

文章编号: 1001-2486 (2001) 04-0024-04

自旋对一维正常金属介观环中持续电流的影响*

陈俊斌, 朱霞

(后勤工程学院基础部物理教研室, 重庆 400016)

摘要: 采用自由单电子模型, 得到了考虑电子自旋后一维正常金属介观环中持续电流的解析及数值计算结果。推广至三维介观环, 得到了与实验结果接近的结论。首次发现了由于自旋引起的调制现象。

关键词: 自旋; 持续电流; 频谱分裂

中图分类号: O56 文献标识码: A

The Influence of Spin in Studying Persistent Currents of One-dimension Mesoscopic Rings

CHEN Jun-bin, ZHU Xia

(Foundation Studies Dept. of Logistics Engineer University, Chongqing 400016, China)

Abstract: This paper reports the analytic and numerical results of persistent currents in one-dimension mesoscopic rings with the free electron model by taking spin into consideration. Extending to three-dimension, the theoretic result is close to the experiment result. The article introduces theoretically the modulation by spin for the first time.

Key words: spin; persistent current; frequency splitting

当金属环的尺度足够小、温度足够低以至其中的电子能保持相位记忆时, 在外磁场的作用下, 正常金属环中能产生持续电流, 这一与宏观现象大相径庭的结论已经为实验所证实^[1]。但是, 现有理论与实验结果仍有较大差距, 特别是实验结果比理论预期大近两个数量级^[2], 说明以前的理论还存在明显的缺陷。

我们分析发现, 以前的理论都忽略了电子的自旋^[2-5], 其实这是非常不合理的: 第一, 没有任何证据表明正常金属介观环具有完全抗磁性; 第二, 电子自旋对持续电流应有明显的影响。本文仅分析理想(即无缺陷)一维正常金属介观环中的持续电流在考虑自旋后的情况, 所得结论推广至二维和三维介观环, 得到与实验吻合的结论。

1 考虑自旋时一维正常金属介观环中的持续电流

考虑一维正常金属环, 半径为 r , 其中有 N_e 个近独立自由电子, 沿轴向加一均匀外磁场 B 。

取外磁场的方向为 Z 轴, 建立柱坐标系。取磁矢势 $A = Bre_\theta/2$, 忽略电子间相互作用, 整理后得到单电子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{ieB\hbar}{2M} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{(eBr)^2}{8M} - \frac{eB}{M} \hat{S}_z \quad (1)$$

其中, e 为电子电量的绝对值。将时间和自旋空间先行分离, 设坐标空间波函数为 ψ , 则电流密度为

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2iM} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* - 2 \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \psi^* \psi) - \frac{e}{M} s_z \nabla \times (\psi^* \psi \mathbf{e}_z) \quad (2)$$

对一维理想环, 电流密度就是电流强度, 解定态薛定鄂方程, 可得到电流强度及能量

$$\mathbf{j} = - \frac{e\hbar}{2\pi Mr^2} (m + \xi) \mathbf{e}_\theta \quad (3)$$

$$E_{m, \sigma} = \frac{\hbar^2}{2Mr^2} (m + \frac{eBr^2}{2\hbar})^2 - \frac{eB}{M} s_z = \frac{\hbar^2}{2Mr^2} [(m + \xi)^2 - 4\sigma\xi] \quad (4)$$

其中, $\xi = eBr^2/2\hbar$ 称为相对磁通, $\sigma = s_z/\hbar$ 为自旋量子数。

* 收稿日期: 2001-01-28

作者简介: 陈俊斌(1967-), 男, 讲师, 硕士。

1.1 $T = 0$ ，弱外场时的持续电流

按照泡利不相容原理和能量最低原理，温度趋于绝对零度时，电子按能量从低到高的顺序占据各能态，能量最高的电子所具有的能量就是体系的费米能。先考虑弱外场即相对磁通在区间 $(0, 0.5)$ 内的情况。

$$(1) N_e = 4n, n = 1, 2, 3, \dots$$

两种自旋取向各占一半，产生的持续电流为 $I = -\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2} \sum (m + \xi) = (-\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2}) N_e (-0.5 + \xi)$

$$(2) N_e = 4n + 1, n = 0, 1, 2, 3, \dots. \text{ 同理可得持续电流为 } I = (-\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2}) N_e (-\frac{N_e - 1}{4N_e} + \xi)$$

(3) $N_e = 4n + 2, n = 0, 1, 2, 3, \dots$ 。磁场较弱时，产生的持续电流为 $I = (-\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2}) N_e \xi$ 。当 ξ 逐渐增大至临界磁场 $\xi_c = N_e/2 (N_e + 4)$ 后，产生的持续电流为 $I = (-\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2}) N_e (-0.5 + \xi)$

$$(4) N_e = 4n + 3, n = 0, 1, 2, 3, \dots. \text{ 产生的持续电流为 } I = (-\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2}) N_e (-\frac{N_e + 1}{4N_e} + \xi)$$

再根据对称性，可得到磁场为负时的持续电流。将电流的表达式作周期性开拓，分解为傅里叶级数

$$I = \frac{e\hbar}{2Mr} N_e \sum_l \frac{1}{l\pi} \sin(2l\pi\xi) \quad N_e = 4n \quad (5)$$

$$I = \frac{e\hbar}{2Mr} N_e \sum_l \frac{1}{l\pi} \left[\frac{N_e - 1}{2N_e} + \frac{N_e + 1}{2N_e} (-1)^l \right] \sin(2l\pi\xi) \quad N_e = 4n + 1 \quad (6)$$

$$I = \frac{e\hbar}{2Mr} N_e \sum_l \frac{\cos 2\xi_c l\pi}{l\pi} \sin(2l\pi\xi) \quad N_e = 4n + 2 \quad (7)$$

$$I = \frac{e\hbar}{2Mr} N_e \sum_l \frac{1}{l\pi} \left[\frac{N_e + 1}{2N_e} + \frac{N_e - 1}{2N_e} (-1)^l \right] \sin(2l\pi\xi) \quad N_e = 4n + 3 \quad (8)$$

只要电子数 N_e 不是太小，偶次谐波的振幅都与电子数 N_e 成正比、与谐波级次成反比。

奇次谐波的情况就复杂得多。当 N_e 为偶数时，奇次谐波振幅也与电子数 N_e 成正比、与谐波级次成反比，但是符号有正负两种；而 N_e 为奇数时，奇次谐波振幅与电子数 N_e 关系微弱、与谐波级次成反比，符号也有正负两种。

按照上面的方法，可以求出磁场继续增强时的持续电流表达式。忽略自旋时，持续电流随相对磁通的变化出现严格周期性变化，周期为 1；考虑自旋时，不会有严格的周期性。

1.2 $T = 0$ ，强外场时的持续电流

外场增强时，考虑自旋后会得到很新奇的结果，持续电流的频谱可能产生分裂或者体系的费米能将出现非常明显的调制。

按照 (4) 式，电子的能量由于自旋而发生分裂，使得电子的分布比较复杂，计算持续电流的思路与前面一样，但是改用数值计算会更清楚地看到强外场时电子行为的规律。

我们分别计算了 N_e 取不同值、相对磁通从 0 逐渐增强时，介观环的持续电流及其频谱、体系的费米能与外场的关系，从大量的计算结果中可明显发现如下规律：

(1) N_e 为偶数时，持续电流随相对磁通变化不是严格的周期性变化，而是受到一缓变函数的调制，即持续电流的频谱将发生分裂，裂距为 $16\pi l/N_e$ 。

(2) N_e 为奇数时，持续电流的频谱只有偶次谐波且基本不发生分裂。但是此时体系的费米能将出现非常明显的调制。

图 1、图 2 分别是 $N_e = 100$ 和 $N_e = 101$ 时平均持续电流的频谱，图 3 是 $N_e = 103$ 时费米能与相对磁通的关系曲线（本文所有图形中的持续电流均为平均电流即 I/N_e ，电流单位为 $-e\hbar/2Mr$ ，能量的单位为 $\hbar^2/2Mr^2$ ，温度的单位为 $\hbar^2/2Mr^2 k$ ）

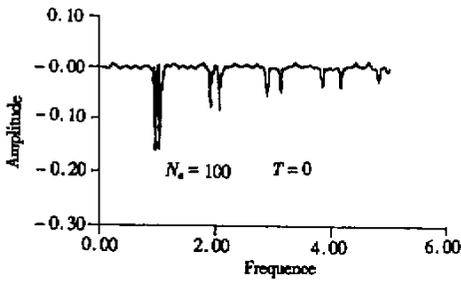


图1 平均持续电流的频谱(一)

Fig.1 The spectrum of average persistent current (1)

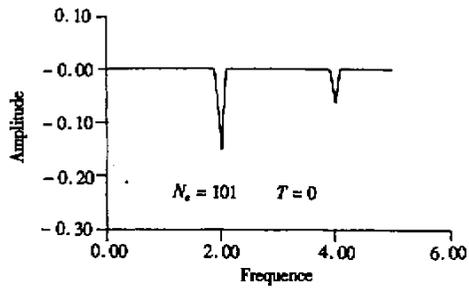


图2 平均持续电流的频谱(二)

Fig.2 The spectrum of average persistent current (2)

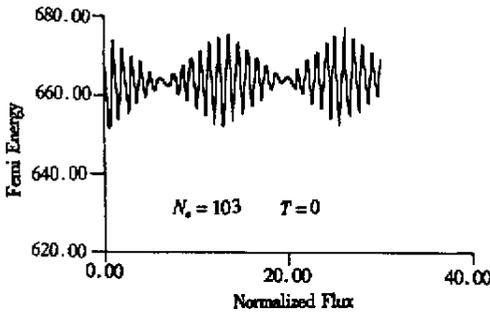


图3 费米能与相对磁通的关系

Fig.3 The curve of Fermi Energy-Flux

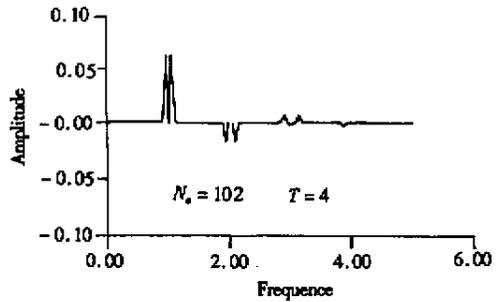


图4 平均持续电流的频谱(三)

Fig.4 The spectrum of average persistent current (3)

1.3 一定温度下介观环中的持续电流

电子按能级的最可几分布遵从费米-狄拉克分布 $f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$ 和条件 $N_e = \sum_{m, \sigma} f(E)$, 可用数值计算方法求出在一定温度 T 、一定外场下的化学势 μ , 然后再由公式

$$I = -\frac{e\hbar}{2\pi Mr^2} \sum_{m, \sigma} (m + \xi) f(E) \tag{9}$$

用数值计算方法计算出同样条件下的持续电流。运用残数定理, 当 N_e 不太小时, 可归纳出如下公式:

$$I = \left(\frac{e\hbar}{2Mr^2}\right) N_e \sum_l A_{l, N_e} \left(\frac{1}{\pi} \frac{2\eta T e^{-l\eta T}}{1 - e^{-2l\eta T}}\right) \text{Si}(\pi l \xi) \tag{10}$$

其中, $\eta = 8\pi^2 Mr^2 k / \hbar^2 N_e$, 而函数 A 为

$$A_{l, N_e} = \begin{cases} \cos \frac{4\pi l \xi}{N_e + 1} [1 + (-1)^{N_e}] & l \text{ 为偶数} \\ \left| \cos \frac{4\pi l \xi}{N_e + 1} [1 + (-1)^{N_e}] \right| \cos(N_e \frac{\pi}{2}) & l \text{ 为奇数, } N_e \text{ 为偶数} \\ -\frac{1}{N_e} \left| \cos \frac{4\pi l \xi}{N_e + 1} [1 + (-1)^{N_e}] \right| \text{Si}(N_e \frac{\pi}{2}) & l \text{ 为奇数, } N_e \text{ 为偶数} \end{cases} \tag{11}$$

在一定温度下, 自旋取向能也将引起调制。电子数为偶数时, 受调制的是持续电流, 此时电流的频谱将由忽略自旋时的单峰分裂为等高的双峰, 裂距与电子数成反比, 如图4所示; 电子数为奇数时, 持续电流的调制可忽略, 而体系的费米能却出现调制, 如图5所示。

随着温度的升高, 持续电流基本上按负指数规律衰减, 高频成份衰减得更快。

偶次谐波的振幅与电子数成正比；奇次谐波的情况与温度趋于零的情况类似。

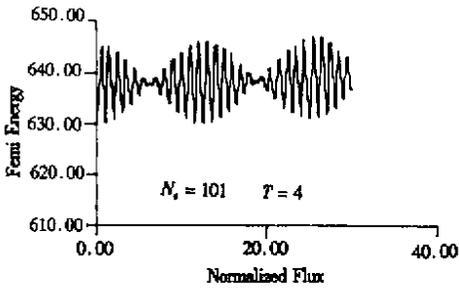


图5 费米能与相对磁通的关系

Fig.5 The curve of Femi Energy-Flux (2)

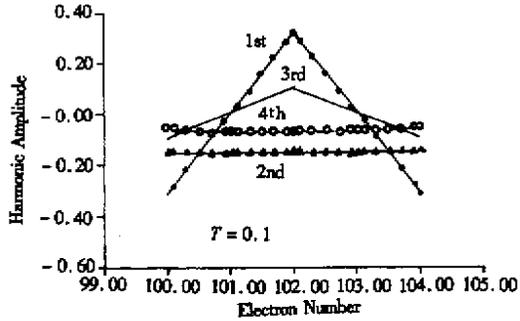


图6 前四次谐波振幅与“电子数” N_e 的关系

Fig.6 The curve of harmonic amplitude- “electron number” N_e

2 N_e 推广至实数时的持续电流

在二维和三维环中，可以将电子分成“壳层”，每个“壳层”中的“电子”数目可以为实数，因此我们计算了几率和

$$N_e = \sum_{m, \sigma} f(E_{n, p, m, \sigma}) = \frac{1}{e^{(E_{n, p, m, \sigma} - \mu)/kT} + 1} \quad (12)$$

为实数（即把电子数推广为实数）时，某“壳层”中“电子” N_e 产生的持续电流，发现平均（对 N_e 平均）持续电流的偶次谐波振幅几乎与 N_e 无关，奇次谐波振幅随 N_e 以 4 为周期做平均值为零的振荡，如图 6 所示。持续电流的温度特性与 N_e 为整数时一样。

3 对实验结果的解释和对新实验的展望

以 Lévy 实验为例^[1]，共有 10^7 个独立的介观环，环的平均半径 $3.65\mu\text{m}$ ，壁厚 $0.6\mu\text{m}$ ，环高 30nm ，总电子数约 3.5×10^8 个。

将电子分成“壳层”，推广至三维理想介观环，由于奇次谐波振幅随广义电子数 N_e 以 4 为周期做平均值为零的振荡，因此各“壳层”产生的持续电流中奇次成份被强烈抵消，单环实验都观察不到，多环实验由于无序组态平均更相互抵消而不出现；偶次谐波与总电子数成正比，绝对零度时，按公式 (10)，单环的持续电流中二次谐波为 1.2mA ，比实验值大近两个数量级。考虑杂质势的影响后，与实验结果吻合。

随着温度升高，持续电流仍按负指数规律衰减，根据我们对三维环的计算，二次谐波的特征温度为 0.824K ，比实验值 0.08K 大 10 倍。考虑杂质势的影响后，特征温度也能很好地与实验结果吻合。

频谱分裂的裂距与电子数成反比，因此该实验未能观察到。但是，可以预期，若总自由电子数能减少至数万左右，或提高仪器的灵敏度，应该能观察到频谱分裂现象。

参考文献：

- [1] Lévy L P, et al. Magnetization of Mesoscopic Copper Rings: Evidence for Persistent currents [J]. Phys. Rev. Lett., 1990, 64 (17): 2074 - 2077.
- [2] Atanas Groshev, et al. Persistent currents in finite-width mesoscopic rings [J]. Phys. Rev. B, 1992, 45 (11): 6279 - 6283.
- [3] Ho-Fai Cheung, et al. Isolated rings of mesoscopic dimensions. Quantum coherence and persistent currents [J]. IBM. J. RES. DEVELOP, 1988, 32 (3): 359 - 371.
- [4] Vinay Ambegaokar, Ulrich Eckern. Coherence and Persistent Currents in Mesoscopic Rings [J]. Phys. Rev. Lett, 1990, 65 (3): 381 - 385.
- [5] Ho-Fai Cheung, et al. Persistent currents in small one-dimensional metal rings [J]. Phys. Rev. B, 1988, 37 (11): 6050 - 6062.

