1/2}$ 为单位, B 是磁场强度.

为了讨论多电子体系, 我们选取二次量子化表象. 体系的哈密顿量为

$$H = \sum_{KL} \hbar \omega_0 \left(K + \frac{1}{2}\right) a_{KL}^\dagger a_{KL} + \sum V(K_1 L_1 K_2 L_2 K_3 L_3 K_4 L_4) a_{K_1 L_1}^\dagger a_{K_2 L_2}^\dagger a_{K_3 L_3} a_{K_4 L_4}, \quad (3)$$

式中 $a^\dagger$ 和 a 分别表示电子的产生和湮灭算符, ω_0 是电子的迴旋频率, V 是电子之间的相互作用势.

$$V = \frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_{K_1 L_1}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{K_2 L_2}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi_{K_3 L_3}(\mathbf{r}_1) \phi_{K_4 L_4}(\mathbf{r}_2). \quad (4)$$

为了计算(4)式中的积分, 我们考虑两个无相互作用电子的体系. 发现体系的波函数可以用两个电子的相对位置和质心位置表示为

$$\phi_{K_1 L_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{K_2 L_2}(\mathbf{r}_2) = \sum_{K_0=0}^{K_1+K_2} \sum_{L_0=0}^{L_1+L_2} \beta_{K_0 L_0}(K_1 L_1 K_2 L_2) \cdot \phi_{K_1+K_2-K_0, L_1+L_2-L_0}(\mathbf{r}_c) \phi_{K_0 L_0}(\mathbf{r}_0), \quad (5)$$

式中 $\mathbf{r}_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $\mathbf{r}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. 系数 β 满足下列递推关系

$$\beta_{K_0 L_0}(K_1 L_1 K_2 L_2) = c b_{K_0}(K_1 K_2) b_{L_0}(L_1 L_2), \quad (6)$$

$$b_0(K_1 K_2) = 1,$$

$$b_1(K_1 K_2) = (K_1 - K_2)/\sqrt{K_1 + K_2},$$

$$b_n(K_1 K_2) = \frac{K_1 - K_2}{\sqrt{(K_1 + K_2 - n + 1)n}} b_{n-1} - \frac{\sqrt{(K_1 + K_2 - n + 2)(n - 1)}}{\sqrt{(K_1 + K_2 - n + 1)n}} b_{n-2}. \quad (7)$$

由下列归一条件决定:

$$\sum_{K_0 L_0} |\beta_{K_0 L_0}(K_1 L_1 K_2 L_2)|^2 = 1. \quad (8)$$

在库仑相互作用下, 利用(5)–(8)式, 可以很容易地得到(4)式的解析表达式为

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{K_0 L_0 \\ K'_0 L'_0}} \beta_{K_0 L_0}^*(K_1 L_1 K_2 L_2) \beta_{K'_0 L'_0}(K_3 L_3 K_4 L_4) \cdot Y_{K_0 L_0 K'_0 L'_0} \\ &\quad \cdot \delta_{K_1+K_2-K_0, K_3+K_4-K'_0} \delta_{L_1+L_2-L_0, L_3+L_4-L'_0}, \\ Y_{K_0 L_0 K'_0 L'_0} &= \int d\mathbf{r} \phi_{K_0 L_0}^*(\mathbf{r}) \frac{1}{\sqrt{2}r} \phi_{K'_0 L'_0}(\mathbf{r}) \\ &= \delta_{K_0-L_0, K'_0-L'_0} \sqrt{K_0! L_0! K'_0! L'_0!} \\ &\quad \cdot \sum_{SS'}' \frac{(-1)^{S+S'}}{(K_0-S)!(L_0-S)!S!(K'_0-S')!(L'_0-S')!S!} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \sqrt{\pi} [2(p - S - S') - 1]!! / 2^{p-S-S'+1} & (K_0 + L_0 + K'_0 + L'_0 = 2p); \\ \frac{1}{2} (p - S - S')! & (K_0 + L_0 + K'_0 + L'_0 = 2p + 1). \end{cases} \quad (10)$$

式中求和从 $S = 0$ 到 $\min(K_0 L_0)$, $S' = 0$ 到 $\min(K'_0, L'_0)$.

三、最低 Landau 能级

首先简单地讨论 $K = 0$ 的 Landau 最低能级, 因为很多人对这一问题作了计算, 通过这一讨论可以验证我们的计算方法.

在最低 Landau 能级, 单电子波函数(1)式变为我们熟悉的形式

$$\phi_L(\mathbf{r}) = (2\pi 2^L L!)^{-1/2} r^L e^{-\frac{r^2}{4}} e^{-iL\theta}. \quad (11)$$

忽略动能项提供的能量常数, 哈密顿量的二次量子化形式为

$$\begin{aligned} H = & \frac{\sqrt{\pi}}{4} \sum_{L_1, \dots, L_4} \sum_{L_0} b_{L_1}(L_1 L_2) b_{L_3}(L_3 L_4) \delta_{L_1+L_2, L_3+L_4} \\ & \cdot \frac{(2L_0 - 1)!!}{(2L_0)!!} \hat{c}_{L_1}^+ \hat{c}_{L_2}^+ \hat{c}_{L_3} \hat{c}_{L_4}, \end{aligned} \quad (12)$$

式中 $\hat{c}_L = a_{0L}$.

利用数值对角化方案, 我们得到 N 个电子的体系具有总角动量为 L 的能谱 (见图 1). 从图 1 中可以看到, 能量形成一个能带. 对 $N = 3, 4, 5$ 的情况, 能带的下边缘与 Girvin 计算的基态能量一致^[4]. 对其它 N , 基态能以 $\Delta L = N$ 为周期出现能量平台的规律仍然存在. 我们也计算了第一激发能隙 E_g , 与 Girvin 的结果比较, 数值有所差别. 但 E_g 随 L 的变化规律完全吻合.

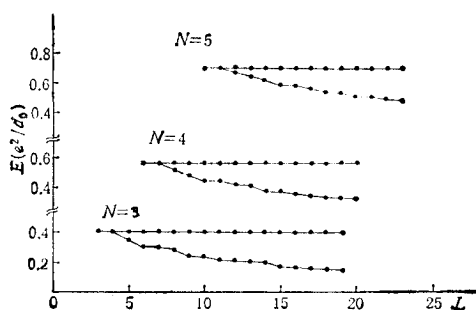


图 1 $N = 3, 4, 5$ 电子体系的能带

能带的上边缘是一条水平线, 也就是说, 这条线所对应的能量是所有 L 的本征能量. 实际上, 在我们的计算中, 存在一条很有趣的规律. 如果我们用 $\{E_L\}$ 表示总角动量为 L 的 N 电子体系所有本征能量的集合, 那么这个集合一定包含于总角动量为 $L+1$ 的本征能量的集合 $\{E_{L+1}\}$ 之中

$$\{E_{L+1}\} \supseteq \{E_L\}. \quad (13)$$

表 1 三电子体系的能量本征值

L	本 征 能 量 ($N = 3$)				
3	0.40157*				
4	0.40157				
5	0.40157	0.35202*			
6	0.40157	0.35202	0.29707*		
7	0.40157	0.35202	0.31617*	0.29707	
8	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.28513*
9	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701*
	0.28513	0.23884*			
10	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353*	0.23884		
11	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27292*	0.23884	0.23000*
12	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329*	0.23884
	0.23000	0.20638*			
13	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26048*
	0.23884	0.23000	0.22002*	0.20638	
14	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26048
	0.25463*	0.23884	0.23000	0.22002	0.20638
	0.20157*				
15	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26048
	0.25463	0.25142*	0.23884	0.23000	0.22002
	0.21007*	0.20638	0.20157	0.18416*	
16	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26408
	0.25463	0.25142	0.24741*	0.23884	0.23000
	0.22002	0.21007	0.20638	0.20157	0.19640*
	0.18416				
17	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26408
	0.25463	0.25142	0.24741	0.24444*	0.23884
	0.23000	0.22002	0.21007	0.20638	0.20157
	0.20091*	0.19640	0.18416	0.18073*	
18	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26408
	0.25463	0.25142	0.24741	0.24444	0.24137*
	0.23884	0.23000	0.22002	0.21007	0.20638
	0.20157	0.20091	0.19640	0.19120*	0.18416
	0.18073	0.16787*			
19	0.40157	0.35202	0.31617	0.29707	0.29701
	0.28513	0.27353	0.27929	0.26329	0.26408
	0.25463	0.25142	0.24741	0.24444	0.24137
	0.23884	0.23878*	0.23000	0.22002	0.21007
	0.20638	0.20157	0.20091	0.19640	0.19288*
	0.19120	0.18416	0.18073	0.17688*	0.16787

进一步我们发现,这一规律并不限于库仑相互作用的体系. 对形如 $V(r) \sim r^n (n \geq -1)$ 的相互作用势,关系式(13)仍然成立. 关于(13)式的实质,还有待于进一步讨论.

Laughlin 对 $N=3$ 的体系也作了数值计算^[3]. 我们发现 Laughlin 的基态在某些角动量时,并非能量极小值,并且他的结果中漏了很多能量本征值. 表1中我们给出了三个电子体系对应于不同角动量的所有本征能量. Laughlin 的全部结果都包含在表1中,并以星号示之. 当然,我们讨论的对象与 Laughlin 略有出入. Laughlin 排除了体系的质心运动,只考虑相对运动部分. 而我们的讨论则包含了质心运动部分. 但我们认为,这一区别并不能解释上述计算结果的差别.

四、第二 Landau 能级

为了考查较高 Landau 能级,我们对第二 Landau 能级作了数值计算. 从第二节可知,这里的讨论不难推广到更高的能级.

假设第一 Landau 能级被填满,在第二 Landau 能级上有 N 个电子,忽略无关紧要的动能项,哈密顿量的二次量子化形式可表示为三项之和

$$H = W_{0-0} + W_{0-1} + W_{1-1},$$

式中 W_{0-0} 表示第一 Landau 能级上电子之间的相互作用, W_{1-1} 表示第二 Landau 能级上的电子作用, W_{0-1} 是第一能级与第二能级上电子之间的作用.

W_{0-0} 与动能项一样,仅仅对能量提供一个常数,我们可以不考虑. W_{0-1} 显然与 Landau 简并度有关.

$$W_{0-1} = \sum_{L_2} V_{\text{eff}}(G, L_2) a_{1L_2}^+ a_{1L_2}, \quad (14)$$

式中 a^+ 和 a 是电子的产生和湮灭算符,下标 1 表示 $K=1$ 的能级. V_{eff} 是第一能级上的电子对第二能级上具有角动量子数 L_2 的电子的有效相互作用势. G 是 Landau 简并度.

$$V_{\text{eff}}(G, L_2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{L_1=0}^{G-1} \sum_{m=0}^{L_1+L_2} \frac{(2m-1)!!}{(2m)!!} (1+\Delta) |b_m(L_1, L_2)|^2, \quad (15)$$

式中当 m 为偶数时, $\Delta = \frac{1}{4m-2}$, 否则 $\Delta = 0$. 哈密顿量最后一项 W_{1-1} 为

$$W_{1-1} = \frac{1}{4} \sum_{L_1, \dots, L_4} \sum_m (Y_{0m0m} + Y_{2m2m}) b_m(L_1 L_2) \cdot b_m(L_3, L_4) \delta_{L_1+L_2, L_3+L_4} a_{1L_1}^+ a_{1L_2}^+ a_{1L_3} a_{1L_4}. \quad (16)$$

首先,忽略带间相互作用 W_{0-1} , 我们得到 $N=6$ 的能谱,发现,本征能量之间的关系式(13)仍然成立,这时带的下边缘比第一能级平滑,以 $\Delta L = N$ 为周期的平台仍可看到,能带明显变窄. 其次,我们对 G 分别等于 20 和 30 的情况作了计算,如图 2 所示. 我们发现 G 对能带的影响并不显著,能带的上边界略有下降的趋势. 图 2 同时给出 $N=6$ 时第一能级的能带.

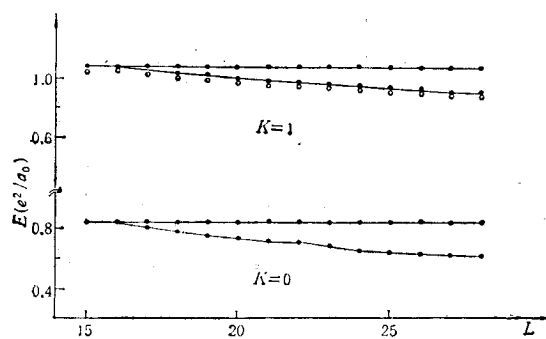


图2 $N=6$ 时第二 Landau 能级上的能带与第一 Landau 能级的比较 ○—— $G=30$; ●—— $G=20$

一定的普遍性,与粒子数 N 及相互作用势的形式无关。如果不考虑带间的耦合,这一关系还与 Landau 能级无关。本征值的这种嵌套关系,体现了哈密顿矩阵之间的某种联系。如果掌握了这种联系,将会对这一系列哈密顿本征值的求解提供一个简化的途径。这项研究目前正在进一步深入。

对同一个体系,按照一般观念,其能量是质心运动部分与相对运动部分之和。然而,我们包含质心运动的讨论与 Laughlin 只考虑相对运动的结果其差别并不在于能量本征值的数值上,而是本征值的数目。Laughlin 排除质心运动,并没有减少体系的能量,而是排除了体系的某些可能的能量值。我们目前还没有在物理上得到满意的解释。

感谢陈灏博士、朱耘和张珉同志有益的讨论。

参 考 文 献

- [1] K. V. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 494.
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.*, **48**(1982), 1559.
- [3] R. B. Laughlin, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3383.
- [4] S. M. Girvin and T. Jach, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 4506.
- [5] F. D. M. Haldane and E. H. Rezayi, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 237.

ENERGIES OF A FINITE 2D COULOMB INTERACTING ELECTRON GAS IN A STRONG MAGNETIC FIELD

XIONG XIAO-MING ZHOU SHI-XUN

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai)

ABSTRACT

A method for calculating the energies of a finite interacting electrons system in a strong magnetic field is presented. The numerical results have been obtained both for the first and the second Landau levels.

五、讨 论

本文仅对有限电子体系作了数值计算,显然,对一个真实的物理体系,正电背景的影响是不容忽视的。关于这一点,我们将另外讨论。但是本文得到的一些有趣的结果将有可能把二维电子体系作为一个数学模型进行更深入的研究。关系式(13)的成立并不是偶然的,它有一

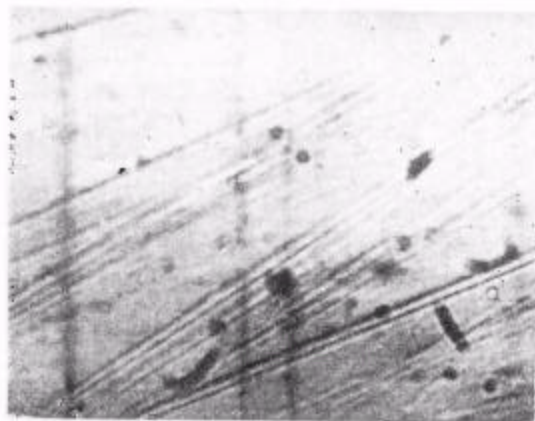


图1 样品 c 向厚 6.0mm, $V_+ = 2.5\text{kV}$, 加电场 14 分钟, 负电染色条纹 (箭头指示的为染色条纹, 斜线为晶体表面缺陷) 上端为外场正极, 下端为负极 $\times 100$

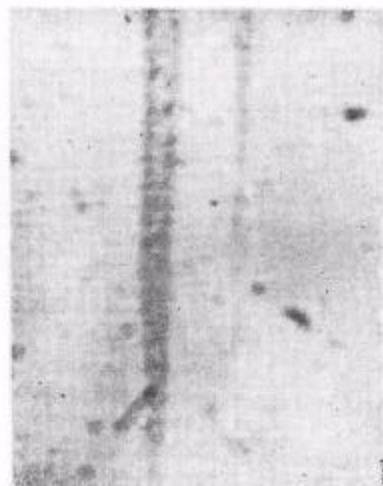


图2 样品 c 向厚 6.0mm, $V_+ = 2.5\text{kV}$, 加电场 30 分钟, 正电染色条纹 上端为外场正极, 下端为负极 $\times 100$



图3 c 向厚 6.0mm, $V_+ = 2.5\text{kV}$, 加电场 14 分钟, 生长层处的亮条纹 上端为正极, 下端为负极 $\times 300$



图 4 图 3 样品晶体生长层处的负电染色 $\times 100$

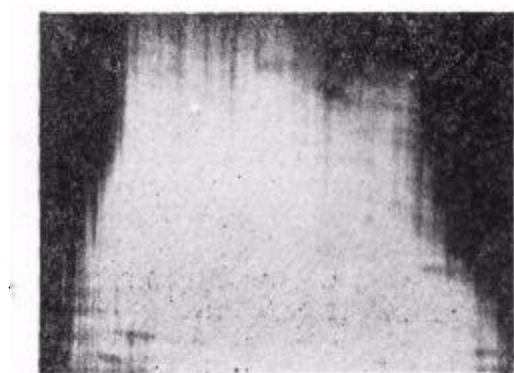


图 5 样品 c 向厚 2.5mm, $V_+ = 0.7\text{kV}$, 加电场 14 分钟, 针状电极作用下的
晶体内部亮条纹的分布 箭头为针状电极的位置 $\times 300$



图1 $\text{Pd}_{80}\text{Si}_{20}$ 非晶合金加热至 340°C 析出的 P_1 亚稳相形貌

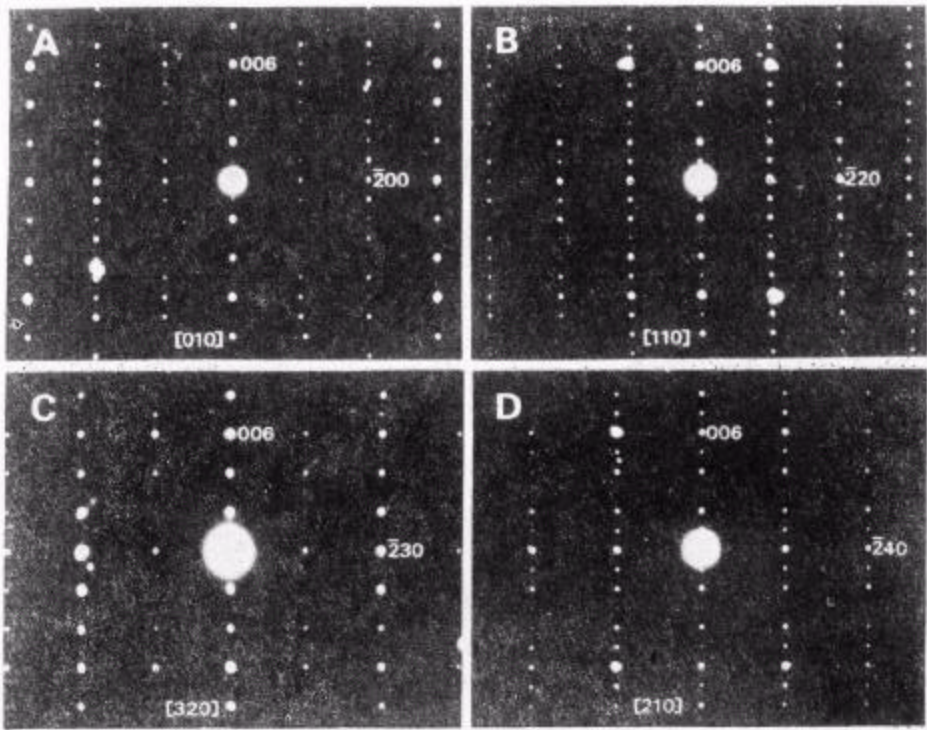


图2 亚稳相 P_1 的电子衍射图

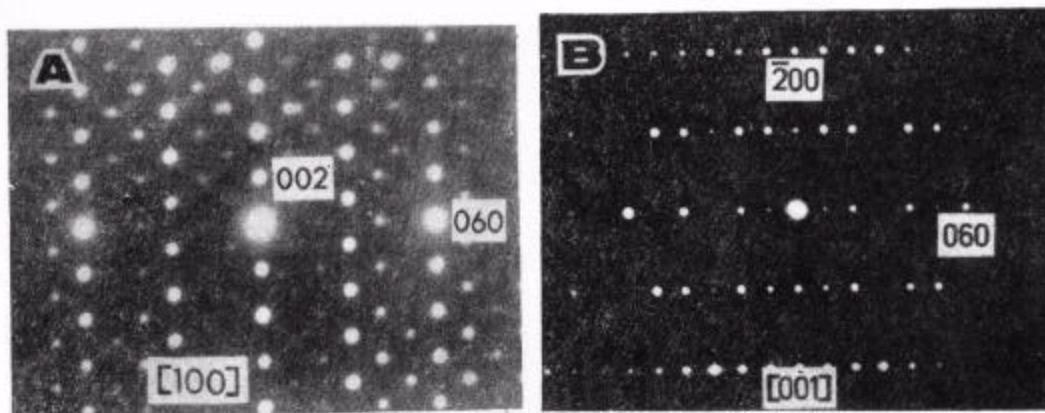


图 3 亚稳相 P1 两个主轴方向的电子衍射图

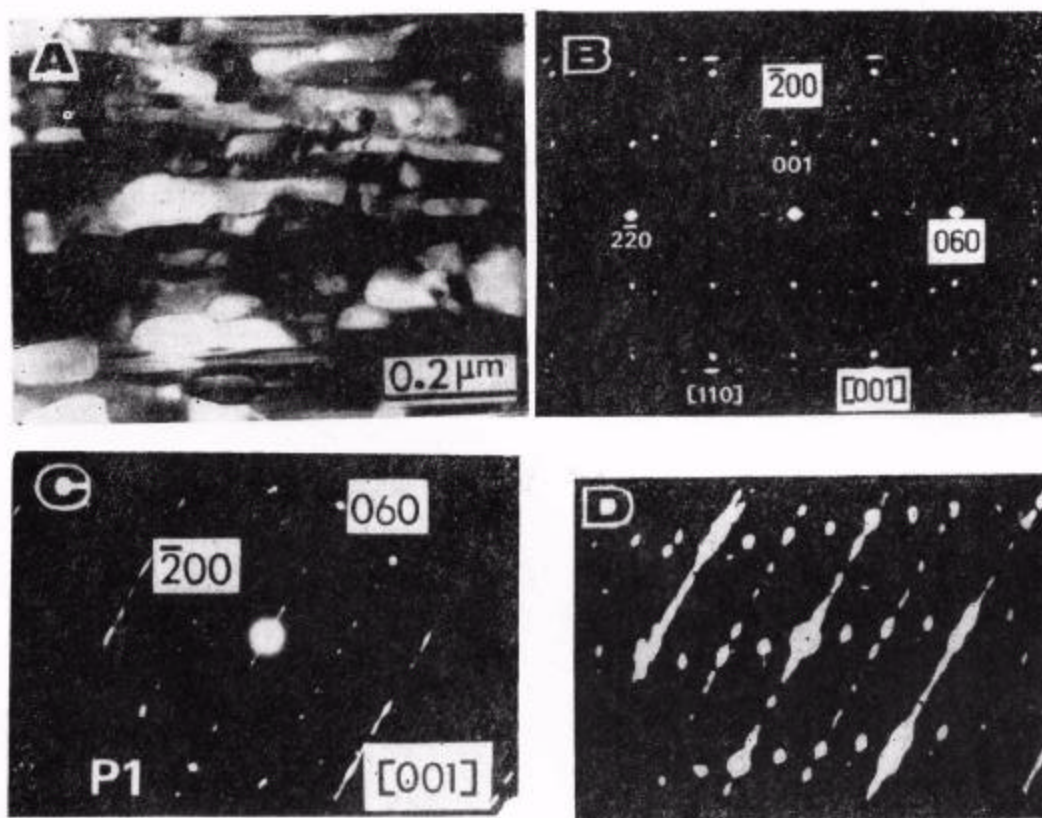


图 4 (a) 加热至 400°C 保温 2h 的晶化相形貌；(b) 与 (a) 对应的 Pd_3Si [110] 及 P_1 [001] 取向复合电子衍射图；(c) 含大量错排 P_1 相 [001] 取向电子衍射图；(d) Duhaï 等人发表电子衍射图

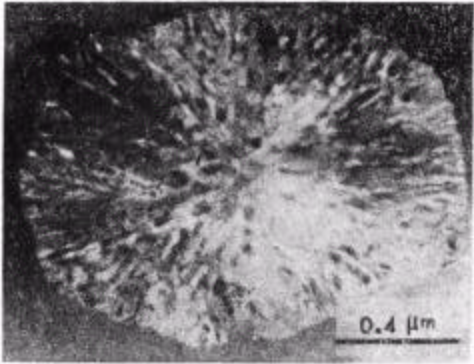


图 5 在 340℃ 保温 2h 析出的类球状晶化相 (F)

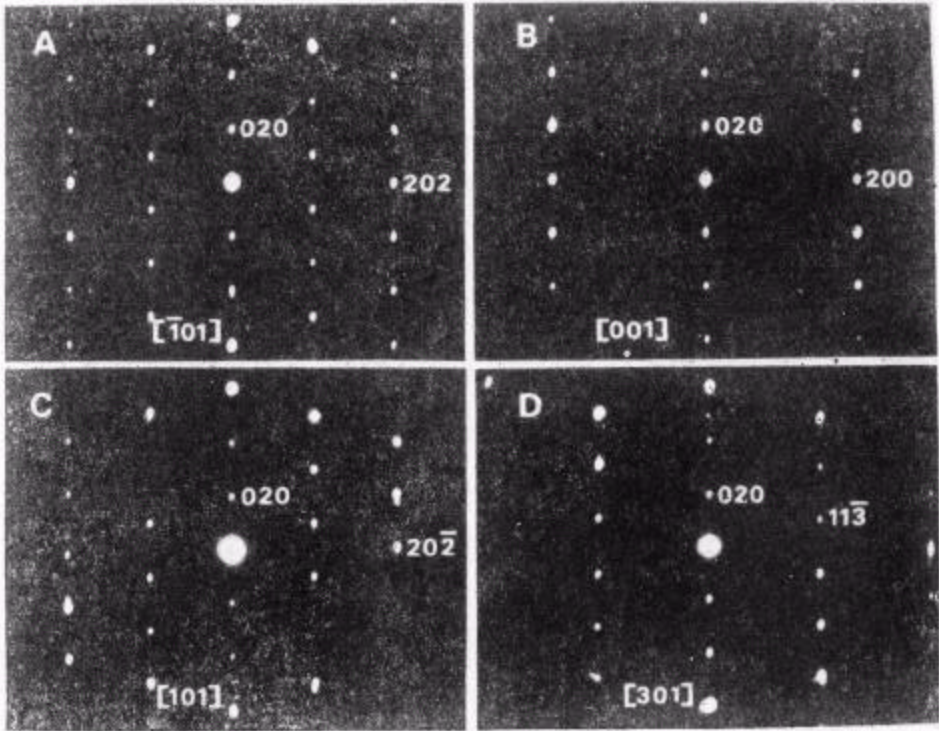


图 6 F 相各取向的电子衍射图

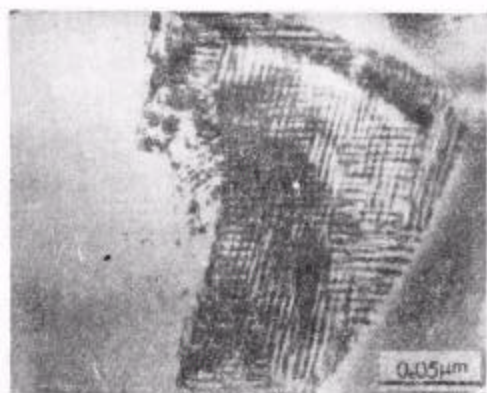


图7 加热至 600°C 观察到的 P_2 晶化相

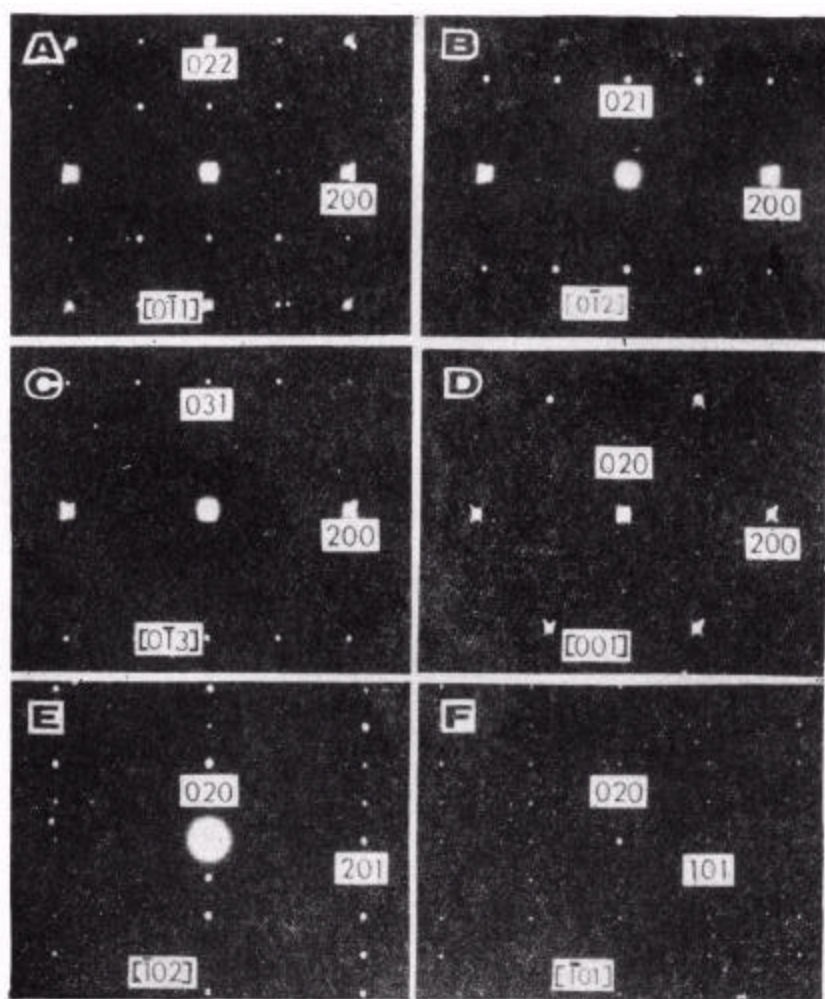


图8 P_2 相各取向的电子衍射图