

介紹 Лифшиц 學派的磁場電效應理論*

高 聯 佩

(清 華 大 學)

張先生剛才談到，近二年來蘇聯 Лифшиц 學派發表了一系列的文章，討論磁化率、熱傳導以及磁場電效應的現象。我預備對該學派在磁場電效應方面的工作再補充介紹一下。我所要講的這篇文章^[1]是在 1956 年發表的。

由於文字的隔閡以及時間倉促，若有不正確的地方請大家指正。這篇論文的基本出發點是把穩定態的玻耳茲曼方程改寫成

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} \dot{\tau} + \frac{\partial f}{\partial p_z} \dot{p}_z + \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \dot{\epsilon} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{CT} = 0. \quad (1)$$

也就是說把慣用的 (p_x, p_y, p_z) 換成了 (τ, ϵ, p_z) ， ϵ 是電子的能量， τ 是一個無因次量， $\dot{\tau}$ ， \dot{p}_z ， $\dot{\epsilon}$ 表示改變率。 τ 的定義是一個關鍵問題，需要詳細交代一下：

先考慮一個自由電子，在均勻磁場 H 的作用下：

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}], \quad \mathbf{v} = \nabla_p \epsilon,$$

∇_p 是對 \mathbf{p} 的梯度算符。若 $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ ，則電子的軌道將是在 $p_x p_y$ 平面上，於是我們可以寫出下面幾個定義：

時間	$t = -\frac{c}{eH} \int \frac{dl}{v_{\perp}}$	
	$dl = d\mathbf{p} , \quad v_{\perp} = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2};$	
週期	$T_0 = -\frac{c}{eH} \oint \frac{dl}{v_{\perp}} = -\frac{c}{e \cdot 1} \frac{\partial S}{\partial \epsilon} = -\frac{c}{eH} 2\pi m_0;$	(2)
面積	$S = \iint dp_x dp_y = \int d\epsilon \oint \frac{dl}{v_{\perp}};$	
質量	$m_0 = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \epsilon}.$	

以上是對自由電子而言。

Лифшиц 學派把這個觀念推廣，認為當導體中的電子在磁場 $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ 中運動，其軌道決定於兩個運動常數：

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \text{常數}, \quad p_z = \text{常數}.$$

(3)式在 \mathbf{p} 空間是一平面曲綫。沿着這曲綫的時間 t 可以寫成

$$t = -\frac{c}{eH} \int \frac{dl}{v_{\perp}}. \quad (3)$$

* 1958 年 1 月 13 日上午在固體電子論報告會上報告。

(4)

利用(4)同(2)式便可得到(1)式中的 τ :

$$\tau = \frac{t}{T_0} = \frac{1}{2\pi m_0} \int \frac{dl}{v_{\perp}}. \quad (5)$$

以上是 τ 的定義，這樣(1)式中的各量都有了明確的定義。若(3)式是一閉合曲綫，那末下面的幾個量也就有了物理意義：

$$\text{週期} \quad T = -\frac{c}{eH} \oint \frac{dl}{v_{\perp}} = -\frac{c}{eH} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = -2\pi c m^* / eH; \quad (6)$$

$$\text{有效質量} \quad m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \iint dp_x dp_y.$$

同時，若讓 u 對 τ 的平均值是

$$\bar{u} = \frac{T_0}{T} \int^{T/T_0} u d\tau,$$

我們便可以證明

$$\bar{v}_z \neq 0, \quad \bar{v}_\alpha = 0 \quad (\alpha = x, y). \quad (7)$$

若費米面 $\varepsilon(p) = \zeta$ 是一封閉面，而(3)式又是一閉合曲綫，則 $V(\zeta)$ 便代表費米面所包含的體積

$$\int S(\varepsilon = \zeta, p_z) dp_z = V(\zeta). \quad (8)$$

當然，若(3)式是非閉合曲綫，則(6)到(8)式都不會有任何意義。Лифшиц 學派根據(7)式提出了他們主要的觀點，他們認為(3)式的拓撲學決定許多傳導現象的特性。下面是他們把這種觀點寫成算學式子的步驟：

(1)式中的 $\dot{\tau}$, \dot{p}_z , $\dot{\varepsilon}$ 可以用下面的方程來計算：

$$\frac{dp}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] + e\mathbf{F},$$

$$\mathbf{v} = \nabla_p.$$

此處 \mathbf{F} 是外電場。得到的近似結果為

$$\dot{\varepsilon} = e\mathbf{v} \cdot \mathbf{F}, \quad \dot{p}_z = eF_z, \quad \dot{\tau} \cong \frac{1}{T_0}. \quad (9)$$

然後，假定

$$f = f_0 - et_0 \psi_i F_i, \quad (10)$$

這裏 $t_0 = -2\pi m_0 c / eH_0$ 代表弛豫時間。將(9)和(10)代入(1)式，

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial \tau} + r_0 \hat{W} \{\psi_i\} = r_0 f'_0(\varepsilon) v_i, \quad (11a)$$

$$r_0 = H_0/H, \quad \hat{W} \{\psi_i\} = t_0 \left\{ \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \right\}_{\text{CT}}, \quad f'_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.$$

同時

$$\overline{\hat{W} \{\psi_i\}} = f'_0(\varepsilon) \bar{v}_i. \quad (11b)$$

若 $r_0 \ll 1$ ，我們可以假定

$$\psi_i = \sum_{k=0}^{\infty} r_0^k \psi_i^{(k)}. \quad (12)$$

把(12)代入(11)，可以解出 ψ_i 是 \hat{W} 的函數。若 \hat{W} 為已知，則電導率張量 σ_{ij} 便可由下式

算出：

$$\sigma_{ij}(H) = -\frac{2e^2t_0}{h^3} \int v_i \psi_j(dp). \quad (13)$$

此中 h 是普朗克常數。如何計算 ψ_i 在後面還要談到。Лифшиц 學派指出，不必詳細計算，只要利用(11)以及(7)，(8)兩式就可求出當 $H \rightarrow \infty$ 時 $\sigma_{ij}(H)$ 的漸近值。下面是幾種典型的結果。

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\alpha} &\sim \text{常數 或 } H^2, \\ \rho_{\alpha\neq\beta} &\sim H \text{ 或 } H^2. \end{aligned}$$

這裏 $\rho_{\alpha\beta}(H)$ 代表電阻率張量。Лифшиц 學派認為， $\rho_{\alpha\alpha}$ 的漸近行為得到了 Justi 學派的實驗支持。若(3)式是封閉面 $\epsilon(p) = \zeta$ 上的封閉曲綫，則

$$\rho_{xy} = H/ec(n_1 - n_2). \quad (14)$$

此中 n_1 可以當作是電子的態密度， n_2 可以當作是“空穴”的態密度。他們認為習慣上用的“空穴”的定義是不自然的，建議電子及“空穴”的定義如下：若費米面 $\epsilon(p) = \zeta$ 所含體積裏的能量比 ζ 小(有效質量 $m^* > 0$)，則代表電子，這是我們所熟知的觀念。若費米面所含體積裏的能量比 ζ 大($m^* < 0$)，那就代表“空穴”。注意，(14)式是用了(8)式得來，所以(14)只是對於封閉面上的封閉曲綫而言才有意義。

下面我想對 Лифшиц 學派如何計算 ψ_i 的方法作一個極簡短的介紹。對於封閉曲綫來說，一個電子的位置也可以用角度 φ (從 0 到 2π) 來表示。(於是我們便可以直接運用傅里葉方法。)

$$\varphi = \frac{t}{T} = 2\pi \frac{\int dl/v_{\perp}}{\oint dl/v_{\perp}}, \quad (15)$$

於是(11)式便可以寫成下面一個矢量方程：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \gamma \hat{W} \psi &= \gamma f'_0 v, \\ \gamma &= (2\pi T/T_0) \gamma_0. \end{aligned} \quad (16)$$

利用傅里葉展開

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{v}(\epsilon, p_z, \varphi) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_k(\epsilon, p_z) e^{ik\varphi}, \\ \psi(\epsilon, p_z, \varphi) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k(\epsilon, p_z) e^{ik\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

代入(16)，

$$ik\psi_k + \gamma \hat{W}_{kk} \psi_k = \gamma f'_0(\epsilon) V_k. \quad (18)$$

由上面方程(18)可解出 ψ_k ，然後代入(13)式而計算出電導率張量。

參 考 文 獻

- [1] Лифшиц, И. М., Авбель, М. Я. и Каганов, М. И., ЖЭТФ, 31 (1956), 63.

討 論

謝希德 張先生所講的 Лифшиц 的理論對研究金屬的德·哈斯-萬·阿爾芬效應很有貢獻,所得到的量子化條件 $\oint p_y dp_x = (n+r)k \frac{2\pi eH}{c}$ 與 Onsager¹⁾ 得到的結果相同,由測量磁化率振盪的週期,便可求出 $\oint p_y dp_x$.

高先生所談到的封閉的等能面有效質量可以寫成 $m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial E}$, 在 p 型鎢和硅的迴旋共振實驗中,事實上即採用了這種形式的有效質量. 如空穴與磁場垂直的速度為 v , 與磁場及速度垂直的動量是 p , 則 $dp = \frac{c}{v} vH dt$, $\frac{2\pi}{\omega} = \oint \frac{cdp}{eHv}$, $v = \hbar \frac{\partial E}{\partial k_\rho}$, k_ρ 為矢量 \mathbf{k} 在與 \mathbf{H} 垂直方向的分量, 由 $\omega = \frac{eH}{m^*c}$, $dp = k_\rho d\varphi$, 得到 $m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \oint \frac{k_\rho d\varphi}{\frac{\partial E}{\partial k_\rho}}$, 如 $\frac{\partial E}{\partial k_\rho}$ 與 φ 無關, 則上式與 $m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial E}$ 同. 由研究德·哈斯-萬·阿爾芬效

應中,磁化率振盪振幅隨溫度的變化可以決定 m^* .

莫 黨 聽了張宗燧先生和高聯佩先生介紹 И. М. Лифшиц 等人關於金屬中磁場電現象的理論,我想是否可以用一個粗淺的方式來對這個理論作一些比較形象化的解釋.

Лифшиц 等明確地指出:要區分兩種在金屬中電子狀態的能量-準動量 ($\epsilon-\mathbf{p}$) 關係,也就是說,要區分兩種在準動量空間中的等能面. 圖 1 是用二維的示意圖來表示 Лифшиц 等所區分的兩種情況:圖中 A 代表閉合的等能面, B 代表非閉合的等能面.

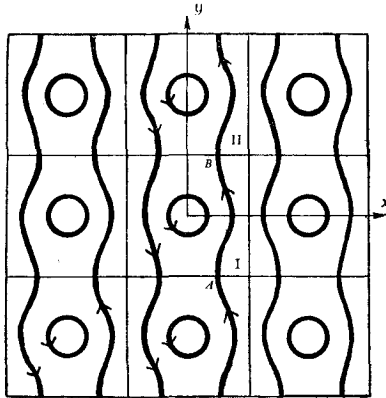


圖 1

這兩種情況的根本區別究竟何在? 據剛才張宗燧先生和高聯佩先生的介紹,在閉合等能面的情況中,有外磁場作用時,電子的準動量 \mathbf{p} 沿着閉合的曲線(垂直外磁場的平面和等能面的交綫)運動,不斷地按一定週期回復到原來的位置,因此可以很明確地用週期 T 來定義有效質量 m^* . 而在非閉合等能面中,則 \mathbf{p} 會沿着非閉合的曲線跑到無窮遠處,不再回來,因此就不能如此定義 m^* 了. \mathbf{p} 的兩種運動方式,在圖 1 中用箭頭來表示. 但是,我這樣想,考慮到晶格的週期性, $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ 也必有週期性,所以,區域 I 和區域 II 在物理上是相同的, A 點和 B 點在物理上是相同的, \mathbf{p} 從 A 點跑到 B 點就等於又

回到 A 點,此後不斷重復地在 AB 綫上運動. 這樣看來,在非閉合等能面的情況中,電子在 \mathbf{p} 空間的運動像閉合等能面的情況那樣,仍具有週期性,不需要想像它跑到無窮遠去. 依照我剛才想到的意見,覺得是否可以從對稱性來看兩種情況的本質區別. 由於前面提到 $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ 的週期性,只需要看下面的等能面(圖 2, 圖 3). 畫有陰影綫的區域表示在費米面附近的電子. 費米面以內的能級幾乎全為電子所佔. 由圖 2 及圖 3 可以看到,電子分佈狀態是上下、左右都對稱的.

1) Onsager, L., *Phil. Mag.* **34**, 1006 (1952).

在垂直圖面向上的磁場 H_z 的作用下，電子在 \mathbf{p} 空間只是沿着等能面（就是圖中的曲線）運動。運動的方向用箭頭表示。至於兩種不同情況下相應的電子在平常空間的運動情況，則示意地用圖 4 來表

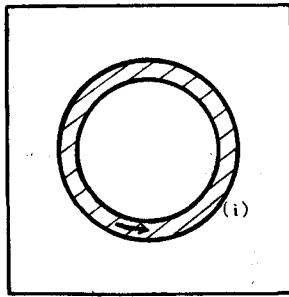


圖 2

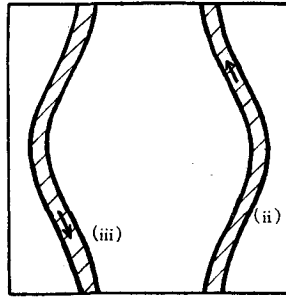


圖 3

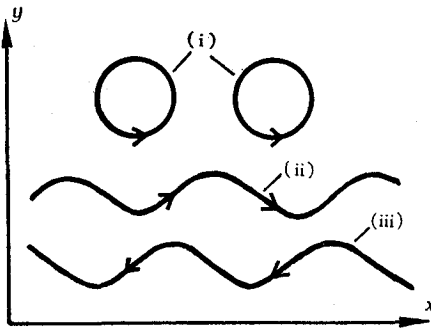


圖 4

示。很清楚，閉合等能面的電子，如 (i)，老在打圈子。然而非閉合等能面的某些電子，如 (ii)，經過一段時間後，已朝着 x 方向運動了一段路程；但是，同時必有另一些電子，如 (iii)，則向反方向 ($-x$ 方向) 運動，因此就所有的電子看，仍沒有定向的運動。這裏，假設磁場足夠大，在電子兩次碰撞的時間間隔中，在圖 2 中電子沿等能面轉了多次，在圖 3 中也重復跑了多次。

除磁場外，再加上電場的作用，情況就不同了。我們按下述的方式來看。用圖 5 及圖 6 表示單獨加電場的情況。在電場作用下，整個電子分佈在 \mathbf{p} 空間沿電場方向運動，同時由於有碰撞發生，使之回復到原來的分佈，因此達到如圖 5、圖 6 那樣的穩定分佈。這分佈是不對稱的，除去對稱部分，剩下的在

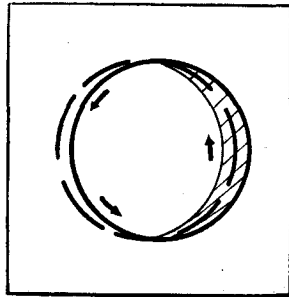


圖 5

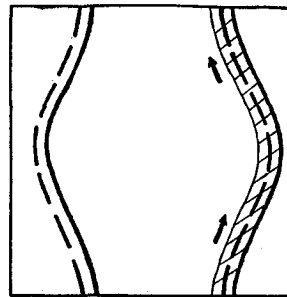


圖 6

圖中以陰影區表示，這就相當於某些電子在平常空間的運動不能為其他電子反方向的運動所抵消。這樣一來，在兩種不同類型等能面的情況下，都有電子的定向運動，換言之，有電流發生。

當同時還有磁場存在時，磁場的作用如前面說過那樣，使電子沿等能面運動。在閉合等能面的情況，我們以球面等能面來想像，就是在 xy 平面上以原點為圓心轉動電子所佔據的區域。於是，強磁場對由於電場作用而產生的電子定向運動的影響，相當於把圖 5 的陰影區環繞原點轉圈子。這樣一來，電子

定向運動不再老沿着一定方向,而是各方向均有,總的看,也就幾乎抵消了。猶如風扇轉起來,看去像一圓盤。從電子在實際空間的運動看,這時處在圖 5 陰影區的個別電子,如圖 4(i) 那樣,不是平均地朝某方向前進。由此就得出結論¹⁾,在費米面為閉合等能面的金屬中,當磁場 H_z 增至很大時,垂直磁場方向的電流(即電導)趨於零。

在非閉合等能面的情況下,磁場對電導的影響完全不同。磁場的作用使電子在 \mathbf{p} 空間中沿等能面跑,從圖 6 可以看到,在陰影區的電子雖然跑來跑去,但仍停留在陰影區附近(按圖中的箭頭方向運動)。因此,由陰影區所代表的、電子在電場作用下產生的有向運動仍然存在,這樣,電流不消失,情況大致與無磁場時相似。具體看在實際空間的情形,在圖 4 中,像 (ii) 運動的電子將比像 (iii) 運動的電子多一些,結果就不能抵消掉有向運動。由此可以看出²⁾,在費米面為非閉合等能面的金屬中,當磁場 H_z 增至很大時, x 方向的電導不會趨於零而保持有限值,實際上是趨於一穩定值。

總之,概括以上的分析,兩種等能面的區別在於對稱性不同:在垂直外磁場的平面中,閉合等能面上的電子能夠沿等能面連續地跑到相對於 \mathbf{p} 空間原點的對稱位置;而在非閉合面上的電子則不能,因為,雖然對稱於 \mathbf{p} 空間原點的兩點具有相同能量,但分別屬於等能面與垂直外磁場平面交綫的不同支,故不能沿交綫連續過渡。從結果看,費米面為不同類型等能面的電子在電場和強磁場作用下的平均速度是不同的;閉合時差不多等於零,非閉合時在某些方向則不然。

上面是企圖用比較直觀和簡單化的方式,從物理方面來說明一下 Лифшиц 等的理論;自然,描述實際情形的嚴格理論比這複雜得多,牽涉到的問題也多得多。Лифшиц 等除了強調地提出要區分兩類等能面這一極有意義的概念外,還在不對等能面和碰撞機構的具體形式作任何假定下,進一步解了玻爾茲曼方程,計算了電導率。他們的結果,與實驗結果比較,應可以給出有關電子能帶結構的知識,可是目前這方面還沒有具體的工作。目前關於電子在電磁場作用下各種遷移現象的唯象理論已有相當多的發展,同時實驗技術的一些新發展愈來愈多地獲得有用的數據,把這兩方面聯系起來,研究金屬中電子的具體狀態是很重要的,我了解 Лифшиц 等的工作正是屬於這類性質的。我沒有看過 Лифшиц 學派的工作的全文,只見到過他們一些工作的摘要,知道他們除了在這次會議上已提到過的理論外,還有許多有關固體和金屬理論方面的工作,例如,在金屬中磁場電現象方面,量子效應、費米能級變化等等的影響;又如,金屬中電子的迴旋共振,某些磁共振現象、趨膚效應以及別的有關金屬中電磁場的宏觀理論、晶格理論等等。

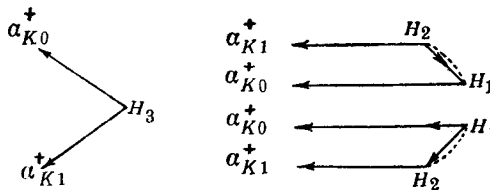
程開甲¹⁾關於 Боголюбов 的超導電理論,作一個補充。Боголюбов 對於電子的產生和消滅算符 $\alpha_{k,1/2}^{\pm}$, $\alpha_{k',-1/2}$ 等作一個接觸變換:

$$\alpha_{k_0} = u_k \alpha_{k,1/2} - v_k \alpha_{k,-1/2}^{\pm},$$

$$\alpha_{k_1} = u_k \alpha_{-k,-1/2} + v_k \alpha_{k,1/2}^{\pm},$$

$$u_k^2 + v_k^2 = 1.$$

這種變換相當於把電子的波函數作一個綫性組合,使能級有所調整。但是,這樣的變換使新的哈密頓式中包含有 $\alpha_{k_0} \alpha_{k_1}$, 或 $\alpha_{k_1}^{\pm} \alpha_{k_0}^{\pm}$ 的項。這些項使得第一次微擾便發散。Боголюбов 用一個條件決定 $u_k v_k$, 使得下列圖形的躍遷矩陣元素之和為零,



1) 會後註:在發言時,沒有明確地指出這點,後來黃昆先生把我的這點意思補充說了一下。

2) 同上。

可以有兩套不同的 (u_k, v_k) 。一套是老的費米分佈 $(u_k, v_k) = (1, 0)$ ，一套是新的分佈

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \{1 + F(k)\}, \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \{1 - F(k)\},$$

$F(k)$ 為 k 的函數，並且當 $k \rightarrow k_0$ (費米球面上 k 值)，

$$|F(k)| \rightarrow 1.$$

新的分佈的總能量(單位體積中)比老的費米分佈要低，

$$\Delta E = -\frac{1}{2} (\hbar\omega)^2 N(\epsilon) e^{-2/\rho},$$

$$\rho = N(\epsilon) g^2,$$

其中 g 為耦合常數， $N(\epsilon)$ 為在費米面上的能級密度， ω 為離子振動的頻率。這種分佈稱為基態，描述超導態。

Боголюбов 又證明，從基態上激發出一個電子所需的能量至少為

$$\Delta \epsilon = \hbar\omega e^{-1/\rho},$$

激發態和基態間能量是不連續的，這正是超導態可以產生永久電流的條件。

黃 昆 昨天會和彭桓武同志對於會議的內容交換了些意見；我們有些共同的想法，想借這機會，就我們所談的，說一點感想。

這次會上的報告的特點是較多地偏重於一些理論工作很集中的主題。因此，就需要我們注意，這遠遠沒有把固體理論的全面概括進去。

同時，有兩方面似乎是值得強調的。一方面今天人家在國際上所搞的東西未必一定就是我們目前最需要做的工作。同時對一些比較老一點的領域，如果還沒有掌握，可能根據發展我們工作的需要，就得很重視地迅速地把它掌握起來。另一方面，我們覺得，目前開展這方面的理論工作的一個最主要的任務是配合實驗工作而滿足其進一步發展的需要。

我想，我們如何看待所報告各項問題的意義，特別需要考慮到以上關於結合我們實際的兩個方面。

謝希德 我想介紹一下利用自旋共振吸收研究固體中電子束縛態的一些工作；主要是關於 F 心。 F 心是由於在鹼金屬的鹵化物中有負離子空位而產生的，相當於一個正電中心，可以束縛電子在其周圍運動。對於 F 心的電子自旋共振吸收的研究得到下面的結果：

1. g 因子的移動 一個自旋為 S 的自由粒子的能級，在磁場中將分裂成 $(2S + 1)$ 個能級，能級之間的距離是 $g\mu_B H$ ， g 即為熟知的 g 因子，如在靜磁場外再施一垂直的頻率為 ω 的高頻磁場，如果頻率滿足下列條件：

$$\hbar\omega = g\mu_B H \quad (1)$$

(μ_B 是波爾磁子)，則粒子可以由高頻場吸收能量，在能級間產生躍遷。這樣由對於高頻功率吸收的測量可以決定 g 。束縛在負離子空位附近運動的只有一個電子，自旋是 $1/2$ ， g 應該是 2.0023，但對於 KCl 中 F 心自旋共振吸收的研究，得到 $g = 1.995 \pm 0.001$ ， $\Delta g = -0.007$ ，即所謂的 g 因子移動。一般認為這個移動可能是由於自旋與軌道耦合所引起的，因此可以推斷 F 心的波函數一定含有 $l \neq 0$ 的成分。為了解釋 g 因子的移動會對 F 心的波函數作了下面的幾種假設：

(i) 除了負離子空位作為正電中心的勢場以外，還有周圍的 6 個 K^+ 離子勢場的影響，因此勢場不是球面對稱的，基態不一定只包括 $l = 0$ 的函數。如設勢場有立方對稱，基態可以含有 $l = 0$ 及 $l = 4$ 的成分。計算指出：要很好的解釋 Δg ，必須設 $l = 4$ 的成分相當大¹⁾。

(ii) 另一種看法是將波函數寫成 6 個以 K^+ 離子為中心的鹼金屬原子波函數的綫性組合。由於負離子空位的存在所引起的極化，使得基態的波函數含有 s 成分及 p 成分。如果設 p 函數的成分與 s 函數相差不多，則可以解釋實驗所得到的 Δg 。

1) Kohn, A. H., Kittel, C., *Phys. Rev.* **89** (1953), 315.

2. 自旋共振吸收綫的寬度 對 KCl 的實驗指出吸收綫的寬度約為 $\Delta H = 56$ 奧, 而且綫的形狀是高斯曲綫型. 如果認為綫寬是由 F 心電子間的自旋-自旋相互作用而引起的, 對於 F 心濃度為 10^{18} /厘米³ 的晶體, 綫寬只能為 $\Delta H \sim 10^{-2}$ 奧, 而且綫的形狀應與洛倫茲吸收曲綫同. 這說明不可能用電子間的自旋相互作用來解釋 F 心自旋共振吸收綫的寬度. 現在認為¹⁾ 這是由於電子和 6 個 K^+ 離子的核磁矩超精細相互作用的疊加而引起的, 如果設想 F 心電子有相當一段時間是在 K^+ 附近運動, K 核的磁矩是 $I = 3/2$, 可能有 4 種方位, 計入 6 個 K^+ 離子, 核磁矩的方位可能有 $4^6 = 4096$ 種方式, 這些方式的分佈是高斯形的, 因此吸收綫也是高斯型. 超精細相互作用的能量可以寫為

$$H = \sum_i a_i \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i, \quad (2)$$

$$a_i = -\frac{16}{3} \pi \frac{\mu_B \mu_i}{I_i} |\psi_i|^2. \quad (3)$$

式中 μ_i 是鉀核磁子, ψ_i 為電子波函數在 K^+ 離子的原子核處之值. 由此可以看出, 從解釋自旋共振吸收綫寬度的角度看來, 上述的關於波函數的模型(ii)比較適宜. 天然的 KCl 中約有 93.08 是 K^{39} , 6.91% 是 K^{41} , $\mu_i^{41}/\mu_i^{39} = 0.55$, 因此 $K^{41}Cl$ 的自旋共振吸收綫應有較小的寬度, 理論計算得到 $\Delta H \sim 31$ 奧, 而實驗得出 $K^{41}Cl$ 的 $\Delta H \sim 36 \pm 2$ 奧. 為了解釋這個結果, 假設電子不只在 K^+ 附近運動, 而且可以在次鄰 Cl^- 附近運動, 也和 Cl^- 核磁矩產生超精細相互作用. 由上面的實驗結果可以說明 F 心的電子並不是局限在負離子空位附近, 而是有較大的運動範圍.

由上面可以看出, 電子自旋共振吸收的實驗有助於了解 F 心的波函數. 此外對於 n 型硅中的電子自旋共振吸收的研究²⁾ 也求出了由於電子與施主雜質的核磁矩的超精細相互作用的能級裂距, 由研究吸收譜綫的距離, 可以得到電子波函數在施主雜質原子核位置的值.

張承修 謝先生說電子可能與次近鄰的 Cl^- 的磁矩作用, 是否可能是和近鄰的四極矩之間的相互作用?

謝希德 和四極矩作用的問題沒有考慮過.

高聯佩 Боголюбов 的理論解決了些什麼問題? 例如 Feynman 在最近一期 Reviews of Modern Physics (April, 1957) 上提到過的一些問題: 超導體的比熱問題; 超導元素不是簡單元素, 大多是週期中間幾行的元素; 超導合金和其成分的關係, 有些合金是超導的, 儘管組成這合金的成分元素都不是超導的; 超導與晶體結構的關係, 有些元素在某種結構下可以變成超導, 但在另一種結構下便不能變成超導; ……這些問題在 Боголюбов 的理論中有沒有提到?

程開甲 Боголюбов 的結論是凡導體都可以有超導, 與結構無關.

高聯佩 按他的理論, 什麼是基本的? 完全抗磁性, 還是永久電流?

程開甲 永久電流. 關於磁共振提個問題: 許多問題中是否可以用核磁矩共振求出 $|\psi|^2$?

謝希德 ψ 是用電子和核磁矩的相互作用來研究的.

芑清泉 我同意剛才黃昆先生所談的意見, 對固體理論應作綜合性的研究, 必須採用多種多樣的方法. 這次報告會是偏重於電子論方面, 但這並不是說只有電子論最重要, 我們以後開展工作, 不應當只局限於這方面.

過去研究固體理論的方法, 一般有兩種極端, 一種是只注意電子而忽略了原子, 另一種是只注意原子而忽略了電子. 我們不妨探索建立一種既考慮電子又考慮原子的比較全面的方法, 我認為引用和推廣量子化學的方法來研究固體是值得重視的. 從原子結構、分子結構、化學鍵的方法來研究固體, 可以使原子、分子的問題和固體理論相聯繫起來, 使電子論和原子論結合起來. 在這方向上已有人下過一些工夫, 例如 L. Pauling 的金屬鍵理論, 不過這個理論還處於定性階段, 是否可以探索發展下去, 值得

1) Kip, A. F., Kittel, C., Levy, R. A., Partis, A. M., *Phys. Rev.* **91** (1953), 1066.

2) J. M. Luttinger, W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 883, (1957).

大家研究。此外，P. Löwdin 的工作也值得注意。

李蔭遠 基本上同意芑清泉先生提出的以原子為單位的研究也有考慮到的必要。舉一個例子： BaTiO_3 型的鐵電性的問題直接從電子論出發不容易下手，除了很成功的熱力學處理之外，有一些粗淺的理論是以化學鍵來考慮的。又如反鐵磁體和鐵滲氧磁體，如果只從超交換作用來研究，那麼對其中一些現象例如晶體結構的對稱改變就很難解釋。固體理論不妨分成三方面：(1)以電子為單位的理論；(2)以原子為單位的理論；(3)塑性的理論(看作連續介質)，這次會的討論對象是內容比較最豐富最有系統性的一方面，但並不就是全部。

程開甲 我同意黃昆先生的意見，不應集中在場論方面，作為一個方法是可以的。固體研究雜質、空穴、位錯的理論對工業聯系多一些，對研究工作也應主要着重在原子雜質、空穴、位錯方面；在固體電子論方面工作不應當化力太多，單純做這方面是不對的。

黃 昆 據我瞭解，學部希望以後能夠比較經常地舉行這樣小型的學術討論會，主要是為了增進對於一些專門領域的瞭解。為了能夠比較深入，每一次的主題範圍不可能很寬；這一次的主題並不是固體理論，而是固體的電子論。