

邵 惠 民

(南京大学物理系)

一、现 象

1930年荷兰的德哈斯(de Haas)和万阿耳芬(van Alphen)在测量铋单晶的低温磁化率时,当温度降到14K左右,发现了一个奇怪的现象:铋单晶的磁化率随磁场变化而振荡,其周期与磁场的倒数成正比,如图1所示.自此之后,经人们进一步研究,发现此现象并非为铋单晶所独有,而对很多晶体也能观察到.为此人们就把这种在外加磁场改变时,抗磁化率(或磁化强度)的值发生振荡的现象定名为德哈斯-万阿耳芬效应^[1].

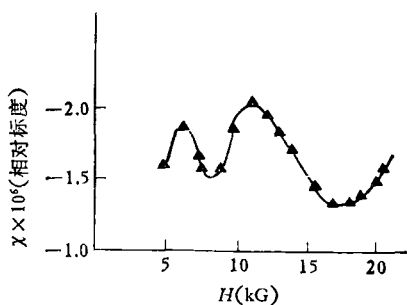


图1 $T = 14.2\text{K}$ 时,铋单晶的磁化率 χ 随磁场变化而振荡

图2(a)所示是铋单晶在1.4K温度下测得的磁化强度 M 对磁场 H 的函数曲线(实际上是扭矩 $T = |\mathbf{M} \times \mathbf{H}|$ 对 H 的曲线).对应图上振峰的序号1, 2, 3, ...的磁场若为 H_1, H_2, H_3, \dots ,则以振峰的序号1, 2, 3, ...为横坐标,以对应的磁场 H 的倒数 $1/H_1, 1/H_2, 1/H_3, \dots$ 为纵坐标作图,即得图2(b).由图可知,实验点的连线是一条直线,实验点的周期即反映磁化强度随磁场变化的周期 P 为常数且 $P = 1.53 \times 10^{-6} \text{Oe}^{-1}$.这一规律具有普遍性,因此颇令人感兴趣.特别是这个周期 P 还和金属的费密面有关,即

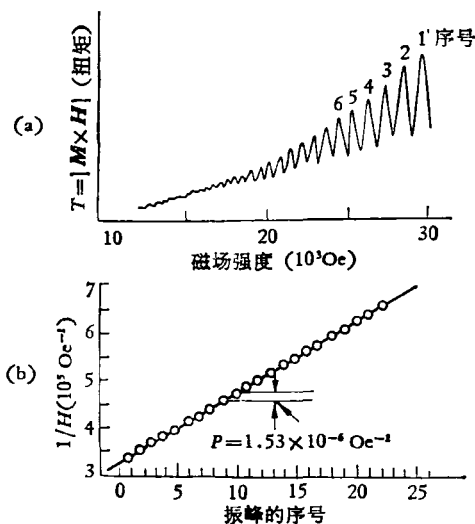


图2 $T = 1.4\text{K}$, 铋单晶的磁化强度 M 随磁场 H 变化而振荡,其周期为 P

$$P = \frac{2\pi e}{\hbar c S_0}, \quad (1)$$

式中 e 是电子电荷, \hbar 是普朗克常数, S_0 是费密面在磁场垂直方向上的横截面的极大值(或极小值), c 是真空中光速值.上式意味着我们可以通过周期 P 的测量来定出 S_0 ,从而描绘出费密面的图像.正是由于这一点德哈斯-万阿耳芬效应才引起人们这么大的兴趣.事实上它现在已成为确定费密面的强有力的方法之一.但为了弄清这一效应,我们还得从研究它的本质入手.

二、本 质

1. 经典力学的解释

在理论计算中,对于 N 个电子组成的体系,单位体积的磁化率定义为^[2]

$$\chi = -\frac{1}{VH} \frac{\partial E}{\partial H} \quad (T=0),$$

1) 本实验中的磁化强度是用扭矩法测量($T = |\mathbf{M} \times \mathbf{H}|$),所以图2(a)中曲线的振幅是反映扭矩的大小.

$$\text{或 } \chi = \frac{kT}{VH} \frac{\partial \log_e f}{\partial H} \quad (T \neq 0), \quad (2)$$

式中 V 是所研究的样品的体积; H 是磁场强度; $\frac{\partial E}{\partial H}$ 是体系能量随磁场强度变化的速率; T 是绝对温度; k 是玻耳兹曼常数; f 是配分函数, 它决定系综的能量分布。

从经典物理预言, 这磁化率应不随磁场而变。因为, (1) 磁场改变电荷的运动方向, 但不改变它的速率; (2) 前条理由意味着能量的分布不随磁场而改变, 因此配分函数是不改变的; (3) 如果配分函数不随磁场的变化而改变, 则由式(2)得出: 在磁场作用下, 带电粒子的运动对磁化率的贡献应为零。因此德哈斯-万阿耳芬效应显然不能在经典物理的范畴内找到合理的解释。

2. 量子力学的解释

量子力学和经典力学的根本区别, 在于经典力学中在磁场中运动的电子不存在稳定化的运动轨道, 而量子力学的预言截然相反, 对于电子运动确实存在稳定化的量子轨道。又物质的磁性主要是由于物质中的电子提供。在外磁场中物质的磁性有三个效应, 来源于: (1) 电子所固有的自旋; (2) 电子绕核旋转的轨道角动量; (3) 外加磁场感生的轨道矩的改变。前两者对磁化产生顺磁性贡献, 第三者给出抗磁性贡献。一般说来它们同时存在, 并且互相竞争。但为了说明轨道量子化引起抗磁性这一重要事实, 我们暂且忽略顺磁性, 而考虑理想化的情形, 即考虑自旋为零的自由电子体系。

为了应用公式(2), 我们必须知道体系的配分函数 f 。但要找出 f , 首先得计算出单粒子的能级及其简并度。

(1) 朗道能级

为了形象化起见, 我们还是采用玻尔的量子论描述。在磁场 H 中, 晶体中的传导电子受洛伦兹力的作用, 它遵守如下的方程^[6]

$$\frac{d}{dt} (\hbar \mathbf{k}) = -\frac{e\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{H}. \quad (3)$$

又能带伦中的自由电子近似有

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}), \quad (4)$$

代入(3)式, 并积分。令积分常数为 \mathbf{k}_0 , 则有

$$\mathbf{r} \times \frac{e}{\hbar c} \mathbf{H} = -(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0), \quad (5)$$

由上式可知, 在磁场作用下坐标空间中径矢的轨迹和动量空间中波矢的轨迹形状相同, 仅后者比前者差一比例因子 $\frac{e}{\hbar c}$, 并绕磁场转了一个 90° 方位。因此在费密面上, 波矢端点的运动方程为

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar c} v_{\perp} H = -\frac{eH}{\hbar^2 c} [\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})]_{\perp}, \quad (6)$$

式中符号 \perp 表示矢量在磁场垂直方向上的投影。因此波矢端点以 v_{\perp} 的速度沿费密面与磁场垂直面的交线运动, 其周期为

$$T = \oint dt = \frac{c\hbar}{eH} \oint \frac{d\mathbf{k}}{v_{\perp}} = \frac{\hbar^2 c}{eH} \oint \frac{d\mathbf{k}}{(\nabla_{\mathbf{k}} E)_{\perp}},$$

又因为

$$[\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})]_{\perp} = \frac{\Delta E}{(\nabla \mathbf{k})_{\perp}}, \quad \oint (\Delta \mathbf{k})_{\perp} d\mathbf{k} = \Delta S,$$

式中 S 是 k 空间波矢回旋轨道的面积。所以

$$T = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{1}{\Delta E} \oint (\Delta \mathbf{k})_{\perp} d\mathbf{k} = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{\partial S}{\partial E}. \quad (7)$$

形式上我们和自由电子进行类比, 在自由电子近似中有

$$\oint \frac{d\mathbf{k}}{v_{\perp}} = \frac{m}{\hbar} \oint \frac{d\mathbf{k}}{k_{\perp}} = \frac{2\pi}{\hbar} m,$$

因此我们也引入一个有效质量 m^* , 其定义为

$$m^* = \frac{\hbar}{2\pi} \oint \frac{d\mathbf{k}}{v_{\perp}} = \frac{\hbar^2}{2\pi} \oint \frac{d\mathbf{k}_{\perp}}{dE} d\mathbf{k} = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial E}. \quad (8)$$

按玻尔量子理论, 带电粒子在外场中的容许轨道应满足下列量子化条件:

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{q} = \oint (\hbar \mathbf{k} - e\mathbf{A}) d\mathbf{r} = (n + \gamma) 2\pi \hbar, \quad (9)$$

式中 n 是整数, \mathbf{A} 是矢势, $\text{rot} \mathbf{A} = \mathbf{H}$, γ 是相位修正因子, 对于自由电子 $\gamma = \frac{1}{2}$ 。由(5)式

有

$$\oint \hbar \mathbf{k} d\mathbf{r} = \frac{e\mathbf{H}}{c} \oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} \\ = \frac{2e}{c} HS = \frac{2e}{c} \Phi, \quad (10)$$

式中 Φ 即坐标空间中闭合轨道所含的磁通值, 按斯托克斯定律有

$$e \oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = e\Phi. \quad (11)$$

将(10)和(11)两式代入(9)式得

$$\Phi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi\hbar c}{e}, \quad (12)$$

式中 $\frac{2\pi\hbar c}{e}$ 是磁通量子, 因此在 \mathbf{k} 空间中波矢 \mathbf{k} 端点轨迹所围成的面积 S_n 也成量子化, 即

$$S_n = \frac{2\pi e H}{\hbar c} \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (13)$$

上述结果与波矢 \mathbf{k} 平行于磁场的分量 k_{\parallel} 无关. 磁场的效应是使费密面内允许 \mathbf{k} 的状态构成一系列同心圆筒. 由式(13)可知 S_1, S_2, S_3, \dots 的截面之差是一样的, 即

$$\Delta S = S_{n+1} - S_n = \frac{2\pi e H}{\hbar c}. \quad (14)$$

因此磁场愈强筒愈粗, 间距愈大, 如图 3 所示.

由此可见在量子力学中, 磁场的引入改变了能态的分布, 这是经典物理无法得到的结论.

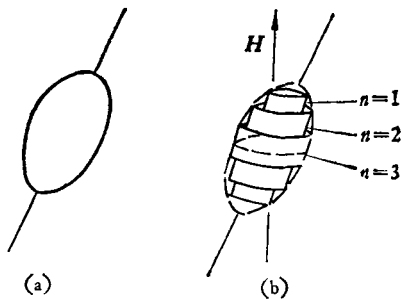


图3 磁场改变了 k 空间的状态分布(在没有磁场时费密面呈椭球面) (a) $H=0$; (b) $H \neq 0$

对于 z 方向上一一定的动量值, 这些许可能态相互隔开, 其间隔为

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial S} \Delta S = \frac{\partial E}{\partial S} \frac{2\pi e H}{\hbar c}.$$

再利用公式(8)

$$\Delta E = \frac{\hbar e H}{m^* c} = \hbar \omega_c. \quad (15)$$

上式中我们已引入了一个回旋频率 ω_c , 其定义为 $\omega_c = \frac{eH}{m^* c}$. 这样我们可以说垂直于磁场方

向运动的能量应量子化, 其间隔为 $\Delta E = \hbar \omega_c$ ——这些量子化能级称为朗道能级^[2]. 另一方面, 平行于磁场的 \mathbf{k} 分量的能量关系不受磁场影响, 所以单电子的总能量为

$$E(n, k_z) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2. \quad (16)$$

其次我们来计算分离能级的简并度. 对于边长为 L 的正方形样品, 若略去自旋, 则 \mathbf{k} 空间中单个轨道占据的面积是 $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$, 又在恒定磁场

中相继量子化轨道之间的面积是 $\Delta S = \frac{2\pi e H}{\hbar c}$,

因此以 n 标记的态的简并度是

$$G = \left(\frac{2\pi e H}{\hbar c}\right) \times \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 = \rho H, \quad (17)$$

其中 ρ 是一个比例常数, 其值为 $\frac{eL^2}{2\pi\hbar c}$.

(2) 朗道抗磁性

有了单电子能级及其简并度, 我们就可计算配分函数 f , 得

$$f = \prod_{n, k_z, G} \{1 + e^{\beta[\mu - E(n, k_z)]}\}, \quad (18)$$

式中 μ 为化学势, $\beta = 1/kT$, k 是玻耳兹曼常数, T 是绝对温度, $E(n, k_z)$ 由公式(16)给出

$$\log_e f = \sum_{n, k_z, G} \log_e \{1 + e^{\beta[\mu - E(n, k_z)]}\} \\ = GL \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{n=0}^{\infty} \log_e \{1 + e^{\beta[\mu - E(n, k_z)]}\}. \quad (19)$$

对于高温, 上式可按 $e^{\beta\mu}$ 来展开, 保留一项就可得到很好结果.

$$\log_e f \simeq \frac{e^{\beta\mu}}{2\pi^2} \frac{eHV}{\hbar^2 c} \sqrt{\frac{\pi m}{\beta}} \frac{e^{-y}}{1 - e^{-2y}}, \quad (20)$$

其中 $y = \frac{e\hbar}{2mc} \frac{H}{kT}$. 对于弱磁场, y 的值很小,

因此上式又可在 $y = 0$ 附近进行展开,得

$$\log_e f \approx \frac{e^{\beta\mu}}{4\pi^2} \frac{eHV}{\hbar^2 c} \sqrt{\frac{\pi m}{\beta}} \frac{1}{y} \left(1 - \frac{y^2}{6}\right), \quad (21)$$

将上式代入公式(2),最后得到高温下单位体积的磁化率 χ :

$$\chi \approx -\frac{N}{6kTV} \left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2, \quad (22)$$

式中 V 为样品的体积, N 是粒子数. 上式中的负号表示抗磁性,即熟知的朗道抗磁性. 与 $1/T$ 的关系正是居里定律所预言的结果.

在低温下, $T \rightarrow 0$, 并且磁场足够强,使得 $y = \frac{e\hbar}{2mc} \frac{H}{T}$ 不再是一个小量,表达式(20)不能

在 $y = 0$ 附近展开,磁化率随外磁场 H 变化而振荡. 因此德哈斯-万阿耳芬效应仅是朗道抗磁性在低温和强场条件下的一个特例.

(3) 德哈斯-万阿耳芬效应

原则上我们只要计算出 $T = 0$ 时 N 个电子体系的能量 E , 然后代入公式(2),就可得到单位体积的磁化率 $\chi^{[6]}$. 但是为了同时给出效应及周期 P , 我们还是采用下面的叙述: 在 $T = 0$, 无外磁场时, N 个电子均匀地充满了费密

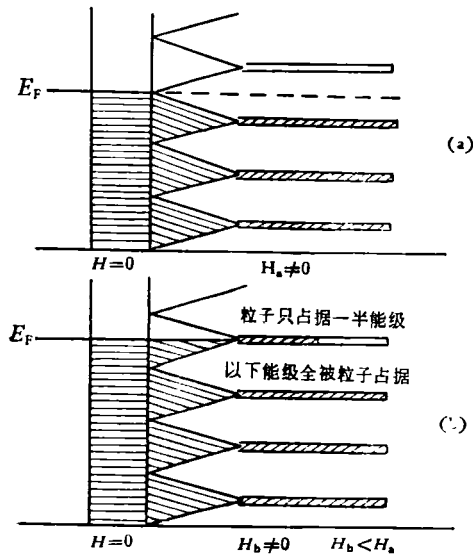


图4 磁场的作用改变了能态的分布

(a) 当 $H = H_a \neq 0$ 时, 体系的自由能 $F(H_a) = F(0)$, 费密能级以下的分立能级全被粒子占据;
(b) 当 $H = H_b < H_a$ 时, $F(H_b) > F(0)$, 在费密能级处的分立能级只有一半被粒子占据

能级以下的连续能带,如图4(a)左半边所示.

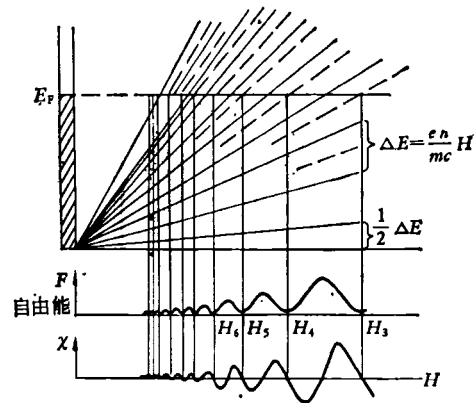


图5 德哈斯-万阿耳芬效应与朗道能级的关系^[3]
(图中 F 是自由能,其定义为 $F = kT \log_e f$)

加上磁场之后,能级分立. 对于 x 方向上一定的动量值许可能态的密度按 $E^{-\frac{1}{2}}$ 减小,所以允许的状态挤压在朗道能级附近,图4中以三角形来示意这种状态密度的分布. 磁场的作用一则使能级量子化;二则使状态密度按 $E^{-\frac{1}{2}}$ 减小. 由于这两个作用的共同影响,随着磁场的增减, N 个电子体系的总能量 E 产生周期性的变化. 如图4所示, $H = H_a$ 时,对于每一朗道能级附近的状态密度(图中以三角形表示)上下呈对称分布,因此许多电子能量的增加(或减少)值与磁场 H_a 中因轨道量子化导致能量的减少(或增加)值相同,所以体系的总能量相对 $H = 0$ 时的总能量没有变化. 而当磁场减少到 H_b 时,如图4(b)所示,由图可知朗道能级附近的状态密度,唯费密面处的例外——不呈对称分布. 因此位于费密面附近的电子,因磁场 H_b 产生的轨道量子化导致能量增加. 所以体系的总能量有净的增加. 以此类推,如图5所示. 当外磁场 H_3, H_4, H_5, \dots 满足以下等式

$$\begin{aligned} E_F &= 3H_3 \frac{e\hbar}{m^*c} = 4H_4 \frac{e\hbar}{m^*c} = \dots \\ &= nH_n \frac{e\hbar}{m^*c} \end{aligned} \quad (23)$$

时,体系总能量取极小. 因此我们得到体系总能量变化的周期为^[3]

$$P = \frac{1}{H_n} - \frac{1}{H_{n-1}} = \frac{e\hbar}{E_F m^* c}. \quad (24)$$

由于 $M = -\frac{\partial E}{\partial H}$, 所以磁化强度变化的周期也为 P .

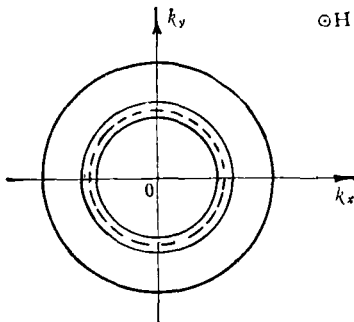


图6 磁场平行 z 轴, 本图系垂直于磁场的费密分布的剖面图, 外面的圆表示费密分布的极值截面

我们再来详细看一下, 在磁场中电子能级的重新分配情况^[2]. 如图6所示, 磁场平行 z 轴, 该图系垂直于磁场的费密分布的剖面图. 外面的圆表示费密分布极值截面(极大或极小)的边界. 在没有外磁场时, 波数的容许值均匀地分布. 当加外磁场 H 之后, 位于平行于 z 轴的圆柱壳内(图中阴影部分), 且相当于 $\Delta E = \frac{e\hbar H}{m^* c}$ 范围内的能级聚合, 而形成具有一定 n 值的能级(图中虚线所示位置). 这一过程使原来位于虚线外的能级的电子能量降低了, 但使原来位于虚线内的能级的电子能量提升了, 两者

贡献彼此相消, 所以平均能量保持不变. 但对极值截面的边界来说, 可以是单方面的原因造成能量变化, 产生一个净的信号. 因此对体系总能量变化起支配作用的仅是极值截面的边界. 又 E_n 和 S_n 成正比, 特别是当 $E_n = E_F$ 时, $S_n = S_0$ (其中 S_0 为极值截面), 最后得

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_F = \frac{E_F}{S_0}. \quad (25)$$

将上式及式(8)一起代入式(24), 有

$$\begin{aligned} P &= \frac{2\pi e}{\hbar c} \cdot \frac{1}{E_F} \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_F \\ &= \frac{2\pi e}{\hbar c S_0}. \end{aligned} \quad (26)$$

由上式可知, 德哈斯-万阿耳芬效应中磁化强度变化的周期和费密面的极值截面成反比.

三、应 用

由于磁化强度变化的周期为 $P = \frac{2\pi e}{\hbar c S_0}$, 其

中 S_0 为与磁场垂直的极值截面. 参照图2, 利用磁化强度的实验结果求出周期, 再利用公式(26)算出极值截面 S_0 . 但要注意这个 P 和 S_0 是对应磁场一定取向下的结果, 而我们改变磁场的取向, 就可得到对应于磁场不同取向的极值截面 S_0 , 从而可以确定费密面的形状及其大小. 例如图7所示^[4]. 在图7(a)中磁场沿水平方向, 可以得到两个极值截面 S_A 和 S_B ; 磁场沿垂

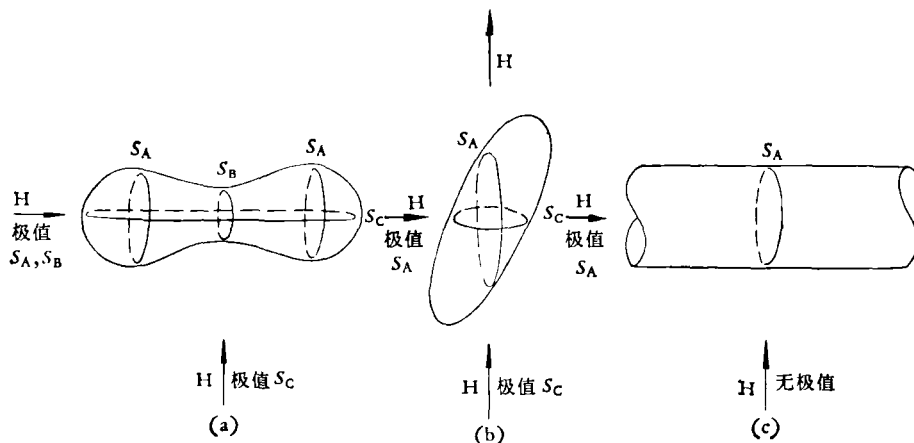


图7 对应于磁场不同取向的极值截面

直方向,只能得到一个极值截面 S_c . 其余图形的极值截面可以此类推.

至于更复杂的费密面,也可用上述方法得到^[5,6]. 图 8(a) 中画出了金(或铜)的费密面,图 8(b) 中画出了磁场沿 [111] 方向时金中的德哈斯-万阿耳芬效应. 图中的腹振动(细密间距)反映了图 8(a) 中的极值截面 B_{111} , 图 8(b) 中的颈振动(粗疏间距)反映了图 8(b) 中的极

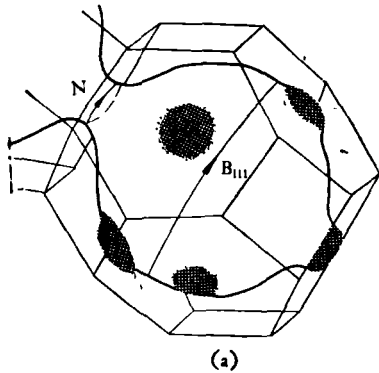


图 8(a) 金或铜的费密面^[6] [截角八面体表示 fcc 结构的布里渊区, 图中还画出了沿 [111] 方向的两个极值轨道 B_{111} 和 N]

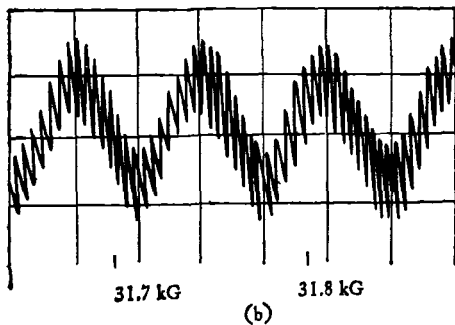


图 8(b) 金中的德哈斯-万阿耳芬效应^[5] [磁场平行 [111] 方向, 图中的腹振动(细密间距)和颈振动(粗疏间距)分别反映了图 8(a) 中的极值轨道 B_{111} 和 N]

值截面 N .

至于具体实验装置,因牵涉的东西较多,限于篇幅这里暂不介绍. 我们只想谈一点实验条件问题. 德哈斯-万阿耳芬效应并不是在任何情况下(例如室温)都能观察到,而是需要一定条件,通常为了便于观察必须具备下列条件:

(1) 样品中的传导电子(或空穴)必须高度

简并,并且自由电子数 N 要足够大. 否则在不很强的磁场 H 中,就有 $N < G$ [G 是式 (17) 定义的简并度],而所有电子都可处于最低的朗道能级,这时体系的总能量为 $E = N \left(\frac{e\hbar}{2m^*c} \right) H$, 磁化强度就与 H 无关.

(2) 样品要足够纯净. 因为在非纯净样品中,电子的量子化轨道由于碰撞而模糊,能级也不再清晰确定,所以振荡部分也模糊不清. 在低温下,传导电子散射的主要来源是杂质和点阵缺陷,合金中对电子产生散射的因素较多,所以在稀薄合金中观测不到德哈斯-万阿耳芬效应.

(3) 强度要低. 因为本效应是当外场 H 变化时,费密面上或在它附近的轨道的粒子布居发生振荡 (population oscillation),从而引起的一种效应. 因此我们不希望布居振荡被相邻轨道的热布居平均化.

(4) 外场要强. 从本文公式 (20) 得知, $y = \frac{e\hbar}{2mc} \cdot \frac{H}{kT}$ 很小时得不出德哈斯-万阿耳芬效应. 为了得到此效应,必须使 $y \left(\sim \frac{H}{T} \right) \gg 1$,

而通常我们是利用强磁场和低温(液氮温度)来满足这一条件的.

(5) 限于测量仪器的灵敏度,要求 P 足够大. 从而要求相对于样品费密分布的极值截面要小. 这样就对磁场的空间均匀度及时间稳定度提出了较高的要求.

参 考 文 献

- [1] D. Shoenberg, The de Haas-van Alphen Effect in Progress in Low Temperature Physics, New York, Vol 2 (1957).
- [2] F. Seitz, Modern Theory of Solids, McGraw-Hill New York, (1940), 580. F. 赛兹,近代固体理论,(中译本)科学出版社,(1958), 466—472.
- [3] 田沼静一,固体物理, V(6), (1970), 327.
- [4] 田沼静一,固体物理 I(4), (1966), 17.
- [5] D. Shoenberg, Proc. Phys. Soc., 79 (1962), 1—9.
- [6] C. 基泰尔,杨顺华等译,固体物理导论,科学出版社,(1979), 299.