

更加深入地研究正电子湮没将为理解高温超导机制和寻求性能更好的高温超导材料两方面都作出更大的贡献。

- [1] J. Muller and J. L. Cisen (eds.), *High Temperature Superconductors: Materials and Mechanisms of Superconductivity*, North-Holland, Amsterdam, (1988).
- [2] R. N. Shelton and W. A. Harrison (eds.) *High Temperature Superconductor: Materials and Mechanisms of Superconductivity II*, North-Holland, Amsterdam, (1989).
- [3] W. Brandt and A. Dupasquier (eds.), *Positron Solid State Physics*, North-Holland, Amsterdam, (1983).
- [4] H. Haghighi et al., *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 382.
- [5] P. E. Mijnaerends et al., *Physica, C*, **178**(1991), 113.
- [6] Y. C. Jean et al., *Phys. Rev., B*, **36**(1987), 3994.
- [7] S. G. Usmar et al., *Phys. Rev. B*, **36**(1987), 8854.
- [8] D. R. Harshman et al., *Phys Rev B*, **38**(1988), 848.
- [9] Y. C. Jean et al., *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 1593.
- [10] A. Bharathi et al., *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 10199.
- [11] C. S. Sundar et al., *Phys. Rev., B*, **41**(1990), 11685.
- [12] Y. C. Jean et al., *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 1069.
- [13] C. S. Sundar et al., *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 2193.
- [14] L. C. Smedsjkaer et al., *Physica, B+C*, **150**(1988), 56.
- [15] S. J. Wang et al., *Phys. Rev., B*, **37**(1988), 603.
- [16] J. S. Zhu et al., *J. Phys. C*, **21**(1988), L281.
- [17] 王少阶等科学通报, **35**(1990), 1298.
- [18] S. J. Wang et al., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **114**(1989), 273.
- [19] S. J. Wang et al, in "Positron and Positronium Chemistry", ed. by Y. C. Jean World Sci., Singapore, (1990), 500.

分数微积分进入半导体物理

——新型的分數微分谱

莫 党

(中山大学物理系, 广州 510275)

分数微积分是一种正在发展的数学工具, 在物理研究中还没有广泛应用, 我们在本文中首先给一通俗介绍, 然后介绍我们把分数微积分引入半导体物理, 对带间跃迁光谱进行分析的工作。着重描述所导出的带间跃迁介电函数的分数微积分表达式, 以及一种叫做分数微分谱的新型谱。这种谱可用于测定能带临界点参数和维度分析, 也可用于分数维度的场合。

Abstract

We propose the application of fractional calculus to semiconductor physics, in particular to the analysis of interband spectra. A new kind of spectroscopy—fractional derivative spectroscopy is also proposed for determining the parameters of critical points and the dimensionality, even in the case of fractional dimensions.

一、什么是 $\frac{d^{1/2}f}{dx^{1/2}}$ ——从普通微积分到分数微积分

每个上过大学的人都会学过微积分吧? 大家对于

$$\frac{df}{dx}, \frac{d^2f}{dx^2}, \frac{d^3f}{dx^3}, \dots$$

这样的一次微商、二次微商和三次微商、……, 以及

$$\int_0^x f dx_1, \int_0^x dx_2 \int_0^{x_2} f dx_1, \dots$$

这样的一次积分、二次积分、……, 恐怕是很习惯的了。但是, 有没有次数不是整数的微商或积分呢? 它们遵从什么的运算规则? 又有哪些应用呢?

回顾历史。其实,大约三百年前,德国数学家 Leibniz, 微积分的创始人, 在他的通信中曾提到过 $1/2$ 次微分, 并使用了 $d^{1/2}y$ 这样的符号。以后, 经过一些数学家的工作, 现在分数微积分已经发展成为一种较有系统并有某些实际应用(例如在分析化学、扩散理论等方面)的数学。加拿大学者 Oldham 和 Spanier 曾在 1974 年出版了一本介绍分数微积分的书^[1]。

但是, 广大物理学者和物理系大学生、研究生当中, 还很少有人听说过“分数微积分”, 更不用说拿它来加以运用了。至今已出版的中文书籍中, 也很难找到描述分数微积分的全书或章节。

何星飞是我以前的一位研究生。由于他与攻读数学的朋友的交往, 一个偶然机会使他注意到分数微积分这种数学工具, 并开始尝试把它应用到半导体的带间光谱的研究中。

分数微积分对微商与积分采用统一的符号

$$\frac{d^q f}{dx^q},$$

这里 q 不一定是整数, 可以是分数。并且, $q > 0$ 时表示微商, $q < 0$ 时表示积分。严格定义则为

$$\frac{d^q f}{dx^q} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{(x/N)^{-q}}{\Gamma(-q)} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(j-q)}{\Gamma(j+1)} \times f\left(x - j \frac{x}{N}\right) \right], \quad (1)$$

式中 $\Gamma(x)$ 为 Γ 函数。分数微积分还有关系式:

$$\frac{d^q f}{dx^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^x (x-y)^{-q-1} f(y) dy, \quad (q < 0) \quad (2)$$

(2) 式可应用于半导体中带间跃迁表达式中。

分数微积分与普通微积分相似, 遵从线性相加律等许多运算规律, 但也有一些性质与普通微积分不同的地方。这里我们不去细说。让我们看一下两个例子:

$$(1) \frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}} (x^{1/2}) = ? \quad \text{答案为 } \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

$$(2) \frac{d^{3/2} x}{dx^{3/2}} = ? \quad \text{答案为 } \frac{1}{\sqrt{\pi}} x^{-1/2}.$$

二、用分数微积分帮助半导体物理 (带间跃迁光谱表达式)

原子和分子的吸收光谱和发射光谱是一些尖锐的线系, 它们的波长值通常能很精确地确定。上世纪以及本世纪初的大量原子、分子光谱数据, 对量子论的产生和发展起过重要的作用; 对于固体, 光谱测量和分析也是一类很有用的了解其电子结构的手段。但是这里情况有些不同, 因为固体是由大量粒子组成的体系。固体由于结合能类型的不同, 可分为离子晶体、分子晶体、共价晶体、金属晶体等等。除了分子晶体外, 其他类型固体的电子结构与组成固体的组元(原子、离子或分子)的能级结构很不相同, 它们组成固体能带。所以, 固体的光谱常常在一定波长范围内较平滑地变化, 不象原子、分子光谱那样易于鉴别和分析。

光入射到半导体, 电子吸收了光子能量, 从价带跃迁到导带。这时, 可用复数介电函数谱来描述带间跃迁光谱。介电函数的虚部 $\epsilon_2(h\nu)$ 满足下式:

$$\epsilon_2(h\nu) \propto |M|^2 G(E - h\nu), \quad (3)$$

其中 M 为跃迁矩阵元, 在一较窄的波长范围内可近似看作常数。这时, 光谱频谱特性主要决定于联合态密度 (JDOS) $G(E)$:

$$G(E) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|}. \quad (4)$$

由(4)式可见, $|\nabla_k E| = 0$ 为被积函数奇点, 相应的能量点称为临界点。在临界点附近, $G(E)$ 可用二次式展开, 便于分析计算。实验上, 能测定出临界点的参数值。

针对固体带间跃迁光谱变化较平缓的特点, 近 30 年来曾发展了一类叫微分光谱(包括调制光谱)的方法。通过微分或调制, 可使谱结构突显出来。所以, 微分光谱、调制光谱已成为研究半导体的重要方法。

另一方面, 椭圆光谱(测量反射时光偏振状态的相对变化)也有重要发展。它同时测出介电函数的实部和虚部而获取较大量的信息, 有

利于分析其能带结构。

带间跃迁介电函数的一般表达式为

$$\epsilon(h\nu) = i^{r-n} \frac{C_n}{(h\nu)^2} \int_0^{E_g} \frac{(E_g - E)^{n/2-1} dE}{E - h\nu - i\Gamma}, \quad (5)$$

这里 r 为临界点类型, n 为维度, E_g 与 Γ 为临界点参数。

有了分数微积分这工具, 我们便可把上式表达成^[2-4]

$$\epsilon(h\nu) = i^{r-n} \frac{C_n \Gamma(n/2)}{(h\nu)^2} \frac{d^{-n/2}}{dE_g^{-n/2}} \times \left(\frac{1}{E - h\nu - i\Gamma} \right), \quad (6)$$

式中出现 $n/2$ 次积分。式(6)形式简明, 也便

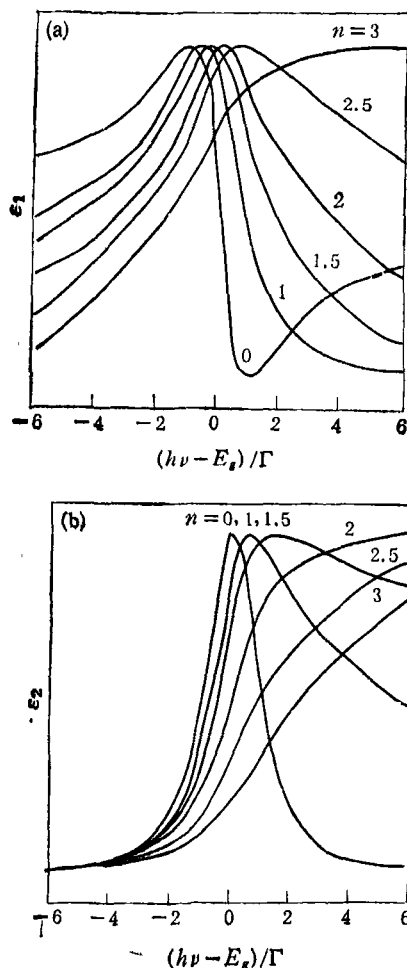


图1 不同维度固体中带间跃迁的介电函数谱
(a) 介电函数实部 ϵ_1 与光子能量 $h\nu$ 的关系;
(b) 介电函数虚部 ϵ_2 与光子能量 $h\nu$ 的关系

于计算, 并且还可以进一步推广到维度 n 不是整数的情况。

图1是根据(6)式算出的不同 n 值情况下的介电函数谱, 其中 ϵ_1 为实部, ϵ_2 为虚部。这里是利用类似(1)式的改进型 Grünwald 公式来进行数值计算的。

三、一种新型光谱——分数微分谱

传统的微分光谱是一次、二次或三次微分的。我们提出分数微分谱(fractional derivative spectroscopy, 简称 FDS)^[5], 扩大了传统微分光谱的作用和威力。例如, 对一个三维的固体, 带间跃迁 $3/2$ 次微分谱便有着很简明的形式, 即有近似式:

$$\frac{d^{3/2}\epsilon(h\nu)}{d(h\nu)^{3/2}} \propto \frac{1}{E_g - h\nu - i\Gamma}, \quad (7)$$

即相应于一种 Lorentz 谱型。这时临界点能量 E_g 相应于极值, 可方便地确定出来。传统的微分谱分析中, 由于 E_g 值一般不对应于极值或零点值, 故需用拟合法来求 E_g 等参数值。此外, 利用分数微分谱来确定固体的维度, 比传统微分谱更方便更准确, 并且原则上还可应用于维度不是整数的情况。

我们测量了 As 离子注入 Si 的椭圆光谱。注入能量为 150keV, 注入剂量由 $3 \times 10^{12}/\text{cm}^2$ 至 $1 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ 。用分数微分方法处理实验数据, 得到 $3/2$ 次微分光谱 ($3/2$ th FDS)。图2给出实部 ϵ_1 的 $3/2$ 次 FDS。分析 ϵ_1 和 ϵ_2 的分数微分谱, 可求出 E_g 值、线宽 Γ 值以及线型随注入剂量改变而变化的结果, 有助于了解离子注入引起固体无序的过程。

分数微分谱还可望应用于一些低维固体或维度转变的情况。近代凝聚态物理中, 有不少研究课题与低维度有关。分维问题在近年来颇受人注意。有一类具有标度不变性的互相似结构, 被命名为分形。分形的维度叫做分维(fractal dimension), 其值一般是非整数。

另一方面, 研究分形网络的扩散和弹性振动时, 可定出分维子维度(fracton dimension),

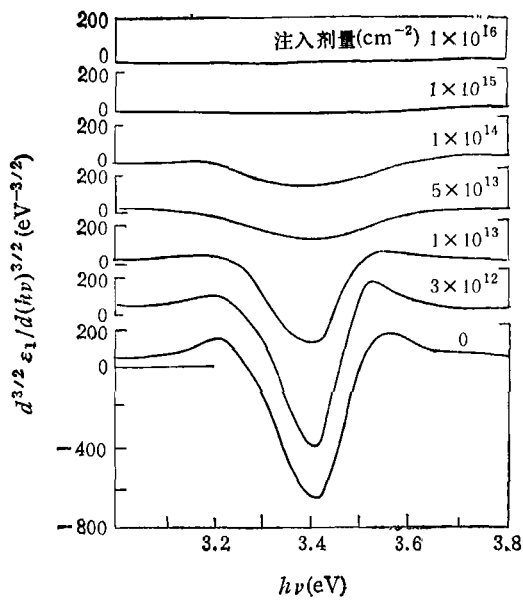


图2 砷离子注入硅的介电函数实部 ϵ_1 的 $3/2$ 次微分谱

与之相应的振动模式称为分维子。分维子维度与分维一般并不相等,但有一定关系。

半导体中许多过程与电子或空穴的能带结构和性质有关,光性与电性方面尤其是这样。对半导体的维度及维度转变的研究,至今还不

够充分。这里提出个问题:有没有与电子某些性质相关的“维度”呢?原则上说,这种维度可以不同于分维或分维子维度。何星飞提出一个抽象的“分数维度空间”^[6],用来近似描述真实空间中某些元激发的各向异性。引入一个与 Bloch 能带电子有关的“分数维度”(fractional dimension)。根据联合态密度 $G(E)$ 的公式

$$G(E) = \frac{2}{\Gamma(\alpha/2)} \left[\frac{m_{vc}}{2\pi\hbar^2} \right]^{\alpha/2} (E - E_g)^{\alpha/2-1} \quad (8)$$

定出的 α 便是分数维度的值。其范围在 $0 \leq \alpha \leq 3$ 。这个概念和相应的方法,可望用于低维系统或维度转变问题的研究。这样,光频介电函数谱(特别是分数微分谱)将提供一种新的量度和研究维度的方法。

- [1] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic, New York, (1974).
- [2] He Xingfei and Mo Dang, *Chinese Phys. Lett.*, **3**(1986), 565.
- [3] 何星飞,莫觉,物理学报, **36**(1987), 1624.
- [4] X. F. He, *Solid State Commun.*, **61**(1987), 53.
- [5] Xingfei He et al., *Phys. Rev. B*, **41**(1990), 5799.
- [6] Xingfei He, *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 11751.

量子蒙特卡罗方法及其应用¹⁾

张保安²⁾ 姚凯伦

(华中理工大学物理系,武汉 430074)

量子体系的蒙特卡罗研究近十多年来非常活跃,并取得了许多富有意义的成果。量子蒙特卡罗方法愈来愈受到人们的关注。本文结合量子蒙特卡罗方法的建立和发展介绍了它的基本思想。在对几种具体方法作介绍的同时,还分析了它们特点。文中还对超导、主要是高温超导电性研究中的一些有益的量子蒙特卡罗工作作了介绍。最后讨论了量子蒙特卡罗方法存在的主要问题,并展望了量子蒙特卡罗方法的发展前景。

随机试验方法早在 18 世纪就已被人们所认识,但用该方法时,要想获得较高精度的结果需要大量的试验。所以在计算机出现之前,要真正进行随机试验几乎不可能。

本世纪 40 年代,美国著名物理学家和数学

家 Von Neumann 及其合作者在曼哈顿工程中为了模拟中子链式反应,设计了随机试验的第一个计算机程序,并在世界第一台计算机

1) 国家自然科学基金资助的项目。

2) 现在通讯地址:河北地质学院基础部,石家庄,050031。