

介观圆筒持续电流

紧束缚近似下的严格解

邓文基¹⁾²⁾ 刘有延¹⁾ 龚昌德²⁾

1) 华南理工大学物理系, 广州 510641

2) 南京大学物理系, 南京 210008

1993年4月26日收到

证明了含 Aharonov-Bohm 型磁通的空心圆筒中环行电流的单电子理论计算公式, 它与圆筒形状及载流子属性(电荷与质量)无关, 在紧束缚近似下采用完整晶体模型求得能量和电流的严格解, 并研究了电流随磁通变化的周期性, 以及持续电流的幅值随筒高与筒厚增大的可能性, 获得一系列新结果.

PACC: 7210; 0560; 7215

一、引言

早在五六十年代, 人们已经根据真空中的 Aharonov-Bohm 效应证明了电磁势在量子力学中具有独立的物理意义^[1,2]; 即使带电粒子运动的区域内是无场的, 电磁势也可能影响粒子的运动状态, 如果 A-B 型磁通 Φ 轴向穿过圆筒的中空部分, 则该系统的一切决定于带电粒子 q 的物理性质随 Φ 变化的基本周期必定是磁通量子 $\Phi_0 = h/q$. Buttiker 等人最先以类比的方式研究了理想的一维环中的电流问题^[3], 他们注意到一维环路中运动电子的本征态是布罗赫态, 相应的波矢与环路包围的磁通有关; 处于能级 $E_n(\Phi)$ 本征态的电子所载电流的计算公式为 $i_n = -\partial E_n / \partial \Phi$. 由于非零磁通 Φ 破坏了系统的旋转对称性, 即使在基态下反向绕行的电流也不会完全抵消; 从而存在持续不衰的电流, 这一富于启发性的工作导致了一系列研究结果的出现, 最近的两个实验已肯定了在介观体系中持续电流的存在. 实验测量的直接对象是环路电流的磁矩. 第一个实验^[4]是关于大量(10^7 个)外观相同互不连通的小铜环内持续电流的平均效应, 总电流随磁通 Φ 变化的周期是基本周期的一半 $\Phi_0/2$, 这十分类似于最先揭示了无序固体中弹性碰撞不破坏电子的量子相干性的第一个重要实验的结果^[5], 在那个实验中已观察到沿细长薄圆筒轴向的磁阻随 Φ 变化的周期砍半 (period halving) 现象. 所谓周期砍半是指系统的物理性质随 Φ 变化的最小周期是基本周期 Φ_0 的一半; 第二个实验^[6]的数据来源于对单个孤立小金环的测量, 发现电流随 Φ 变化的傅里叶频谱中 Φ_0 分量与 $\Phi_0/2$ 分量共存; 也就是说不再显示周期砍半行为. 因此人们相信周期砍半现象可能源于某种求和平均. 事实上 Cheung 等人^[7]

在紧束缚近似下作数值研究时已发现若假定各金属环内的电子数固定但彼此不同并作平均则可以解释周期狄半现象。他们还指出,若假设各金属环化学势固定但彼此不同则总平均电流为零, Bouchiat 等人^[9]在更详细的数值计算中进一步肯定了上述结论。但是这些工作主要都是针对一维环的;由于计算量的限制他们对更实际的三维情形完全没有涉及。最近发表的许多文章亦限于一维的理想模型^[9,10]。人们对三维空心圆筒中的持续电流知之尚少,并存在一些不正确的认识,解决这些遗留的问题以获得有关持续电流的更清楚、更正确的物理图象是本文的主要目的。

二、模型的建立与数学处理

1. 单电子理论的电流公式

我们所研究的系统如图 1 所示。局限于中空部分的轴向 A-B 型磁通为 Φ , 电子运动的双连通区域是无场的, 单电子的哈密顿量可一般地写作

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A})^2 + u, \quad (1)$$

其中 $u(\mathbf{r})$ 是势函数, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 是矢势, 而标势已取为零。由于电磁场的规范不变性, 在极坐标下我们总可以令

$$A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi\rho}, \quad A_\rho = 0, \quad A_z = 0, \quad (2)$$

处于任意量子态 $\Psi(\mathbf{r})$ 的电子其电流密度矢量的 φ 方向分量是

$$J_\varphi = \frac{q}{2\mu} [\Psi^*(P_\varphi - qA_\varphi)\Psi + \Psi(P_\varphi - qA_\varphi)^*\Psi^*], \quad (3)$$

圆筒中绕行电流强度可对任意截面(给定极角 φ)积分得到

$$\begin{aligned} i_\varphi &= \iint d\rho dz J_\varphi = \frac{1}{2\pi} \iiint \rho d\rho dz d\varphi \frac{J_\varphi}{\rho} \\ &= \frac{q}{2\pi\mu} \iiint \frac{dV}{\rho} \Psi^*(P_\varphi - qA_\varphi)\Psi, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 dV 是积分体积元。如果所考虑的量子态正是电子的本征态 Ψ_n , 则按费曼原理^[11]可证

$$i_n = - \frac{\partial E_n}{\partial \Phi}, \quad (5)$$

这就是处于 E_n 本征态的电子所载电流的计算公式。虽然 Buttiker 等人^[3]曾在理想化的一维情形下采用类比的方法得到此式, 但根据量子力学的基本原理给出在三维情形下的上述证明仍然是十分必要的。由证明过程可以看到, 公式与圆筒的形状和载流子的电荷及质量无直接关系。唯一的前提是要求单电子近似成立。

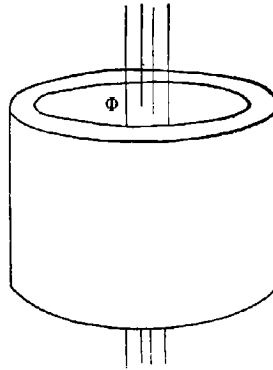


图 1 A-B 型磁通轴向穿过中空部分的介观圆筒示意图。典型的介观尺度是 μm 量级, 实验温度是 mK 量级

2. 紧束缚模型的能量本征值问题

哈密顿量(1)式的本征值问题有多种解法。当电子在无场区域内运动时,可以通过对波函数作变换

$$\Psi \rightarrow \Psi \exp \left(-i \frac{2\pi q}{h} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \right), \quad (6)$$

将矢势 $\mathbf{A}$ 从方程中消去。但新的波函数 Ψ 不再具有单值性,相应的周期性边界条件是

$$\Psi(\rho, z, \varphi + 2\pi) = \Psi(\rho, z, \varphi) \exp \left(-i \frac{2\pi q}{h} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \right), \quad (7)$$

对电子 $q = -e$, 上式即为

$$\Psi(\rho, z, \varphi + 2\pi) = \Psi(\rho, z, \varphi) \exp \left[i \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} \right], \quad (7')$$

在紧束缚近似下,单电子的哈密顿量可以一般地写作

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_i \sum_{\delta} (t_{i,\delta} |i\rangle \langle i+\delta| + \text{c.c.}), \quad (8)$$

其中 $|i\rangle$ 表示位于格点 i 处的局域波函数,近似作为瓦尼尔基, ε_i 是相应的座能量, $t_{i,\delta}$ 则表示电子由格点 i 到最临近格点 $i+\delta$ 的跃迁矩阵元。求和遍及所有格点和最近邻。电子的波函数可按瓦尼尔基展开为

$$\Psi = \sum_i \phi_i |i\rangle, \quad (9)$$

能量本征方程 $H\Psi = E\Psi$ 展开为

$$\varepsilon_i \phi_i + \sum_{\delta} t_{i,\delta} \phi_{i+\delta} = E \phi_i, \quad (10)$$

周期性边条件(7')体现在表示原子链首尾衔接的跃迁矩阵元要乘因子 $\exp(\pm i2\pi\Phi/\Phi_0)$ 。为明确起见,我们写出电子在具有 N 个格点的一维环上的矩阵本征方程:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 - E & t_1 & & & t_N \exp(i2\pi\Phi/\Phi_0) \\ & \varepsilon_2 - E & t_2 & & \\ & & \varepsilon_3 - E & t_3 & \\ & & & \dots & \\ t_N \exp(-i2\pi\Phi/\Phi_0) & & & t_{N-1} & \varepsilon_N - E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix} = 0, \quad (11)$$

由此易证

$$E_{\pm} \left(\frac{\Phi_0}{2} + \Delta\Phi \right) = E_{\pm} \left(\frac{\Phi_0}{2} - \Delta\Phi \right), \quad (12)$$

即能谱是关于 $\Phi = (2k+1)\Phi_0/2$ 对称的(此处 k 取零或任意整数)。从而电流 $i_{\pm}$ 关于 $\Phi = (2k+1)\Phi_0/2$ 反对称,即

$$i_{\pm} \left(\frac{\Phi_0}{2} + \Delta\Phi \right) = -i_{\pm} \left(\frac{\Phi_0}{2} - \Delta\Phi \right), \quad (13)$$

所以,有关的讨论都可以局限于 $0 \leq \Phi < \Phi_0/2$ 范围内。

3. 迁移矩阵方法

迁移矩阵方法是处理各类紧束缚问题的有力工具,无限长一维原子链中的可数无穷维能量本征方程可按布罗赫定理约化为有限维问题。布罗赫定理中所取周期单元内包含格点的数目决定维数。而(11)式正是这样的有关布罗赫本征态的方程,只要将其中的 $\exp(+iq\Phi/\hbar)$ 当作布罗赫波中的行波因子。

所以可采用迁移矩阵方法来处理本征方程(11)。为此,我们将能量本征方程改写为^[12]

$$\begin{bmatrix} \psi_{i+1} \\ \psi_i \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{bmatrix}, \quad (14)$$

其中迁移矩阵为

$$M_i = \begin{bmatrix} \frac{\epsilon_N - E}{t_i} - \frac{t_{i-1}}{t_i} & t_{i-1} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

若令 $t_0 = t_N$ 并定义

$$\tilde{M} = M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1, \quad (16)$$

可证明圆环本征值问题(11)式的定解条件为^[12]

$$\frac{1}{2} \text{tr} \tilde{M} = \cos \left(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (17)$$

若去掉非对角矩阵元 $t_N \exp(\pm 2\pi i \Phi / \Phi_0)$ 则(11)式即是有限长一维原子链上的单电子本征值问题。这时计算(16)式时可取 $t_N = t_i$ 为任意非零值而并不影响结果。相应的本征值问题的定解条件是^[12]

$$M_{11}(E) = 0, \quad (18)$$

这一结果在第三节中还要引用。图2是按(17)式算得的能谱。

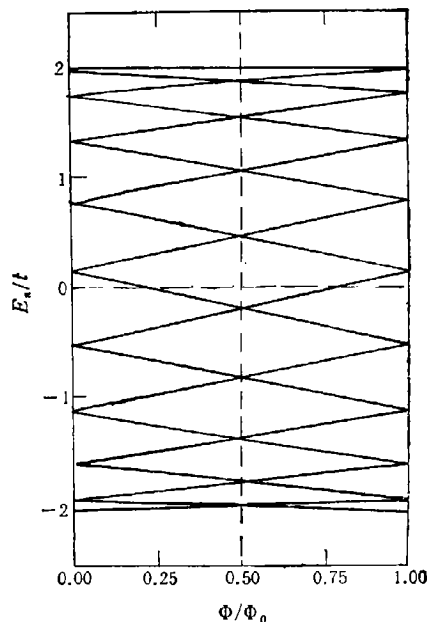


图2 一维周期性圆环的能级图。格点数 $N = 19$, 座能量 $\epsilon_i = 0$, 迁移矩阵元 $t_i = -1$ 。注意第10个能级与 $E = 0$ 交于 $\Phi^* = \Phi_0/4$ 处

三、严格解及其物理意义

虽然完整周期性晶格只是一种理想化的情形,实际样品是扩散型的,但下述两个原因促使我们系统地研究它: 1) 无序虽然象温度一样使电流幅值有所减小,但并非产生周期狄半现象的决定因素。因此研究周期狄半现象时可以忽略无序。 2) 三维情形下引入了无序的本征方程只能依赖数值方法求解;受计算量的限制,几乎无法模拟与样品尺寸相应的大系统 ($\sim 10^4 \times 10^2 \times 10^2$ 即 10^8 维的矩阵)。而在完整晶体情形下采用迁移矩阵方法却可以求得单电子本征方程的严格解。三维圆筒 (N, M_1, M_2) 紧束缚模型的哈密顿量可写成块状矩阵的形式:

$$H_e = \begin{bmatrix} H_f & \Delta_1 & & \\ \Delta_1 & H_f & \Delta_1 & \\ & & \dots & \\ & & \dots & \Delta_1 \\ & & & \Delta_1 & H_f \end{bmatrix}, \quad (19)$$

而其中

$$H_f = \begin{bmatrix} H & \Delta_2 & & \\ \Delta_2 & H & \Delta_2 & \\ & & \dots & \\ & & \dots & \Delta_2 \\ & & & \Delta_2 & H \end{bmatrix}, \quad (20)$$

其中 H 是定义如(11)式的一维环上单电子的哈密顿量, H_f 描述了同一圆柱面上 M_2 个相同的圆环间的相互作用, 而 $\Delta_1 = -tI_1$, $\Delta_2 = -tI_2$, 其中 I_1 和 I_2 分别是 $N \times M_2$ 和 N 维单位矩阵。由于 H_e , H_f 和 H 都是厄密矩阵, 采取对角化的步骤可以证明:

1) H_f 的 $N \times M_2$ 个能量本征值可按一维环能量本征值 $E_n (n = 1, 2, \dots, N)$ 来分类。对应于 E_n 的 M_2 个本征值所遵循的本征方程为

$$\begin{bmatrix} E_n - E & -t & & \\ -t & E_n - E & -t & \\ & -t & E_n - E & -t \\ & & \dots & \dots \\ & & \dots & -t \\ -t & & & E_n - E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \phi_{x,1,n} \\ \phi_{x,2,n} \\ \phi_{x,3,n} \\ \vdots \\ \phi_{x,M_2,n} \end{bmatrix} = 0, \quad (21)$$

2) H_e 的 $N \times M_2 \times M_1$ 个能量本征值亦可按 E_{n,m_2} 分类, 相应于 E_{n,m_2} 的 M_1 个本征值所遵循的本征方程是

$$\begin{bmatrix} E_{n,m_2} - E & -t & & \\ -t & E_{n,m_2} - E & -t & \\ & -t & E_{n,m_2} - E & -t \\ & & \dots & \dots \\ & & \dots & -t \\ -t & & & E_{n,m_2} - E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \phi_{x,y,1} \\ \phi_{x,y,2} \\ \phi_{x,y,3} \\ \vdots \\ \phi_{x,y,M_1} \end{bmatrix} = 0, \quad (22)$$

而本征方程式(11)及(21),(22)均可采用迁移矩阵方法严格求解。所得的能量本征值是

$$E_{n,m_2,m_1} = -2t \left(\cos \frac{m_2 \pi}{M_2 + 1} + \cos \frac{m_1 \pi}{M_1 + 1} \right) + E_n, \quad (23)$$

$m_2 = 1, 2, \dots, M_2; m_1 = 1, 2, \dots, M_1.$

其中 E_n 是电子在具有 N 个格点的一维环上的本征值的解。在完整晶格的理想情形下, 可以证明¹⁾

1) 邓文基, 私人通信。

$$E_n = -2t \cos \theta_k, \quad 0 \leq \varphi_k < \pi. \quad (24)$$

而

$$\theta_k = \frac{2\pi}{N} \left(k + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (25)$$

$$\theta_k = \frac{2\pi}{N} \left(k - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad k = 1, 2, 3, \dots, \quad (25')$$

其中 k 的取值应使 $0 \leq \theta_k < \pi$ 的条件得到保证。相应的本征态波函数为

$$\Psi_{n, m_1, m_2}(x, y, z) = \frac{2}{\sqrt{N(M_2 + 1)(M_1 + 1)}} \exp(i\theta_k x) \sin \frac{\pi y}{M_2 + 1} \sin \frac{\pi z}{M_1 + 1}, \quad (26)$$

其中 $x = 1, 2, \dots, N$, $y = 1, 2, \dots, M_2$, $z = 1, 2, \dots, M_1$ 分别是周期点阵中沿 φ, ρ, z 方向格点的序号。

1. 电子数固定的一维环

我们只考虑零温下的单带模型。每个能级上至多填充一对自旋反平行的电子，整个系统最多容纳 $2N$ 个电子。不同的电子填充情形决定不同的持续电流。当 $2n$ 个能级被填满时，总电流为

$$I = \frac{4t}{N\Phi_0} \frac{\sin \frac{2n\pi}{N}}{\sin \frac{\pi}{N}} \sin \frac{2\pi}{N} \left(\frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (27)$$

当 $2n + 1$ 个能级被填满时，总电流为

$$I = - \frac{4t}{N\Phi_0} \frac{\sin \frac{2n+1}{N} \pi}{\sin \frac{\pi}{N}} \sin \left(\frac{2\pi\Phi}{N\Phi_0} \right), \quad (28)$$

当电子数为奇数时，最高能级只有一个电子；也就是说 $2n$ 个能级被填满后还多出一个电子填充到 $2n + 1$ 能级，总电流为

$$I = - \frac{2t}{N\Phi_0} \left(\sin \frac{2n+1}{N} \pi \sin \frac{2\pi\Phi}{N\Phi_0} - \sin \frac{2n\pi}{N} \sin \frac{2\pi}{N} \left(\frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \right), \quad (29)$$

与实际样品相对应^[4-6]， N 足够大，且 $2n + 1 \sim N/2$ ，以上三式又可简化为

$$I = \frac{8t}{N\Phi_0} \left(\frac{1}{2} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (27')$$

$$I = - \frac{8t}{N\Phi_0} \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (28')$$

$$I = \frac{8t}{N\Phi_0} \left(\frac{1}{4} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (29')$$

再根据(13)式将 Φ 的取值范围扩大到 $[0, \Phi_0]$ 区间，所得电流随 Φ 变化的关系示于图 3。

其中图 3 (a)和(b)与其他作者的结果一致, (c)是我们获得的新结果。它表明在电子数固定的一维环中持续电流已可能表现出严格的周期狄半现象。而在此之前人们相信只有平均才能给出周期狄半现象。

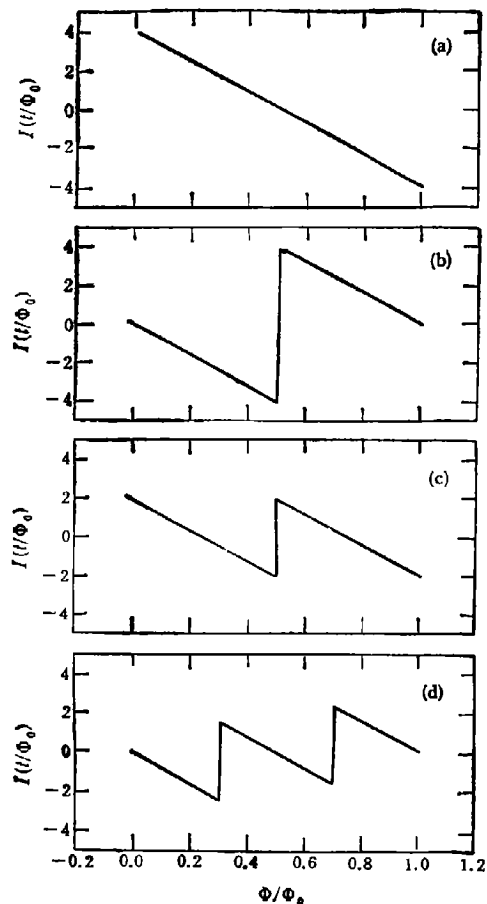


图 3 一维环中持续电流随磁通 Φ 变化的示意图 (a)–(c) 为电子数固定情形, (a) 偶数个能级被占据 (b) 奇数个能级被占据 (c) 电子总数为奇数 (d) 化学势固定而被占据能级数随磁通变化在 Φ^* 处增减 1

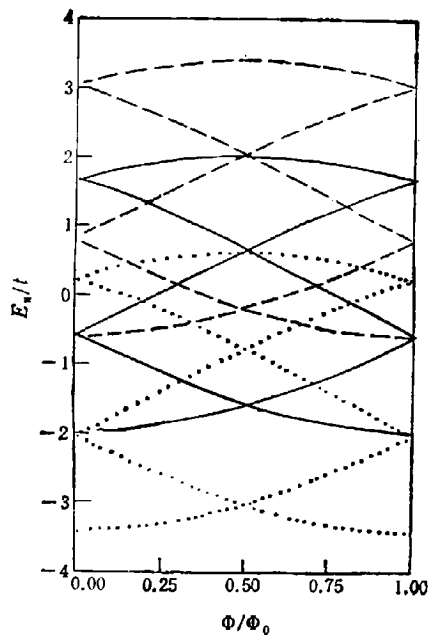


图 4 三维圆筒的能谱可当作是一维环的能谱按(31)式平移叠加而成。图中圆筒 $(5,3,1)$ 的能谱正是环 $(5,1,1)$ 的能谱平移 $0, -2\cos(\pi/4), 2\cos(\pi/4)$ 而得到的, 分别对应实线、点线和短划线

2. 化学势固定的一维环

化学势固定的环内电子数目总保持是偶数, 但除了极特殊的情形外, 由于能级随 Φ 变化从而导致环内电子总数亦随 Φ 变化。当化学势以下的能级数目由奇数 $2n + 1$ 增大到偶数 $2(n + 1)$ 时, 其持续电流如图 3(d) 所示。详细分析一维环的能谱结构(参见图 2)之后不难证明, 这是固定化学势的一维环中持续电流的典型曲线。相应的傅里叶分解是

$$I = \frac{4t}{N\pi\Phi_0} \sin \frac{2n+1}{N} \pi \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\cos \frac{2\pi l \Phi^*}{\Phi_0}}{l} \sin \frac{2l\pi\Phi}{\Phi_0}, \quad (30)$$

如果取巨正则平均, 并假设各环的化学势互不相同, Φ^* 在 $[0, \Phi_0/2]$ 区间内均匀分布, 则总电流为零。这正是文献[7,8]中通过复杂计算得出的结论。当化学势固定为零时, 可以一般地证明¹⁾:

1) 若 N 为偶数, 则因 $E = 0$ 与能级无交点, 此时环内总电子数固定, 电流曲线如图 3(a) 或 (b)。

2) 若 N 为奇数, 则 $\Phi' \equiv \Phi_0/4$, 电流曲线是周期为 $\Phi_0/2$ 的锯齿波。傅里叶频谱中的一阶项为零, 二阶项为 $-4t \sin[(2n+1)/N]/(N\pi\Phi_0)$ 。所以, 若对零化学势的一维环求平均(各环的 N 不尽相同), 总电流是严格周期砍半的。我们这一结果修正了巨正则平均无电流的结论¹⁾。

3. 三维圆筒问题转化为一维环问题

迄今为止, 还没有文献真正研究过与实验对应的三维圆筒内的持续电流。关于二维问题的研究也不充分^{17,18}。根据(23)式求出的电子在三维圆筒中运动的能谱显然可以当作是 $M_1 \times M_2$ 个一维环能谱作平移

$$E_{m_1, m_2} = -2t \left(\cos \frac{m_2 \pi}{M_2 + 1} + \cos \frac{m_1 \pi}{M_1 + 1} \right), \quad (31)$$

而叠加得到, 参见图 4。所以固定化学势 μ 的单个圆筒中的持续电流正是 $M_1 \times M_2$ 个相同的互不连接的一维圆环处于不同的化学势 $\mu' = \mu - E_{m_1, m_2}$ 时各自电流的总和。在这种意义下我们将三维问题转化成了一维问题。此时由于 μ' 并不是在一定的能量区间内均匀分布的, 固定化学势的圆筒内的持续电流不为零, 而且一般说来它也不表现出周期砍半现象。这一点正与实验一致¹⁶⁾, 但零化学势下的圆筒是重要的例外, 可以严格证明¹⁾:

1) 若 N 为偶数

$$I_{-\mu}(\Phi) = I_{\mu}(\Phi), \quad (32)$$

2) 若 N 为奇数

$$I_{-\mu} \left(\Phi + \frac{\Phi_0}{2} \right) = I_{\mu}(\Phi), \quad (33)$$

从而化学势分别为 $\pm \mu$ 的两个互不连接的相同圆环内持续电流的总和是严格周期砍半的, 参见图 5。这是因为

$$\begin{aligned} I_{\mu}(\Phi) + I_{-\mu}(\Phi) &= I_{-\mu} \left(\Phi + \frac{\Phi_0}{2} \right) + I_{\mu} \left(\Phi - \frac{\Phi_0}{2} \right) \\ &= I_{\mu} \left(\Phi + \frac{\Phi_0}{2} \right) + I_{-\mu} \left(\Phi + \frac{\Phi_0}{2} \right). \end{aligned} \quad (34)$$

在证明过程中我们用到满填充能带总电流恒为零这一结果。再有, 考虑到单环持续电流实验已可实现, 有必要指出关于单个圆筒中电流随 Φ 变化周期性的新现象。通过大量的

1) 邓文基, 私人通信。

数值模拟我们发现最小周期可以是 Φ_0/p 。此处 p 为偶数。参见图 5。

4. 持续电流的大小

已发表的文献大都采用一维环的自由电子模型来分析准一维样品的实验结果^[1-10]。电流大小应为 $I_s = ev_F/L$ 量级, 此处 v_F 是费密电子的速度, $L \propto N$ 是环的周长。采用系综平均的方法人们曾得到电流值为 $10^{-2}I_s$, 被认为与第一个实验的结果符合^[4,10]。但随后的第二个实验却要求电流值为 I_s ^[6,10]。考虑温度、无序、电子-电子相互作用诸因素都无法得到这一结果^[10]。现在一般认为介观环内持续电流的理论值比实验值小两个数量级。

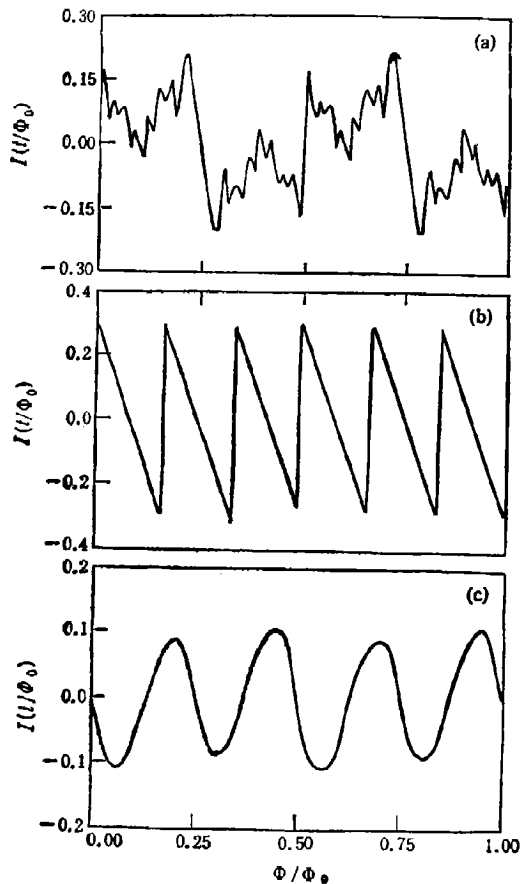


图 5 零化学势下圆筒中持续电流随磁通 Φ 变化的周期性。(a) $N, M_1, M_2 = 221, 15, 8$ 的圆筒(221, 15, 8), $P = 2$ 。(b) 圆筒(221, 50, 1), $P = 6$ 。(c) 圆筒(221, 48, 1), $P = 4$

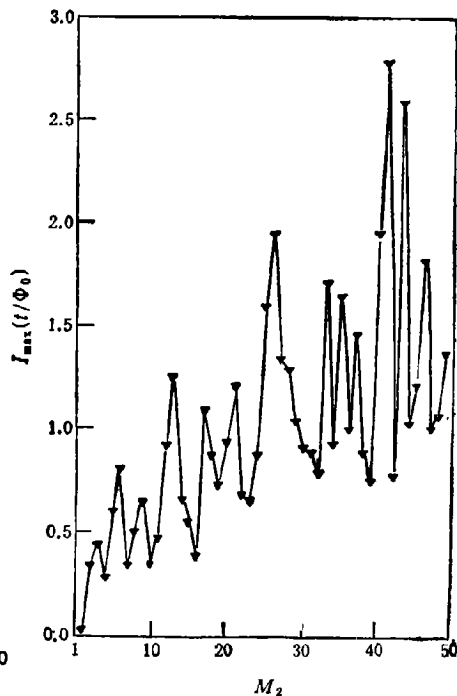


图 6 横向通道效应有增大电流幅值的作用。处于零化学势下的圆筒(221, 100, M_2)其横向通道效是通过调整圆筒壁厚 $M_2 = 1-50$ 来实现的

我们在数值模拟试验中发现单个圆筒中持续电流的幅值随横向通道数有增大的趋势, 参见图 6。事实上, Cheung 等人^[10]在研究二维柱面模型时已指出电流平方最大值正

比于有效横向通道数。但由于 Bouchiat 等人^[6]又断言在弱无序极限下系综平均 $\langle I \rangle$ 与通道数无关。有效横向通道数对介观圆筒中持续电流的影响没有得到更深入的研究。

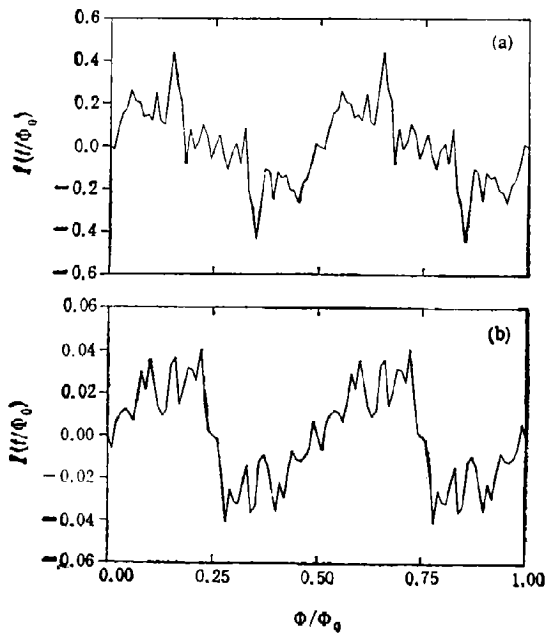


图7 μm 量级介观尺度圆筒持续电流的数值模拟结果
(a) 系统参数为(701,200,30) (b) 系统参数为(7001,200,30)

前面我们提出的将三维圆筒问题转化为相应一维环问题的方法对深入研究持续电流的大小是有帮助的。为简单明确起见，我们仍然限于讨论固定化学势为零的特殊情形。一维环的能谱按(31)式平移将给出 $M_1 \times M_2$ 个不同的横向通道。因为整体处于化学势之上或之下的一维环总电流为零，所以只有剩下的其它能谱对持续电流有贡献。它们对应的横向通道称为有效横向通道。简短的代数运算给出有效横向通道数目 $M_{\text{eff}} \sim 0.63 M_1 \times M_2$ 。某一通道的电流贡献当然与 E_{m_1, m_2} 有关，参见(27)–(29)式，但作为粗略的估计可假定每个有效横向通道贡献的电流大约为 I_0 。考虑到电流的正负，横向通道效应使圆筒内总电流增大大约 $(M_{\text{eff}})^{1/2}$ 倍。对实验所采用的样品，这一考虑可使持续电流的理论值提高1到2个数量级，从而与实验结果更一致。图7(a),(b)是关于 μm 量级介观尺度圆筒持续电流的数值模拟结果，二者具有相同的 $M_1 = 200$ ， $M_2 = 30$ 。图中数据表明电流与环的周长(或 N)成反比，而横向通道确实能使电流增大。按图7(b)的系统参数 $N = 7001$ ，若原子间距取 0.3nm (金属 Cu 和 Au 的 fcc 晶格常数分别为 0.361nm 和 0.408nm ，最近原子间距分别为 0.256nm 和 0.288nm ，则环的周长为 $2.1\mu\text{m}$ 。最大电流值约为 $4 \times 10^{-2} t / \Phi_0$ 。若迁移矩阵元取 $t = 0.1 - 1\text{eV}$ ，对应的电流值约为 $15 - 150\text{nA}$ 。实验中采用的介观尺度无序 Cu 金属环给出的持续电流为 nA 量级^[6]。这一结果被认为比以往的理论值大2个数量级。从我们的结果来看，即使考虑相当强的 Anderson 无序，仍

可期望解决理论值远小于实验结果这一异常困难。

四、小 结

我们在单电子模型的基础上研究了介观圆筒中的持续电流问题。首先根据量子力学的基本原理严格证明了常用的一维环电流公式可以推广应用于三维圆筒。然后为了计算的方便我们采用了紧束缚近似,并且详细研究了不含无序的完整晶格情形。所求得的本征值和本征波函数为考察介观圆筒中持续电流随磁通 Φ 变化的周期性和持续电流的大小提供了方便的途径。我们发现周期砍半现象不仅可以由大数介观环内电流的正则平均产生,而且在单个多通道圆环内也同样可能存在。与过去有些作者主张的相反,我们还发现在一定条件下巨正则平均同样可以给出非零的持续电流。数值模拟与定性分析还说明横向通道效应可以提高持续电流的理论值,从而为解决理论值比实验值小1到2个数量级的困难提供了一条可能途径。

由于篇幅的限制,我们略去了一些计算细节以及考虑无序后对结果的影响。另外,整个讨论都限于 Aharonov-Bohm 型磁通情形。实验样品被置于均匀磁场中,相应的理论工作将再撰文讨论。环内电子-电子长程库仑相互作用与赫伯特(Hubbard)关联能对持续电流的影响是很有趣的问题,我们亦将报告有关结果。

- [1] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.*, **115**, (1959), 485.
- [2] F. Bloch, *Phys. Rev.*, **B2**, (1970), 109.
- [3] M. Buttiker, Y. Imry and R. Landauer, *Phys. Lett.*, **A96** (1983), 365.
- [4] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir and H. Bouchiat, *Phys. Rev. Lett.*, **64**, (1990), 2074.
- [5] B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov, and B. Z. Spivak, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **33** (1981), 101; *JETP Lett.*, **33** (1981), 94.
- [6] V. Chakraborty, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketcher, W. J. Gallagher and A. Kleinsasser, *Phys. Rev. Lett.*, **67**, (1991), 3578.
- [7] H. F. Cheung, Y. Gefen, E. Riedel and W. H. Shih, *Phys. Rev.*, **B37**, (1988), 6050.
- [8] H. Bouchiat and G. Montambaux, *J. Phys. (France)*, **50**, (1989), 2695.
- [9] P. Kopietz, *Phys. Rev.*, **B46**, (1992-I), 7204.
- [10] M. Abraham and R. Berkovits, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, (1993), 1509.
- [11] 李正中, 固体理论, (高等教育出版社, 北京 (1985)), p. 138.
- [12] Deng Wen-ji (邓文基), Liu You-yan (刘有延), Huang xiu-qing (黄秀清), *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)*, **1**, (1992), 113.
- [13] H. F. Cheung, E. K. Riedel and Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, (1989), 587.

PERSISTENT CURRENTS IN MESOSCOPIC HOLLOW CYLINDERS

EXSOT SOLUTIONS OF TIGHT BANDING MODELS

DENG WEN-JI^{1),2)} LIU YOU-YAN¹⁾ GONG CHANG-DE²⁾

¹⁾*Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510641*

²⁾*Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008*

(Received 26 April 1993)

ABSTRACT

The formula of one-electron theory for the circulating currents in normal metal hollow cylinders, threaded by magnetic flux of Aharonov-Bohm type, is proven. The form of it is independent of either the shape of cylinder or the properties of carriers (charge and mass). The exact solutions of energy eigen values and wave-functions have been obtained for the perfect lattice case. We have also studied the periodicity of currents varying with the magnetic flux and the increasing tendency of current amplitudes with the height and thickness of cylinder wall. A number of new results have obtained in this work.

PACC: 7210; 0560; 7215