

凝聚态理论和材料计算研究进展

谢心澄[†] 施均仁 吴 飙

(中国科学院物理研究所 凝聚态理论和材料计算实验室 北京 100190)

摘 要 文章介绍了中国科学院物理研究所凝聚态理论与材料计算实验室的历史渊源和发展现状,重点介绍了该室研究人员自 2001 年以来在表面与半导体物理、强关联物理、自旋与轨道电子学、冷原子与玻色-爱因斯坦凝聚体、固体物理中的贝里相位效应、低维量子输运与量子信息等方面所做的研究工作。

关键词 凝聚态理论,材料计算,表面,半导体,强关联,自旋电子学,轨道电子学,玻色-爱因斯坦凝聚,贝里相位,低维量子输运,量子信息

Progress in Condensed Matter Theory and Material Computation

XIE Xin-Cheng[†] SHI Jun-Ren WU Biao

(Theory Laboratory, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract The history and development of the Division of Condensed Matter Theory and Material Computation is briefly reviewed. In particular, we summarize the research done since 2001, the year the division was established, by our members in the following research fields: surface and semiconductor physics, strongly correlated electron systems, spin and orbit electronics, cold atoms and Bose-Einstein condensation, Berry phase effects in solid state physics, low dimensional quantum transport, and quantum information.

Keywords condensed matter theory, material computation, surface, semiconductor, strong correlation, spintronics, orbitronics, Bose-Einstein condensation, Berry phase, low dimensional quantum transport, quantum information.

1 中国科学院物理研究所理论室的历史与现状

中国科学院物理研究所(以下简称物理所)的理论研究要追溯到 1958 年。当年 9 月,物理所开辟了固体理论学科方向。次年 6 月,固体理论研究室正式成立,主任是李荫远先生,成员有朱砚馨、陈式刚、霍裕平、张绮香、许政一、潘少华、刘大乾、冷中昂等。此后,陈春先、于淦、郝柏林等先后从国外留学回国,和国内的不少大学毕业生加入到了这个队伍中,使固体理论室迅速发展。到“文革”动荡之前已发展为 5 个研究组,30 多位研究人员,研究方向包括半导体、金属、磁学、超导、激光物理中的理论问题和多体理论、统计物理等。

这些前辈志同道合,组织起富有成效的互教互学活动。虽然理论室成立不久就碰上 1960—1962 年的困难时期,甚至奉命减掉了几位研究人员,但还是日渐壮大。大家劲头十足,学术氛围非常好,每周要组织三四次学术报告会,讨论的问题非常广泛,学术思想很解放。从多体形式理论(包括格林函数方法、输运过程理论等)到它们在凝聚态物理中的具体应用,涉及超导、铁磁现象和共振弛豫过程等。大家互相切磋,互相指教,这种自由讨论的学术氛围成就了固体理论室的发展。这个时期的理论室人才济济,他们当中好几位在未来的岁月中因作出突出贡献而被选为中国科学院院士。

同一时期,物理所在磁学室里还有一个专门从

2008-05-15 收到

[†] 通讯联系人, xcxie@aphy.iphys.ac.cn

事理论研究的小组. 这个磁学理论组在 1960 年由蒲富恪先生组建, 工作也很活跃, 主要从事自旋位形、稀土磁性和磁性相变等研究. 在铁磁共振中的弛豫和线宽的研究中, 这个组与磁学室的孟宪振以及理论室的霍裕平合作, 做出了优秀的成绩.

1966 年夏天“文革”动荡开始以后, 理论研究工作受到很大干扰. 1968—1969 年, 固体理论研究室和磁学室的磁学理论组都相继解体, 人员全被分散到其他实验室去了. 但即使在那个浩劫的时期, 这些人还是在各自所在的学科领域里, 在各实验室同事的理解下和局部较为宽松的“小气候”下, 尽力做了一些有意义的研究工作. 如李荫远先生在晶体实验室里领导开展了碘酸锂的研究; 蒲富恪、郝柏林、冯克安、蔡俊道等组织进行了小天线的理论研究和计算; 当时被分散到其他实验室的还有如去激光实验室的杨国桢、霍裕平和顾本源等, 都取得了很好的成绩.

1972 年以后, 社会上对基础研究又开始关心起来, 环境变得宽松了, 理论物理也不再被扣上“脱离实际”的罪名. 原有的理论研究室和磁学室理论组的部分同志走到一起, 重新成立了理论与计算机研究组. 这一时期做的主要工作有: 临界现象的重正化群理论、相变中的统计模型、磁性自旋波激发和地震活动的统计分析和预报等. 在理论研究的同时, 积极引进电子计算机, 开始建立计算物理研究. 尤其是在相变和临界现象方面的研究成果, 在“文革”后期即将改革开放的前夜, 对促进国际交流和开放发挥了很好的作用. 1975 年, 美国物理学会组织了一个高层次代表团到中国访问, 成员包括巴丁、施里弗、布鲁姆贝格等多位诺贝尔奖得主, 他们对这项工作给予了很好的评价.

到“文革”动荡结束, 尤其是 1978 年中央召开了科学大会之后, 科学研究才受到真正重视. 中国科学院在北京新建了理论物理所, 有郝柏林等去参加; 在合肥新建了等离子体物理所, 有霍裕平等去参加. 在物理所里, 虽然当时还没有把重建理论研究室提到日程上来, 但从事理论研究的热情、规模和水平都有了显著的恢复和发展. 在接下来的 80 年代改革开放前后, 许多人先后出国进修, 接触到新的研究方向; 一些人从国外归来, 加入了物理所的理论研究队伍; “文革”后新培养的年青一代补充进来, 为不断发展创造了条件.

到 1990 年代, 我国的科研管理体制和物理所的科研组织的调整大致成型, 重新组建理论研究室的

问题就提上了议事日程. 科学院启动知识创新工程, 使得在物理所里重新组建理论研究室的要求变得十分迫切了. 经过认真酝酿, 在 2001 年 7 月凝聚态理论与材料计算实验室成立, 解散了 30 多年的理论室得以重新组建. 这是一个值得记住的历史时刻. 从这一年开始, 理论室以惊人的速度不断发展, 特别是进入中科院知识创新试点工程基地以来, 本着“开放、流动、竞争、联合”的创办方针, 积极开展与国际各理论物理中心的交流, 吸引了很多优秀的理论物理人才加入到这个团体, 努力造就了超越前代的优秀青年理论物理学研究人才的队伍.

2 研究进展

凝聚态理论是物理学的一个重要的研究方向. 物理所的理论研究人员先后在多体理论、统计物理、超导理论、光学、半导体物理、表面物理、磁性理论等方面开展了卓有成效的工作, 并多次获得国家 and 科学院自然科学奖. 2001 年重建理论室以来, 理论室的研究人员在表面与半导体物理、强关联物理、自旋与轨道电子学、冷原子与玻色-爱因斯坦凝聚体 (BEC)、固体物理中的贝里相位效应、低维量子输运与量子信息等方向作了大量的研究, 并取得了丰硕的成果. 同时, 理论室的研究人员广泛开展与所内外实验小组合作, 在相关研究中发挥了重要的作用. 从 2001 年至今的 7 年时间里, 理论室的科研人员在国内外顶尖学术期刊上发表了很多高质量的文章, 其中在 Science 上发表论文 2 篇, 在 Physics Review Letters 上发表论文 37 篇. 在相关领域产生了一定的学术影响.

2.1 表面与半导体物理

表面科学研究固体表面(和界面)的各种结构和电子性质. 各类计算方法和现代计算机技术的迅猛发展, 使得通过计算和模拟可以实现从原子到宏观水平上的定量研究和预测, 与强有力实验手段相互促进, 使得在原子水平上探测表面原子结构及其实时演化成为可能. 以硅为代表的半导体是现代电子技术的基础, 半导体表面又是表面科学中最为重要、最为丰富的部分. 表面重构是半导体表面的一个普遍现象. 表面纳米结构及其电和磁性质的研究和相关调控手段的探索是实现下一代实用电子器件的基础.

2.1.1 表面相关物理研究

硅是现代计算机技术的核心. 硅半导体表面相关物理问题是理论和实验科学工作者长期以来共同关注的重要课题之一. 其中, $\text{Si}(111)\text{-}7\times 7$ 重构表面相及其相变动力学现象的研究一直是一个重要课题. 刘邦贵^[1]等在系统地分析了大量实验事实的基础上, 提出了描述其重构表面及其相变动力学的相场模型. 其模型要点是: 相变过程中 7×7 岛衰变时有两个速度不同的过程, 快过程反应 7×7 重构表面相的基本特征的变化, 慢过程描述随后的大范围原子弛豫. 他们的相场模拟结果与 LEEM 实验完全一致. 该研究合理地解释了 $\text{Si}(111)\text{-}(7\times 7)\text{-}(1\times 1)$ 相变的动力学现象, 同时为半导体重构表面相及其相变研究提供了一个普适方法. 王建涛、王鼎盛等^[2]系统研究了半导体 $\text{Si}(001)$ 表面 Bi 纳米线的结构稳定性, 以及第 V 族元素 (Bi, Sb) 在 Si 表面上形成“5-7-5 双重核心奇数环”纳米线的机理, 提出了“动力学性的表面二量子体扭曲协同纳米线自组装”新模型, 揭示了表面吸附原子 (活性剂) 和衬底之间的反应机制. 这一成果为在半导体硅表面上制备金属纳米线提供了理论支持, 对理解硅表面结构及有关物性具有广泛的科学意义^[3]. 徐力方、方忠^[4]等利用第一性原理深入研究了清洁的金刚石 (001) 表面的台阶结构, 发现在金刚石的 (001) 表面上, 其台阶结构比平整的表面更加稳定. 基于此, 他们对碳元素提出了一个用来探索其再构的计键规则 (bond-counting rule), 并且应用于金刚石 (001) 台阶面的再构, 与计算及实验观测结果完全一致. 该研究指出了金刚石表面的台阶化与硅表面台阶化的根本不同, 深入认识了金刚石表面台阶的性质, 为利用金刚石表面制作各种高可靠性器件奠定了基础.

2.1.2 磁纳米结构的磁性及其控制的研究

探索、认识和掌握磁纳米结构的本征纳米磁性及其控制方法具有重要的意义. 刘邦贵研究组系统研究了具有巨大磁各向异性的纳米磁体的铁磁性及其电流控制机理. 他们通过综合研究与分析, 发现铂表面的钴单原子自旋链具有很强的单轴磁各向异性, 会导致自旋反转过程中的过渡态势垒效应. 利用动力学蒙特卡罗 (KMC) 方法来对该系统进行模拟研究, 他们得到了与实验一致的结果, 并使用 KMC 方法研究了一类典型的、具有巨大磁各向异性的纳米磁体在注入的自旋极化电流作用下的行为和规律. 该项研究给出了巨大磁各向异性引起的纳米铁磁性机理, 找到了一类典型的具有巨大磁各向异性的纳米磁体的自旋极化电流控制机理与规律^[5].

2.2 低维强关联物理研究

随着材料科学及微加工技术的迅速发展, 低维强关联系统已经成为凝聚态物理的研究前沿. 由于维度的降低和尺寸的缩小, 量子效应和电子之间的关联作用变得非常明显和重要, 两者结合使得低维多体系统呈现出许多内涵极为丰富的新的物理特性.

2.2.1 二维量子系统中电荷的分数量子化

电荷的分量化是微观量子理论研究的一个基本问题. 在一个二维量子系统中, 电荷的分量化也是一个普遍的物理现象, 但其机理一直是一个让人困惑的问题. 向涛与合作者解决了这个问题. 他们发现, 在一个二维量子系统体内产生一个分数化的量子激发, 等价于在两个开放的二维量子系统的界面产生一个将两个边界连接在一起的纽结, 对应于这个纽结, 存在一个孤子解, 其电荷是分数量子化的. 同时, 他们还证明, 在一个 $U(1)$ 规范不变的量子系统产生一个分数电荷的激发, 等价于在一个对应的 Z_2 规范不变的量子系统产生一个非阿贝尔的任意子, 而后者正是实验上为实现高容错性的拓扑量子计算而积极寻找的基本量子运算单元. 他们的工作揭示了二维量子空间中电荷分数化的微观机理, 建立了统一描述一维与二维量子系统中电荷分数量子化的物理框架, 同时也对研究和发现非阿贝尔任意子有指导意义^[6].

2.2.2 低维量子自旋链系统、关联电子系统和统计物理中的严格可解模型

由于传统近似方法不再适用于低维强关联系统, 针对一类物理体系的严格结果无疑是非常重要的. 在多体系统的严格解方面, 向涛与合作者在求解各向异性晶体场作用下自旋为 1 的量子 Ising 模型的问题上取得了突出进展. 他们提出了一套空穴分解方案, 得到了这一模型全部本征态的严格解以及热力学量的严格结果. 他们的方法具有很强的普适性, 不仅可以研究自旋为 1 的量子 Ising 模型, 而且可以普遍地用于研究有非磁性杂质掺杂的量子磁性系统, 对进一步研究高自旋模型中的量子相变与临界行为有指导意义^[7]. 王玉鹏提出了第一个严格可解的自旋梯子模型, 并成功地解释了几个梯子材料的实验现象^[8], 构造了一类高自旋冷原子体系中的严格可解模型并研究了原子间的配对机制^[9], 率先利用严格可解模型, 研究了低维强关联电子体系中的磁杂质问题^[10, 11], 指出标量杂质势与近藤交换作用的竞争会导致“鬼自旋” (非半整数) 的形成, 最先

研究确定了杂质导致的边界临界指数,并建立了边界量子临界现象的普适类理论——“束缚拉亭格液体理论”,指出自旋不守恒系统仍具有不携带固定自旋的自旋子激发,属于一类新的元激发(凝聚态物质中的“基本粒子”)^[12]。

2.3 自旋与轨道电子学

随着微加工和大规模集成电路技术的迅猛发展,传统半导体器件的性能已接近极限。自旋与轨道电子学研究的目的在于探索以电子自旋和轨道自由度作为信息载体的可能性,以实现功耗更低、速度更快的信息处理器件。这一方面的研究受到了广泛的重视。理论室的研究人员在自旋与轨道电子学器件与材料、自旋霍尔效应、自旋与轨道电子学的理论基础方面进行了广泛而深入的研究。

2.3.1 自旋流理论研究

电子具有电荷和自旋自由度,但在传统的电路或半导体电子器件中,人们仅仅利用了电子的电荷,而它的自旋一直被忽略。近二十年来,人们在低维纳米尺度发现自旋在很多性能方面比电荷更优越,这使得人们开始研究和试图利用电子自旋和它的流来制造信息器件。孙庆丰等从理论上设计出一种自旋池装置,该装置能从外微波(THz)场中吸取能量,转变为自旋流。当这自旋池装置与外电路相接时,它将类似于电池的作用,能对外电路输出自旋流。这一工作解决了自旋流的产生问题,为实验上进一步的深入研究自旋流的各个方面性质奠定了基础^[13,14]。另外,孙庆丰、谢心澄等发现:在一个只有自旋轨道耦合的但没有磁通以及其他任何磁性材料的介观量子小环中,存在纯的持续自旋流^[15]。在自旋流基础理论方面,施均仁等深入研究了自旋流的概念,他们发现,先前普遍采用的自旋流定义是不完整与不可测量的,恰当定义的自旋流算符应该是自旋位移算符(即自旋与位置算符的乘积)对时间的全导数,只有这样定义的自旋流才能满足非平衡态热力学的基本要求,从而可以在实验中直接进行测量。作为一个真正描述自旋运输的概念,这样定义的自旋流应具有有的性质,即在绝缘体中严格为零^[16]。

2.3.2 自旋霍尔效应研究

自旋霍尔效应是一种新型的霍尔效应:由于相对论效应自旋轨道耦合作用的存在,一个纵向加载的电场除了产生纵向电流以外,还会在垂直于电场的方向上产生自旋流。方忠和姚裕贵在自旋霍尔效应上开展了深入而广泛的探索,并取得了一些创新

成果。他们利用第一性原理方法,计算了半导体和简单金属的自旋霍尔电导率,发现内禀自旋霍尔电导率具有丰富的符号变化,这一点和外在于自旋霍尔效应有着本质上的不同,这个属性有可能被用于分辨自旋霍尔效应的内禀和外在于机制。他们还首次预言了简单金属钨和金具有较大的自旋霍尔效应且符号相反,同时发现强散射并不会抑制这两种金属中的自旋霍尔效应,也就是说,在强散射情形下,自旋霍尔电导率仍然具有较大的值,这使得它们有可能是一种潜在的可应用于自旋电子学器件中的材料^[17]。此外,姚裕贵等利用 LMTO 方法深入地研究了许多半导体材料中的自旋霍尔效应和轨道霍尔效应,发现由于材料中轨道淬灭效应两者并不能相互抵消,解决了以前理论中的分歧。同时他们还发现利用应变可以操控自旋霍尔效应的强度,并预言了在半导体中存在交流的自旋霍尔效应^[18]。戴希、方忠与姚裕贵等利用 $k \cdot p$ 方法,计算了空穴型掺杂的半导体量子阱的自旋霍尔系数。他们发现当掺杂浓度和自旋轨道耦合常数满足某种特定的关系时,体系的自旋霍尔系数会突然改变符号。这种随着空穴浓度或者自旋轨道耦合系数的改变而突然变号的性质,是内禀自旋霍尔效应所特有的奇异性质。利用这一有趣的特性,可以验证实验上观测到的自旋霍尔效应是否是内禀的特性,同时还可以利用这一特性设计出新的自旋电子学器件^[19]。

2.3.3 自旋与轨道电子学的材料计算

方忠与合作者通过 LDA + U 的方法对 Ca_2RuO_4 中的轨道有序态进行了系统的研究。作为一种过渡金属氧化物, Ca_2RuO_4 的基本物理特征就是其中的电荷、自旋、格子、轨道自由度的强耦合。由此导致的各种轨道有序态对系统的电、磁、光学性质具有重要的影响。研究发现, Ca_2RuO_4 在其反铁磁态,电子将主要占据 Ru-4d_{xy} 轨道,因此具有很强的各向异性。理论计算的结果可以很好地解释实验中测量到的各向异性光电导率,并且可以自洽地解释其他一些相关的实验结果^[20]。另一方面,与重要半导体相容的高自旋极化率磁性材料被认为是未来纳米尺度上的自旋电子器件的理想组件,探索合适的半金属(half-metal)铁磁材料至关重要。刘邦贵等用准确的第一原理密度泛函理论方法首先证明:闪锌矿结构的 CrSb^[21]以及 MnBi^[22]具有良好的半金属铁磁性。同时他们还研究了相应半金属铁磁性的形成机理。在此基础上,他们基于准确系统的电子结构和形变结构计算,进一步证明:3个过渡金属硫系化合物

CrTe, CrSe 和 VTe 的闪锌矿结构相是优质半金属铁磁体,不仅具有很宽的半金属能隙,而且其结构稳定性明显优于已合成的 CrAs 闪锌矿结构薄膜^[23, 24]. 在计算的理论基础方面,施均仁等提出了计算晶体材料轨道磁化强度的普适量子公式.一方面,他们在理论上严格证明了该公式对金属、绝缘体以及具有非零陈示性数的反常霍尔绝缘体等系统都普遍有效;另一方面,他们将该轨道磁矩公式进一步推广到具有电子-电子相互作用的一般系统,指出利用推广的密度泛函理论,即流与自旋密度泛函理论(CS-DFT),可以精确地计算实际材料的轨道磁化强度.该工作确立了轨道磁化第一性原理计算的严格理论基础,并为系统提高其计算精度指明了方法与途径^[25].

2.4 冷原子与玻色-爱因斯坦凝聚

以玻色-爱因斯坦凝聚为代表的超冷原子物理是近几年来蓬勃兴起的一个新兴科学领域,其所展现出的独特的量子力学波动性、宏观量子相干性以及人工可调控性,使得它毫无疑问地成为物理学中前所未有的全新量子态物质.理论室的研究人员在玻色-爱因斯坦凝聚体的干涉、光晶格中玻色-爱因斯坦凝聚体的量子隧穿、Feshbach 共振作用下原子相互作用参数随时间变化的玻色-爱因斯坦凝聚体中的孤子、非线性 Landau-Zener 隧穿、光晶格中 BEC 里的动力学不稳定性等方面开展了卓有成效的工作.

2.4.1 原子和玻色-爱因斯坦凝聚体与外场的相互作用

刘伍明等研究了一个排斥势中随时间变化的原子间相互作用的玻色-爱因斯坦凝聚的亮孤子的动力学,给出了一个一维非线性薛定谔方程的严格解.他们发现,在亮孤子中的原子数可以保持一个动力学平衡,在亮孤子和背景间存在一个时间周期的原子的交换,在一定的参数范围内,亮孤子可以通过增加原子的散射长度被挤压成非常高的局域物质密度.这提供了一个实验的工具来确认一维 Gross-Pitaevskii 方程的适合应用的范围,并可以实现对玻色-爱因斯坦凝聚态的挤压与控制^[26].刘伍明、纪安春和谢心澄设计了一个光学微腔阵列,每个微腔包含一个 V-型三能级原子.由于光子之间的强相互作用,横向极化的光子之间会形成混合.通过调节偶极跃迁矩阵元以及不同光学微腔之间的跃迁几率,这个体系可以有效地实现量子铁磁相和反铁磁相,

同时他们进一步预言存在一种新颖的超逆流凝聚相.超逆流凝聚相可以用来设计新型的光学开关.他们还详细地研究了如何在实验上观测超逆流凝聚相.这项新的研究工作对进一步认识光与物质相互作用具有非常重要的意义^[27].

2.4.2 宏观量子凝聚体的基础理论研究

在一个依赖于某些外界参量的量子系统中,有两种极限:一种是准经典极限 $\hbar \rightarrow 0$,在这个极限下,量子系统表现得越来越像经典系统;另一种极限是绝热极限,也就是外界参量随时间的变化率 $\rightarrow 0$.吴飙等在一个有相互作用的两模玻色子体系中重新研究了这两种极限的可对易性.他们的研究发现,这两种极限在相互作用足够强时是不可对易的.也就是说,先取准经典极限,后取绝热极限,系统会表现出一种行为;但如果先取绝热极限,后取准经典极限,系统会表现出另一种行为.这个结果有两个重要的意义:(1)用平均场理论在绝热极限下得到的结果可能和系统的真实量子行为相差很远,甚至完全不对;(2)由于 N 是实验上可调节的量,他们的结果是可以被实验验证的,比如用 Bose-Einstein 凝聚物^[28].

2.5 凝聚态物理中的贝里相位效应

在 1984 年, M. V. Berry 研究了量子系统的绝热演化.他发现,量子本征态在绝热变化中,除了众所周知的动力学相位外,还会得到一个几何相位,这个几何相位被称为贝里相位,它已成为量子力学中的一个基本概念,并在物理学的各个领域得到了广泛的应用.

2.5.1 反常霍尔效应研究

铁磁材料的霍尔(Hall)效应存在正比于磁化的反常部分.理论研究表明,内禀反常霍尔电导率能够表达成倒空间中电子占据态的波函数 Berry 曲率的求和.方忠等^[29]详细分析了动量空间中的贝里曲率的奇点问题,首次提出其实质上相应于倒空间的一种磁单极存在形式.这种磁单极并非存在于实空间中,而是存在于晶体的动量空间中.并且,这种磁单极具有很低的能量,在实验中很容易观测到.最直接的方法是测量磁性晶体中的反常 Hall 效应.由于磁单极的存在,电子的 Hall 输运行为受到很大的影响,导致其反常 Hall 系数与晶体的磁化强度成非线性关系,而并非以前预测的线性关系.基于以上理论,方忠通过从头计算的方法,直接计算了 SrRuO₃ 中的反常 Hall 系数,和实验结果比较,得到了非常

一致的结果,从而证明了磁单极存在于晶体的动量空间中^[29]。姚裕贵、王鼎盛、王恩哥等对反常霍尔效应的内禀机制进行了深入的研究,利用第一性原理 LAPW 方法精确地计算了经典铁磁体 Fe 等的 Berry 曲率,并得到了反常霍尔电导率。通过理论值和实验结果的相互比较,他们认为,室温下经典铁磁体材料 Fe 等的反常霍尔效应主要是由内禀机制即 Berry 相位引起的,而不是外在散射机制引起的^[30]。此外,姚裕贵、方忠等还发展了一套贝里相位效应理论,解释铁磁材料中由统计力(如温度和化学势的梯度)驱动的反常热电输运现象,并发展了一套可计算反常热电输运系数的第一性原理程序,成功地用于解释实验^[31]。

2.5.2 贝里相位的基础理论研究

随着实验技术的发展,物理学家开始具备对原子尺度上的量子体系进行操控的能力。这些量子操控实验中的探测手段都是经典系统,因而涉及的体系是一个量子经典混合体。吴飙等提出了一个描述和解决这类量子经典混合系统的一般理论方法。他们发现,量子子系统会对经典子系统有一个类似洛伦兹力的反作用。当量子子系统被处理成经典系统时,几何力会消失。在纯粹的理论意义上,吴飙、张起提出的正则变换可以被用来统一描述迄今已知的三种绝热几何相位:Berry 相, Hannay 角,以及吴飙等最近提出的非线性几何相^[32]。另外,吴飙等提出新的混合态几何相位,它有以下特点:首先,这个新的几何相位是对一般量子态直接定义的,这不同于 Berry 相位只对量子本征态有定义,当应用于本征态时,这个新相位会回到 Berry 相位;其次,这个新的几何相位适用于以玻色-爱因斯坦凝聚物为代表的非线性量子系统,是描述非线性量子系统中绝热演化不可缺少的物理量。他们的研究在概念上深化了对几何相位的理解^[33]。

2.6 低维量子输运

随着微加工技术和大规模集成电路的迅速发展,计算机的运算速度也飞速提高。目前,主流芯片内的电子器件尺度已到几十纳米,已经到了经典电子器件工作原理的极限。如果想要进一步的发展,体系的量子行为将显著表现出来,使得人们不得不按照量子力学的规律来重新设计新一代的电子器件。这需要对低维(纳尺度)量子体系的输运性质开展全面的研究。约在二十多年前,人们已开始了对这一领域的研究,而且这一领域一直是前沿热点。

2.6.1 量子点输运研究

电子隧穿通过有库仑作用的量子点是否还保持相干性一直是富有意义和争论性的研究课题。人们通过把量子点嵌入到 AB 介观环的一臂中,在实验上观测到 AB 振荡,从而证实电子至少还是部分相干的。孙庆丰、谢心澄和王玉鹏等对这一问题做了深入的研究。他们利用一个开放的多端 AB 环体系来研究这一问题,证实量子点内的电子-电子库仑作用不会对输运经过量子点的电子引起任何退相干^[34]。另外,在高温或弱耦合时,量子点的输运通常可由单粒子共振隧穿理论来描述,但在低温强耦合条件下,描述高阶隧穿过程的近藤共振效应将变得很重要,并对自旋输运有显著的影响。然而人们对这一过程的理解非常有限。王玉鹏、谢心澄等在这一研究方向上取得重要进展,他们从理论上研究了相互作用量子点在外部分旋转磁场下的非平衡自旋输运性质,并证明量子点中的相干自旋振荡可以导致自旋电流的产生。计入库仑关联相互作用后,近藤共振效应受外部进动磁场的影响很大。当磁场的进动频率与塞曼分裂能级满足共振条件时,每个自旋近藤峰就会劈裂为两个自旋共振峰的叠加。在低温强耦合区,这种近藤型共隧穿过程对自旋电流产生重要贡献。这为实验上实现自旋极化电流提供了一个重要途径^[35]。

2.6.2 二维电子气输运理论研究

二维电子气是凝聚态物理的重要研究系统,实验发现,二维电子气在极低载流子浓度下存在金属-绝缘体相变,同时在相变点附近还发现了一系列难以解释的奇异现象,例如很强的磁阻效应及电子气的压缩率反常。施均仁和谢心澄在这个领域进行了深入研究,提出所观测到的金属-绝缘体相变在本质上属于准经典的渗流(percolation)相变。他们利用密度泛函理论计算了临界点附近的电子密度分布,发现系统在电子-电子相互作用与无序的共同作用之下,形成空间上非均匀的电子密度分布。在此基础上还计算了电子气的压缩率,发现其随电子浓度有非单调的变化关系,并在电子液滴的渗流临界密度附近达到极值。这一理论结果与实验上观测到的临界点附近的压缩率反常现象相吻合^[36]。此外,他们还研究了高迁移率半导体二维电子气在微波辐射下感生“零电阻态”的效应,提出:在二维电子气中观察到的辐射感生“零电阻态”是系统态密度的振荡结构和光子辅助输运的共同结果。同时他们还给出了一个推广的 Kubo-Greenwood 电导公式,来

描述任意系统的光子辅助输运,指出了反常输运在不同系统之间的本质统一性^[37].

2.7 量子信息与计算

量子信息与计算是过去十几年发展最迅速的研究领域之一,已经取得了许多重要进展,同时提出了一系列深刻的理论问题.范桁和周端陆在研究各种形式的量子克隆机、VBS 态的量子纠缠性、局域么正变换不变的多体量子关联度、量子态不可分定理等方面开展了大量工作.

2.7.1 量子纠缠

量子纠缠在量子计算和量子信息处理中起着关键性的作用,例如在量子态隐性传输和量子密码中,量子纠缠态不可或缺.量子计算机超越经典计算机之处正在于量子纠缠态的存在.另一方面,随着大家对量子纠缠概念的深入了解,又反过来把它作为描述量子系统状态的基本量之一.为准确描述量子系统提供了一种全新的视角.实际上,可以用量子纠缠的概念重新对一些物理系统进行更深入的研究.范桁等研究了量子纠缠在 VBS 态中的体行为和边界行为,发现量子纠缠的变化和系统的关联函数存在紧密的联系,从而提出量子纠缠也可以作为量子相变中的序参量^[38].

2.7.2 量子态多体关联的度量

在量子信息和计算中,量子态是一种基本的信息载体,如何对量子态中的多体关联进行分类和刻画,是一个对量子信息本身和对量子多体物理都具有基本意义的问题.周端陆等在此方向开展了一系列探索性的工作.首先他们给出了多体关联的概念,并将统计学中的 Cumulant 参量引入到多体关联的度量当中,证明了基于它可以定义一个合法的多体关联的度量^[39],他们指出了多体量子关联的度量与有阈值的秘密共享方案之间的联系,给出了集团态有阈值的秘密共享方案容量的解析表达式^[40],针对 Wootters 等人提出的多体量子关联度的概念,他们首次计算了特殊非同多体量子态的非平庸的多体关联,并从新的角度证明了集团态多体关联的解析表达式^[41];另外他们还将此方法推广到全同粒子系统,首次对全同多粒子系统任意量子态定义了关联度的概念,澄清了以前关于全同粒子关联的一些含糊的观念^[42].

3 总结与展望

自 2001 年以来,凝聚态理论与材料计算实验室

的研究人员在凝聚态理论的一些重要方向上开展了深入的研究,取得了一系列成果,并在一些国际前沿领域产生一定的影响.在这些工作中,有的发展新的理论原理、概念、模型与方法,有的解决凝聚态理论中长期悬而未决的理论难题,也有的预言新的实验效应,解释实验现象.在研究方法上,既有传统的解析方法,也有利用第一性原理计算方法针对实际材料的研究.无论在研究的问题和研究的方法上都呈现出多元化的特征.相信随着理论室的进一步发展,理论室的研究将会覆盖凝聚态物理更加广阔的领域,在研究的方法和手段上也将获得进一步的提升.

致谢 本文的历史介绍部分根据李荫远、于泳和王鼎盛先生的回忆整理而成,他们阅读并完善了原稿,邓莹对文章进行了整理,在此向他们致谢,同时感谢中国科学院知识创新工程、国家自然科学基金和国家重点基础研究发展计划的资助.

参 考 文 献

- [1] Xu Y C, Liu B G. Phys. Rev. Lett., 2008, 100 : 056103
- [2] Wang J T, Mizuseki H, Kawazoe Y *et al.* Phys. Rev. B, 2003, 67 : 193307
- [3] Wang J T, Wang E G, Wang D S *et al.* Phys. Rev. Lett., 2005, 94 : 226103
- [4] Yang H X, Xu L F, Fang Z *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100 : 026101
- [5] Li Y, Liu B G. Phys. Rev. B, 2006, 73 : 174418; Phys. Rev. Lett., 2006, 96 : 217201
- [6] Lee D H, Zhang G M, Xiang T. Phys. Rev. Lett., 2007, 99 : 196805
- [7] Yang Z H, Yang L P, Dai J H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100 : 067203
- [8] Wang Y P. Phys. Rev. B, 1999, 60 : 9236
- [9] Cao J P, Jiang Y Z, Wang Y P. Europhys. Lett., 2007, 79 : 30005
- [10] Wang Y P, Dai J H, Hu Z N. Phys. Rev. Lett., 1997, 79 : 1901
- [11] Wang Y P, Voit Johannes. Phys. Rev. Lett., 1996, 77 : 4934
- [12] Cao J P, Lin H Q, Shi K J *et al.* Nucl. Phys. B, 2003, 663 : 487
- [13] Sun Q F, Guo H, Wang J. Phys. Rev. Lett., 2003, 90 : 258301
- [14] Long W, Sun Q F, Guo *et al.* Appl. Phys. Lett., 2003, 83 : 1397
- [15] Sun Q F, Xie X C, Wang J. Phys. Rev. Lett., 2007, 98 : 196801
- [16] Shi J R, Zhang P, Xiao D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2006, 96 : 076604

[17] Yao Y , Fang Z. Phys. Rev. Lett. , 2005 , 95 :156601
 [18] Guo G Y , Yao Y G , Niu Q. Phys. Rev. Lett. , 2005 , 94 : 226601
 [19] Dai X , Fang Z , Yao Y G *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2006 , 96 : 086802
 [20] Jung J H , Fang Z , He J P *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2003 , 91 : 56403
 [21] Liu B G. Phys. Rev. B , 2003 , 67 :172411
 [22] Xu Y Q , Liu B G , Pettifor D G. Phys. Rev. B , 2002 , 66 : 184435
 [23] Xie W H , Xu Y Q , Liu B G. Phys. Rev. Lett. , 2003 , 91 : 037204
 [24] Liu B G. Lecture Notes in Physics. Vol. 676 , Chapter 9. Springer Press , 2005. 276
 [25] Shi J R , Vignale G , Xiao *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2007 , 99 : 197202
 [26] Liang Z X , Zhang Z D , Liu W M. Phys. Rev. Lett. , 2005 , 94 :050402
 [27] Ji A C , Xie X C , Liu W M. Phys. Rev. Lett. , 2007 , 99 : 183602
 [28] Wu B , Liu J. Phys. Rev. Lett. , 2006 , 96 :020405
 [29] Fang Z , Nagaosa N , Takahashi K S *et al.* Science , 2003 , 302 : 92
 [30] Yao Y G , Kleinman L , MacDonald A H *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2004 , 92 :037204
 [31] Xiao D , Yao Y G , Fang Z *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2006 , 97 :026603
 [32] Zhang Q , Wu B. Phys. Rev. Lett. , 2006 , 97 :190401
 [33] Wu B , Liu J , Niu Q. Phys. Rev. Lett. , 2005 , 94 :140402
 [34] Jiang Z T , Sun Q F , Xie X C *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2004 , 93 :076802
 [35] Zhang P , Xue Q K , Wang Y P *et al.* Phys. Rev. Lett. , 2002 , 89 :286803 ; Zhang P , Xue Q K , Xie X C. Phys. Rev. Lett. , 2003 , 91 :196602
 [36] Shi J R , Xie X C. Phys. Rev. Lett. , 2002 , 88 :086401
 [37] Shi J R , Xie X C. Phys. Rev. Lett. , 2003 , 91 :086801
 [38] Fan H , Korepin V , Roychowdhury V *et al.* Phys. Rev. B , 2007 , 76 :014428
 [39] Zhou D L , Zeng B , Xu Z *et al.* Phys. Rev. A , 2006 , 74 : 052110
 [40] Zhou D L , You L. arXiv : quant - ph/0701029
 [41] Zhou D L. arXiv :0803.2747
 [42] Zhou D L. arXiv :0805.3867



· 书评和书讯 ·

探索高等科教书店物理类书目推荐(14)

作者	书名	定价	作者	书名	定价
J. A. Peacock	宇宙物理学(影印)	196.0	Peter Y. Yu	半导体材料物理基础	46.5
冯康·秦孟兆	哈密尔顿系统的辛几何算法	68.0	[比]C. Claeys	先进半导体材料及器件的辐射效应·刘忠立	55.0
杨帮文	新型光电器件与光电辅料应用手册	30.0	张树霖	拉曼光谱学与低维纳米半导体	78.0
肖志国	半导体照明发光材料及应用	32.0	夏建白	半导体超晶格物理	42.0
张伟刚	光纤光学原理及应用	38.0	Schroeder	热物理学导论(影印)	59.0
彭翔	光学信息安全导论	45.0	J. E. Marsden	力学和对称性导论 第2版(影印)	69.0
陈弘达	微电子与光电子集成技术	48.0	王怀玉	凝聚态物理的格林函数理论	78.0
侯朝霞	透明玻璃陶瓷材料组成·结构及光学性能	32.0	徐江荣	两相湍流流动 PDF 理论与数值模拟	40.0
季家谔	高等光学教程 - 非线性光学与导波光	58.0	薛明德	力学与工程技术的进步	16.6
李福利	高等激光物理学 第2版	53.0	李书民	经典力学概论	28.0
葛瑞·马沃可	岩石物理手册·徐海滨译	38.0	文尚胜	固体物理简明教程	20.0
周祖	大陆边缘构造与地球动力学	48.0	Yong Zhou	时滞差分方程的振动性 英文版	60.0
近角聪信	铁磁性物理·葛世慧译	52.5	黄献民	狭义相对论与时空图	26.0
蒋国强	氦和氙的工程技术	78.0	John M. Lee	光滑流形导论	75.0
底清云	可控源音频大地电磁数据正反演及方法应用	65.0	刘文琰	结构可靠性设计手册	#####
金先龙	结构动力学并行计算方法及应用	56.0	张隽	数学物理方程与 Mathematica 软件应用	20.0
刘林华	辐射传递方程数值模拟的有限元和谱元法	55.0	Shiinshen Chern	复流行 第2版(影印)	25.0
周云	摩擦耗能减震结构设计	48.0	Reinhard Diestel	图论 第3版(影印)	49.0
周云	粘弹性阻尼减震结构设计	43.0	乔治·伽莫夫	物理世界奇遇记·吴伯泽	28.0
理查德·哈蒙德	有趣的力学·感受到的力	29.9	上海应用物理中心	高温超导体的光电子谱研究	48.0

我店以经营科技专著为特色, 以为科技工作者和大专院校师生提供优质服务为宗旨, 欢迎广大读者来店指导或来电查询。

电话 010 - 82872662、62556876、89162848

网址 <http://www.explorerbook.com>

电子邮箱 explorerbook@vip.163.com

通讯地址 北京市海淀区海淀大街31号313北京探索高等科教书店

邮政编码 100080

联系人 徐亮、秦运良