

文章编号: 0529-6579 (2000) S2-0034-04

一维二聚化环的 Aharonov-Bohm 效应*

方奕忠

(中山大学物理学系, 广州 510275)

摘 要: 讨论 Aharonov-Bohm (AB) 对一维二聚化环的影响, 结果显示当 AB 势存在时, 一维二聚化环的 SSH 哈密顿量需要修改, 环上的持续电流和总能量受 AB 磁通影响.

关键词: AB 势; 二聚化; SSH 哈密顿量

中图分类号: O413.1 **文献标识码:** A

我们知道, Aharonov-Bohm 效应表明, 电磁场 (E, B) 在描述荷电粒子在外场中的量子行为是不充分的, 而电磁势 (A_0, A) 却能给出一个完整的描述, 虽然它们能够通过规范变换任意改变. 当比起几何效应动力学效应可忽略的时候, AB 效应这一项常常要考虑. AB 效应的研究前人已经有很多重要的结果^[1,2], 而二聚化链很久以前已经开始研究^[3,4]. 在本文我们讨论了 AB 势对一维二聚化链的影响, 结果显示当 AB 磁通存在的时候, SSH 哈密顿量必须修改, 而环的总能量和持续电流都受到 AB 磁通的影响.

模型和基本方程: 考虑一维二聚化环, 其中 AB 势矢 $A = \eta\phi_0/Nde_\theta$ ($\eta = \phi/\phi_0$) 位于环的中心, $\phi_0 = ch/e$ 为单电子的磁通量子单位, e_θ 为极角的单位向量, 使用 x 表示电子的位置, 单电子哈密顿量为

$$h_e = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 + \sum_{n=0}^N v(x - R_n) \quad (1)$$

这里 R_n 代表第 n 个格点的离子坐标.

在紧束缚近似 (TBA) 下, 第 l 个格点的 Wannier 函数为 $\varphi(x - R_l)$, 满足

$$\left(\frac{p^2}{2m} + v(x - R_l) \right) \varphi_l(x - R_l) = \epsilon \varphi_l(x - R_l) \quad (2)$$

当 $A \neq 0$ 时, 在紧束缚近似下, 我们可以用原子的轨道函数代替 Wannier 函数, 这里

$$\psi(x) = \sum_l a_l \varphi_l(x - R_l) \quad (3)$$

为哈密顿量 h_e 对应于本征值 E 的本征函数, 则

$$\psi' = \exp \left[i \frac{\eta}{Nd} 2\pi(x - R_l) \right] \psi \quad (4)$$

应满足方程

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (19905016)

收稿日期: 2000-04-18; 作者简介: 方奕忠 (1969~), 男, 讲师.

$$h'_e \psi' = E(k) \psi' \quad (5)$$

这里

$$h'_e = \frac{p^2}{2m} + \sum_{i=1}^N v(x - R_n) \quad (6)$$

边界条件为

$$\psi(x + Nd) = \psi(x)$$

在二次量子化表象里面, 电子哈密顿量为

$$H_e = \int \psi'^{\dagger} h'_e \psi' dx \quad (7)$$

与文献[4]不同, 该哈密顿量可化为

$$H_e = - \sum_i t(R_{i+1} - R_i) (a_{i+1}^{\dagger} a_i e^{i\delta_i} + a_i^{\dagger} a_{i+1} e^{-i\delta_i}) - \\ iMv_f \sum_i (a_{i+1} a_i e^{i\delta_i} - a_i^{\dagger} a_{i+1} e^{-i\delta_i} + \frac{1}{2} m v_f^2 \sum_i a_i^{\dagger} a_i) \quad (8)$$

明显地第一项为通常的紧束缚近似下的结果, 或者说的 SSH 哈密顿量^[3,4]. 这里

$$\delta_i = \delta + (-1)^i \delta_0, \delta = \frac{2\pi\eta}{N}, \delta_0 = \frac{2\pi\eta}{N} \frac{2u}{d}, v_f = \frac{2\pi\eta\hbar}{mNd}^{[5]}$$

Nd 为环的周长, N 为格点总数, d 为没有发生二聚化情况下的链的晶格常数, $t(R_{i+1} - R_i)$ 为跳跃积分, 并且有

$$t(R_{i+1} - R_i) \approx t_0 - \alpha(u_{n-1} - u_n)$$

t_0 表示离子在平衡位置时的跳跃积分, 或者说为非二聚化链, α 为电子—声子耦合常数. 在玻恩—奥本海默近似下, 二聚化链的组态坐标可写为 $u_n = (-1)^{n+1}u$. 则有

$$t(R_{i+1} - R_i) \approx t_0 - 2(-1)^n \alpha u$$

方程(8)中的第二项为

$$iM = \int \varphi_{i+1}^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_i dx$$

这里假定对所有 l 上式都成立. 我们可以看到(8)式中的三项求和都与 AB 磁通有关. 式(8)中的自旋指标已经全部求和. 类似文献[3,4], 令 a_n 分隔成指标分别为奇数的(a_{n_0})和偶数的(a_{n_1}), 引入傅里叶级数

$$a_{n_0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-\frac{2\pi}{4d} \leq k \leq \frac{2\pi}{4d}} (c_k^v - c_k^c) e^{-ikn_0 d} \\ a_{n_1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{-\frac{2\pi}{4d} \leq k \leq \frac{2\pi}{4d}} (c_k^v + c_k^c) e^{-ikn_1 d}$$

这里的上标 v 和 c 分别表示价带和导带. 哈密顿量(8)可以用 k 空间来表示

$$H_e = \sum_k E_0(k) (c_k^{v\dagger} c_k^v - c_k^{c\dagger} c_k^c) + \\ 2v_f M \sum_k [\sin(kd + \delta) (c_k^{v\dagger} c_k^v - c_k^{c\dagger} c_k^c) \cos\delta_0 + i(c_k^{v\dagger} c_k^v - c_k^{c\dagger} c_k^c) \sin(kd + \delta) \sin\delta_0] + \\ \frac{1}{2} m v_f^2 \sum_k (c_k^{v\dagger} c_k^v - c_k^{c\dagger} c_k^c) \quad (10)$$

这里

$$E_0(k) = -2t_0 \cos(kd + \delta) \cos\delta_0 - 4\alpha u \sin(kd + \delta) \sin\delta_0$$

$$\Delta(k) = 4au \sin(kd + \delta) \cos \delta_0 - 2t_0 \cos(kd + \delta) \sin \delta_0 \quad (11)$$

为了把哈密顿量对角化,引入下面的玻戈留波夫变换^[3,4]

$$a_k^v = \alpha_k c_k^v + \beta_k c_k^c, \quad a_k^c = \alpha_k^* c_k^c - \beta_k^* c_k^v \quad (12)$$

要求 $|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2 = 1$.

则(10)式的对角化形式为:

$$H_0 = - \sum_k E(k) (a_k^{v\dagger} a_k^v - a_k^{c\dagger} a_k^c) + \frac{1}{2} m v_f^2 \sum_k (a_k^{v\dagger} a_k^v - a_k^{c\dagger} a_k^c) \quad (13)$$

这里

$$\begin{aligned} E(k) &= \sqrt{E_0'^2(k) + \Delta'^2(k)} \\ E_0'(k) &= E_0(k) + 2Mv_f \sin(kd + \delta) \cos \delta_0 \\ \Delta'(k) &= \Delta(k) + 2Mv_f \sin(kd + \delta) \sin \delta_0 \end{aligned}$$

式(12)中的一个可能的变换系数为

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_0'(k)}{E(k)} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ \beta_k &= -i \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{E_0'(k)}{E(k)} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \operatorname{sgn} \Delta'(k) \end{aligned} \quad (14)$$

在绝对零度下,价带占满,导带空着,可以求出这时的总能量为

$$\begin{aligned} U &= U' + \frac{1}{2} N m v_f^2 \\ U' &= -2 \sum_{k=-\frac{2\pi}{4d}}^{\frac{2\pi}{4d}} \sqrt{E_0'^2(k) + \Delta'^2(k)} \end{aligned} \quad (15)$$

用积分代替求和^[5],有

$$\begin{aligned} U' &= -\frac{2Nt_0}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}-\delta}^{\frac{\pi}{2}-\delta} \sqrt{(\cos x - \lambda \sin x)^2 + \rho^2 \sin^2 x} dx = \\ &= -\frac{2Nt_0}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{(\cos x - \lambda \sin x)^2 + \rho^2 \sin^2 x} dx \approx \\ &= -\frac{4Nt_0}{\pi} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\ln \frac{4}{\rho} - \frac{1}{2} \right) \rho^2 - \frac{\lambda^2}{\rho'^2} \left(\ln \frac{4}{\rho} - \frac{2}{\rho'^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (16)$$

这里 $\rho' = \sqrt{1 - \rho^2}$, $\rho = 2au/t_0$, $\lambda = v_f M/t_0$, 这里还假设 $\lambda \leq \rho \leq 1$ ^[6,7].

因为磁通 ϕ (不一定要求为 ϕ_0 的整数倍), 实际上不影响能量本征值 $E(k)$. 这是文[5]的结果的一个延伸.

如果考虑宏观动量迁移, 或者说是电子在 k 空间上的位移, 我们必须发现单电子哈密顿量 H' 的对应的电子波函数. 导致价带能量 $E_v = -2E(k)$ 的如此的一个波函数应为

$$\psi' = \frac{\exp(i(mv_f/\hbar)x)}{\sqrt{N}} \left(\alpha_k \sum_{n=1}^N e^{iknd} e^{-iR_n \frac{2\pi\eta}{Nd}} \phi_n + \beta_k \sum_{n=1}^N e^{iknd} (-1)^n e^{-iR_n \frac{2\pi\eta}{Nd}} \phi_n \right) \quad (17)$$

利用上面的波函数, 可计算出动量的平均值

$$\langle p_x \rangle = m v_f + \frac{2ME_0'(k)}{E(k)} \cos(kd - \delta) \sin \delta_0 - \frac{2\Delta'(k)}{E(k)} \sin(kd - \delta) \sin \delta_0 \quad (18)$$

可以看到,这时的持续电流密度与近自由电子模型的电流密度 $j = nev_f$ 不同,它依赖于 AB 磁通 ϕ .

参考文献:

- [1] MATHUR H, STONE A D. *Phys Rev Lett*, 1992 (68): 2964.
- [2] NATHANSON B, ENTIN-WOHLMAN O. *Phys Rev B*, 1992 (45): 3499.
- [3] SU W P, SCHRIEFFER J R, HEEGER A J. *Phys Rev Lett*, 1979 (42): 1698.
- [4] SU W P, SCHRIEDDER J R, HEEFER A J. *Phys Rev B*, 1980 (22): 2099.
- [5] LIANG J Q, PENG F, DING X X. Persisten curreng induced by magnetic flux in a polyacetylene ring and Fröhlich superconductivity superconductivity. *Phys Lett A* 201 (1995): 369 ~ 374.
- [6] BARDEEN J. *Solid State Commun*, 1973 (13): 357.
- [7] ALLENDER D BRAY J W, BARDEEN J W. *Phys Rev B*, 1974 (9): 119.

Effect of the Aharonov-Bohm Potential in a Polyacetylene Ring

FANG Yi-zhong *

Abstract: The effect of Aharonov-Bohm (AB) potential in a peierls-dimerized chain, name-ly a polyacetylene ring discussed. It shows when the AB potential is pres-ent, the SSH Hamiltonion of a one-dimensional dimerized chain must be modified, and the total energy as well as the persisitent current is affected by the magnetic flux.

Keywords: AB potential; dimerize; SSH hamiltonian

* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275, China