

电中性背景中二维电子气基态能的 迭代计算

熊小明 周世勋

(复旦大学物理系)

1986 年 10 月 27 日收到

提 要

本文讨论了强磁场中局域电中性二维电子气的基态能的数值迭代计算方法。计算结果表明基态能随总角动量的变化曲线只在某些角动量处出现尖角。

近年来,实验上分数量子 Hall 效应的发现,使理论物理学工作者对强磁场中二维电子体系的研究产生了很大的兴趣。理论上有一部分工作是围绕对少数电子体系的精确数值计算展开的。人们希望少体问题的讨论方法及结论能对真实物理体系的研究作出某些有启发性的指导。而且在热力学极限下,少数粒子体系的结果应该很好地逼近真实的物理体系。

Laughlin^[1] 首先对相互作用的二电子体系和三电子体系进行数值计算。发现要解释实验上发现的 $1/3$ 分数量子 Hall 效应,只需讨论最低 Landau 能级。他提出了一个多粒子体系的试探波函数,并建立了分数量子 Hall 效应的不可压缩流体理论^[2,3]。Girvin 和 Jach^[4] 利用数值对角化方法,计算了三、四、五电子体系的基态能和第一激发能隙。从他们的数值计算结果中可以看到,基态能随总角动量的变化以体系的电子数目 N 为周期出现平台。Yoshioka 等人^[5] 讨论了周期边界条件下,矩形盒中六个电子的体系。他们考虑了正电背景的影响,得到了比 Wigner 晶体更低的基态能。并且在 $1/3$ 填充因子处看到了能量的尖角。

Lai 等人^[6] 考虑局域电中性问题,他们在 Hartree-Fock 近似下用电子波函数构造正电背景的电势分布。巧妙地把正电部分的相互作用与电子间的库仑相互作用抵消。他们得到能量与总角动量间的依赖关系。发现在某些角动量的地方明显出现能量的尖角。

本文中,我们用数值迭代的方法,修正了局域电中性体系的基态能。发现能量的尖角只出现在少数几个角动量上。取 Hartree-Fock 波函数 $\psi(r_1, \dots, r_N)$ 为基矢。多电子体系的波函数 $\Phi(r_1, \dots, r_N)$ 可展开为

$$\Phi(r_1, \dots, r_N) = \sum_i a_i \psi_i(r_1, \dots, r_N), \quad (1)$$

其中 a_i 是在基矢 $\{\psi_i\}$ 所张态空间中的波矢分量。根据局域电中性条件,正电背景的电势分布应等于电子的密度。

$$n(x_1) = \int |\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2 d^2x_2 \cdots d^2x_N. \quad (2)$$

在二次量子化表象中, 相互作用电子体系的哈密顿量可写为

$$H = \frac{1}{2} \sum_{L_1, L_2, L} v(L_1, L_2, L) c_{L_1}^{\dagger} c_{L_2}^{\dagger} c_{L_1-L} c_{L_1+L} + \sum_L v_b c_L^{\dagger} c_L + \frac{1}{2} v_{bb}, \quad (3)$$

式中 c^+ 和 c 分别表示电子态的产生和湮灭算符, $v(L_1, L_2, L)$ 是电子间的相互作用积分, v_b 和 v_{bb} 分别是电子与背景电荷以及背景电荷之间的相互作用.

$$\begin{aligned} v(L_1, L_2, L) &= \int d^2 r_1 d^2 r_2 \phi_{L_1}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{L_2}^*(\mathbf{r}_2) \\ &\quad \cdot \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{L_1+L}(\mathbf{r}_1) \phi_{L_1-L}(\mathbf{r}_2), \\ v_b &= - \int d^2 r d^2 x n(\mathbf{x}) \phi_L^*(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \phi_L(\mathbf{r}), \\ v_{bb} &= \int d^2 x d^2 x' n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \end{aligned} \quad (4)$$

$\phi(\mathbf{x})$ 是单电子的波函数.

记 $\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ 为多电子体系的基态波函数, 则

$$n(\mathbf{x}) = \sum_i |a_i^{(0)}|^2 \sum_m |\phi_m(\mathbf{x})|^2 \langle \Psi_i | c_m^{\dagger} c_m | \Psi_i \rangle. \quad (5)$$

(4) 式中与背景有关的相互作用为

$$\begin{aligned} v_b &= - \sum_m \left[\sum_i |a_i^{(0)}|^2 \langle \Psi_i | c_m^{\dagger} c_m | \Psi_i \rangle \right] v(L, m, 0), \\ v_{bb} &= \sum_{mm'} \left[\sum_{i,i'} |a_i^{(0)}|^2 \cdot |a_{i'}^{(0)}|^2 \langle \Psi_i | c_m^{\dagger} c_m | \Psi_i \rangle \cdot \langle \Psi_{i'} | c_{m'}^{\dagger} c_{m'} | \Psi_{i'} \rangle \right] v(m, m', 0). \end{aligned} \quad (6)$$

显然, 我们碰了一个循环求解的问题. 为了求哈密顿量本征方程

$$H\Phi = E\Phi, \quad (7)$$

我们必须知道 H 中的相互作用势 v_b 和 v_{bb} . 而 v_b 和 v_{bb} 又是电荷密度 $n(\mathbf{x})$ 的函数, $n(\mathbf{x})$ 要通过求解哈密顿量的本征方程的本征矢给出. 我们用迭代的方法, 首先任取一个本征矢 $a^{(0)}$. 算出 v_b 和 v_{bb} , 求解本征方程得出初步的基态能 E_0 和新的基态波函数 $a^{(0)}$. 将新求得的 $a^{(0)}$ 代入方程(6)中求出修正的 v_b 和 v_{bb} . 再解本征方程(7). 这样逐次迭代求解, 直到得到一个稳定的基态能 E_0 .

我们对 $N=2$ 到 9 的电子体系作了数值计算. 正如 Lai 等人指出的, 能量随总角动量的变化在某些 L_m 处出现尖角.

$$L_m = \frac{1}{2} (2m + N - 1)N \quad (m = 0, 1, \dots). \quad (8)$$

我们把能量 E 随角动量 L 的变化以 $E-m$ 的关系作图 (如图 1 所示). 可以看到能量的尖角只发生在 $m=1.0, 2.0$ 和 3.0 的地方. 这意味着当 N 大于 4 时 $1/3$ 填充因子不可能出现能量的尖角. 虽然我们计算的数据很有限, 但从图 1 的趋势看这一结论似乎很可靠. 随着粒子数 N 的增大, $m=1.0, 2.0$ 和 3.0 的能量都趋于某一极限值. 并且, 在 $m=0.0$ 到 1.0 之间, 曲线有一个下凹, 而在 0.0 和 1.0 附近则有突出的峰值. 关于这些现象的进一步研究需要较大的计算机工作量.

图 2 给出了三电子体系的计算结果与 Lai 等人结果的比较, 在 $m=1.0, 2.0$ 和 3.0

时,两个结果非常一致,而在其它角动量处,差别很大,迭代后的结果使得能量向下的尖角更加明显。

我们还计算了第一激发态的情况。仍然利用局域电中性条件,用第一激发态的电子波函数构造正电背景的密度分布函数,

$$n(\mathbf{x}) = \sum_i |a_i^{(1)}|^2 \sum_m |\phi_m(\mathbf{x})|^2 \langle \phi_i | c_m^\dagger c_m | \phi_i \rangle, \quad (9)$$

式中 $a_i^{(1)}$ 是第一激发态的波矢分量。但是,在某些角动量处,得不到稳定的迭代结果。我们认为这可能是激发态破坏了局域电中性。也就是说激发态对应于电荷的聚积。

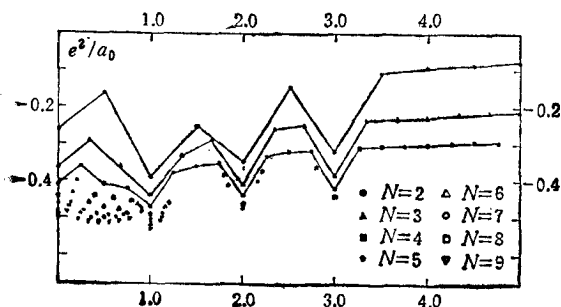


图 1

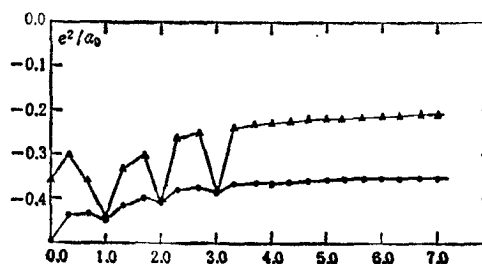


图 2

● 为文献[6]的结果; ▲ 为本文结果

参 考 文 献

- [1] R. B. Laughlin, *Phys. Rev.*, **B27** (1983), 3383.
- [2] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1395.
- [3] R. B. Laughlin, *Surface Science*, **142** (1984), 163.
- [4] S. M. Girvin and T. Jach, *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 4506.
- [5] D. Yoshioka, B. I. Halperin and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1219.
- [6] W. Lai, K. Yu, Z. Su and L. Yu, *Solid State Commun.*, **52**, (1984), 339.

THE ITERATION RESULT OF THE GROUND STATE ENERGY FOR A TWO DIMENSIONAL ELECTRON GAS IN THE NEUTRALIZING BACKGROUND

XIONG XIAO-MING ZHOU SHI-XIUM

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai)

ABSTRACT

We study the 2-D electron system in a strong magnetic field with the contribution from the neutralizing background included. We find that the downward cusp of the ground state energy only occurs for several angular momenta.