

6.3 恒定磁场中 Bloch 电子的运动

Bloch 电子在磁场中的准经典运动

Landau 能级

二维 de Haas-van Alphen 效应

三维 dHvA 效应

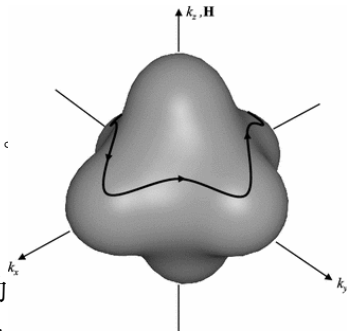
磁场中电子、空穴轨道

强磁场时的结果

恒定磁场中的准经典运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- $\mathbf{F} \perp \mathbf{B}$, 沿着 \mathbf{B} 方向的 \mathbf{k} 分量不改变。电子在垂直于 \mathbf{B} 的平面内运动。
- $\mathbf{F} \perp \mathbf{v}_n$, 电子能量不随时间改变
 - ☞ 电子在等能面上运动。
 - ☞ 电子在垂直于磁场的等能线上运动
- 和自由电子类似, 在动量空间电子沿等能线运动。不从磁场里获得能量, 也不把能量传递给磁场。
- 在动量空间, 自由电子的运动是周期的, 轨迹是一个圆, 比较简单。Bloch 电子的运动也是周期循环的, 但是轨迹一个复杂的 (封闭) 曲线。



恒定磁场中的准经典运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- 实空间中的运动轨迹

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B} = -e \frac{d\mathbf{R}}{dt} \times \mathbf{B}$$

$$[\mathbf{k}_\perp(t + \delta t) - \mathbf{k}_\perp(t)] = \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \times [\mathbf{R}_\perp(t + \delta t) - \mathbf{R}_\perp(t)]$$

- 平行磁场方向匀速运动
- 垂直磁场方向的实空间轨道和 k 空间中轨道形状相同，但是旋转了 90° ，并且放大了 \hbar/eB 倍。

恒定磁场中的准经典运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- 回旋运动周期和频率
在垂直于 \mathbf{B} 的平面内

$$T = \oint_{\varepsilon_n = \text{const}} dt = \oint \frac{dk}{|\dot{\mathbf{k}}|} = \frac{\hbar}{eB} \oint_{\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}} \frac{dk}{|\mathbf{v}_\perp(\mathbf{k})|}$$
$$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi eB}{\hbar \oint_{\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}} \frac{dk}{|\mathbf{v}_\perp(\mathbf{k})|}}$$

恒定磁场中的准经典运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- 各向同性的能带底部/顶部

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}$$

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar \oint_{k_\perp} \frac{dk}{|\mathbf{v}_\perp(\mathbf{k})|}} = \frac{2\pi eB}{\hbar(2\pi k_\perp)/(\hbar k_\perp/m^*)} = \frac{eB}{m^*}$$

这个结果和自由电子一致，只是用有效质量代替电子质量。

恒定磁场中的准经典运动

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}$$

- 有效质量是各项异性的情况
轨迹是一个椭圆，可以类似的求积分。一般通过求解运动方程更加简单。

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m^*} \cdot \mathbf{F} = -e \frac{1}{m^*} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

在主轴坐标系下，让磁场平行于 z 轴

$$m^* = \begin{pmatrix} m_x^* & & \\ & m_y^* & \\ & & m_z^* \end{pmatrix}$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{eB}{m_x^*} v_y \\ \frac{eB}{m_y^*} v_x \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \omega_c^z = \frac{eB}{\sqrt{m_x^* m_y^*}}$$

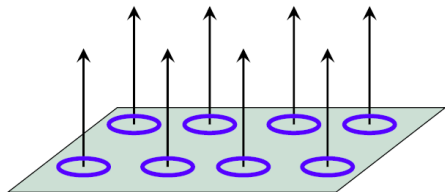
回旋频率也是各向异性的。

Bloch 电子在磁场中的运动的经典图像

质量为 m^* ，电荷为 $-e$ ，速度为 \mathbf{v}

- 受力: $\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, Lorentz 力
- 平行磁场方向的运动不受磁场影响
 - ☞ 只需要考虑 $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}, \mathbf{v}$ 的情况
- 无外加电场, 垂直磁场方向做周期的回旋运动
 - ☞ 电子围绕磁力线做回旋运动: $\mathbf{v} = \mathbf{\Pi}/m^* = e\mathbf{B} \times \mathbf{R}/m^*$
 - ☞ 回旋频率: $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$
 - ☞ 实空间回旋半径: $R = \frac{m^*v}{eB}$ 。
- 有外加电场时粒子做螺旋运动: 回旋运动, 同时在与电场和磁场都垂直的方向上加上一个匀速运动
 - ☞ 垂直方向的速度 $\mathbf{v} = -e \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}$

二维 Bloch 电子在磁场中的运动：半经典量子化



- 经典的回旋运动 \Rightarrow 周期性 \Rightarrow 能级量子化
- Bohr-Sommerfeld 量子化规则 $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = (n + \gamma)h$

$$\mathbf{p} = \Pi \left[\text{正则动量} = m\mathbf{v} \right] - e\mathbf{A}$$

$$(n + \gamma)h = \oint (m\mathbf{v} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r} = eBR \times 2\pi R - e \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S}$$

$$= 2eB\pi R^2 - e\Phi = e\Phi$$

$$\Phi = \pi R^2 B \text{ 轨道包含的磁通}$$

$$\Phi = (n + \gamma)h/e = (n + \gamma)\Phi_0$$

$$\text{量子磁通: } \Phi_0 = h/e$$

二维 Bloch 电子在磁场中的运动：半经典量子化

零点运动
 $\gamma = 1/2$

- 量子化条件： $B\pi R^2 = \Phi = (n + \gamma)\Phi_0 = (n + \gamma)h/e$

$$R_n^2 = (n + \gamma) \frac{h}{e\pi B} = (n + \gamma) l_B^2$$

$$l_B = \sqrt{\frac{h}{e\pi B}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{eB}}: \text{磁场长度}$$

$$v = \omega_c R = eBR/m^*$$

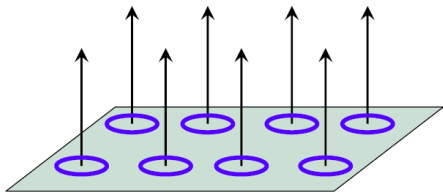
$$\varepsilon_n = \frac{m^* v^2}{2} = \frac{m^* \omega_c^2 R^2}{2} = \frac{1}{2} m^* \frac{e^2 B^2}{m^{*2}} (n + \gamma) \frac{h}{e\pi B}$$

$$= (n + \gamma) \frac{h}{2\pi} \frac{eB}{m^*} = (n + \gamma) \hbar \omega_c$$

Landau 能级

- 很多书 / 文献里在考虑量子化条件时没有考虑正则动量和动量之间的差别，这样得到的结果和实际相差两倍。
- Bohr-Sommerfeld 量子化条件等价于在轨道上形成驻波 \Leftrightarrow 电子绕轨道一周后总相位改变 2π 整数倍
相位改变主要有两部分贡献：波传播导致的 $\oint \mathbf{\Pi} \cdot d\mathbf{r}/h$ + 带电粒子绕磁场运动额外增加的相位（AB 效应）

二维 Bloch 电子在磁场中的运动：半经典量子化



- 电子绕磁力线做量子化的回旋运动：半径 $R_n^2 = (n + \gamma)l_B^2$ ，能量为 $\varepsilon_n = (n + \gamma)\hbar\omega_c$ 。
- 每个量子化轨道占据面积： $\pi\Delta R_n^2 = \pi l_B^2 = h/(eB) = \Phi_0/B$
- 相同半径但围绕不同磁力线的回旋运动是简并的量子态。
- 量子化能级简并度 = 面积 A 里可以容纳的量子化轨道数目
 $\Omega_L = \frac{A}{\Phi_0/B} = \frac{AB}{\Phi_0} = \frac{\Phi}{\Phi_0} = \text{量子磁通的数目} = \text{磁力线个数}$

二维 Bloch 电子在磁场中运动的量子力学解

磁场不是非常强的时候，可以用有效质量近似来描述 Bloch 电子的量子化运动。假设磁场 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ 沿 z 方向，包络波函数满足如下 Schrödinger 方程：

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\hbar\mathbf{k}_0 + \mathbf{p} + e\mathbf{A})\Psi = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m^*}\Psi \quad \text{各向同性}$$

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B} \quad \mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad \text{Landau 规范}$$

$$\varepsilon\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m^*} + \frac{(-i\hbar\partial_y + eBx)^2}{2m^*} \right] \Psi(\mathbf{r})$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(x, y) = \psi(x)e^{ik_y y}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon\psi(x) &= \left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m^*} + \frac{(\hbar k_y + eBx)^2}{2m^*} \right] \psi(x) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m^*} + \frac{m^*}{2} \left(\frac{eB}{m^*} \right)^2 \boxed{= \omega_c^2} (x + \hbar k_y / eB)^2 \right] \psi(x) \end{aligned}$$

$$\varepsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c \quad \psi_n(x) = \Phi_n(x + \hbar k_y / eB) \quad \text{简谐振子本征波函数}$$

二维 Bloch 电子在磁场中运动的量子力学解

- 能级量子化:

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= (n + 1/2)\hbar\omega_c = (n + 1/2)\frac{\hbar eB}{m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*}(2n + 1)\frac{eB}{\hbar} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{2n + 1}{l_B^2}\end{aligned}$$

- Landau 简并度:

$$x_0(k_y) = -\frac{\hbar k_y}{eB} \qquad k_y = \frac{2l_y\pi}{L_y}$$

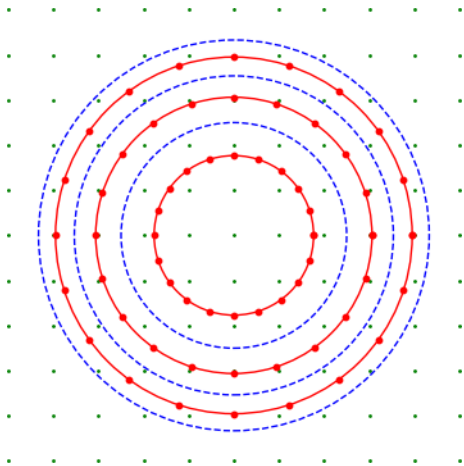
$$\Delta x_0 = \frac{\hbar\Delta k_y}{eB} = \frac{2\pi\hbar}{eBL_y}$$

$$\Omega_L = \frac{L_x}{\Delta x_0} = \frac{L_x L_y B}{h/e} = \frac{AB}{\Phi_0} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad \boxed{= \text{磁力线个数}}$$

二维 Landau 能级在动量空间的表示

加上磁场后，不具有平移对称性， k 不再是好量子数。但是我们仍然从 k 空间角度去看这种量子态，把它们当成处于特殊 k 点的状态。这样做，有助于我们理解体系的行为。

按照半经典图像，电子在 k 空间做圆周运动，能谱 $\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) = (n + 1/2)\hbar\omega_c$ 。因此允许的 k 在一系列圆上。

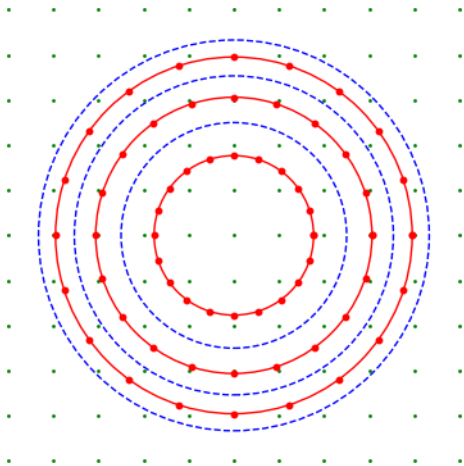


$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= (n + 1/2)\hbar\omega_c \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} [\sqrt{2n + 1}l_B^{-1}]^2\end{aligned}$$

二维 Landau 能级在动量空间的表示

由于色散关系改变， k 空间中描写状态的代表点也发生变化。没有磁场时，代表点均匀分布（绿点）。加上磁场，代表点（红点）变为聚集在半径为 $\sqrt{2n+1}l_B^{-1}$ 的（红色）圆上，能量为 $(n+1/2)\hbar\omega_c$ 。

图中每个蓝色虚线圆的半径是 $\sqrt{2n}l_B^{-1}$ ，代表的能量为 $n\hbar\omega_c$ 。相邻的两个蓝色圆给出的圆环内的绿点数目都是 Ω_L 。每个红色圆上允许的红点数目也是 Ω_L 。可以理解为每个圆环内的绿点代表的量子态在加上磁场后变成环中间红色圆上的红点代表的量子态。



$$\begin{aligned}\varepsilon_n &= (n + 1/2)\hbar\omega_c \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\sqrt{2n+1}l_B^{-1} \right]^2\end{aligned}$$

保持 B 不变，二维 Landau 能级的填充

$B = 0$ 时，允许的 k 点均匀分布在整个 k 空间。

往系统里填电子，电子先占据低能态，也就是先占据 k 空间里离中心近的 k 点。随着电子数增多，电子能量变大，被占据的点离中心的距离变大。被占据的最高能量就是 Fermi 能 E_F 。 $B = 0$ 时， E_F 随电子数 N 线性增加，如右图的蓝线。

保持 B 不变，二维 Landau 能级的填充

当 $B \neq 0$ 时，允许的状态在 Landau 能级上，在 k 空间中可由左图中的空心红点代表。

往系统里填电子的时候，同样先占据半径小的红圆上的红点。占满一个红圆之后，开始占据下一个红圆上的点。占据的最高能量是一个个 Landau 能级。

保持 B 不变，二维 Landau 能级的填充

考虑自由时和有磁场时的电子总能量之间的差别：

$$\Delta U = U(B \neq 0) - U(B = 0)。$$

刚开始往完全空的晶体里添加电子的时候，自由电子（即 $B = 0$ 的情况）增加的能量低于磁场中的电子， ΔU 随电子数增加而增加，直到 $N = \Omega_L/2$ ， $\Delta U = \Omega_L \hbar \omega_c / 4$ 。

保持 B 不变，二维 Landau 能级的填充

填充数超过 $\Omega_L/2$ 后，自由电子增加的能量更大，因此 ΔU 随电子数增加而减小，直到填充因子 $\nu = N/\Omega_L = 1$ ， $\Delta U = 0$ 。

继续增加电子数，开始填充下一个 Landau 能级。由于完全被填满的 Landau 能级对 ΔU 没有贡献，因此 ΔU 的改变和最低能级的情况完全一样。所以如右图绿线所示， ΔU 随着 N/Ω_L 周期变化。

保持 B 不变，二维 Landau 能级的填充

因此固定 B ，改变 N 时， ΔU 随填充因子 $\nu = N/\Omega_L$ 周期震荡。电子完全填满一个 Landau 能级时，即填充因子是整数时， $\Delta U = 0$ 。填满一半的 Landau 能级时，即填充因子是半整数时，Fermi 能和 Landau 能级重合，能量增加量最大。

磁矩 $M \propto -\frac{\partial U(B)}{\partial B} = -\frac{\partial \Delta U}{\partial B}$ ，因此 M 也是 N/Ω_L 周期振荡。

二维 de Haas-van Alphen (dHvA) 效应

所有的物理只依赖于填充因子 $\nu = N/\Omega_L \propto N/B$ ，因此，我们可以固定 N ，通过降低 B 周期地改变 ΔU 和相应的物理量，得到的结论和固定 B 改变 N 时完全一样。因此 M 也是随 B 周期振荡，这就是 de Haas-van Alphen (dHvA) 效应。

二维 de Haas-van Alphen (dHvA) 效应

振荡周期

$$1 = \Delta\left(\frac{N}{\Omega_L}\right) = \Delta\left(\frac{N\Phi_0}{AB}\right) = \Delta\left(\frac{n_e\Phi_0}{B}\right) \quad \Rightarrow \quad \Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{n_e\Phi_0}$$

三维自由电子模型

垂直于磁场平面里的回旋运动量子化，平行于磁场方向运动自由。能谱为 $E_n(k_{\parallel})$ ($n + \frac{1}{2}$) $\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}$ 。在 k 空间，允许的态在一系列圆柱面上。

和二维类似， B 改变时，填充状态改变，当 Fermi 面和某个圆柱面相切时能量增加量达到极大。因此电子能量增量同样和 $1/B$ 呈周期变化。和系统总能量有关的物理量，例如磁矩 M 也随 $1/B$ 周期改变。

☞ dHvA 效应

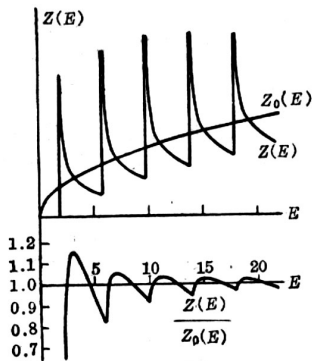
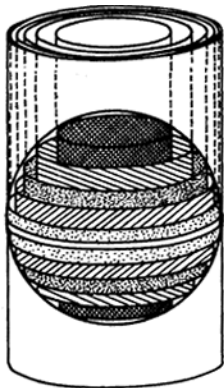


图 6-19 在磁场 $B = \frac{4m}{e\hbar}$ 时，电子气的态密度 $Z(E)$ 同无磁场时态密度 $Z_0(E)$ 的比较



三维电子气在磁场下的态密度。DOS 在 $k_{\parallel} = 0$ 极大，因此 Fermi 面和 Landau 能级柱面相切时能量增加量极大。

实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

[Ziman, pp317-324]

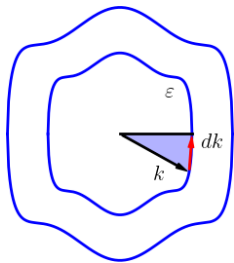
一般能带结构无法求解 Landau 能级。Onsager 借助经典的 Bohr-Sommerfeld 量子化方法, $\oint \mathbf{p}_\perp \cdot d\mathbf{r}_\perp = (n + \gamma)h$ 。利用关系

$$\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dt} = \mathbf{v}_\perp(\mathbf{k}) \quad \frac{d\mathbf{k}_\perp}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{v}_\perp(\mathbf{k}) \times \mathbf{B} \Rightarrow d\mathbf{r}_\perp = \frac{\hbar}{eB} d\mathbf{k}_\perp \times \hat{\mathbf{B}}$$

得到实空间和动量空间轨道形状相同, 角度相差 90° , 尺寸相差 $\hbar/(eB)$, 因此量子化条件变为

$$\begin{aligned} (n + \gamma)h &= \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \oint \hbar \mathbf{k} \cdot \frac{\hbar}{eB} d\mathbf{k}_\perp \times \hat{\mathbf{B}} \\ &= \oint \left(\hbar \mathbf{k} \times \frac{\hbar}{eB} d\mathbf{k} \right) \cdot \hat{\mathbf{B}} = \frac{\hbar^2}{eB} A(\varepsilon, k_\parallel) \end{aligned}$$

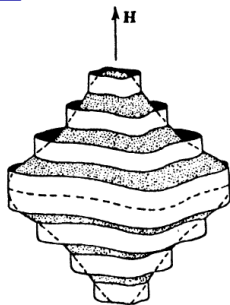
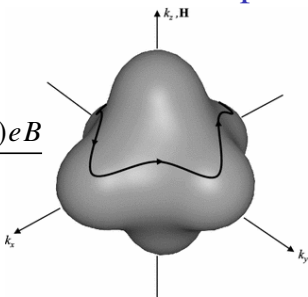
其中 $A(\varepsilon, k_\parallel)$ 是等能线包围的面积, n 是量子数, γ 为相位因子, 多数取为 $1/2$ 。因此允许的态同样在一系列柱面上。



实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

量子化条件

$$A(\varepsilon_n, k_{\parallel}) = \frac{2\pi(n + \gamma)eB}{\hbar}$$



同样的道理，各个物理量同样会随着磁场振荡周期。当 Fermi 面和某个量子化柱面相切的时候，系统能量增加量达到极大。因此实际材料里振荡周期 $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_F}$ 。其中 A_F 是垂直于磁场的费米面极值截面积（增量极值发生在 Fermi 面和量子化柱面相切，相切意味着 Fermi 面截面极值）。如果我们测出磁场沿不同方向给出的截面积，就可以绘出费米面的形状。

实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

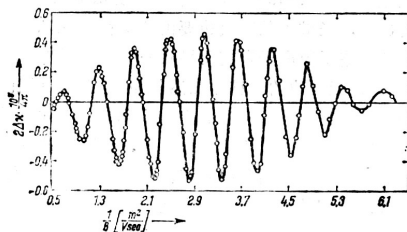
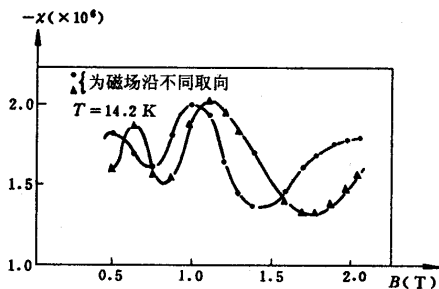


图 136 锌的德哈斯-范阿耳芬效应, $T = 4.2$ K

实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

物理量随磁场的振荡行为我们只讲了 dHvA 效应，因为这个效应理论上计算和解释最简单。实际上有更多物理量，例如在磁致电阻、磁声衰减等物理量都观测到这个振荡。这些现象一般统称为 Shubnikov-de Haas 效应。实验上最容易测量的是电阻，因此电阻随磁场振荡是这些效应里最早被发现的。

振荡周期 $\Delta(1/B) \propto 1/A_F$ ，因此 Fermi 面截面的面积越小，需要的磁场就越小，实验上就越容易观测到。早期实验现象都是在诸如 Bi 之类的 semimetal 里观测到。后来实验技术提高，能够实现稳定的强磁场后才陆续在其它材料里观测到类似效应。

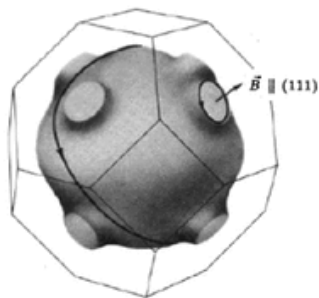
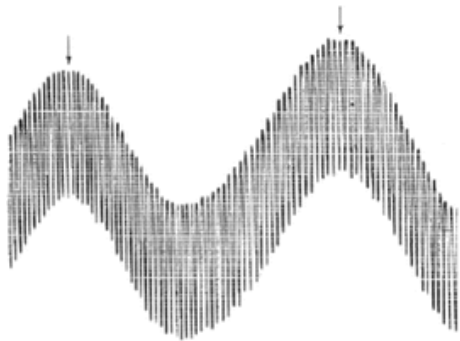
Fermiology: 从磁场的振荡周期，可以得到垂直于该磁场的 Fermi 面的截面面积的极值。通过改变磁场方向，可到不同方向截面积极值，从而可以绘出费米面的形状。这是最早测量 Fermi 面的实验手段之一。

实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

碱金属晶体结构是 BCC，其费米面近似为球体，不同方向具有极值截面的数目和大小相同。不同方向的 dHvA 效应具有相同的行为。实验上也确实证实了这一点。并且实验测量的 k_F 和按照自由电子模型计算的 k_F 基本一致。

实际三维材料的 de Haas-van Alphen 效应

Au/Ag/Cu 等贵金属的晶体结构是 FCC，其 Fermi 面明显不是球形，在八个 $\langle 111 \rangle$ 方向突出并和 BZ 边界相交。不同方向 dHvA 行为不同。尤其在 $\langle 111 \rangle$ 方向上，有两个极值截面。一个在中间的大“肚子”截面，另一个是在 BZ 边界小“脖子”截面。实验证实了这一点。两个极值截面积之比对金银铜分别是 29, 51, 27。



三维自由电子 dHvA 效应的计算

三维时计算复杂度远超过二维。J. Sólyom, “Fundamentals of the Physics of Solids”, Vol. 2, Chap. 22

Poisson summation formula

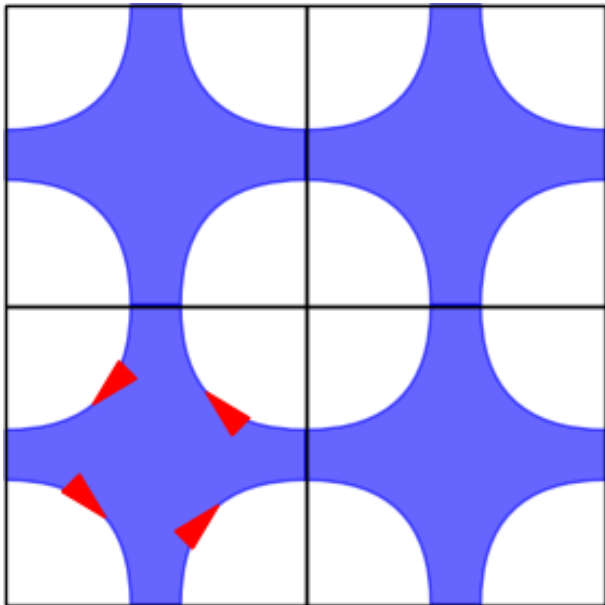
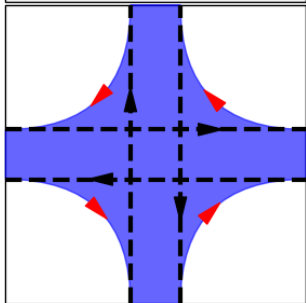
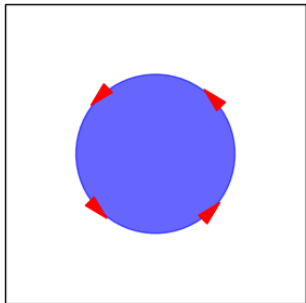
$$\begin{aligned}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) &= \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{2i\pi sx} = 1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \cos(2\pi sx) \\ \sum_{n=0}^{\infty} f(n+1/2) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} f(x) \delta[x - (n+1/2)] dx \\ &= \int_0^{\infty} dx f(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-1/2-n) \\ &= \int_0^{\infty} dx f(x) \left\{ 1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \cos[2\pi s(x-1/2)] \right\} \\ &= \int_0^{\infty} f(x) dx + 2 \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s \int_0^{\infty} f(x) \cos(2\pi sx) dx\end{aligned}$$

三维自由电子 dHvA 效应的计算

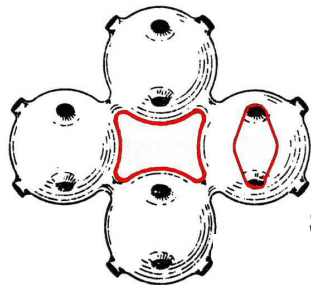
$$\begin{aligned}\ln \Xi &= - \sum_i \ln \left[1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \right] = -\Omega_D \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{dk_z}{2\pi} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta[\varepsilon(n, k_z) - \mu]} \right\} \\ &= -\frac{eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta[\varepsilon(n, k_z) - \mu]} \right\} dk_z \\ &= -\frac{eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta[\varepsilon(x, k_z) - \mu]} \right\} dx dk_z \\ &\quad - 2 \frac{eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{l=1}^{\infty} (-)^l \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta[\varepsilon(x, k_z) - \mu]} \right\} \cos(2\pi lx) dx dk_z\end{aligned}$$

$$\varepsilon(x, k_z) = x\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

磁场中电子、空穴轨道

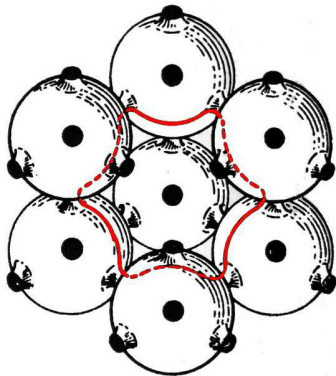


磁场中电子、空穴轨道

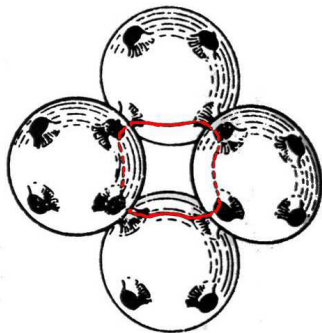


Six corner Rosetta

Dog's bone
+ Lemon



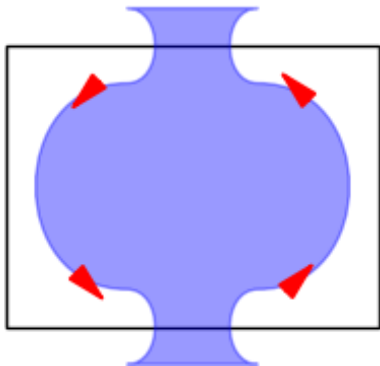
Four corner
Rosetta



磁场中的开放轨道

电子在 k 空间中可以形成如右图的周期但非封闭的轨道。这类轨道在延展的 BZ 里一直运动下去，因此被称为开放轨道。

封闭轨道（电子/空穴轨道）和开放轨道对磁致电阻的影响有非常不同。封闭轨道中，电子的平均速度为零。在强磁场极限，电子做回旋运动，沿电场方向电流为零，电导趋于零。



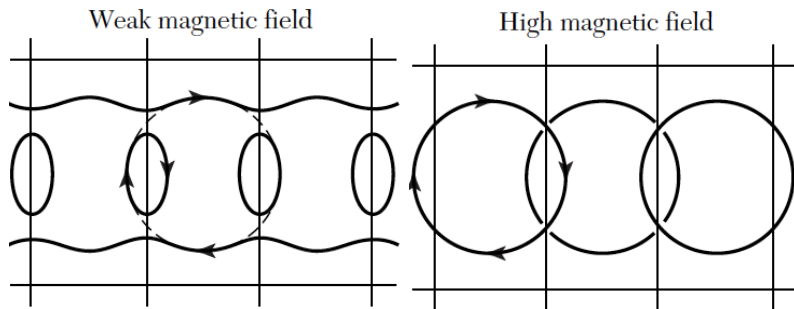
开放轨道中，电子速度在一个方向为零（图中的 y 方向），另一个方向（图中的 x 方向）非零。在强磁场极限， y 方向电导趋于零，但是 x 方向电导趋于饱和。

磁致电阻的计算需要考虑 Hall 效应：封闭轨道磁电阻饱和；开放轨道，一个方向趋于无穷大，另一个方向饱和。

$$R_{xx} = \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2}$$

$$R_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2}$$

Magnetic breakdown



- 低场的时候，电子在小的 Fermi 面上回旋运动，包围的面积小，SdH/dHvA 频率低。
- 高场时，可以在不同的轨道内跃迁，可以形成右图的回旋运动，包围的面积大，SdH/dHvA 频率高。
- 条件： $\hbar\omega_c \geq \varepsilon_g^2/\varepsilon_F$ 。

强磁场时的能带结构

Harper-Onsager-Periels 模型: Tight-binding

$$-\sum J_{nm}a_m = \varepsilon a_n$$

$$J_{nm} \Rightarrow J_{nm}e^{i\phi_{nm}}$$

$$\phi_{nm} = -\frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$$

$$\alpha = \frac{a^2 B}{\Phi_0}$$

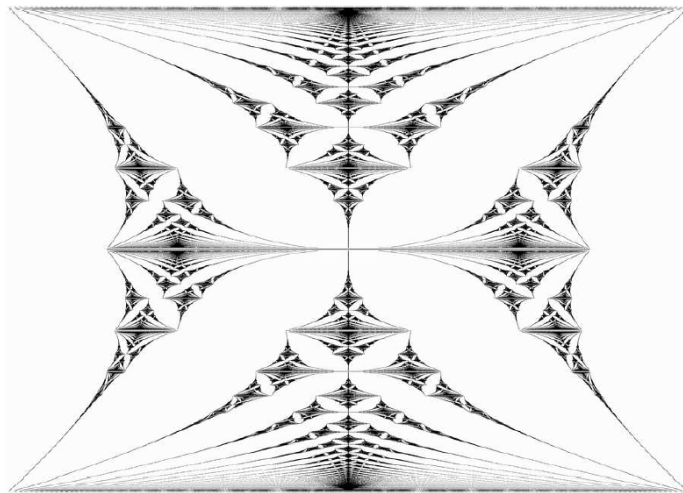
一个原胞内的量子磁通 (磁力线) 数目

- 能级结构是 α 的周期函数

强磁场时的能带结构

Hofstadter Butterfly, [D. R. Hofstadter, PRB **14**, 2239 (1976)]

“Gödel, Escher, Bach: An Eternal Golden Braid”



α vs ε : 横轴是允许能量, 纵轴是原胞内磁力线个数 (0 - 1)

强磁场时的能带结构

$$\alpha = \frac{a^2 B}{\Phi_0}$$

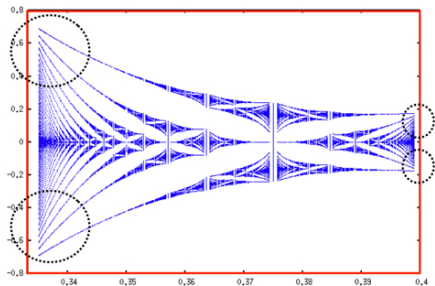
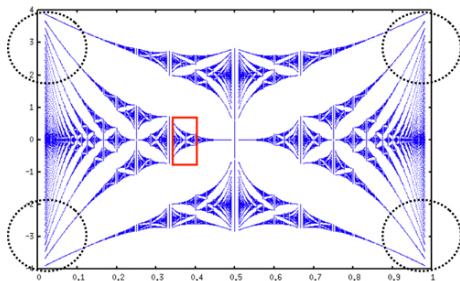
- 如果 $\alpha = p/q$ 是有理数, p, q 是互质的整数
 - 能带分为 q 个子带
 - 有些子带非常靠近, 整体上看近乎有 $[q/p = 1/\alpha]$ 个子带
- 如果 α 是无理数
 - 无穷多个子带
 - 子带形成 Cantor 集

强磁场时的能带结构

$$\alpha = \frac{a^2 B}{\Phi_0}$$

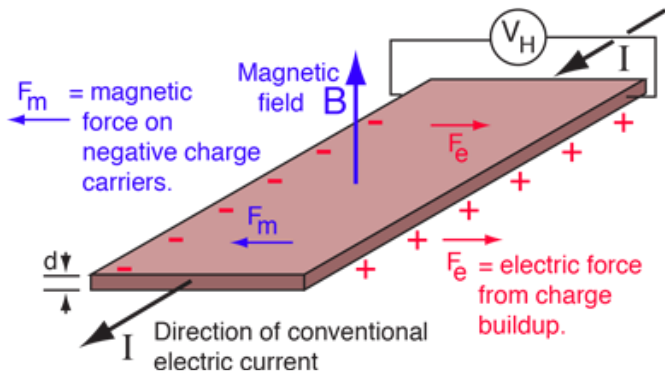
- 能带为具有自相似性的分型结构
- 存在杂质/无序的时候，精细的子带结构会被抹平，整体上看近乎有 $[1/\alpha]$ 个子带

👉 横、纵坐标轴和上一张图的



I. Satija, "Butterfly in the Quantum World"
Fig 7.8

Hall 效应



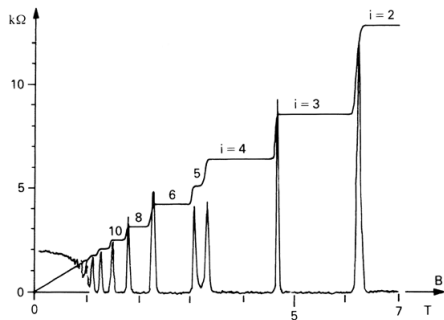
$$R_{xy} = \frac{V_H}{I} = -\frac{B}{ne} = R_H B$$

整数量子 Hall 效应

$$\begin{aligned} |R_{xy}| &= \frac{BL_xL_yh}{N_e(h/e)e^2} = \frac{\Phi}{\Phi_0N_e}R_K \\ &= \frac{R_K}{\nu} \\ R_K &= \frac{h}{e^2} = 25812.807557(18) \Omega \end{aligned}$$

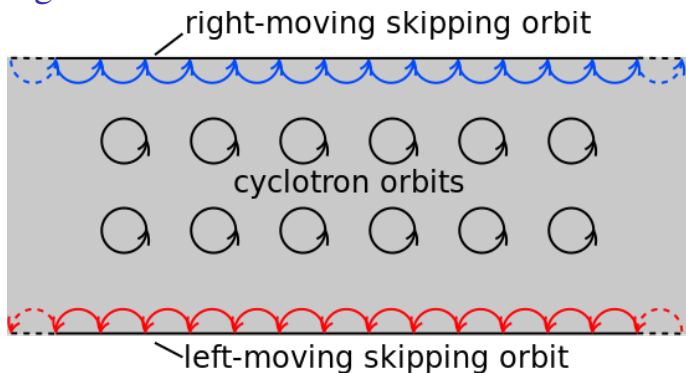
如果电子填充因子 $\nu = N_e/\Omega_L$ 是整数的话，Hall 电阻 R_{xy} 是量子化的。

1980 年，von Klitzing 在研究异质结中的杂质散射时意外的发现 Hall 电导/电阻量子化是非常稳定的现象。在整数填充的时候出现预料的量子化电导。



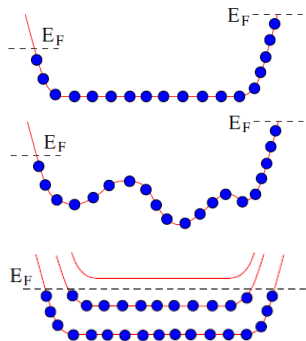
但是偏离整数填充时，Hall 电导并没有改变。 R_{xy} 随电子填充或者磁场改变呈台阶状。而且杂质的存在没有破坏量子化。恰恰相反，在适当范围内，杂质浓度越大，平台宽度越大，量子化越加稳定。

Chiral Edge States



- 在边界处无法作完整的回旋运动。
- 电子在上边界只能朝右运动，在下边界只能朝左运动
- 同一个边界不同态之间的散射不改变电流，对电阻无贡献。
- 只有把电子从一个边界散射到另外一个边界时，才能改变电流，从而改变电阻。
- 当 L_y 很大时，这种散射机率很低。

从边界态看量子 Hall 效应



- $L_y \rightarrow \infty$, 每个电子不受散射的从左右两边流动。
- 每个被填充的 Landau 能级的边界态是一个导电通道, 对电导的贡献 $G_0 = e^2/h$ 。
- 杂质对边界态导电没有影响。
- 总电导 $\sigma_{yx} = \nu G_0 = \nu e^2/h$

分数量子 Hall 效应

