

量子材料（第二代）

——浅谈

刘晓辉，秦伟，解士杰

山东大学物理学院

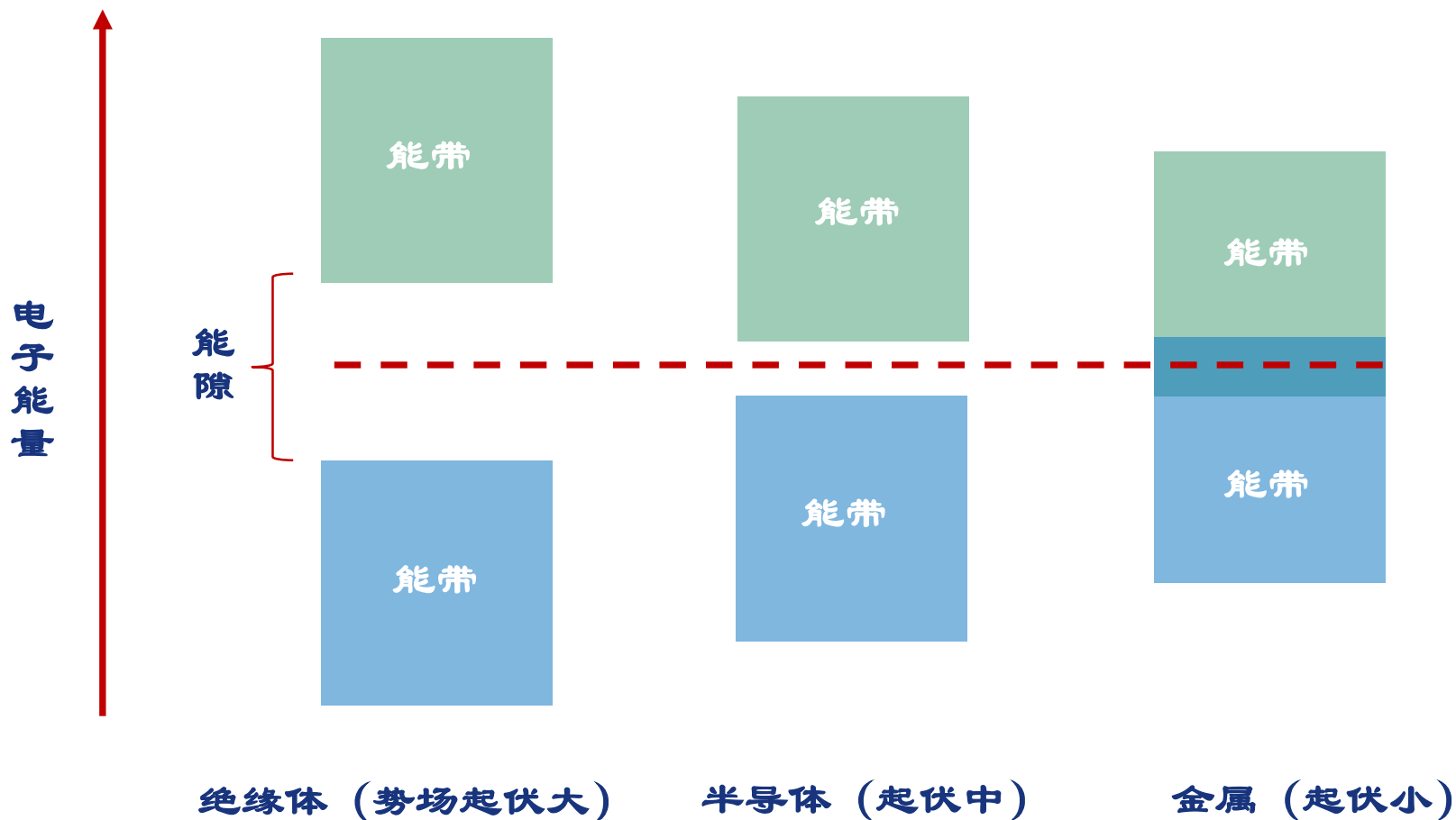
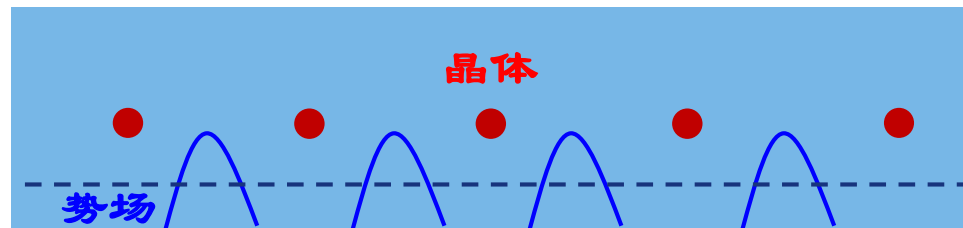
晶体材料国家重点实验室

山东大学本科生院，山东大学文学生活馆

山东大学齐鲁青年学者启动经费

国家自然科学基金

导体、绝缘体和半导体



能带论的局限

第一代量子材料

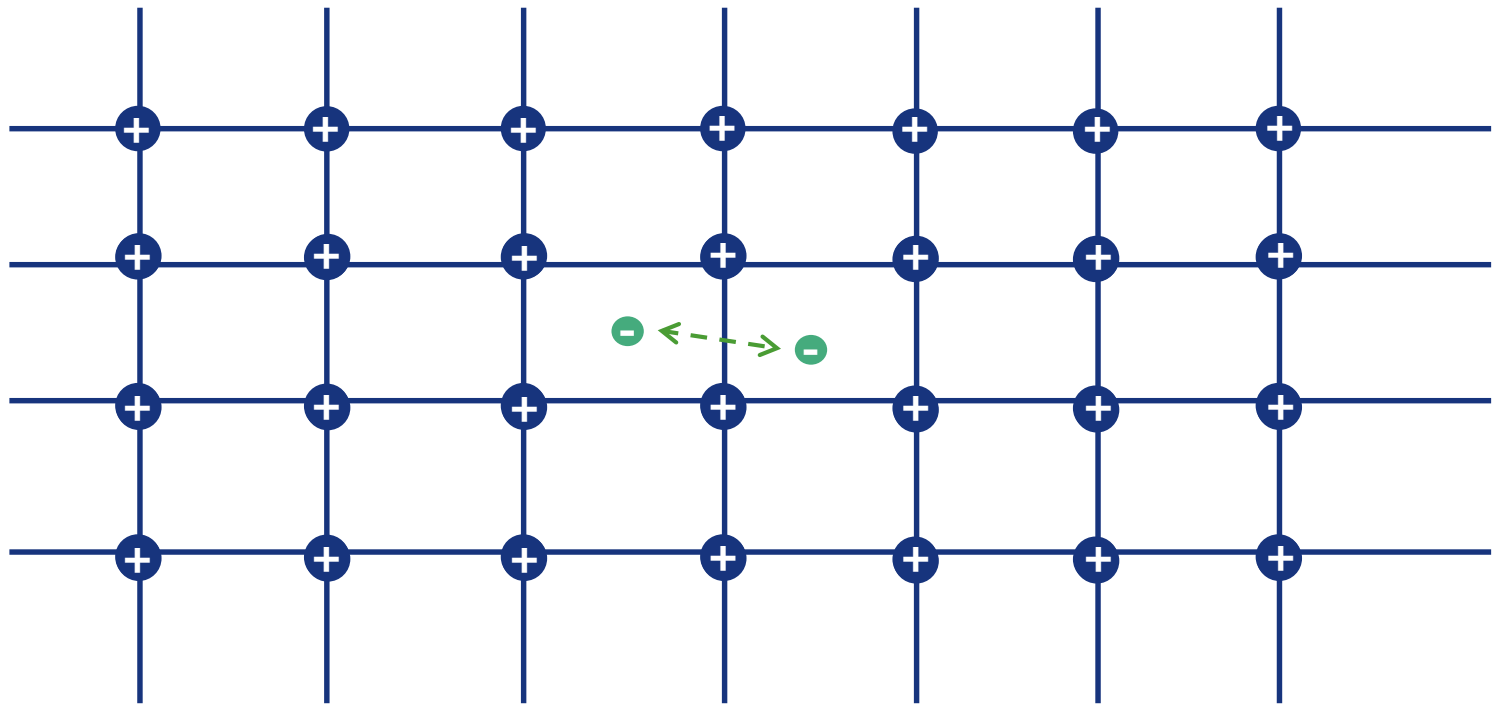
- ◆ 载体：半导体
- ◆ 理论基础：能带理论（单电子近似，忽略粒子间相互作用）

能带论的不足：

- ◆ MnO, CoO, CrO₂, NiO等，能带论给出错误判断
- ◆ 能带论判断为金属
- ◆ 实际为绝缘体

电子-电子相互作用 (电子关联) 起作用

第二代量子材料：关联作用



□ 电子运动，晶格振动

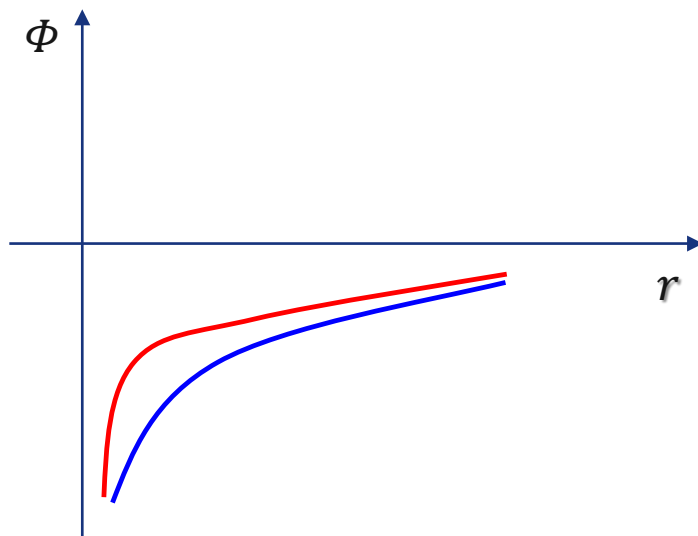
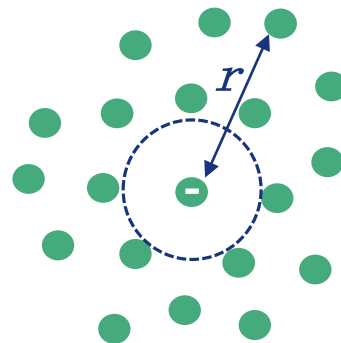
□ 电子-电子；晶格-晶格；电子-晶格之间相互作用

电子-电子相互作用：屏蔽效应

两个电子作用 托马斯费米近似

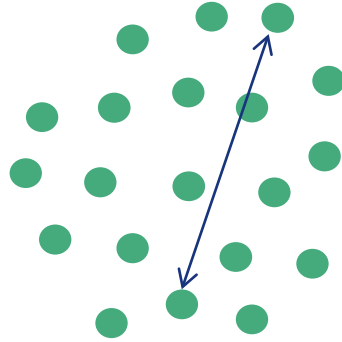
$$\phi = \frac{Q}{r}$$

$$\phi = \frac{Q}{r} e^{-k/r}$$



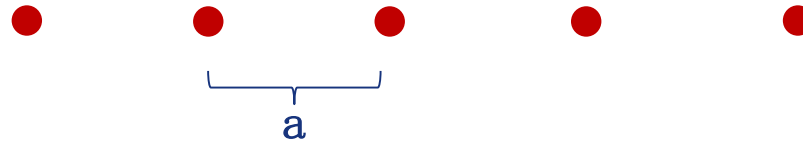
◆ 实际情况要更要复杂

关联作用

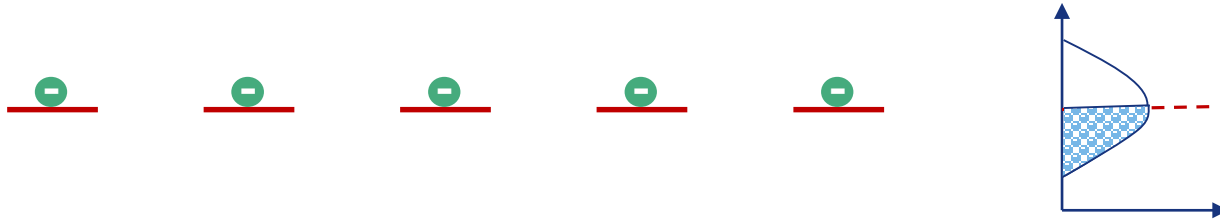


- ◆ 泡利不相容原理，量子效应：全同性
- ◆ 两个电子不能占据同一个轨道。
- ◆ 考虑大量电子的行为时，必须考虑电子之间的相互作用。
- ◆ 库伦力是长程力，将所有电子关联在一起，牵一发动全身。
- ◆ 很多现象与此相关！（相关例子）

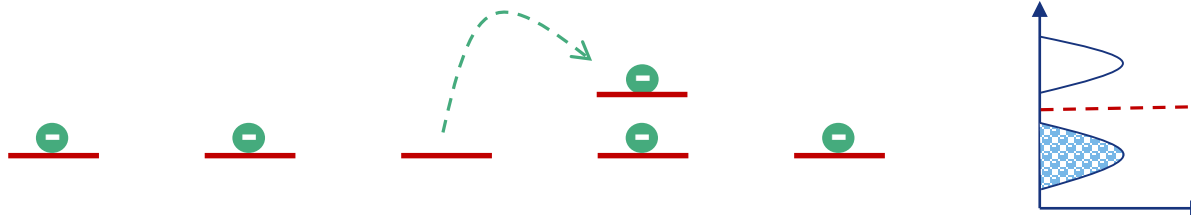
从金属到绝缘体



金属从孤立原子 $a = \infty$ 到聚合成为金属，能级劈裂，动能减少，能量降低，内聚能。这一过程是退局域过程。单电子近似，没考虑占据同一轨道的电子关联。

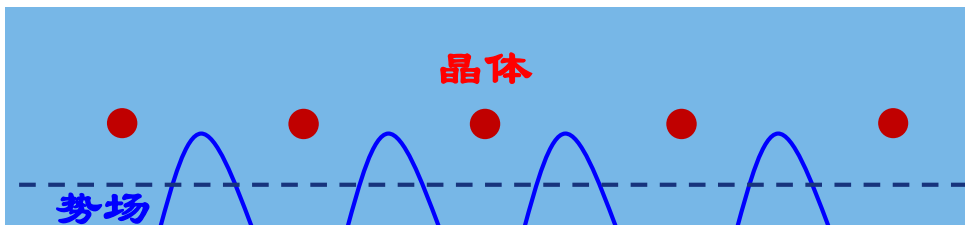


同轨道占据会增加库伦排斥作用, U 。当库伦排斥作用大于内聚作用，产生带隙。

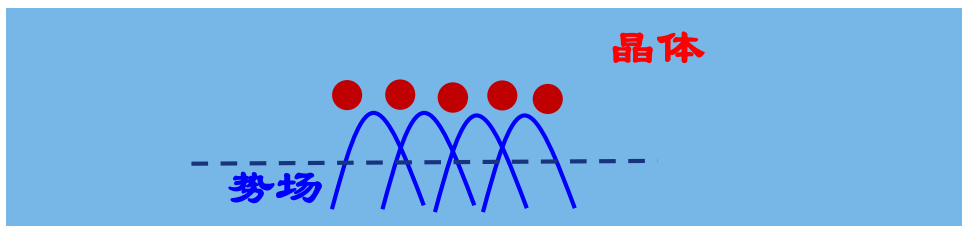


动能和势能之争

□ 当电子密度低时（ a 比较大），势场起伏大，势能占主导，局域态。



□ 当电子密度高时，势场平滑，动能占主导，关联作用降低。

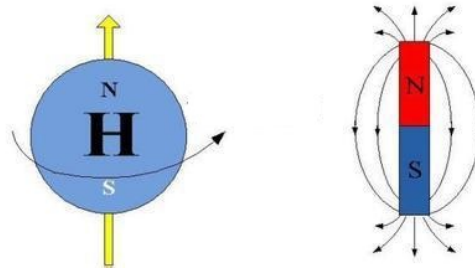


- 势能，有序
- 动能，无序
- 加热会破坏有序

铁磁

□ 很多物质表现为很多相，比如水：气，液，固；相变表现为对称性的变化

□ 磁性，磁矩有序
高于 T_c ，没有磁性
低于 T_c ，表现为磁性
 T_c 相变温度；
磁铁，指南针，地球



□ 磁性成因：

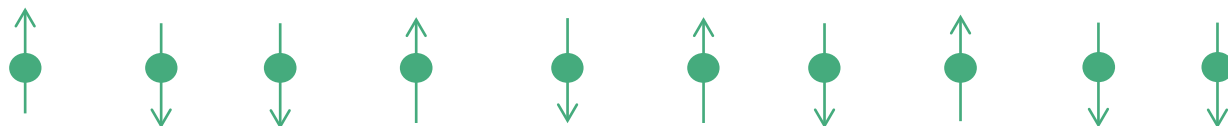
- 开始人们认为磁矩之间的相互作用，但是太弱，和实际差10000倍。
- **磁性离子间的交换作用导致磁性。**
- 如果每个格点一个电子占据，那么交换势能就会导致磁有序。



磁性成因

经典图像无法描述磁性的成因：电子自旋上下能量兼并。随机排列，总体不表现磁性

顺磁



由于交换关联作用让电子有序排列

铁磁



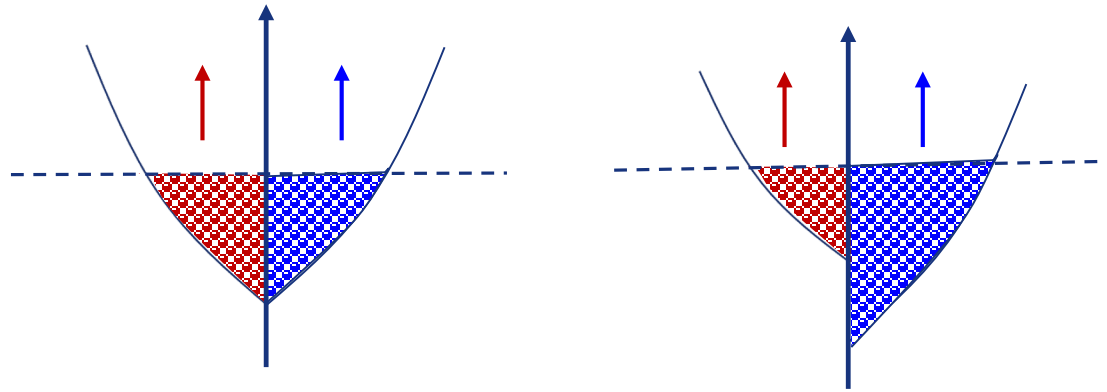
反铁磁



铁磁金属

□ 铁磁金属巡游电子模型：实际很多情况电子不是局域的，而是可以流动的。

□ 能带产生交换劈裂



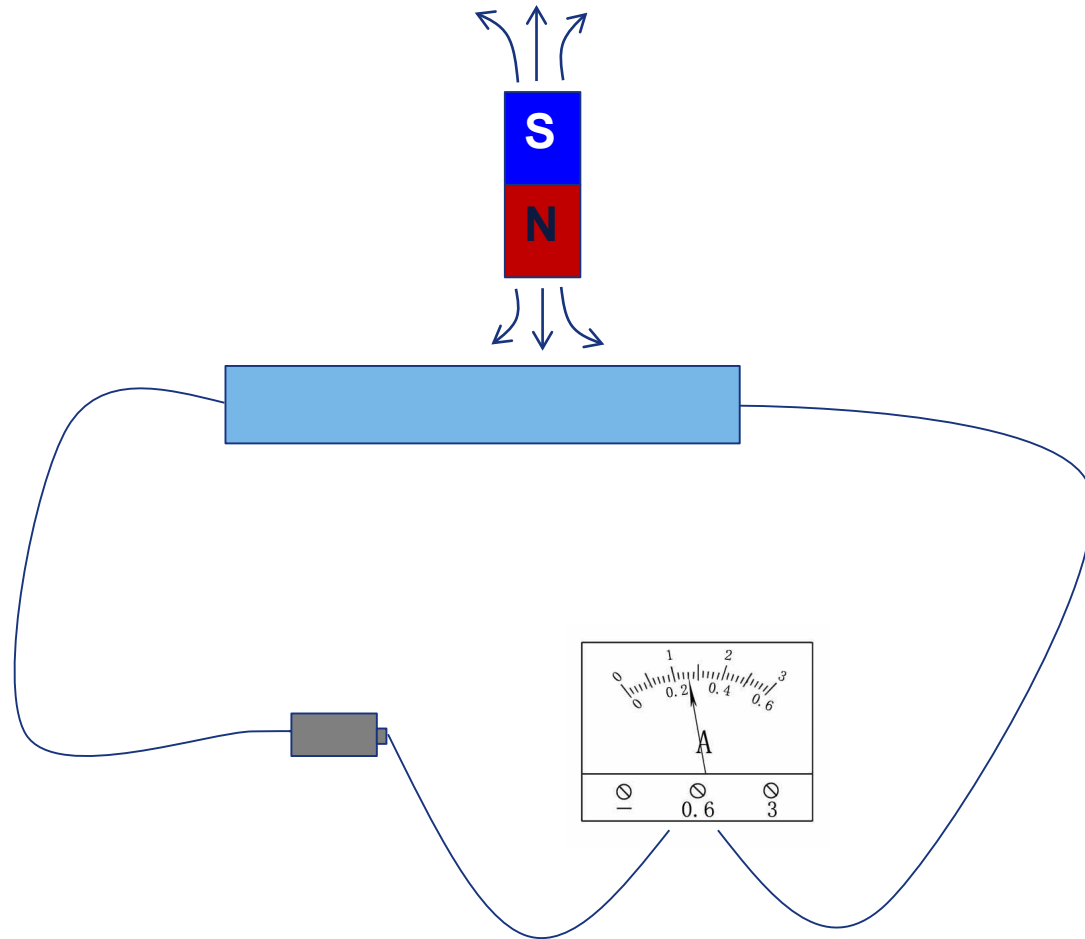
磁性材料的应用



磁盘：信息存储

□ 信息的读写

磁阻



- 在存在磁场的情况下，电阻改变。
- 磁电阻是电子器件的基本原理：传感器。
- 自旋电子学：电荷输运+磁性
- 霍尔电阻，AMR, GMR, TMR

四代磁阻技术

技术	Hall	AMR	GMR	TMR
功耗 (mA)	5~20	1~10	1~10	0.001~0.01
尺寸 (mm)	1×1	1×1	2×2	0.5×0.5
灵敏度 (mV/V/Oe)	0.05	1	3	20
工作范围 (Oe)	1~1000	0.001~10	0.1~30	0.001~200
分辨率 (mOe)	500	0.1	2	0.1
温度特性 (°C)	<150	<150	<150	<200
响应时间 (ns)	>1000	10	10	0.1
温度漂移 (PPM/K)	3000	3000	3000	400

□ Hall: 利用磁场改变电阻

□ AMR: 各向异性磁阻; 磁场改变材料的磁矩方向, 从而改变材料的电阻。

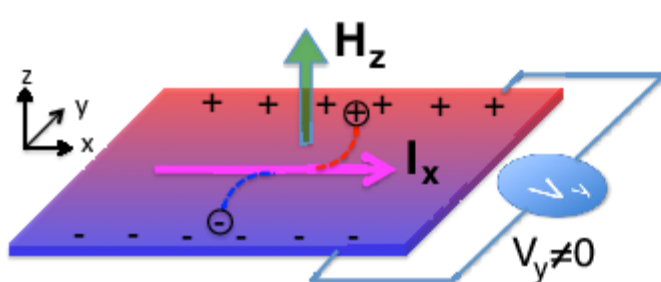
□ GMR: 通过改变电子传输路径上的磁性, 对不同自旋电子散射, 改变电阻。

□ TMR: 利用磁性改变隧穿电子的隧穿电阻。

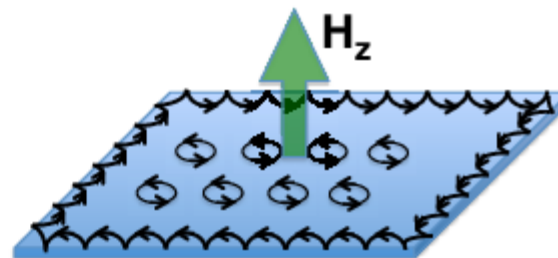
量子霍尔效应故事

- 1879年，霍尔效应发现。
- 1980年，整数量子霍尔效应。1985年的诺贝尔物理学奖。
- 1982年，分数量子霍尔效应。1998年的诺贝尔物理学奖。
- 2007年，量子自旋霍尔效应，《科学》杂志评出的十大科学进展之一。
- 2013年，量子反常霍尔效应，中国科学家薛其坤院士团队，首次在三维体系中实现。

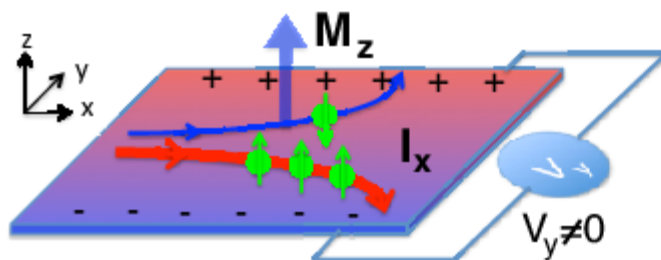
霍尔效应与量子霍尔效应



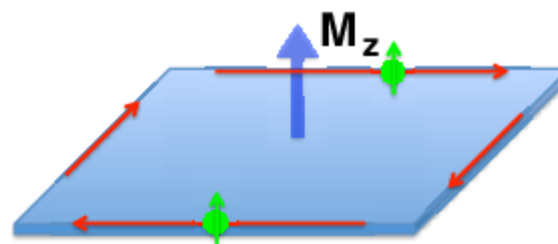
(a) Hall effect



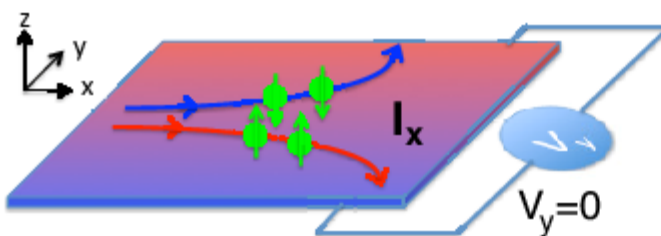
(b) Quantum Hall effect



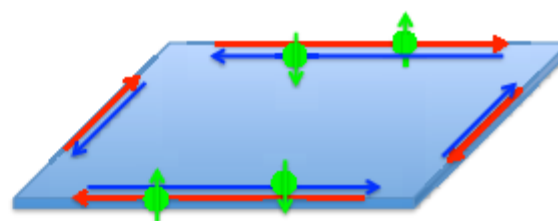
(c) Anomalous Hall effect



(d) Quantum Anomalous Hall effect



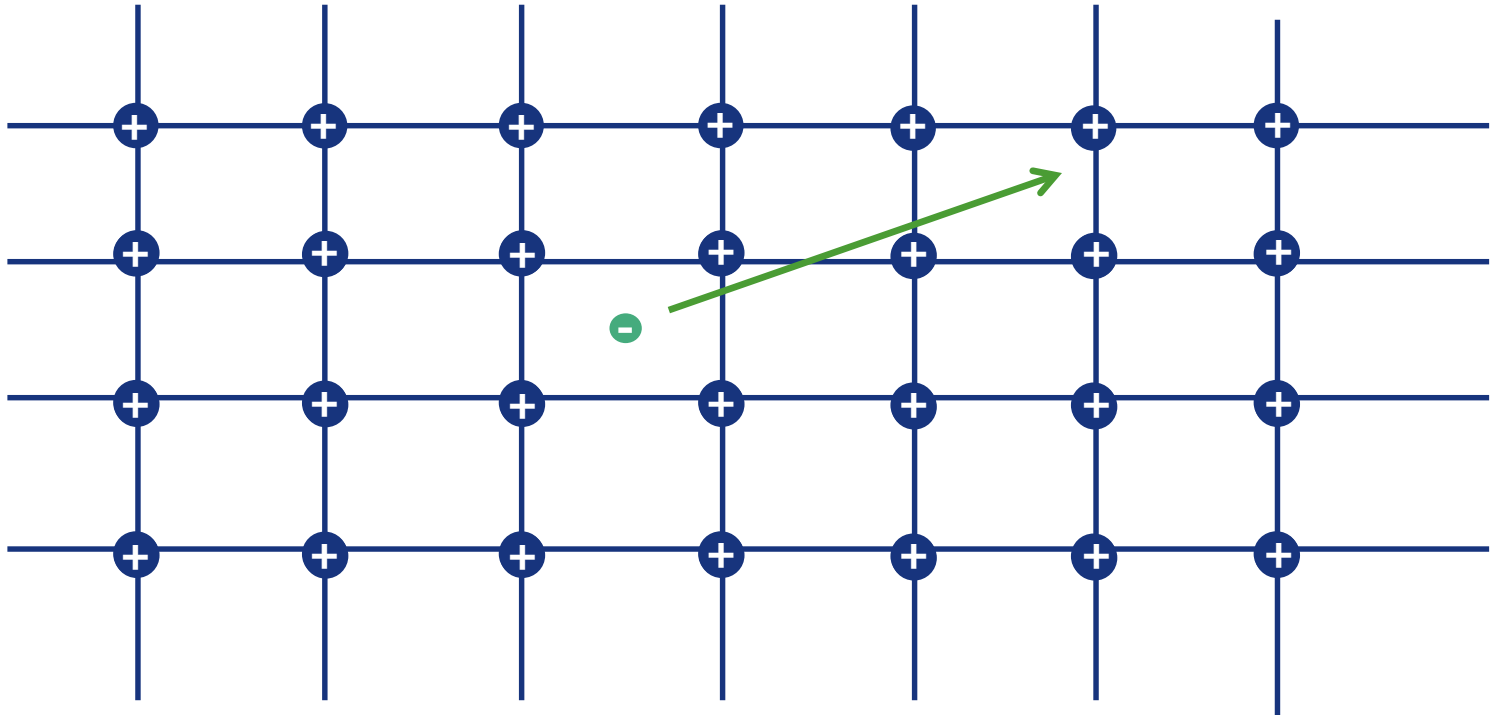
(e) Spin Hall effect



(f) Quantum Spin Hall effect

电子：弹道输运，不受散射。

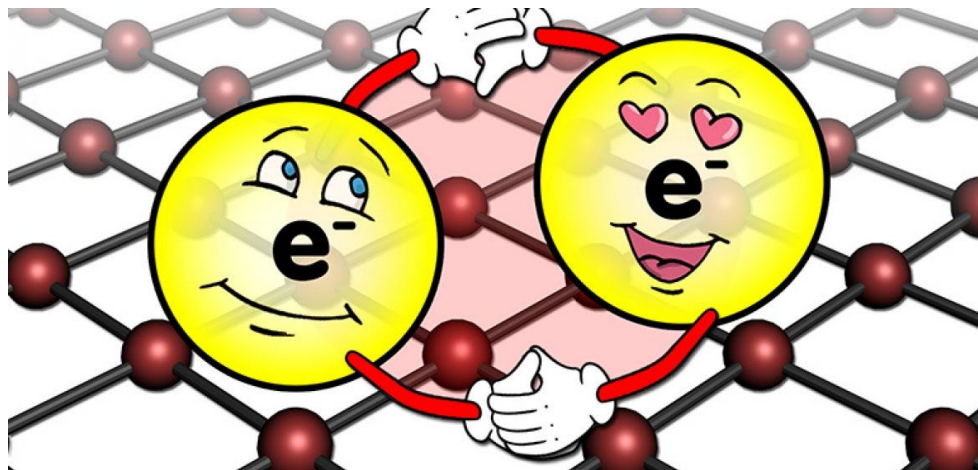
电子和晶格的相互作用



- 晶格在不停地震动，晶格由带电粒子组成。
- 电子-晶格之间相互作用导致电阻的产生。
- 减小电阻，就是要给电子运动以限制，有秩序地“跑起来”。

玻色—爱因斯坦凝聚：超导

量子现象的宏观表现

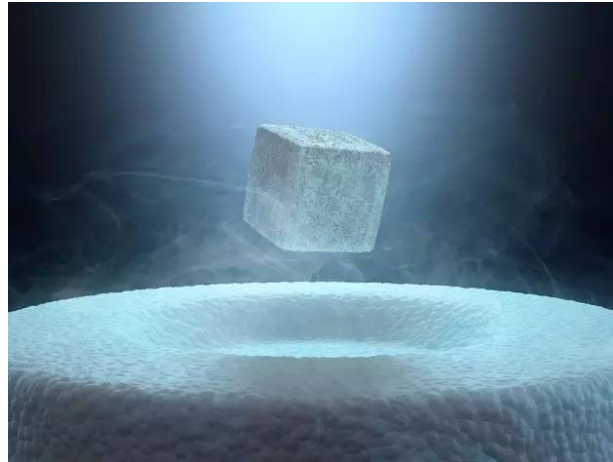


库珀对

◆ 超导的BCS理论

- 电子-晶格-电子 相互作用，晶格作为媒介，两个电子联姻形成一个符合玻色子—库珀对。
- 类似于超流，库珀对没有阻力，表现为超导。
- 库珀对比较脆弱，温度会拆散两个电子。
- 低温下才可以维持。

高温超导陶瓷

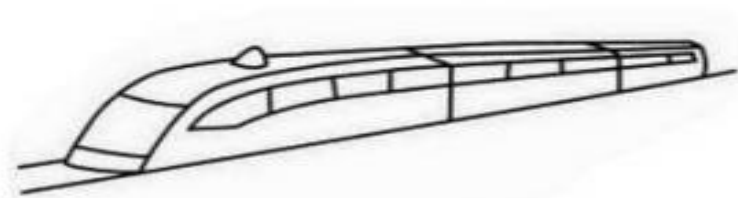
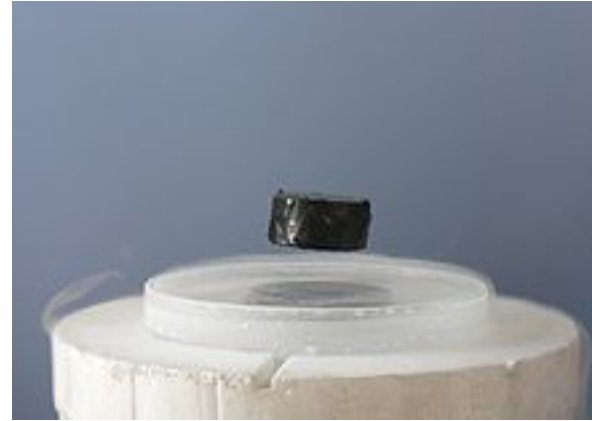
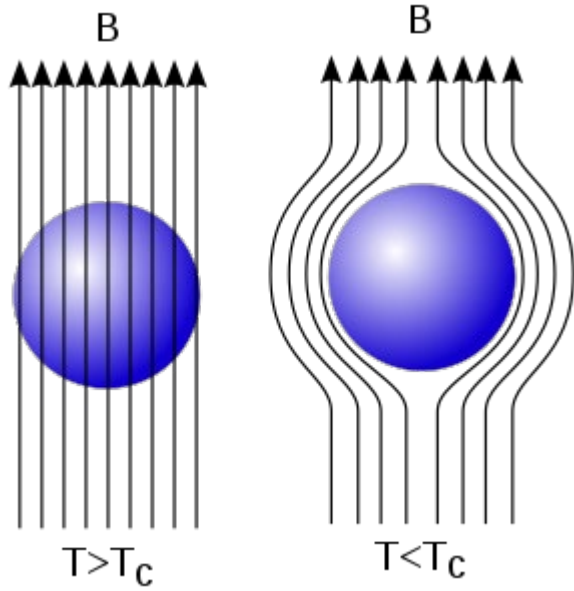


- 1911年，水银发现超导，4.2K。
- 1957年，BCS理论，不超过40K。
- 1980年代，铜氧化物陶瓷材料，92.9K（液氮临界温度77K）。
- 1990年代，超过130K。
- 2015年，超过200K。

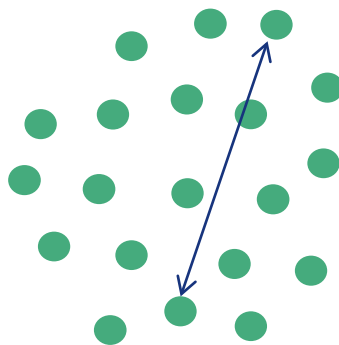
最低温度0K，相当于零下273摄氏度。

磁悬浮列车，输电，超导计算机等等

迈斯纳效应和磁悬浮



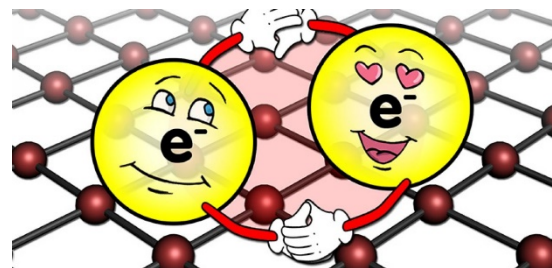
第二代量子材料



电子关联



电子-电子
磁性, 霍尔效应



电子-晶格
电阻, 超导