

Содержание

I. Кинетическое уравнение	4
I.1. Состояния в кристалле	4
I.2. Волновые пакеты частиц	5
I.3. Функция распределения	6
I.4. Формулировка кинетического уравнения	7
I.5. Интеграл неупругих столкновений	8
II. Времена релаксации	11
II.1. Рассеяние на примесях	11
II.2. Точечные дефекты и экранированные примеси	13
II.3. Кулоновские примеси	13
II.4. Системы с линейным спектром	14
III. Проводимость электронного газа	16
III.1. Проводимость на конечной частоте: вывод из кин. уравнения	18
III.2. Проводимость на конечной частоте: вывод из кв.-мех. рассмотрения непрямых оптических переходов	19
IV. Проводимость узких каналов	21
IV.1. Баллистический режим	21
IV.2. Гидродинамический режим	23
V. Квадратичные по электрическому полю вклады в функцию распределения	26
V.1. Разогрев электронов	26
V.2. Выстраивание электронных импульсов	28
VI. Фотогальванический эффект	30
VI.1. Симметрийный анализ	30
VI.2. Расчёт из кинетического уравнения	31
VII. Циркулярный фототок	35
VIII. Эффект фотонного увлечения	38

VIII.1. Феноменология	38
VIII.2. Расчёт qE^2 -вклада в фототок увлечения	39
VIII.3. Расчёт EB -вклада в фототок увлечения	41
VIII.4. Расчёт $T_{3,4}$ -вкладов	41
 IX. Флуктуации	 43
IX.1. Флуктуации функции распределения	44
IX.2. Коррелятор в электронном газе в равновесии	46
IX.3. Равновесный спектр шума электрического тока в электронном газе	47
 X. Вывод кинетического уравнения	 49
 XI. Слабая локализация	 53
XI.1. Оценка поправки к проводимости	55
XI.2. Сбой фазы и аномальная температурная зависимость проводимости	56
XI.3. Магнитосопротивление в классически слабых полях	57
XI.4. Влияние спиновой релаксации	58
 XII. Проводимость при сильной локализации	 59
XII.1. Прыжковая проводимость	59
XII.2. Прыжки на ближайшие центры	60
XII.3. Прыжки с переменной длиной. Закон Мотта	61
XII.4. Кулоновская щель. Закон Эфроса-Шкловского	62
 XIII. Проводимость квантовых точечных контактов	 64
XIII.1. Проводимость идеальной квантовой проволоки	64
XIII.2. Диссипация энергии	65
XIII.3. Формула Ландауэра	65
XIII.4. Диффузионный предел	66
 XIV. Эффект Шубникова-де Гааза	 68
XIV.1. Плотность состояний в трёхмерных системах	68
XIV.2. Проводимость в трёхмерных системах	71
XIV.3. Эффект в двумерных системах	72

XV. Квантовый эффект Холла	74
XV.1. Бесконечный образец	74
XV.2. Конечный образец	76
XV.3. Аргумент Лафлина и топология	78
XV.4. ДКЭХ	79

I. Кинетическое уравнение

I.1. Состояния в кристалле

В идеальном кристалле есть зоны разрешённых и запрещённых энергий. Электронные состояния в них описываются волновым вектором \mathbf{k} , который может принимать значения внутри зоны Бриллюэна, а также дискретными квантовыми числами – проекцией спина на выбранную ось, номером долины и т.д. Верхняя из заполненных зон называется зоной проводимости. Полупроводники, в которых кинетические явления сейчас изучаются наиболее интенсивно, характерны тем, что электроны заполняют часть зоны Бриллюэна вблизи минимума зоны проводимости. Это значит, что характерные значения k далеки от границ зоны Бриллюэна $\pm\pi/a_0$, где a_0 – постоянная решётки, а характерные энергии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ много меньше, чем величины разрешённых и запрещённых зон:

$$ka_0 \ll 1, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} \ll E_g. \quad (1)$$

Волновая функция электрона представляет собой произведение

$$\Psi_{c\mathbf{k}} = u_{c\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}, \quad (2)$$

где $u_{c\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – блоховская амплитуда, периодическая с периодом a_0 , а $\psi_{\mathbf{k}}$ – плавная огибающая, меняющаяся на расстояниях много больших постоянной решётки. Вблизи минимума зоны проводимости идеального кристалла электрон описывается одночастичным гамильтонианом $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$, блоховская амплитуда с хорошей точностью равна u_{c0} , т.е. не зависит от \mathbf{k} , а огибающая удовлетворяет уравнению

$$\mathcal{H}_0 \psi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}. \quad (3)$$

Например, вблизи минимума зоны проводимости, если не принимать во внимание другие степени свободы, $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$ – квадратичная изотропная функция волнового вектора, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / (2m)$, где m – эффективная масса, и огибающая – плоская волна:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (4)$$

Объём кристалла здесь и далее принимается за единицу.

Границные условия Борна-Кармана:

$$\psi_{\mathbf{k}}(x + L_x, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y + L_y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y, z + L_z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y, z). \quad (5)$$

Из цикличности этих условий следует, что $k_i L_i$ ($i = x, y, z$) должно быть целым числом, умноженным на 2π . Поэтому k_i оказываются дискретными переменными, квантованными с шагом $2\pi/L_i$. Но в макроскопическом образце объёмом $V = L_x L_y L_z$ этот шаг очень мал, и при суммировании по \mathbf{k} можно переходить к интегрированию:

$$\sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{k} \frac{V}{(2\pi)^3} \Phi(\mathbf{k}). \quad (6)$$

I.2. Волновые пакеты частиц

Описывать электроны стационарными блоховскими решениями уравнения Шрёдингера $\psi_{\mathbf{k}}$ бесполезно для изучения кинетических явлений, так как они соответствуют определенному значению квазимпульса \mathbf{k} , в то время как координата остается совершенно неопределенной. Этот недостаток можно исправить, сформировав волновой пакет из блоховских состояний. Притом желательно всё-таки наиболее точно определить квазимпульс \mathbf{k} . Для этого возьмем сумму блоховских волн по малому интервалу $\Delta\mathbf{k}$ (сокращение этого интервала ограничено точностью определения координат). Верхний допустимый предел для Δk – это, очевидно сам квазимпульс k .

Для того чтобы найти скорость электрона, описываемого волновым пакетом, рассмотрим интеграл

$$J = \int_{\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}} d\mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - i\varepsilon_{\mathbf{k}'} t/\hbar} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где интегрирование идёт по окрестности $\Delta\mathbf{k}$ вокруг какого-то определённого импульса \mathbf{k} . При $\Delta k \ll k$ этот интеграл приближённо равен

$$J = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\varepsilon_{\mathbf{k}} t/\hbar} \int_{\Delta\mathbf{k}} d\delta\mathbf{k} e^{i\delta\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - (\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}/\partial\mathbf{k})t/\hbar]}. \quad (8)$$

Этот интеграл имеет порядок $(\Delta k)^3$ только если $|\mathbf{r} - (\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}/\partial\mathbf{k})t/\hbar| \ll 1$. Значит,

$$\mathbf{r} \approx \frac{1}{\hbar} \frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}} t, \quad (9)$$

то есть волновой пакет перемещается со скоростью

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}}. \quad (10)$$

Во внешнем поле \mathbf{F} электрон получает от поля в единицу времени энергию $\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}$. Но она должна быть равна скорости изменения энергии электрона

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \hbar \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (11)$$

Отсюда получаем

$$\frac{d(\hbar\mathbf{k})}{dt} = \mathbf{F}. \quad (12)$$

I.3. Функция распределения

В идеальном кристалле в отсутствие внешних полей электрон с волновым вектором \mathbf{k} согласно (12) летит бесконечно долго, сохраняя его направление и величину. В реальных системах есть отклонения от идеальности: дефекты кристаллической решётки, примеси, а также колебания кристалла – фононы. Все эти причины приводят к изменению волнового вектора электрона, летящего в реальном кристалле. На языке квантовой механики электрон под действием этих факторов переходит из состояния с волновым вектором \mathbf{k} в состояние с каким-то другим волновым вектором \mathbf{k}' , то есть *рассеивается*. Также может происходить изменение спинового состояния электрона или – в многодолинных системах – номера его долины.

За всеми электронами следить невозможно, поэтому вводится *функция распределения* $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ – число электронов с волновым вектором \mathbf{k} , находящихся в момент времени t в окрестности точки \mathbf{r} . По функции распределения вычисляются макроскопические величины, измеряемые в эксперименте. Например, концентрация электронов и плотность электрического тока

$$N(\mathbf{r}, t) = \sum_{\nu\mathbf{k}} f_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = e \sum_{\nu\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t). \quad (13)$$

Здесь ν – дискретный индекс, нумерующий спиновые состояния, а также, если есть, долины. В случае простой зоны в однодолинном полупроводнике функция распределения не зависит от спина, и суммирование по ν даёт двойку. Скорость при заданном законе дисперсии определяется выражением (10).

По определению, функция распределения имеет смысл только для описания классических свойств, так как в квантовой области одновременное задание квазимпульса и координаты противоречит принципу неопределённости. С учётом рассеяния электрон имеет конечную длину свободного пробега l – среднюю длину между рассеивателями, которую электроны пролетают по прямой. Это – типичный пространственный масштаб, на котором протекают кинетические явления. Поэтому неопределённость координаты Δr должна быть меньше, чем l . А поскольку неопределённость импульса

должна быть меньше самого импульса: $\Delta k \ll k$, из принципа неопределенности имеем:
 $k \gg \Delta k \sim 1/\Delta r \gg 1/l$, то есть

$$kl \gg 1. \quad (14)$$

Это – условие квазиклассичности, при выполнении которого можно пользоваться функцией распределения в фазовом пространстве (\mathbf{k}, \mathbf{r}) .

I.4. Формулировка кинетического уравнения

Из-за рассеяния электронов их функция распределения меняется во времени. Такие изменения можно описать следующим уравнением, называемым кинетическим:

$$\frac{df}{dt} = \text{St}[f], \quad (15)$$

где $\text{St}[f]$ – так называемый интеграл столкновений.

Левая часть может быть переписана в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}. \quad (16)$$

Здесь согласно (10), (12) $\hbar d\mathbf{k}/dt = \mathbf{F}$ – внешней силе, а $d\mathbf{r}/dt = \mathbf{v}_k$ – скорости волнового пакета.

Интеграл столкновений зависит от типа рассеяния. Важным случаем является *упругое* рассеяние, который далее и рассмотрим. Тогда правая часть кинетического уравнения является разностью прихода из других состояний \mathbf{k}' и ухода в них из \mathbf{k} при рассеянии. Вероятности таких процессов обозначим $W_{kk'}$ и $W_{k'k}$ (слева – конечный, справа – начальный квазимпульс в соответствии с обозначением W_{fi}). Поэтому

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_k \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) f_k(\mathbf{r}, t) = \sum_{k'} (W_{kk'} f_{k'} - W_{k'k} f_k). \quad (17)$$

Рассеяние может быть описано вкладом в потенциальную энергию $V(\mathbf{r})$. Для плавного потенциала рассеяния можно использовать уравнения движения волновых пакетов для нахождения $W_{k'k}$ чисто классическими методами. Однако, в наиболее реалистичных ситуациях рассеивающий потенциал не плавный, а представляет собой набор резких пиков от случайно расположенных примесей. Это затрудняет квазиклассическое описание, но квантовая механика даёт простое решение.

При квазиклассическом описании мы стремимся оперировать только классическими понятиями, используя однако некоторые правила, связывающие их с квантово-механическими величинами для достижения количественно строгих результатов. Одно из таких правил, называемое в силу своей важности “золотым”, определяет чисто классическую величину – вероятность рассеяния – через квантово-механические величины:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (18)$$

Здесь $T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ – амплитуда рассеяния:

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{p}} \frac{V_{\mathbf{k}'\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i0} + \dots, \quad (19)$$

где $V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ – матричный элемент рассеивающего потенциала $V(\mathbf{r})$, рассчитанный на невозмущённых функциях (в данном случае – плоских волнах).

Часто достаточно оставить только первое слагаемое – такой подход называется борновским приближением. Видно, что в борновском приближении справедлив принцип детального равновесия:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} . \quad (20)$$

I.5. Интеграл неупругих столкновений

В отсутствие внешних полей и пространственных градиентов решением кинетического уравнения при упругом рассеянии является любая функция энергии $f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$. В равновесии устанавливается распределение Ферми-Дираха $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, но происходит это за счёт процессов, идущих с изменением энергии электронов – рассеяния на фонах или межэлектронного взаимодействия.

Интеграл столкновений – правая часть кинетического уравнения – равен разности приходного и уходного слагаемых. Заметим, что при упругом рассеянии он линеен по функции распределения. А в случае рассеяния не на примесях, а на фонах он имеет следующий вид:

$$\text{St}[f_{\mathbf{k}}] = - \sum_{\mathbf{k}'} [W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'}) - W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}})], \quad (21)$$

где вероятность рассеяния

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, \pm, \nu} |M(\mathbf{q}, \nu)|^2 \left(N_{\nu\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta_{\mathbf{q}, \pm(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\Omega_{\nu\mathbf{q}}). \quad (22)$$

Здесь верхний знак описывает процесс с испусканием, а нижний – с поглощением фонона, $N_{\nu q}$ и $\Omega_{\nu q}$ – числа заполнения и частота фононов ветви ν с волновым вектором \mathbf{q} , а $M(\mathbf{q}, \nu)$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия. Для деформационного взаимодействия с акустическими фононами $|M_{DA}|^2 \sim 1/q$, а для пьезо-оптического (фрёлиховского) взаимодействия $|M_{PO}|^2 \sim q$. В случае рассеяния 2D электронов на 3D фононах закон сохранения квазимпульса выполняется только для компонент в плоскости: $\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, а матричный элемент

$$M_{2D}(\mathbf{q}) = M_{3D}(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{\infty} dz \varphi^2(z) e^{iq_z z}, \quad (23)$$

$\varphi(z)$ – волновая функция размерного квантования.

В отличие от примесей, фононы могут обмениваться с электронами не только импульсами, но и энергией. Интеграл электрон-фононного рассеяния унуляется, если $N_{\nu q}$ – распределение Бозе-Эйнштейна, а $f_{\mathbf{k}}$ – функция Ферми-Дирака с одинаковыми температурами:

$$N = \frac{1}{e^{\hbar\Omega/T} - 1}, \quad f_0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/T} + 1}, \quad (24)$$

так как при этом справедливы равенства

$$(N + 1) = e^{\hbar\Omega/T} N, \quad 1 - f_{\mathbf{k}} = e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/T} f_{\mathbf{k}}, \quad (25)$$

откуда следует, например для испускания, когда $\varepsilon_k = \varepsilon_{k'} + \hbar\Omega$:

$$(N + 1)f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'}) = Nf_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}}). \quad (26)$$

Отсюда получается, что изменение функции распределения в процессе с испусканием фонона $\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}$ полностью компенсируется обратным процессом рассеяния $\mathbf{k} \leftarrow \mathbf{k}'$ с поглощением фонона.

Межэлектронное взаимодействие быстро устанавливает равновесное распределение $f_{\mathbf{k}} = f_0$ с некой температурой T_e . Однако электронная система сама по себе не может изменить свою полную энергию. Поэтому на более поздних временах за счёт взаимодействия с фононами происходит релаксация электронной температуры к температуре решётки T . Схематически иерархию времён релаксации можно изобразить так:

$$f_{\mathbf{k}} \xrightarrow{t \sim \tau_{el}} f(\varepsilon_k) \xrightarrow{t \sim \tau_{ee}} f_0(T_e \neq T) \xrightarrow{t \sim \tau_{e-ph}} f_0(T). \quad (27)$$

Здесь τ_{el} – время упругого рассеяния (на примесях, дефектах), τ_{ee} – время межэлектронных столкновений, и τ_{e-ph} – время релаксации на фононах. При низкой температуре $\tau_{el} \ll \tau_{ee} \ll \tau_{e-ph}$.

II. Времена релаксации

II.1. Рассеяние на примесях

Вернёмся к упругому рассеянию на примесях.

Матричный элемент рассеяния из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' равен фурье-компоненте $V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$, определяемой как обычно:

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (28)$$

Важный пример упругого рассеяния – рассеяние на идентичных произвольно расположенных примесях. В этом случае

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad V_{\mathbf{q}} = V_0(q) \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (29)$$

где \mathbf{R}_i – координаты примесей, а $V_0(q)$ – фурье-компоненты потенциала одной примеси, считающейся изотропной.

В каждом конкретном образце имеется свой беспорядок, описываемый своим потенциалом V . Нас будут интересовать свойства образца, усреднённые по реализациям этого потенциала. В данном случае мы усредним по положениям примесей. Такое среднее от величины, определяющей вероятность рассеяния, есть

$$\langle |V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = |V_0(q)|^2 \left\langle \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} \right\rangle_{\mathbf{R}_{i,j}}. \quad (30)$$

При $i \neq j$ в сумме будут быстро осциллирующие вклады, которые уйдут при усреднении по расположению примесей. Поэтому ненулевой ответ будет только от слагаемых с $i = j$, то есть от матричных элементов рассеяния на одной и той же примеси. Он пропорционален количеству (концентрации) примесей N_i и описывает независимое рассеяние всеми примесями. В результате $\langle |V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = N_i |V_0(q)|^2$ и

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (31)$$

В случае примесей интеграл столкновений имеет согласно (17), (31) следующий вид

$$\text{St}[f_{\mathbf{k}}] = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} N_i |V_0(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) (f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}}). \quad (32)$$

В случае изотропного закона дисперсии ε_k величина волнового вектора при рассеянии сохраняется: $k' = k$, а меняется его направление. Рассмотрим однородный в пространстве 2D случай. Тогда $\mathbf{k} = (k, \varphi_{\mathbf{k}})$, и величина переданного при рассеянии системе примесей волнового вектора есть

$$q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| = k\sqrt{2(1 - \cos \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})} = 2k \left| \sin \left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} \right) \right|, \quad \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \varphi_{\mathbf{k}'} - \varphi_{\mathbf{k}}. \quad (33)$$

Важным свойством интеграла столкновений является то, что он зависит от разности углов до и после рассеяния. Отсюда следует, что он не смешивает различные фурье-гармоники функции распределения. Действительно, разложим

$$f(k, \varphi_{\mathbf{k}}) = \bar{f}_k + \sum_{n \neq 0} f_n(k) e^{in\varphi_{\mathbf{k}}}. \quad (34)$$

Изотропная часть функции распределения \bar{f}_k при упругом рассеянии не релаксирует:

$$\text{St}[\bar{f}_k] = 0. \quad (35)$$

Анизотропные поправки релаксируют за характерные времена:

$$\text{St}[f_n(k) e^{in\varphi_{\mathbf{k}}}] = -\frac{f_n(k) e^{in\varphi_{\mathbf{k}}}}{\tau_n}, \quad (36)$$

$$\frac{1}{\tau_n} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (1 - \cos n\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} N_i |V_0(k, \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) (1 - \cos n\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) . \quad (37)$$

Если фурье-образ потенциала рассеяния зависит от углов, то времена релаксации гармоник функции распределения различны и отличаются от уходного времени

$$\frac{1}{\tau_0} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (38)$$

В дальнейшем нам встретятся времена τ_0 , τ_1 и τ_2 , а время релаксации третьей гармоники τ_3 встречается в задачах спинtronики.

Отметим, что в трехмерном случае вместо фурье-гармоник разложение производится по полиномам Лежандра.

Для 2D случая с изотропным законом дисперсии в выражении для темпов релаксации можно провести интегрирование по k' :

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \langle |V_0(k, \theta)|^2 (1 - \cos n\theta) \rangle_{\theta} g_{2D}. \quad (39)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по углу рассеяния, а g_{2D} – двумерная плотность состояний (на 1 спин):

$$g_{2D} = \sum_{\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) = \int_0^\infty dk' \frac{k'}{2\pi} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) = \frac{k}{2\pi\hbar v_k}. \quad (40)$$

При параболическом законе дисперсии $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ плотность состояний не зависит от энергии:

$$g_{2D} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}. \quad (41)$$

Отсюда следует, что зависимость времён релаксации от энергии электрона обусловлена только матричным элементом потенциала рассеяния.

Вычислим времена релаксации для актуальных механизмов рассеяния двумерных электронов.

II.2. Точечные дефекты и экранированные примеси

Если радиус действия потенциала примеси d много меньше длины волны электрона, $kd \ll 1$, то он является короткодействующим:

$$V_0(\boldsymbol{\rho}) = V_0 \delta(\boldsymbol{\rho}) \quad (42)$$

(размерность V_0 есть энергия $\times L^2$). Фурье-образ не зависит от переданного импульса, а, значит, ни от энергии электрона, ни от угла рассеяния: $V_0(k, \theta) = V_0$. Поэтому времена релаксации всех гармоник равны уходному:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0|^2 g_{2D} \equiv \frac{1}{\tau}. \quad (43)$$

II.3. Кулоновские примеси

Если экранирование неэффективно, то потенциал примеси является кулоновским:

$$V_0(\boldsymbol{\rho}) = \frac{e^2}{\epsilon\rho}, \quad (44)$$

где ϵ – низкочастотная диэлектрическая проницаемость. Фурье образ в 2D случае:

$$V_0(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} = \frac{\pi e^2}{\epsilon k \sin(\theta/2)}, \quad |V_0(k, \theta)|^2 = \left(\frac{\pi e^2}{\epsilon} \right)^2 \frac{\hbar^2}{m\varepsilon_k(1 - \cos\theta)}. \quad (45)$$

Отсюда следует, что уходное время τ_0 расходится, а времена релаксации гармоник линейно зависят от энергии:

$$\frac{1}{\tau_1(\varepsilon_k)} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \left(\frac{\pi e^2 \hbar}{\epsilon} \right)^2 \frac{g_{2D}}{m\varepsilon_k}, \quad \frac{1}{\tau_2(\varepsilon_k)} = \frac{1}{\tau_1(\varepsilon_k)} \left\langle \frac{1 - \cos 2\theta}{1 - \cos \theta} \right\rangle_\theta = \frac{2}{\tau_1(\varepsilon_k)}, \quad \frac{1}{\tau_3(\varepsilon_k)} = \frac{3}{\tau_1(\varepsilon_k)}. \quad (46)$$

II.4. Системы с линейным спектром

В графене и на поверхности 3D топологических изоляторов носителями заряда являются дираковские фермионы. Они описываются 2D гамильтонианом Вейля:

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{k}) = \hbar v_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} = \hbar v_0 \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_0 k \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi_k} \\ e^{i\varphi_k} & 0 \end{pmatrix}, \quad (47)$$

где v_0 – параметр материала. Матрицы Паули могут обозначать истинно спиновые операторы как в топологических изоляторах или псевдоспиновые – как в графене. Энергетический спектр в зонах с положительными и отрицательными энергиями изотропен и линеен: $\varepsilon_c = -\varepsilon_v = \varepsilon_k = \hbar v_0 k$, а волновые функции двухкомпонентны. В зоне проводимости:

$$\Psi_{c\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \chi_{c\mathbf{k}}, \quad \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) \chi_{c\mathbf{k}} = \varepsilon_k \chi_{c\mathbf{k}}, \quad \chi_{c\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix}. \quad (48)$$

В результате матричный элемент рассеяния отличается от фурье-образа рассеивающего потенциала. Например, для зоны проводимости:

$$\langle \mathbf{k}' | V_0(\boldsymbol{\rho}) | \mathbf{k} \rangle = V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \langle \chi_{c\mathbf{k}'} | \chi_{c\mathbf{k}} \rangle = V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{1 + e^{-i\theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}}{2}, \quad (49)$$

где $\theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}'} - \varphi_{\mathbf{k}}$. Дополнительный множитель, равный перекрытию блоховских амплитуд, которые существенно зависят от волнового вектора, приводит к важному явлению: запрету рассеяния назад. Действительно, при $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ направления связаны соотношением $\varphi_{\mathbf{k}'} = \pi + \varphi_{\mathbf{k}}$, в результате $\theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \pi$, и $\langle -\mathbf{k} | V_0(\boldsymbol{\rho}) | \mathbf{k} \rangle = 0$ для любого потенциала рассеяния.

Времена релаксации отличаются от случая параболической дисперсии. Во-первых, плотность состояний линейно зависит от энергии:

$$g(\varepsilon_k) = \frac{k}{2\pi\hbar v_0} = \frac{\varepsilon_k}{2\pi\hbar^2 v_0^2}. \quad (50)$$

Во-вторых, дополнительный множитель $\langle \chi_{c\mathbf{k}'} | \chi_{c\mathbf{k}} \rangle$ также модифицирует зависимость времён релаксации от энергии. Квадрат матричного элемента:

$$|\langle \mathbf{k}' | V_0(\rho) | \mathbf{k} \rangle|^2 = |V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \frac{1 + \cos \theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{2}. \quad (51)$$

Отсюда получаем, что даже для короткодействующего рассеяния, когда V_0 – постоянная, времена релаксации обратно пропорциональны энергии электрона:

$$\frac{1}{\tau_0(\varepsilon_k)} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0|^2 g(\varepsilon_k) \times \frac{1}{2} \propto \varepsilon_k, \quad (52)$$

$$\frac{1}{\tau_1(\varepsilon_k)} = \frac{1}{\tau_0(\varepsilon_k)} \langle (1 + \cos \theta)(1 - \cos \theta) \rangle_\theta = \frac{1}{2\tau_0(\varepsilon_k)}, \quad (53)$$

$$\frac{1}{\tau_{n \geq 2}(\varepsilon_k)} = \frac{1}{\tau_0(\varepsilon_k)} \langle (1 + \cos \theta)(1 - \cos n\theta) \rangle_\theta = \frac{1}{\tau_0(\varepsilon_k)}. \quad (54)$$

То есть 1-я гармоника функции распределения релаксирует на короткодействующих примесях в два раза дольше, чем все остальные гармоники.

Рассеяние на кулоновских примесях: уходное время расходится, а времена релаксации гармоник прямо пропорциональны энергии электрона:

$$\frac{1}{\tau_n(\varepsilon_k)} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \left(\frac{\pi e^2}{\epsilon} \right)^2 \frac{g(\varepsilon_k)}{k^2} \left\langle \frac{1 - \cos n\theta}{\sin^2(\theta/2)} \frac{1 + \cos \theta}{2} \right\rangle_\theta \propto \frac{1}{\varepsilon_k}. \quad (55)$$

Вычисление даёт:

$$\frac{1}{\tau_1(\varepsilon_k)} = \frac{N_i}{\hbar \varepsilon_k} \left(\frac{\pi e^2}{\epsilon} \right)^2, \quad \tau_2 = \tau_1/3, \quad \tau_3 = \tau_1/5. \quad (56)$$

III. Проводимость электронного газа

Рассчитаем проводимость 2D системы с помощью кинетического уравнения. Будем считать электрическое поле \mathbf{E} слабым, однородным и постоянным во времени. Доминирующим будем считать упругое рассеяние на примесях. Кинетическое уравнение имеет в этих условиях следующий вид:

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (57)$$

Здесь введён импульс электронов $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Уравнение решается итерациями по \mathbf{E} . В отсутствие поля решением является равновесное распределение Ферми-Дирака $f_0(\varepsilon_p)$. Действительно, рассеяние на примесях не меняет изотропного распределения: $\text{St}_{\text{imp}}[f_0] = 0$. Для нахождения поправки $f_{\mathbf{p}}^{(1)}$, линейной по полю, подставляем в левую часть (в полевое слагаемое) f_0 :

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p f'_0(\varepsilon_p) = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}^{(1)}]. \quad (58)$$

Левая часть содержит только первую фурье-гармонику угла $\varphi_{\mathbf{p}}$, поэтому и поправка $f_{\mathbf{p}}^{(1)}$ имеет такую же угловую зависимость. Это означает, что

$$\text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}^{(1)}] = -\frac{f_{\mathbf{p}}^{(1)}}{\tau_1}. \quad (59)$$

Отсюда получаем:

$$f_{\mathbf{p}}^{(1)} = e\tau_1(\varepsilon_p)\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p[-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (60)$$

Плотность электрического тока:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\nu p} \mathbf{v}_p e\tau_1(\varepsilon_p) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p [-f'_0(\varepsilon_p)] = \mathbf{E} e^2 \sum_{\nu p} \frac{v_p^2}{2} \tau_1(\varepsilon_p) [-f'_0(\varepsilon_p)] \equiv \sigma \mathbf{E}. \quad (61)$$

Здесь использована изотропия двумерной системы. При низкой температуре $T \ll \varepsilon_F$ электронный газ вырожден, и

$$-f'_0(\varepsilon_p) \approx \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_F). \quad (62)$$

Отсюда получаем соотношение Эйнштейна:

$$\sigma = e^2 g_{\text{tot}}(\varepsilon_F) D(\varepsilon_F), \quad (63)$$

где введён коэффициент диффузии $D(\varepsilon_p) = v_p^2 \tau_1/2$, а полная плотность состояний $g_{\text{tot}}(\varepsilon_p) = \sum_\nu g(\varepsilon_p)$.

Проводимость также можно связать с концентрацией:

$$N = \sum_{\nu p} f_0(\varepsilon_p). \quad (64)$$

Из того, что f_0 зависит от разности $\varepsilon_p - \varepsilon_F$ следует, что $-f'_0(\varepsilon_p) = \partial f_0 / \partial \varepsilon_F$. Поэтому:

$$\sum_{\nu p} [-f'_0(\varepsilon_p)] = \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F}, \quad (65)$$

и проводимость

$$\sigma = e^2 \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F} \frac{v_F^2 \tau_{\text{tr}}}{2}. \quad (66)$$

Здесь мы ввели транспортное время – время релаксации 1-й гармоники функции распределения при энергии Ферми: $\tau_{\text{tr}} = \tau_1(\varepsilon_F)$.

При параболической дисперсии $\varepsilon_F = mv_F^2/2$ концентрация $N = g_{2D} \varepsilon_F$ линейна по ε_F .

Поэтому

$$\sigma = \frac{Ne^2 \tau_{\text{tr}}}{m}. \quad (67)$$

При линейной дисперсии $\varepsilon_F = v_0 p_F$

$$N = \sum_\nu \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon_p) d\varepsilon_p \propto \varepsilon_F^2, \quad (68)$$

и проводимость

$$\sigma = \frac{Ne^2 \tau_{\text{tr}} v_0^2}{\varepsilon_F}. \quad (69)$$

Видно, что в обоих случаях проводимость зависит от энергии Ферми как $\sigma \propto \varepsilon_F \tau_{\text{tr}}(\varepsilon_F)$.

При произвольной температуре верна формула Друдэ (66), где в случае параболической дисперсии транспортное время есть

$$\tau_{\text{tr}} = \frac{\langle \varepsilon_p \tau_1(\varepsilon_p) \rangle}{\langle \varepsilon_p \rangle}, \quad \langle \Phi(\varepsilon_p) \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon_p \Phi(\varepsilon_p) [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (70)$$

Видно, что проводимость зависит от времени рассеяния τ_{tr} нечётным образом. Это согласуется с требованиями, налагаемыми инверсией времени: электрический ток – дисипативная величина, а вызывающее его электрическое поле – нет. Поэтому проводимость σ , которая их связывает, должна содержать нечётное количество дисипативных величин, таких как времена релаксации.

Видно, что проводимость определяется временем релаксации 1-й гармоники функции распределения. Влияют ли на проводимость межчастичные столкновения? Они сохраняют полный импульс электронов. В системах с параболической дисперсией это автоматически означает, что они не влияют и на полную скорость электронов, то есть на ток. В случае же линейной дисперсии сохранение импульса не означает сохранения скорости, запрет нарушается, и межчастичные столкновения вносят вклад в проводимость. Это важно при не слишком низких но и не слишком высоких температурах.

III.1. Проводимость на конечной частоте: вывод из кин. уравнения

Рассмотрим переменное электрическое поле

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} + c.c. \quad (71)$$

Ясно, что такое поле вызывает электрический ток, также осциллирующий на частоте ω . Поскольку проводимость – функция линейного отклика, оба слагаемых в $\mathbf{E}(t)$ будут вызывать независимые токи. Поэтому мы рассмотрим только первое слагаемое и будем искать поправку к равновесному распределению в виде

$$f_{\mathbf{p}}(t) = f_{\mathbf{p}}(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (72)$$

Тогда кинетическое уравнение примет вид

$$-i\omega f_{\mathbf{p}}(\omega) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f'_0(\varepsilon_p) = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}(\omega)] = -\frac{f_{\mathbf{p}}(\omega)}{\tau_1}. \quad (73)$$

Это уравнение сводится к случаю нулевой частоты, если произвести замену

$$\frac{1}{\tau_1} \rightarrow \frac{1}{\tau_1} - i\omega \equiv \frac{1}{\tau_{1\omega}}, \quad \tau_{1\omega} = \frac{\tau_1}{1 - i\omega\tau_1}. \quad (74)$$

Отсюда сразу следует, что

$$\sigma(\omega) = e^2 \sum_{\nu\mathbf{p}} \frac{v_p^2}{2} \frac{\tau_1(\varepsilon_p)}{1 - i\omega\tau_1(\varepsilon_p)} [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (75)$$

В случае вырожденного электронного газа

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma(0)}{1 - i\omega\tau_{\text{tr}}}. \quad (76)$$

Энергия, поступающая в единицу времени в электронную систему,

$$Q = \langle \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \rangle_t = 2|\mathbf{E}_0|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)], \quad (77)$$

где мы использовали свойство $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$. Отсюда следует, что поглощаемая мощность линейна по концентрации электронов N и имеет частотную зависимость

$$Q \propto \frac{\tau_{\text{tr}}}{1 + (\omega\tau_{\text{tr}})^2}. \quad (78)$$

На высоких частотах $Q \propto 1/(\omega^2\tau_{\text{tr}})$, то есть поглощение пропорционально вероятности рассеяния импульса электронов. Это значит, что если нет рассеяния, то нет и поглощения энергии.

III.2. Проводимость на конечной частоте: вывод из кв.-мех. рассмотрения непрямых оптических переходов

Рассмотрим ту же задачу при высоких частотах $\omega \sim \varepsilon_F/\hbar \gg 1/\tau_{\text{tr}}$. При этом применим подход поглощения света свободными носителями. Мы исследуем, как стыкуются эти два метода – кинетическое уравнение и оптика.

Поглощение на свободных носителях является внутризонным: начальное и конечное состояния лежат в зоне проводимости. Но, поскольку оптические переходы прямые, при взаимодействии электрона со светом невозможно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса. Поэтому переход идёт в два этапа, и поглощение тем больше, чем сильнее рассеяние. Виртуальное (промежуточное) состояние совпадает либо с начальным, либо с конечным, так как энергия фотона много меньше энергетических расстояний до других зон.

Взаимодействие свободных носителей с фотонами описывается возмущением

$$\mathcal{H}_{e-phot}(\mathbf{p}) = -\frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}_p = -\frac{e}{i\omega} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p, \quad (79)$$

где использовано $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c = (i\omega/c)\mathbf{A}$.

Второй порядок теории возмущений:

$$M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{V_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}\mathbf{p}}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_v} + \frac{U_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{p}}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_v}. \quad (80)$$

В нашем случае $V_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} = V(\mathbf{p}' - \mathbf{k})$ – матричный элемент рассеяния, $U_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} = \mathcal{H}_{e-phot}(\mathbf{p}')\delta_{\mathbf{p}'\mathbf{k}}$ – матричный элемент взаимодействия со светом. Энергия системы в исходном состоянии $\mathcal{E}_i = \varepsilon_p + \hbar\omega$. В первом слагаемом, когда сначала поглощается фотон, в промежуточном (виртуальном) состоянии $\mathcal{E}_v = \varepsilon_p$, а во втором слагаемом, когда сначала происходит рассеяние, энергия промежуточного состояния системы $\mathcal{E}_v = \varepsilon_{p'} + \hbar\omega$. Поэтому

$$M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = -\frac{e}{i\omega} V(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \mathbf{E}_0 \cdot \left(\frac{\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}} + \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}}{\hbar\omega} \right). \quad (81)$$

Вероятность поглощения фотона:

$$W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega) [f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_{p'})]. \quad (82)$$

С учётом закона сохранения энергии знаменатели в $M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ отличаются знаком. Поэтому

$$W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 |\mathbf{E}_0|^2 \frac{(v_{\mathbf{p},x} - v_{\mathbf{p}',x})^2}{(\hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega) [f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_p + \hbar\omega)]. \quad (83)$$

Углы отсчитываются от направления \mathbf{E}_0 .

Поглощаемая мощность

$$Q = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \nu} \hbar\omega W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}. \quad (84)$$

Подстановка выражения для вероятности и усреднения по беспорядку даёт:

$$Q = |\mathbf{E}_0|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \nu} \frac{f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_p + \hbar\omega)}{\hbar\omega} (v_{\mathbf{p},x} - v_{\mathbf{p}',x})^2 \frac{2\pi}{\hbar} \mathcal{K}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega). \quad (85)$$

Рассмотрим случай энергий фотона много меньших средней энергии электронов: $\hbar\omega \ll \varepsilon_p$. Тогда $(v_{\mathbf{p},x} - v_{\mathbf{p}',x})^2 \approx v_p^2 (\cos^2 \varphi_{\mathbf{p}} + \cos^2 \varphi_{\mathbf{p}'} - 2 \cos \varphi_{\mathbf{p}} \cos \varphi_{\mathbf{p}'})$,

$$Q = |\mathbf{E}_0|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \nu} v_p^2 [-f'_0(\varepsilon_p)] \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 (1 - \cos \theta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p). \quad (86)$$

сумма по \mathbf{p}' даст обратное время рассеяния $1/\tau_1$:

$$Q = |\mathbf{E}_0|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \nu} \frac{v_p^2}{\tau_1(\varepsilon_p)} [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (87)$$

Сравнивая с выражением для проводимости (75), окончательно получаем

$$Q = 2|\mathbf{E}_0|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)], \quad (88)$$

где последнее равенство написано с учётом того, что $\omega \gg 1/\tau_1$.

Мы показали, что кинетическое уравнение при высоких частотах даёт тот же ответ, что и квантово-механическое рассмотрение непрямых оптических переходов.

IV. Проводимость узких каналов

Рассмотрим теперь конечную двумерную систему, имеющую ширину w (канал). Проводимость канала существенно зависит от соотношения между его шириной w и длиной свободного пробега $l = v\tau_1$, где v – характерная скорость электронов. Ясно, что при $w \gg l$ можно считать систему бесконечной и пользоваться для проводимости формулой Друдэ $\sigma = Ne^2l/(mv_F)$. В обратном пределе $w \ll l$ движение электронов происходит баллистически, и от одной стенки канала до другой они летят по прямым. Такой режим осуществляется только в узких и чистых каналах, но в последнее время такие системы стали технологически доступны.

IV.1. Баллистический режим

Рассчитаем проводимость баллистического канала. Пусть он ограничен в горизонтальном направлении, так что $-w/2 \leq x \leq w/2$, и бесконечен в вертикальном, куда и направлено постоянное электрическое поле E_y . В отсутствие рассеяния кинетическое уравнение для функции распределения $f_{\mathbf{p}}(x)$ имеет следующий вид:

$$v_x \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial x} + eE_y \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial p_y} = 0. \quad (89)$$

В линейном по полю режиме имеем $f_{\mathbf{p}}(x) = f_0(\varepsilon_p) + \delta f_{\mathbf{p}}(x)$. Для поправки получается дифференциальное уравнение 1-го порядка:

$$v_x \frac{\partial \delta f_{\mathbf{p}}}{\partial x} = -eE_y v_y f'_0. \quad (90)$$

Его решение имеет вид

$$\delta f_{\mathbf{p}}(x) = -xeE_y \frac{v_y}{v_x} f'_0 + C(\mathbf{p}), \quad (91)$$

где функция $C(\mathbf{p})$ находится из граничных условий на стенках канала.

Будем предполагать полностью диффузное отражение от стенок. В этом случае на стенках, то есть при $x = \pm w/2$, отлетающие частицы не должны иметь анизотропной части функции распределения. Это значит, что при $x = w/2$ функция распределения частиц с $v_x < 0$ должна обращаться в ноль:

$$C(v_x < 0) = \frac{w}{2} eE_y \frac{v_y}{v_x} f'_0. \quad (92)$$

Также в ноль обращается функция распределения при $x = -w/2$ для частиц с $v_x > 0$. Поэтому получаем при всех x

$$\delta f_{\mathbf{p}}(x) = \left[x + \frac{w}{2} \operatorname{sgn}(v_x) \right] e E_y \frac{v_y}{v_x} (-f'_0). \quad (93)$$

В единицу времени электроны получают от поля импульс $N_1 e E_y$, где одномерная концентрация есть $N_1 = N w$. Они отдают этот импульс стенкам, на которых происходит диффузное рассеяние. Рассчитаем изменение импульса всех электронов. Оно происходит только у стенок, то есть меняется импульс только у электронов с $x = \pm w/2$:

$$\dot{P}_y = \sum_{\nu, \mathbf{p}, \pm} p_y \delta f_{\mathbf{p}}(\pm w/2) v_x = 2 \sum_{\nu, \mathbf{p}} p_y \delta f_{\mathbf{p}}(w/2) v_x, \quad (94)$$

где учтено, что обе стенки получают одинаковый импульс. Множитель v_x – это количество электронов, налетающих на стенку в единицу времени. Вычисление даёт:

$$\dot{P}_y = 2 \sum_{\nu, \mathbf{p}} p_y v_x w \Theta(v_x) e E_y \frac{v_y}{v_x} (-f'_0) = 2 e E_y w \sum_{\nu, \mathbf{p}} p_y v_y \Theta(v_x) (-f'_0) = 2 e E_y w \sum_{\nu, \mathbf{p}} \frac{p^v}{4} (-f'_0), \quad (95)$$

где $1/4$ получилась из-за усреднения по полукругу $v_x > 0$. Ясно, что вклад у правой стенки $x = w/2$ от электронов с $v_x < 0$ отсутствует, так как эти отлетающие электроны при полностью диффузном рассеянии импульс не уносят. Окончательно получаем

$$\dot{P}_y = e E_y w N = e E_y N_1, \quad (96)$$

как и должно быть.

Теперь рассчитаем проводимость канала. Плотность электрического тока вычисляется как обычно

$$j_y(x) = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} \delta f_{\mathbf{p}}(x) v_y = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} \left[x + \frac{w}{2} \operatorname{sgn}(v_x) \right] e E_y \frac{v_y^2}{v_x} (-f'_0). \quad (97)$$

Зависящий от x вклад уходит, поскольку он нечётен по v_x , и для проводимости получаем

$$\sigma_{yy} = e^2 \frac{w}{2} v_F \frac{N}{\epsilon_F} \left\langle \frac{\sin^2 \varphi}{|\cos \varphi|} \right\rangle_{\varphi}. \quad (98)$$

Угловой интеграл логарифмически расходится при $\varphi = \pi/2$. Эти углы соответствуют электронам, летящим параллельно стенкам. В данной модели они не испытывают соударений и неограниченно набирают энергию от поля. Это могут ограничить только процессы рассеяния. С их учётом получаем, что интеграл обрежется на величине

$w/l \ll 1$, где l – длина свободного пробега по отношению к рассеянию на примесях. Вычисление даёт:

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi}{|\cos \varphi|} &= 2 \int_0^\pi \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi}{|\cos \varphi|} \approx \frac{1}{\pi} \left(\int_0^{\pi/2-w/l} + \int_{\pi/2+w/l}^{\pi} \right) \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|} = \frac{1}{\pi} 2 \int_0^{\pi/2-w/l} \frac{d\varphi}{\cos \varphi} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{w/l}^{\pi/2} \frac{dz}{\sin z} \approx \frac{2}{\pi} \int_{w/l}^{\pi/2} \frac{dz}{z} = \frac{2}{\pi} \ln \left(\frac{l}{w} \right). \quad (99) \end{aligned}$$

Окончательно получаем

$$\sigma_{yy} = \frac{Ne^2 w/v_F}{m} \frac{2}{\pi} \ln \left(\frac{l}{w} \right). \quad (100)$$

Если переписать этот ответ в виде формулы Друдэ, то эффективная длина свободного пробега $l_{\text{eff}} \approx w \ln(l/w)$ окажется намного больше, чем ширина канала w .

IV.2. Гидродинамический режим

В чистых и не слишком узких каналах при промежуточных температурах (30...70 К) становятся важны межэлектронные столкновения. А именно, может реализоваться ситуация, когда соответствующая длина $l_{ee} = v\tau_{ee}$ станет меньше ширины канала:

$$l_{ee} \ll w \ll l. \quad (101)$$

При таких условиях сильно взаимодействующие друг с другом электроны ведут себя скорее не как газ, а как жидкость.

Кинетическое уравнение имеет вид

$$v_x \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial x} + eE_y v_y f'_0 = St_{ee}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (102)$$

Межэлектронные столкновения, если они эффективны, делают все времена релаксации короткими, кроме времени τ_1 (мы рассматриваем систему с параболическим спектром). Поэтому в фурье-разложении поправки к функции распределения

$$f_{\mathbf{p}}(x) = f_1(x) \sin \varphi_{\mathbf{p}} + \sum_{n \geq 2} f_n(x) \sin n\varphi_{\mathbf{p}} \quad (103)$$

более высокие гармоники с $n = 2, 3 \dots$ много меньше первой. Здесь учтена симметрия системы по отношению к отражению $x \rightarrow -x$, запрещающая вклады $\propto \cos n\varphi_{\mathbf{p}}$. Однако,

уравнение для f_1 оказывается связанным с уравнением для f_2 . Действительно, так как $v_x f_1 \sin \varphi_p = \frac{v}{2} f_1 \sin 2\varphi_p$, получаем:

$$\frac{v}{2} \frac{\partial f_1}{\partial x} = -\frac{f_2}{\tau_2}. \quad (104)$$

Здесь время $\tau_2 = \tau_{ee}$ обусловлено межчастичными взаимодействием.

Уравнение для f_2 будет содержать 1-ю и 3-ю фурье-гармоники, поскольку $v_x f_2 \sin 2\varphi_p = \frac{v}{2} f_2 (\sin \varphi_p + \sin 3\varphi_p)$. Уравнение для 1-й гармоники имеет вид:

$$\frac{v}{2} \frac{\partial f_2}{\partial x} + eE_y v f'_0 = 0. \quad (105)$$

Из двух последних уравнений получаем одно уравнение второго порядка на f_1 :

$$\eta \frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2} = eE_y v f'_0, \quad \eta = \frac{v^2 \tau_2}{4}. \quad (106)$$

Коэффициент η называется вязкостью. Границное условие к этому уравнению есть $f_1(x = \pm w/2) = 0$. Отсюда получаем:

$$f_p = \sin \varphi_p \frac{eE_y v (-f'_0)}{2\eta} \left[\left(\frac{w}{2} \right)^2 - x^2 \right]. \quad (107)$$

Плотность электрического тока в гидродинамической модели:

$$j_y(x) = e \sum_{\nu, p} v_y f_p = \frac{e^2 E_y}{2\eta} \left[\left(\frac{w}{2} \right)^2 - x^2 \right] \sum_{\nu, p} v^2 \sin^2 \varphi_p (-f'_0) = \frac{e^2 E_y N}{2\eta m} \left[\left(\frac{w}{2} \right)^2 - x^2 \right]. \quad (108)$$

Такой параболический профиль тока характерен для гидродинамики, описывающей течение жидкостей, и отличается от постоянного по координате тока, получаемого без учёта взаимодействия.

Полная плотность тока в канале:

$$\bar{j}_y = \frac{1}{w} \int_{-w/2}^{w/2} dx j_y(x) = \frac{2}{w} \int_0^{w/2} dx j_y(x) = \frac{2}{w} \frac{Ne^2 E_y}{2\eta m} \int_0^{w/2} dx \left[\left(\frac{w}{2} \right)^2 - x^2 \right] = \frac{Ne^2 E_y w^2}{12\eta m}. \quad (109)$$

Получилась проводимость

$$\sigma_{yy} = \frac{Ne^2 w / v_F}{m} \frac{w}{3v_F \tau_2} \gg \frac{Ne^2 w / v_F}{m}. \quad (110)$$

Неравенство имеет место, поскольку длина $v_F \tau_2 \sim l_{ee} \ll w$.

Видно, что увеличение проводимости по отношению к $Ne^2 w / (mv_F)$ не логарифмическое, а более сильное: эффективная длина свободного пробега $l_{eff} \sim w^2 / l_{ee} \gg w$.

Проводимость в гидродинамическом режиме больше, чем в баллистическом. Это следует из того, что электроны теряют импульс только на стенках. И если в баллистическом режиме большинство из них достигает стенок за время $\sim w/v_F$, то в гидродинамическом режиме они с большей вероятностью рассеиваются на другом электроне и не достигнут стенки. В результате передача импульса стенкам происходит реже, и проводимость возрастает.

Также отличаются и зависимости проводимости от ширины канала. Это позволяет определять по транспортным исследованиям силу взаимодействия электронов.

Если реализуется гидродинамический режим, то есть межчастичные столкновения самые частые, то интеграл столкновений унуляет следующее распределение электронов:

$$f_{\text{HD}}(\mathbf{p}, x) = \left\{ \exp \left[\frac{m[\mathbf{v} - \mathbf{V}(x)]^2/2 - \mu(x)}{T(x)} \right] + 1 \right\}^{-1}, \quad (111)$$

в котором $\mu(x)$, $T(x)$ и $\mathbf{V}(x)$ – произвольные функции координаты. Это легко понять, если вспомнить, что взаимодействие между частицами не меняет числа частиц, полной энергии и полного импульса (а, значит, и средней скорости).

V. Квадратичные по электрическому полю вклады в функцию распределения

Мы получили, что в электрическом поле электронное распределение приобретает линейную по полю поправку, которая определяет электрический ток. А какое устанавливается распределение электронов при учёте нелинейных по полю вкладов?

Для их нахождения подставим в полевое слагаемое кинетического уравнения

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[f_p] \quad (112)$$

линейную по \mathbf{E} поправку $f_1 = e\tau_{1\omega}(-f'_0)\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p$. Квадратичные по E поправки делятся на два типа: осциллирующие на удвоенной частоте $e^{\pm 2i\omega t}$ и независящие от времени. Осциллирующие поправки могут дать сигнал второй оптической гармоники. Мы изучим постоянный во времени вклад. Он описывается произведениями типа $E_\alpha E_\beta^*$ (далее мы опускаем индекс “0”, обозначающий комплексную амплитуду поля):

$$-e^2 E_\alpha E_\beta^* \frac{\partial}{\partial p_\beta} (\tau_{1\omega} f'_0 v_\alpha) + c.c. = \text{St}[\delta f_p]. \quad (113)$$

Производная вычисляется так:

$$\frac{\partial}{\partial p_\beta} (\tau_{1\omega} f'_0 v_\alpha) = (\tau_{1\omega} f'_0)' v_\alpha v_\beta + \tau_{1\omega} f'_0 \frac{\partial v_\alpha}{\partial p_\beta}. \quad (114)$$

Рассмотрим систему с изотропной параболической дисперсией $\varepsilon_p = p^2/(2m)$. Тогда полевое слагаемое есть

$$-e^2 E_\alpha E_\beta^* \left\{ (\tau_{1\omega} f'_0)' \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v_p^2}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m} [\varepsilon_p (\tau_{1\omega} f'_0)' + \tau_{1\omega} f'_0] \right\} + c.c. \quad (115)$$

Рассмотрим два вклада в фигурных скобках по отдельности.

V.1. Разогрев электронов

Второе слагаемое в (115) изотропно и может быть компактно записано в виде полной производной по энергии:

$$-\frac{e^2}{m} |E|^2 (\varepsilon_p \tau_{1\omega} f'_0)' + c.c. \quad (116)$$

Эта часть генерирует изотропную поправку к функции распределения $\bar{f}_2 \propto |E|^2$, которая не релаксирует при упругих столкновениях с примесями. Она релаксирует за время

τ_{ee} , которое много длиннее, чем τ_{tr} . Поэтому в интеграле столкновений нужно учесть межчастичные процессы:

$$-\frac{e^2}{m}|E|^2(\varepsilon_p\tau_{1\omega}f'_0)' + c.c. = \text{St}_{ee}[f_0 + \bar{f}_2]. \quad (117)$$

Написав явно интеграл электрон-электронных столкновений для функции $f_0 + \bar{f}_2$ и линеаризовав его по \bar{f}_2 , можно решить это уравнение и найти \bar{f}_2 на временах $t \leq \tau_{ee}$. Но на временах $t > \tau_{ee}$ установится распределение

$$f_p = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_p - \mu_e}{T_e}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (118)$$

Действительно, такое распределение унуляет интеграл межчастичных столкновений. Однако параметры T_e и μ_e межчастичным взаимодействием не устанавливаются. Они определяются законами сохранения энергии и числа частиц. Внешнее электрическое поле не меняет числа частиц в зоне проводимости (пока мы не рассмотрели межзонные переходы). Тогда связь между химическим потенциалом и температурой даётся постоянством концентрации. При параболической дисперсии:

$$N = \sum_{\nu,p} f_p = \frac{m}{\pi\hbar^2} T_e \ln(e^{\mu_e/T_e} + 1) = g_{\text{tot}}\mu_e + O(e^{-\mu_e/T_e}). \quad (119)$$

Отсюда следует, что $\mu_e = \varepsilon_F$, то есть с ростом температуры энергия Ферми не меняется до тех пор, пока газ остаётся вырожденным.

Поэтому отличие электронного распределения от равновесного состоит только в температуре $T_e \neq T$. Электронную температуру можно найти из баланса энергии. В единицу времени электронный газ в электрическом поле получает энергию $Q = 2|\mathbf{E}_0|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)]$. Эта энергия расходуется на увеличение температуры. Баланс энергии устанавливается за счёт её передачи фононам. Энергия, переданная в единицу времени от электронов фононной системе, есть

$$Q = \sum_{kk'q} [f_k(1 - f_{k'})\hbar\Omega_q W_{k'k}^+(\mathbf{q}) - f_{k'}(1 - f_k)\hbar\Omega_q W_{k'k}^-(\mathbf{q})]. \quad (120)$$

Здесь W^\pm – вероятности испускания и поглощения фонона, суммирование по фононным ветвям подразумевается. Поскольку функция распределения – равновесная функция с температурой $T_e > T$, считая изменение температуры малым имеем

$$f_k \approx f_0(\varepsilon_k) + (T_e - T) \frac{\partial f_0}{\partial T}. \quad (121)$$

Линеаризуя интеграл столкновений с фононами по поправке $f_{\mathbf{k}} - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \propto (T_e - T)$, получаем баланс энергии в следующем виде:

$$2|\mathbf{E}_0|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)] = N \frac{T_e - T}{\tau_T}. \quad (122)$$

Здесь введено время релаксации электронной температуры. В случае вырожденной статистики отсюда получаем

$$T_e - T = 2|\mathbf{E}_0|^2 \tau_T \frac{e^2 \tau_{\text{tr}} / m}{1 + (\omega \tau_{\text{tr}})^2}. \quad (123)$$

Для линейной дисперсии роль массы играет $m = \varepsilon_F / v_0^2$.

Иногда баланс энергии пишут, вводя среднюю энергию одного электрона $\bar{\varepsilon}$ и время релаксации энергии:

$$Q = N \frac{\bar{\varepsilon}(T_e) - \bar{\varepsilon}(T)}{\tau_{\varepsilon}}. \quad (124)$$

При больцмановской статистике $\bar{\varepsilon} = T$, и разницы нет: $\tau_{\varepsilon} = \tau_T$. В вырожденном газе

$$\bar{\varepsilon}(T) = \frac{\varepsilon_F}{2} + \frac{\pi^2}{6} \frac{T^2}{\varepsilon_F}, \quad (125)$$

откуда получаем

$$\frac{1}{\tau_T} = \frac{\pi^2}{3} \frac{T}{\varepsilon_F} \frac{1}{\tau_{\varepsilon}}. \quad (126)$$

При $T \rightarrow 0$ время релаксации температуры τ_T остаётся конечным, а τ_{ε} стремится к нулю.

V.2. Выстраивание электронных импульсов

Электрическое поле во втором порядке приводит и к анизотропным поправкам к функции распределения электронов. Они происходят от первого слагаемого в (115). Оно содержит вторые фурье-гармоники $e^{\pm 2i\varphi_p}$. Поэтому генерируется поправка f_2 , которая релаксирует за время τ_2 . То есть время релаксации определяется упругими процессами и оно обычно короче, чем τ_{ee} .

Для нахождения f_2 удобно разложить билинейную комбинацию амплитуд электрического поля на симметричную и антисимметричную части:

$$E_{\alpha} E_{\beta}^* = \frac{E_{\alpha} E_{\beta}^* + E_{\alpha}^* E_{\beta}}{2} + \frac{E_{\alpha} E_{\beta}^* - E_{\alpha}^* E_{\beta}}{2}. \quad (127)$$

Здесь второе слагаемое отлично от нуля только при эллиптической поляризации электрического поля. После суммирования по $\alpha, \beta = x, y$ оно уходит:

$$-e^2(\tau_1\omega f'_0)' \left[\left(v_x^2 - \frac{v_p^2}{2} \right) |E_x|^2 + \left(v_y^2 - \frac{v_p^2}{2} \right) |E_y|^2 + 2v_x v_y \frac{E_x E_y^* + E_y^* E_x}{2} \right] + c.c. = -\frac{f_2}{\tau_2}. \quad (128)$$

Вводя угловую координату импульса $\varphi_{\mathbf{p}}$, получаем:

$$f_2 = 2\tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_p \left[\cos 2\varphi_{\mathbf{p}} \frac{|E_x|^2 - |E_y|^2}{2} + \sin 2\varphi_{\mathbf{p}} \frac{E_x E_y^* + E_y^* E_x}{2} \right]. \quad (129)$$

Вводя угол α между направлением линейной поляризации и осью x , окончательно получим:

$$f_2 = 2|\mathbf{E}|^2 \tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_p \cos(2\varphi_{\mathbf{p}} - 2\alpha). \quad (130)$$

Видно, что поправка описывает увеличение количества электронов с импульсами по направлению линейной поляризации и уменьшение в перпендикулярном направлении, см. Рис. 1. Такое явление называется *выстраиванием импульсов*.

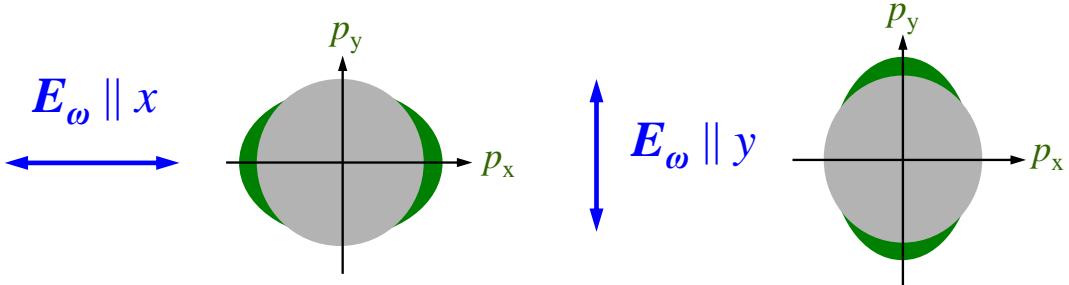


Рис. 1. Выстраивание импульсов под воздействием переменного линейно-поляризованного электрического поля. Распределение носителей, показанное зелёным, “вытягивается” вдоль направления линейной поляризации.

При линейной дисперсии $\varepsilon_p = v_0 p$ скорость электрона с импульсом \mathbf{p} есть

$$\mathbf{v}_{\mathbf{p}} = v_0 \frac{\mathbf{p}}{p} = v_0 \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}}. \quad (131)$$

Видно, что в этом случае $\partial v_x / \partial p_y \neq 0$, что несколько усложняет вычисление степени выстраивания импульсов в графене. Но качественно всё происходит так же, как и при параболической дисперсии.

VI. Фотогальванический эффект

Во втором порядке по полю может возникать постоянный электрический ток. Это явление называется фотогальваническим эффектом. Мы уже близки к тому, чтобы получить фотогальванический ток (фототок) микроскопически, но сначала проведём симметрийный анализ, чтобы установить, какие вклады вообще можно было бы ожидать.

VI.1. Симметрийный анализ

Постоянная во времени плотность электрического тока \mathbf{j} , квадратичная по переменному электрическому полю, связана с билинейными комбинациями амплитуд тензором 3-го ранга:

$$j_\alpha = \chi_{\alpha\beta\gamma} E_\beta E_\gamma^*. \quad (132)$$

Из этого соотношения видно, что фотогальванические эффекты имеют место только в системах без центра пространственной инверсии. Действительно, если инверсия есть, то при её действии левая часть – компонента вектора – меняет знак, а правая часть – произведение двух компонент вектора – сохраняется. Это значит, что в центросимметричных системах $\hat{\chi} = 0$. Если центра инверсии нет, то фототок разрешён.

Рассмотрим для примера двумерные системы симметрии C_{3v} . К ним относятся квантовые ямы, выращенные вдоль кристаллографического направления [111], гетероструктуры на основе GaN, дихалькогениды переходных металлов (MoS_2 , WS_2 , MoSe_2 , WSe_2) и 3D топологические изоляторы, на поверхности которых есть 2D носители с линейной дисперсией. В такой симметрии фототок разрешён в электрическом поле, лежащем в плоскости. В точечной группе C_{3v} есть три представления: одномерные A_1 , A_2 и двумерное E . По ним преобразуются следующие компоненты плотности тока и произведений амплитуд поля:

$$A_1 : |\mathbf{E}|^2 = E_x^2 + E_y^2 \quad A_2 : E_x E_y^* - E_y E_x^*, \quad E : (j_x, j_y), (|E_x|^2 - |E_y|^2, -E_x E_y^* - E_y E_x^*). \quad (133)$$

Здесь одна из трёх плоскостей отражения выбрана как (zx) . Видно, что фототок $j_{x,y}$ возникает только при линейной поляризации. Обе его компоненты преобразуются по одному и тому же представлению, поэтому у тензора $\hat{\chi}$ есть одна линейно-независимая

компоненты, описывающая фототок в такой геометрии (при $E_z = 0$):

$$j_x = \chi(E_x^2 - E_y^2), \quad j_y = -2\chi E_x E_y. \quad (134)$$

Если α – угол между направлением линейной поляризации и осью x , то отсюда получается

$$j_x = \chi|\mathbf{E}|^2 \cos 2\alpha, \quad j_y = -\chi|\mathbf{E}|^2 \sin 2\alpha. \quad (135)$$

Эти равенства можно переписать в едином виде, наглядно отражающем тригональность системы:

$$j_x + ij_y = \chi(E_x - iE_y)^2 = \chi|\mathbf{E}|^2 e^{-2i\alpha}. \quad (136)$$

Действительно, левая и правая части отличаются проекцией момента на ось z на тройку, то есть эквивалентны при операциях симметрии группы C_{3v} .

VI.2. Расчёт из кинетического уравнения

Микроскопически величину χ можно получить из кинетического уравнения:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (137)$$

Казалось бы, нужно найти из него квадратичную по полю поправку $f \propto |\mathbf{E}|^2$, а затем рассчитать плотность тока:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}). \quad (138)$$

Но необходимо где-то учесть отсутствие центра инверсии (C_{3v} симметрию системы), иначе фототок будет нулём. Действительно, на прошлой лекции мы получили квадратичные по полю поправки, но они были чётными по импульсам, и при суммировании дали бы ноль. Единственное место, где может содержаться асимметрия, – это интеграл столкновений.

При выводе интеграла столкновений мы обсуждали, что в борновском приближении вероятность рассеяния удовлетворяет принципу детального равновесия: $W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$. Это не позволяет получить фототок.

Формула, справедливая во всех порядках, имеет вид (18):

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (139)$$

с амплитудой рассеяния (19). Например, в следующем за борновским приближении – в третьем порядке по потенциалу рассеяния – она имеет вид

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(|V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 + 2\text{Re} \sum_{\mathbf{p}} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i0} \right) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (140)$$

Если потенциал гауссов, то есть имеет только корреляторы чётных степеней, то вклада третьего порядка нет. Но если это не так, то этот вклад бывает важен, поскольку в нём есть асимметричная часть. Пользуясь соотношением $\text{Im}(x + i0)^{-1} = -\pi\delta(x)$, получим

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(a)} = \frac{(2\pi)^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} (V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) = -W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(a)}. \quad (141)$$

Для этой части не выполнен принцип детального равновесия. Можно представлять асимметричное рассеяние как рассеяние на клине или треугольнике.

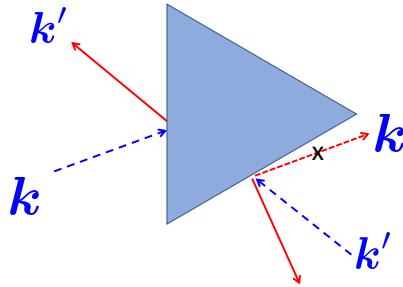


Рис. 2. Иллюстрация асимметричного рассеяния. При рассеянии на треугольнике вероятности процессов $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$ не совпадают.

Она отражает нецентросимметричность системы и приведёт к фототоку. Самый простой вклад получается так: на прошлой лекции мы нашли стационарную квадратичную по полю анизотропную поправку к функции распределения f_2 , описывающую выстраивание импульсов. При этом в интеграле столкновений учитывалась только симметричная часть, на которой и вычислялись времена релаксации. Учтём теперь асимметричную часть:

$$\sum_{\mathbf{p}'} [W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_2(\mathbf{p}) - W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a f_2(\mathbf{p}')] + \frac{\delta f_{\mathbf{p}}}{\tau_1} = 0. \quad (142)$$

Здесь $\delta f_{\mathbf{p}}$ – поправка, которая приведёт к стационарному току.

Первое слагаемое в квадратных скобках вклада не даст, поскольку умножается на $\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a$, а такая сумма равна нулю. Это следует из Оптической теоремы, которая утверж-

ждает, что полное сечение рассеяния есть, с точностью до множителя, амплитуда рассеяния вперёд:

$$\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = -\frac{2}{\hbar} T_{\mathbf{p}\mathbf{p}}, \quad (143)$$

где T – матрица рассеяния. Далее, из инверсии времени следует, что $T_{\mathbf{p}\mathbf{p}} = T_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}}$, откуда

$$\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}',-\mathbf{p}} \equiv \sum_{\mathbf{p}'} W_{-\mathbf{p}',-\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (144)$$

где последнее равенство также получено из инверсии времени. Применяя это соотношение к асимметричной части $W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a = -W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$, получаем, что такая сумма равна нулю.

Тогда $\delta f_{\mathbf{p}}$ определяется только приходным слагаемым, и можно увидеть её нечётность по \mathbf{p} :

$$\delta f_{\mathbf{p}} = \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a f_2(\mathbf{p}'), \quad \delta f_{-\mathbf{p}} = \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} W_{-\mathbf{p},-\mathbf{p}'}^a f_2(\mathbf{p}') = \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_2(\mathbf{p}') = -\delta f_{\mathbf{p}}. \quad (145)$$

Здесь предпоследнее равенство получено из инверсии времени, а также использована чётность функции $f_2(\mathbf{p})$.

Подставляя $\delta f_{\mathbf{p}}$ в выражение для плотности тока, получим:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{p},\nu} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a f_2(\mathbf{p}'). \quad (146)$$

Подставляя f_2 в виде (130), получаем

$$\mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{p},\nu} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a 2|\mathbf{E}|^2 \tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_p \cos(2\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\alpha). \quad (147)$$

Для компоненты j_x :

$$j_x = 2|\mathbf{E}|^2 \frac{e^3}{m} \sum_{\mathbf{p},\nu} v_p \tau_1 \tau_2 \varepsilon_p \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \cos \varphi_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a \cos(2\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\alpha). \quad (148)$$

Поскольку отражение в плоскости (zx) сохраняет $W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$, а $\sin 2\varphi_{\mathbf{p}'}$ меняет знак, поляризационная зависимость получается правильной: $j_x = \chi |\mathbf{E}|^2 \cos 2\alpha$, где вклад в χ имеет вид

$$\chi = 2 \frac{e^3}{m} \sum_{\mathbf{p},\nu} v_p \tau_2 \varepsilon_p \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \Xi, \quad \Xi = \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} \langle W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a \cos 2\varphi_{\mathbf{p}'} \cos \varphi_{\mathbf{p}} \rangle_{\varphi_{\mathbf{p}}}. \quad (149)$$

Безразмерный параметр Ξ описывает степень асимметрии рассеяния. Интегрируя по ε_p по частям и считая статистику вырожденной, получаем:

$$\chi = \frac{2Ne^3\tau_{\text{tr}}}{m\varepsilon_F(1+\omega^2\tau_{\text{tr}}^2)} \frac{d(\Xi\varepsilon_F v_F \tau_2)}{d\varepsilon_F}. \quad (150)$$

Здесь Ξ и τ_2 берутся при $\varepsilon_p = \varepsilon_F$.

Мы получили частотную зависимость фототока: он квадратично спадает с частотой, причём основная зависимость при $\omega \sim 1/\tau_{\text{tr}}$. При временах релаксации порядка пикосекунд соответствующие частоты лежат в терагерцовом диапазоне.

Количество “диссипативных” сомножителей в χ – нечётное (τ_{tr} , Ξ и τ_2), как и должно быть в плотности электрического тока.

Причина возникновения фототока – это асимметричное рассеяние. Его можно проиллюстрировать рассеянием на треугольнике, см. Рис. 2, рассматривая потоки электронов в электрическом поле, поляризованном, например, вдоль x , y или под 45° к ним.

VII. Циркулярный фототок

Есть и второй вклад в фототок. Он получается если сначала учесть асимметрию рассеяния, а уже потом сделать вторую итерацию по электрическому полю. То есть ищется линейная по полю поправка \tilde{f}_1 :

$$-i\omega \tilde{f}_1(\mathbf{p}) = \text{St}_{\text{imp}}[\tilde{f}_1(\mathbf{p})] - \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_1(\mathbf{p}'). \quad (151)$$

Здесь $f_1 = e\tau_{1\omega}(-f'_0)\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p$. Фототок даст поправку $\tilde{\delta f}$:

$$e\mathbf{E}^* \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \mathbf{p}} + c.c. = -\frac{\tilde{\delta f}}{\tau_1}. \quad (152)$$

Отсюда второй вклад в фототок:

$$\delta j_\alpha = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} v_\alpha(-\tau_1) e E_\beta^* \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial p_\beta} + c.c. \quad (153)$$

Удобно проинтегрировать по частям:

$$\delta j_\alpha = e^2 E_\beta^* \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tilde{f}_1 \frac{\partial(v_\alpha \tau_1)}{\partial p_\beta} + c.c. \quad (154)$$

Видно, что при параболической дисперсии и короткодействующем рассеянии этот вклад отсутствует, т.к. производная превращается в числа, а \tilde{f}_1 – анизотропна. В других случаях этот вклад сравним с первым и также определяется степенью асимметрии рассеяния Ξ .

Замечательно, что этот вклад в фототок зависит от степени круговой поляризации электрического поля. Действительно, так как $\partial\tau_1/\partial p_\beta = \tau'_1 v_\beta$,

$$\delta j_\alpha = e^2 E_\beta^* \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tilde{f}_1 \tau'_1 \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v^2}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) + c.c. \quad (155)$$

Здесь явно выделена анизотропная часть. Отсюда следует, что в ток от \tilde{f}_1 войдёт 2-я фурье-гармоника. Поэтому из (151) имеем:

$$\tilde{f}_1 = -\tau_{2\omega} \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_1(\mathbf{p}'). \quad (156)$$

Отсюда получаем для вклада в ток:

$$\delta j_\alpha = e^3 E_\gamma E_\beta^* \sum_{\nu, \mathbf{p}} f'_0 \tau_{1\omega} \tau'_1 \tau_{2\omega} \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v^2}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) v_\gamma(\mathbf{p}') + c.c. \quad (157)$$

Поскольку для электромагнитной волны, распространяющейся в направлении \mathbf{q} ,

$$i\mathbf{E} \times \mathbf{E}^* = P_{\text{circ}}|E|^2 \frac{\mathbf{q}}{q}, \quad (158)$$

и в нашем случае компоненты поля, тока и скоростей лежат в плоскости (xy) , имеем:

$$i(E_\gamma E_\beta^* - E_\gamma^* E_\beta) = \epsilon_{\gamma\beta z} P_{\text{circ}} |E|^2. \quad (159)$$

Введём величину

$$\Xi_{\alpha\beta\gamma} = \tau_{\text{tr}} \sum_{\mathbf{p}'} \left\langle W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \frac{\left(v_\alpha v_\beta - \frac{v^2}{2} \delta_{\alpha\beta}\right) v_\gamma(\mathbf{p}')}{v^3} \right\rangle_{\varphi_{\mathbf{p}}}. \quad (160)$$

Тогда фототок, зависящий от степени циркулярной поляризации волны, \mathbf{j}^{circ} ,

$$j_\alpha^{\text{circ}} = P_{\text{circ}} |E|^2 e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} f'_0 \tau'_1 \frac{\text{Im}(\tau_{1\omega} \tau_{2\omega})}{\tau_{\text{tr}}} v_p^3 (\Xi_{\alpha yx} - \Xi_{\alpha xy}). \quad (161)$$

Поскольку

$$\Xi_{xyx} - \Xi_{xxy} = -\frac{1}{2} \tau_{\text{tr}} \sum_{\mathbf{p}'} \left\langle W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \sin(\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\varphi_{\mathbf{p}}) \right\rangle_{\varphi_{\mathbf{p}}} \equiv -\frac{\Xi_s}{2}, \quad (162)$$

$$\Xi_{yyx} - \Xi_{yxy} = -\frac{1}{2} \tau_{\text{tr}} \sum_{\mathbf{p}'} \left\langle W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \cos(\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\varphi_{\mathbf{p}}) \right\rangle_{\varphi_{\mathbf{p}}} \equiv -\frac{\Xi_c}{2}, \quad (163)$$

получаем для вырожденной статистики:

$$j_{x,y}^{\text{circ}} = -P_{\text{circ}} |E|^2 \Xi_{s,c} \frac{N(ev_F)^3}{2\varepsilon_F} \frac{d\tau_{\text{tr}}}{d\varepsilon_F} \frac{\omega\tau_2(\tau_{\text{tr}} + \tau_2)}{(1 + \omega^2\tau_{\text{tr}}^2)(1 + \omega^2\tau_2^2)}. \quad (164)$$

Из полученного выражения следует, что циркулярный фототок линейно растёт с частотой при $\omega\tau_{\text{tr}} \ll 1$ и спадает как $1/\omega^3$ при $\omega\tau_{\text{tr}} \gg 1$. Его направление определяется величинами $\Xi_{s,c}$. Например, для симметрии C_s единственная плоскость отражения, обозначим её за (zx) , задаёт чётность $W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a$ по $\varphi_{\mathbf{p}}$ и $\varphi_{\mathbf{p}'}$. Отсюда $\Xi_s = 0$, и циркулярный фототок течёт перпендикулярно плоскости отражения. Это согласуется с соображениями симметрии: j_y и $P_{\text{circ}} |E|^2 = i(E_x E_y^* - E_y E_x)$ преобразуются по одному представлению (A^-), а j_x и $|E_{x,y,z}|^2$ – по другому (A^+).

При симметрии C_{3v} циркулярного фотогальванического эффекта при нормальном падении излучения нет. Действительно, при повороте вокруг тригональной оси z на 120° $W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a$ при такой симметрии не меняется, а $\exp[i(\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\varphi_{\mathbf{p}})]$ – меняется. Значит, $\Xi_s = \Xi_c = 0$. В системах такой симметрии, а также в C_{2v} и D_{2d} точечных группах, описывающих симметрию обычных (001) гетероструктур, циркулярный фототок возникает

при наклонном падении, когда отлична от нуля компонента поля E_z . Микроскопически нужно учесть влияние E_z на рассеяние.

Подсчитаем количество диссипативных постоянных. Буквы τ и Ξ вошли чётное число раз. Дополнительным множителем, меняющим знак при инверсии времени, является степень круговой поляризации излучения P_{circ} . Отсюда ясно, что “линейный” и “циркулярный” фототоки всегда имеют различное количество диссипативных кинетических параметров.

VIII. Эффект фотонного увлечения

В средах с центром пространственной инверсии также возможна генерация фототоков. Для этого нужно учесть наличие у электромагнитной волны волнового вектора \mathbf{q} , то есть пространственную дисперсию:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \quad (165)$$

Импульс фотона может передаваться носителям заряда, что приводит к их направленному движению, то есть току.

При оптических частотах, вызывающих межзонные переходы, поляризационно-независимый фототок увлечения получается наглядным образом. А здесь мы расчитаем фототок увлечения при классических частотах.

VIII.1. Феноменология

Феноменологически плотность тока увлечения связана с двумя компонентами электрического поля и одной компонентой волнового вектора фотона:

$$j_\alpha = T_{\alpha\beta\mu\nu} q_\beta E_\mu E_\nu^*. \quad (166)$$

Рассмотрим проводящую двумерную систему наиболее высокой симметрии – однородную плёнку, параллельную плоскости (xy). Её точечная группа симметрии – $D_{\infty h}$, и в ней допустимы фототоки, описываемые четырьмя линейно-независимыми постоянными:

$$\mathbf{j}_\parallel = \mathbf{q}_\parallel (T_1 |\mathbf{E}|^2 + T_2 |E_z|^2) + T_3 i(E_x E_y^* - E_y E_x^*) \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{q} + T_4 [\mathbf{E}_\parallel^*(\mathbf{q}_\parallel \cdot \mathbf{E}_\parallel) + c.c.] \quad (167)$$

Действительно, ток в плоскости может быть направлен вдоль векторов \mathbf{q}_\parallel или \mathbf{E}_\parallel или вдоль псевдовектора $\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{q}$, но этот вклад нужно ещё умножить на псевдоскаляр $\varkappa_z |\mathbf{E}|^2 = i(\mathbf{E} \times \mathbf{E}^*)_z$.

Все четыре вклада имеют один порядок величины, но различную зависимость от угла падения и поляризации излучения, а также разное направление по отношению к плоскости падения. Видно, что ток, чувствительный к линейной поляризации, течёт в плоскости падения ($T_{1,2}$ вклады), а пропорциональный циркулярной поляризации –

перпендикулярно плоскости падения. Эти токи соответственно называются линейным и циркулярным фототоками увлечения. Ещё один линейный фототок увлечения (описываемый постоянной T_4) имеет компоненты как в плоскости падения, так и перпендикулярно ей.

Поскольку $q_{\parallel} = (\omega/c) \sin \theta$, $|E_z|^2 = |\mathbf{E}|^2 \sin^2 \theta$, $\varkappa_z = P_{\text{circ}} \cos \theta$, эти вклады различаются и по зависимости от угла падения света θ . В отличие от фотогальванического тока, фототок увлечения линеен по \mathbf{q} , поэтому обнуляется при проходе света по одному и тому же пути в противоположных направлениях. Поэтому эти два эффекта, которые часто имеют один порядок величины, могут быть разделены в эксперименте с зеркалом.

VIII.2. Расчёт $\mathbf{q}\mathbf{E}^2$ -вклада в фототок увлечения

Фототок определяется, как обычно, из кинетического уравнения. Новым будет являться зависимость поля от координат, что приведёт и к зависимости от \mathbf{r} у функции распределения:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} + e \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (168)$$

Мы учли, что 2D носители имеют компоненты импульса и скорости только в плоскости плёнки.

Для нахождения фототока увлечения необходимо трижды проитерировать кинетическое уравнение: дважды по амплитуде поля и один раз по \mathbf{q} . Первая итерация идёт только по \mathbf{E} , что даёт как обычно

$$f_1(\mathbf{r}) = -e\tau_{1\omega} f'_0 \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}_{\parallel} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (169)$$

Далее нужно обязательно учесть пространственную производную. Иначе, если снова учесть электрическое поле $\mathbf{E}^* e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$, поправка не будет зависеть от \mathbf{r} , и зависимость от \mathbf{q} исчезнет. Поэтому на втором этапе находим $\tilde{f}_1 \propto e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$:

$$-i\omega \tilde{f}_1 + i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f_1 = \text{St}_{\text{imp}}[\tilde{f}_1]. \quad (170)$$

Произведение $\mathbf{v}_{\mathbf{p}} f_1$ содержит 2-ю фурье-гармонику и изотропную часть. Они описывают динамическое выстраивание импульсов и колебания электронной плотности на частоте ω . Поэтому в \tilde{f}_1 есть два вклада – соответственно пропорциональные $\tau_{2\omega}$ и

$1/(-i\omega)$:

$$\tilde{f}_1 = ie\tau_{1\omega}f'_0 \left\{ \tau_{2\omega} \left[(\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{E}_{||})(\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{v}_p) - (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) \frac{v_p^2}{2} \right] + \frac{1}{-i\omega} (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) \frac{v_p^2}{2} \right\}. \quad (171)$$

Подставляя теперь \tilde{f}_1 в полевое слагаемое стационарного и независящего от координат кинетического уравнения, находим поправку f_2 , которая даст ток:

$$f_2 = -e\tau_1 \mathbf{E}_{||}^*(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \mathbf{p}} + c.c. \quad (172)$$

Для вычисления тока опять удобно проинтегрировать по частям:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} \mathbf{v}_p f_2 = e^2 E_{\beta}^* \sum_{\nu, \mathbf{p}} \frac{\partial(\tau_1 \mathbf{v}_p)}{\partial p_{\beta}} \tilde{f}_1 + c.c. \quad (173)$$

Для упрощения выкладок предположим, что дисперсия параболическая, и τ не зависит от энергии. Тогда вклад в ток внесёт только изотропное слагаемое в \tilde{f}_1 :

$$\mathbf{j} = e^3 \tau \tau_{\omega} \mathbf{E}_{||}^* \frac{\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}}{2m\omega} \sum_{\nu, \mathbf{p}} (-f'_0) v_p^2 + c.c. = \frac{e^3 \tau}{m^2 \omega} g_{\text{tot}} \varepsilon_F \tau_{\omega} \mathbf{E}_{||}^* (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) + c.c. = \frac{N e^3 \tau}{m^2 \omega} \tau_{\omega} \mathbf{E}_{||}^* (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) + c.c. \quad (174)$$

Здесь учтено, что концентрация $N = g_{\text{tot}} \varepsilon_F$.

В указанных предположениях этот вклад может быть получен совсем просто. Неоднородное электрическое поле вызывает неоднородное осциллирующее во времени изменение электронной концентрации

$$\delta N = \delta N_{\omega} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) + c.c. \quad (175)$$

Оно определяется из уравнения непрерывности

$$-i\omega \delta N_{\omega} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\omega} = 0, \quad (176)$$

где переменный ток $\mathbf{j}_{\omega} = \sigma(\omega) \mathbf{E}_{||}$. Отсюда следует

$$\delta N_{\omega} = (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) \frac{\sigma(\omega)}{\omega} = (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) \frac{N e^2 \tau_{\omega}}{m \omega}. \quad (177)$$

Постоянный ток возникает в результате выпрямления:

$$\mathbf{j} = \frac{e^2 \tau}{m} \langle \delta N(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}_{||}(\mathbf{r}, t) \rangle_t = \frac{e^2 \tau}{m} \delta N_{\omega} \mathbf{E}_{||}^* + c.c. = \frac{N e^3 \tau}{m^2 \omega} \tau_{\omega} \mathbf{E}_{||}^* (\mathbf{q}_{||} \cdot \mathbf{E}_{||}) + c.c. \quad (178)$$

VIII.3. Расчёт EB-вклада в фототок увлечения

Выше мы учли конечность волнового вектора света $q = \omega/c$. Однако, тот же порядок имеет и магнитное поле световой волны \mathbf{B} . Учёт влияния магнитного поля световой волны на электроны должен привести к сравнимому вкладу в фототок увлечения. Для расчёта нужно принять во внимание в кинетическом уравнении силу Лоренца, действующую со стороны световой волны на электроны:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + e\mathbf{E}_{\parallel} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} + \frac{e}{c}(\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (179)$$

Это уравнение совпадает с кинетическим уравнением в скрещенных электрическом и магнитном полях (компоненты \mathbf{B}_{\parallel} на 2D носители не действует). Оно даёт, как известно, холловский ток:

$$\mathbf{j}^{(EB)} = \frac{Ne^3\tau^2/(m^2c)}{1 - i\omega\tau} \mathbf{E}_{\parallel} \times \mathbf{B}_z^* + c.c. = \frac{Ne^3\tau^2/(m^2\omega)}{1 - i\omega\tau} \mathbf{E}_{\parallel} \times (\mathbf{q}_{\parallel} \times \mathbf{E}_{\parallel}^*) + c.c. \quad (180)$$

То есть продольный фототок увлечения в значительной мере обусловлен высокочастотным эффектом Холла.

Складывая $\mathbf{j}^{(EB)}$ и $\mathbf{j}^{(qE^2)}$, полученный учётом волнового вектора, получаем, что существенная часть сокращается, и остаётся только ток, текущий в плоскости падения:

$$\mathbf{j}^{(\text{total})} = 2\mathbf{q}_{\parallel}|E_{\parallel}|^2 \frac{Ne^3\tau^2/(m^2\omega)}{1 + (\omega\tau)^2} = 2\mathbf{q}_{\parallel}(|E|^2 - |E_z|^2) \frac{Ne^3\tau^2/(m^2\omega)}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (181)$$

Мы получили два вклада в ток (167) и установили соотношение между ними: $T_1 = -T_2$.

При линейной дисперсии EB-вклад имеет очень похожий вид, а qE^2 -вклад становится заметнее. Во-первых, производная $\partial v_{\alpha}/\partial p_{\beta}$ отлична от нуля и при $\alpha \neq \beta$, что даёт циркулярные qE^2 -вклады, пропорциональные τ_{tr} , а не только $d\tau_{\text{tr}}/d\varepsilon_F$. Во-вторых, при линейной дисперсии времена релаксации зависят от энергии даже при короткодействующем рассеянии.

VIII.4. Расчёт Т_{3,4}-вкладов

Для получения остальных вкладов при параболической дисперсии нужно учесть зависимость времени релаксации от энергии. Тогда, согласно (173), появится дополнительный вклад в $\mathbf{j}^{(qE^2)}$:

$$\Delta \mathbf{j}^{(qE^2)} = e^2 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 \mathbf{v}_{\mathbf{p}} (\mathbf{E}_{\parallel}^* \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}}) \tilde{f}_1 + c.c. \quad (182)$$

Выберем плоскость падения (zx) (то есть $q_y = 0$), и рассчитаем фототок, перпендикулярный плоскости падения:

$$j_y = iq_x e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 \tau_{1\omega} f'_0 v_y (\mathbf{E}_\parallel^* \cdot \mathbf{v}_p) \left\{ \tau_{2\omega} \left[v_x (\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{E}_\parallel) - E_x \frac{\varepsilon_p}{m} \right] - \frac{1}{i\omega} E_x \frac{\varepsilon_p}{m} \right\} + c.c. \quad (183)$$

Оставляем комбинации скоростей с ненулевым средним:

$$j_y = iq_x e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 \tau_{1\omega} f'_0 \left[\tau_{2\omega} v_x^2 v_y^2 (E_x E_y^* + E_x^* E_y) - v_y^2 E_x E_y^* \frac{\varepsilon_p}{m} \left(\tau_{2\omega} + \frac{1}{i\omega} \right) \right] + c.c. \quad (184)$$

Усреднение по направлениям в 2D случае:

$$\overline{v_y^2} = \frac{v_p^2}{2} = \frac{\varepsilon_p}{m}, \quad \overline{v_x^2 v_y^2} = \frac{v_p^4}{8} = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_p}{m} \right)^2. \quad (185)$$

Отсюда:

$$\begin{aligned} j_y &= iq_x e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 \tau_{1\omega} f'_0 \left(\frac{\varepsilon_p}{m} \right)^2 \left[\tau_{2\omega} \frac{1}{2} (E_x E_y^* + E_x^* E_y) - E_x E_y^* \left(\tau_{2\omega} + \frac{1}{i\omega} \right) \right] + c.c. \\ &= \frac{1}{2} iq_x e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 \tau_{1\omega} f'_0 \left(\frac{\varepsilon_p}{m} \right)^2 \left[-\frac{1}{i\omega} (E_x E_y^* + E_x^* E_y) - \left(\tau_{2\omega} + \frac{1}{i\omega} \right) (E_x E_y^* - E_x^* E_y) \right] + c.c. \\ &= q_x e^3 \sum_{\nu, \mathbf{p}} \tau'_1 (-f'_0) \left(\frac{\varepsilon_p}{m} \right)^2 \left[\frac{\text{Re}(\tau_{1\omega})}{\omega} (E_x E_y^* + E_x^* E_y) + \text{Re} \left[\tau_{1\omega} \left(\tau_{2\omega} + \frac{1}{i\omega} \right) \right] i(E_x E_y^* - E_x^* E_y) \right]. \end{aligned} \quad (186)$$

Видно, что мы получили оба разрешённых симметрией в этой геометрии вклада в ток:

$$j_y = q_x [T_3 i(E_x E_y^* - E_x^* E_y) + T_4 (E_x E_y^* + E_x^* E_y)]. \quad (187)$$

Вычисляя

$$\text{Re}(\tau_{1\omega}) = \frac{\tau_1}{1 + (\omega\tau_1)^2}, \quad \text{Re} \left[\tau_{1\omega} \left(\tau_{2\omega} + \frac{1}{i\omega} \right) \right] = \frac{\tau_1}{1 + (\omega\tau_1)^2} \frac{\tau_1 + \tau_2}{1 + (\omega\tau_2)^2} \quad (188)$$

и считая статистику вырожденной, получаем выражения для коэффициентов:

$$T_4 = \frac{Ne^3}{m^2 \omega} \frac{\tau_{\text{tr}}}{1 + (\omega\tau_{\text{tr}})^2} \varepsilon_F \frac{d\tau_{\text{tr}}}{d\varepsilon_F}, \quad T_3 = \frac{\omega(\tau_{\text{tr}} + \tau_2)}{1 + (\omega\tau_2)^2} T_4. \quad (189)$$

Видно, что линейный фототок увлечения при малых частотах не зависит от ω , а при высоких падает как $1/\omega^2$. Циркулярный фототок линейно растёт с частотой при низких частотах и падает как $1/\omega^3$ при высоких.

IX. Флуктуации

В стационарных условиях никакая физическая величина не остаётся строго постоянной, а отклоняется от своего среднего значения – флуктуирует. Например, если взять проводник, к которому не приложено напряжение, и включить его в цепь с амперметром, то он будет показывать ноль не всё время: электрический ток будет принимать случайные значения вблизи нуля. Другой пример: к проводнику приложено внешнее поле, оно вызывает ток I . Но амперметр покажет не точно значение I , а величину то больше, то меньше. Эти два примера – примеры флуктуаций в равновесных и неравновесных условиях. Сейчас активно изучаются флуктуации спина. Это делается так: на образец падает линейно-поляризованный свет, и измеряется направление его поляризации после прохождения образца. В отсутствие магнитного поля этот угол в среднем ноль, но есть его флуктуации, связанные с тем, что в образце возникают флуктуации спина, приводящие к эффекту Фарадея. Также изучают спиновые флуктуации во внешнем магнитном поле – тогда угол поворота плоскости поляризации флуктуирует вокруг ненулевого среднего значения.

Изучение флуктуаций, или, как ещё говорят, шумов, даёт ценную информацию о кинетических процессах. Вводят отклонение измеряемой величины $x(t)$ от среднего по времени значения $\langle x \rangle$:

$$\delta x(t) = x(t) - \langle x \rangle. \quad (190)$$

Формально флуктуации характеризуются корреляционной функцией (коррелятором):

$$C(t_1, t_2) = \langle \delta x(t_1) \delta x(t_2) \rangle, \quad (191)$$

где угловые скобки означают усреднение по реализациям.

В стационарных условиях этот же коррелятор можно определить через усреднение по длинному времени измерения случайного процесса T :

$$C(t_1, t_2) = \langle \delta x(t_1) \delta x(t_2) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \delta x(t_1 + t) \delta x(t_2 + t). \quad (192)$$

Эквивалентность этих двух определений следует из эргодической гипотезы.

В стационарных условиях одновременный сдвиг по времени $t_1 \rightarrow t_1 + \Delta t$, $t_2 \rightarrow t_2 + \Delta t$ не меняет коррелятора. Поэтому он зависит от разности времён: $C(t_1, t_2) = C(t_1 - t_2)$:

$$C(t) = \langle \delta x(t) \delta x(0) \rangle = C(-t). \quad (193)$$

Одновременний коррелятор равен дисперсии величины x :

$$C(0) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \quad (194)$$

Ясно, что флюктуации, сильно разнесённые по времени, не коррелированы. Поэтому $C(t \rightarrow \infty) = 0$.

Удобно исследовать не сам шум, а его Fourier-спектр:

$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt C(t) e^{i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \delta x(t) \delta x(0) \rangle e^{i\omega t} \equiv \langle \delta x^2 \rangle_{\omega}. \quad (195)$$

Введённый выше коррелятор называется также автокоррелятором, так как описывает корреляцию величины x с самой собой. Рассматривают также корреляторы различных величин:

$$C_{AB}(t) = \langle \delta A(t) \delta B(0) \rangle = C_{BA}(-t). \quad (196)$$

Из симметрии к инверсии времени следует, что коррелятор не может поменяться, если взять величину A в более ранний, а B – в более поздний момент времени. Поэтому $\langle \delta A(t) \delta B(t') \rangle = \langle \delta A(t') \delta B(t) \rangle$, то есть

$$C_{AB}(t) = C_{AB}(-t) = C_{BA}(t). \quad (197)$$

Естественно, это равенство справедливо, если величины A , B сами не меняются при обращении времени, то есть не являются магнитным моментом, скоростью, частотой механического вращения и т.п. В таких случаях в этом равенстве появляется знак “минус”.

Если величины A и B заданы операторами (как это бывает в квантовой теории), то нужно симметризовать это выражение, так как даже для одной и той же наблюдаемой ее гейзенберговские операторы при t и t' могут не коммутировать.

IX.1. Флюктуации функции распределения

Из кинетического уравнения определяется средняя функция распределения $\bar{f}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_p \cdot \nabla + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \text{St} \right) \bar{f} = 0. \quad (198)$$

Она определяет средние значения измеряемых величин, например среднее число частиц:

$$N(\mathbf{r}, t) = \sum_{\nu, \mathbf{p}} \bar{f}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (199)$$

Точная микроскопическая функция распределения $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ отличается от $\bar{f}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ из-за флюктуаций. Введём $\delta f = f - \bar{f}$ и коррелятор

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}_1, t_1) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2, t_2) \rangle. \quad (200)$$

Рассмотрим электронный газ в стационарных условиях. В нём коррелятор может зависеть только от разности $t = t_1 - t_2$, поэтому усреднение производится по одному из времён t_1, t_2 при фиксированном значении их разности. Если система однородна, то и координаты входят в виде разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Поэтому коррелятор можно представить в виде

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (201)$$

Как и любой автокоррелятор, он обладает симметрией

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle = \langle \delta f(\mathbf{p}_2, -\mathbf{r}, -t) \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (202)$$

Кроме того, из симметрии к обращению времени следует (в отсутствие магнитного поля)

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle = \langle \delta f(-\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, -t) \delta f(-\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (203)$$

Если коррелятор известен, то можно найти коррелятор плотности числа частиц:

$$\langle \delta N(\mathbf{r}, t) \delta N(\mathbf{0}, 0) \rangle = \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \nu} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle \quad (204)$$

или компонент электрического тока:

$$\langle \delta j_\alpha(\mathbf{r}, t) \delta j_\beta(\mathbf{0}, 0) \rangle = e^2 \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \nu} v_{1\alpha} v_{2\beta} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (205)$$

Уравнение на коррелятор, имеет, очевидно, следующий вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla + \mathbf{F}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \text{St}_1 \right) \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, t) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle = 0. \quad (206)$$

Здесь $t > 0$, а для нахождения коррелятора при $t < 0$ нужно использовать (202).

Чтобы найти коррелятор необходимо дополнить это уравнение начальным условием (при $t = 0$), то есть вычислить одновременной коррелятор.

IX.2. Коррелятор в электронном газе в равновесии

Нахождение одновременного коррелятора является отдельной сложной задачей. Дело в том, что при столкновении электронов друг с другом одновременно изменяются числа заполнения в двух начальных и двух конечных состояниях, что порождает корреляцию между ними. Однако в отсутствии межэлектронного взаимодействия она может быть решена сравнительно легко. Без учёта электрон-электронного рассеяния одновременные корреляции не могут присутствовать в различных точках фазового пространства. Поэтому одновременной коррелятор сводится к δ -функциям. Коэффициент перед ними равен среднему квадрату флуктуации в одной точке фазового пространства:¹

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, 0) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle = \langle \delta f^2 \rangle \delta(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2). \quad (207)$$

Как известно из статистической физики, $\langle \delta f^2 \rangle = T \partial \bar{f} / \partial \mu$. А поскольку \bar{f} зависит от разности $\varepsilon_p - \mu$, $\langle \delta f^2 \rangle = -T \bar{f}'(\varepsilon_{p_1})$.

Рассмотрим систему в равновесии, когда к ней не приложены внешние силы ($\mathbf{F} = 0$). Равенство (207) является начальным условием к уравнению на коррелятор (206). Для его решения совершим одностороннее прообразование Фурье, определяемое как $\Phi_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{r} \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \Phi(\mathbf{r}, t)$:

$$[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \omega) - \text{St}_1] \langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}, 0) \delta f(\mathbf{p}_2, \mathbf{0}, 0) \rangle = -T \bar{f}'(\varepsilon_{p_1}) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2). \quad (208)$$

Возьмём оператор столкновений в виде $\text{St} = -1/\tau$. Тогда получим:

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{-T \bar{f}'(\varepsilon_{p_1}) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)}{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \omega) + 1/\tau}. \quad (209)$$

Из (202) следует, что полный фурье-образ есть

$$\langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{\omega\mathbf{k}} = \langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} + \langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{-\omega, -\mathbf{k}}^{(+)} = -\frac{2\tau T \bar{f}'(\varepsilon_{p_1}) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)}{1 + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \omega)^2 \tau^2}. \quad (210)$$

¹ Это выражение не вполне верно потому, что такой коррелятор не удовлетворяет условию сохранения числа частиц. В действительности нужно ещё вычесть некий вклад из правой части. Но он не поменяет окончательного ответа, поэтому будем исходить из такой формулы. Она верна, если, например, число частиц в системе не фиксировано.

IX.3. Равновесный спектр шума электрического тока в электронном газе

Рассчитаем спектр флуктуаций электрического тока

$$(\delta j^2)_{\omega \mathbf{k}} = e^2 \sum_{\nu, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} v_{1x} v_{2x} \langle \delta f(\mathbf{p}_1) \delta f(\mathbf{p}_2) \rangle_{\omega \mathbf{k}}. \quad (211)$$

Для простоты рассмотрим однородную систему, тогда в фурье-разложении будет присутствовать только компонента с $\mathbf{k} = 0$:

$$(\delta j^2)_\omega = e^2 \sum_{\nu, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} v_{1x} v_{2x} \frac{-2\tau T \bar{f}'(\varepsilon_{p_1}) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)}{1 + (\omega\tau)^2} = \frac{2e^2 \tau T}{1 + (\omega\tau)^2} \sum_{\nu, \mathbf{p}} v_x^2 [-\bar{f}'(\varepsilon_p)] = \frac{2T N e^2 \tau / m}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (212)$$

Видно, что спектр флуктуаций тока совпал с частотной зависимостью реальной части проводимости:

$$(\delta j^2)_\omega = 2T \text{Re}\sigma(\omega). \quad (213)$$

Это соотношение называется формулой Найквиста. Она справедлива в классической области частот, когда $\hbar\omega \ll T$. При более высоких частотах множитель $2T$ заменяется на $\hbar\omega \coth(\hbar\omega/2T)$, но пропорциональность $\text{Re}\sigma(\omega)$ сохраняется.

Совпадение спектра флуктуаций в равновесных условиях с функцией линейного отклика не случайно. Такое соотношение может быть выведено не только для электрического тока, но и для любых величин. Оно называется флюктуационно-диссипационной теоремой (ФДТ).

Можно написать уравнение и прямо на коррелятор. Это делается умножением уравнения (206) на $v_{1\alpha} v_{2\beta}$ и суммированием по импульсам и ν :

$$\langle v_\alpha v_\beta \rangle^{(+)} \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \right) + \sum_{\nu, \mathbf{p}_1} v_{1\alpha} \mathbf{F}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \omega) v_\beta \rangle^{(+)} = T \sum_{\nu, \mathbf{p}} v_\alpha v_\beta [-f'_0(\varepsilon_{p_1})] = T \frac{N}{m} \delta_{\alpha\beta}. \quad (214)$$

Рассмотрим систему во внешнем магнитном поле $\mathbf{B} \parallel z$, перпендикулярном двумерному газу. Тогда $\mathbf{F}_1 = (e/c)\mathbf{v}_1 \times \mathbf{B}$. После интегрирования по частям получаем полевое слагаемое в виде

$$- \sum_{\nu, \mathbf{p}_1} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \omega) v_\beta \rangle^{(+)} \frac{\partial}{\partial p_{1,\mu}} v_{1\alpha} F_{1,\mu}. \quad (215)$$

Поскольку $\operatorname{div}_{\mathbf{p}} \mathbf{F} = 0$, $\partial v_\alpha / \partial p_\mu = \delta_{\alpha\mu}/m$ (рассматриваем параболический спектр), имеем:

$$-\sum_{\nu, \mathbf{p}_1} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \omega) v_\beta \rangle^{(+)} \frac{F_{1,\alpha}}{m} = -\omega_c \epsilon_{\alpha\gamma z} \sum_{\nu, \mathbf{p}_1} \langle \delta f(\mathbf{p}_1, \omega) v_\beta \rangle^{(+)} v_{1,\gamma} = -\omega_c \epsilon_{\alpha\gamma z} \langle v_\gamma v_\beta \rangle^{(+)}, \quad (216)$$

где $\omega_c = eB/(mc)$ – циклотронная частота. Мы получили уравнения, в которых есть только корреляторы:

$$\langle v_\alpha v_\beta \rangle^{(+)} \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \right) - \omega_c \epsilon_{\alpha\gamma z} \langle v_\gamma v_\beta \rangle^{(+)} = T \frac{N}{m} \delta_{\alpha\beta}. \quad (217)$$

Беря $\alpha = \beta = x$ и $\alpha, \beta = y, x$, получаем

$$\langle v_x^2 \rangle^{(+)} \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \right) - \omega_c \langle v_y v_x \rangle^{(+)} = T \frac{N}{m}, \quad \langle v_y v_x \rangle^{(+)} \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \right) + \omega_c \langle v_x^2 \rangle^{(+)} = 0. \quad (218)$$

Это эквивалентно

$$\left(\langle v_x^2 \rangle^{(+)} \pm i \langle v_y v_x \rangle^{(+)} \right) \left(-i\omega + \frac{1}{\tau} \pm i\omega_c \right) = T \frac{N}{m}. \quad (219)$$

Умножая на квадрат заряда, получаем для корреляторов тока

$$\langle j_x^2 \rangle^{(+)} \pm i \langle j_y j_x \rangle^{(+)} = T \frac{Ne^2 \tau / m}{1 - i(\omega \mp \omega_c) \tau} \equiv T \sigma_{\pm}, \quad (220)$$

где введены проводимости для круговых поляризаций: $j_x \pm i j_y = \sigma_{\pm}(E_x \pm i E_y)$.

Для получения полного фурье-образа нужно добавить коррелятор, в котором обращён знак у ω , а также и у ω_c , поскольку при обращении времени магнитное поле меняет знак. В результате получаем

$$\langle j_x^2 \rangle \pm i \langle j_y j_x \rangle = 2T \operatorname{Re} \sigma_{\pm} = T \frac{Ne^2 \tau / m}{1 + (\omega \mp \omega_c)^2 \tau^2}, \quad (221)$$

откуда

$$\langle j_x^2 \rangle = T \sum_{\pm} \frac{Ne^2 \tau / m}{1 + (\omega \mp \omega_c)^2 \tau^2}, \quad \langle j_y j_x \rangle = -iT \left[\frac{Ne^2 \tau / m}{1 + (\omega - \omega_c)^2 \tau^2} - \frac{Ne^2 \tau / m}{1 + (\omega + \omega_c)^2 \tau^2} \right]. \quad (222)$$

С учётом того, что $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$, видно, что опять выполняется ФДТ: $\langle j_\alpha j_\beta \rangle = T(\sigma_{\alpha\beta} + \sigma_{\beta\alpha}^*)$. Это происходит потому, что приложение магнитного поля не меняет энергию системы, и равновесие сохраняется.

X. Вывод кинетического уравнения

Выведем кинетическое уравнение для функции распределения из квантовой механики. Для этого запишем гамильтониан системы. Рассеяние может быть описано вкладом в потенциальную энергию $V(\mathbf{r})$. С учётом внешних полей, чей вклад обозначим за $U(\mathbf{r}) = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$, гамильтониан есть сумма

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U + V. \quad (223)$$

Система считается однородной.

Состояние квантово-механической системы, в которой волновой вектор электрона не фиксирован, а может меняться, описывается матрицей плотности. Уравнение для неё имеет вид

$$i\hbar\dot{\rho} = [\mathcal{H}_0 + U + V, \rho]. \quad (224)$$

Будем считать внешние поля и рассеяние малыми возмущениями. Тогда удобно работать в базисе собственных состояний гамильтониана \mathcal{H}_0 – плоских волн. В этом базисе

$$i\hbar\dot{\rho}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = (\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\rho_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}_1} [(U + V)_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1}(U + V)_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}]. \quad (225)$$

Классической функции распределения $f_{\mathbf{k}}$ соответствуют диагональные компоненты матрицы плотности $\rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$. Сейчас мы получим уравнение, которому удовлетворяет $f_{\mathbf{k}}$. Оно будет иметь вид кинетического уравнения Больцмана, но его столкновительная часть будет выведена из квантово-механического уравнения для матрицы плотности (225). По дороге мы сформулируем критерии применимости кинетического уравнения.

Напишем уравнение (225) для $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$:

$$i\hbar\dot{f}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}_1} [(U + V)_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}(U + V)_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}]. \quad (226)$$

Матричный элемент потенциальной энергии внешних полей:

$$U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (227)$$

Поэтому первое слагаемое в правой части:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}_1} (U_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}) &= i\mathbf{F} \cdot \sum_{\mathbf{k}_1} \left(\frac{\partial \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} + \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \frac{\partial \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}_1} \right) \\ &= -i\mathbf{F} \cdot \sum_{\mathbf{k}_1} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \left(\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}_1} + \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}} \right) = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (228)$$

Мы видим, что внешнее поле не перемешивает состояния с различными волновыми векторами.

А вот матричный элемент рассеяния из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' отличен от нуля – он равен фурье-компоненте $V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}$, определяемой как обычно:

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (229)$$

То есть рассеяние приводит к появлению недиагональных по \mathbf{k} компонент у матрицы плотности.

Выпишем уравнение для тех недиагональных элементов матрицы плотности, которые присутствуют в правой части уравнения для $f_{\mathbf{k}}$:

$$i\hbar\dot{f}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}_1} (V_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}), \quad (230)$$

то есть для $\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}$:

$$i\hbar\dot{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} = (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'}). \quad (231)$$

Уравнение для $\rho_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ получается заменой $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$. Здесь мы пренебрегаем влиянием внешних полей на рассеяние. Производную по времени заменим на $\dot{\rho} = s\rho$, где малый параметр $s \ll \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar$ описывает адиабатически медленное включение взаимодействия с рассеивателями. Параметр $s > 0$, что соответствует экспоненциальному e^{st} убыванию возмущения при $t \rightarrow -\infty$.

$$\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'}). \quad (232)$$

Подстановка в уравнение (226) даёт:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \left[\frac{\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} - (\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right]. \quad (233)$$

Рассмотрим произведение $V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'}$:

$$V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + \mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}')}. \quad (234)$$

В каждом конкретном образце имеется свой беспорядок, описываемый своим потенциалом V . Нас будут интересовать свойства образца, усреднённые по реализациям этого

потенциала. Например, если он создан хаотически расположеными примесями, то мы усредним по положениям примесей. Такое среднее есть

$$\langle V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \rangle = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \mathcal{K}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}')}, \quad (235)$$

где введён коррелятор случайного потенциала

$$\mathcal{K}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle. \quad (236)$$

Из-за однородности и изотропии системы в среднем он может зависеть только от модуля разности координат.

Переходя в (235) к интегрированию по разности и полусумме координат, получаем, что $\mathbf{q} + \mathbf{q}' = 0$:

$$\langle V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \rangle = \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \langle |V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle \equiv \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \mathcal{K}(q). \quad (237)$$

Здесь использована вещественность потенциала беспорядка: $V(-\mathbf{q}) = V^*(\mathbf{q})$ и введён фурье-образ коррелятора случайного потенциала $\mathcal{K}(q) = \int d\mathbf{R} \mathcal{K}(R) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}$. Но если $\mathbf{q} + \mathbf{q}' = 0$, то элементы матрицы плотности в правой части (233) сведутся к функции распределения:

$$-\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{K}(q) \left[\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} - (\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right]. \quad (238)$$

Делая во втором слагаемом вместо $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$ эквивалентную замену $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}$, приводим правую часть кинетического уравнения к виду

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{K}(q) (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} + \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\hbar s} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{K}(q) (-2i\hbar s) \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})^2 + (\hbar s)^2}. \end{aligned} \quad (239)$$

Переходя к пределу $s \rightarrow 0$ и используя правило

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\hbar s}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})^2 + (\hbar s)^2} = \pi \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}), \quad (240)$$

получаем кинетическое уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'}). \quad (241)$$

Здесь введён волновой вектор $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$ и вероятность рассеяния $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ на случайном потенциале:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \mathcal{K}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) . \quad (242)$$

Мы действовали во втором порядке по V , что соответствует борновскому приближению теории возмущений. Ясно, что можно получить и более высокие по степени V вклады в интеграл столкновений. Формула, справедливая во всех порядках, имеет вид (18):

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle |T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \rangle \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (243)$$

с амплитудой рассеяния (19).

Если потенциал гауссов, то есть имеет только корреляторы чётных степеней, то вклада третьего порядка нет. Но если это не так, то этот вклад бывает важен, поскольку в нём есть асимметричная часть. Если рассчитать поправку 3 порядка для рассеяния на потенциале случайно расположенных идентичных примесей $V(\mathbf{r}) = \sum_i V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, она будет отлична от нуля при рассеянии на одной и той же примеси:

$$\langle V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'} \rangle = N_i V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}') V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{p}) V_0(\mathbf{p} - \mathbf{k}). \quad (244)$$

То есть потенциал примесей не является гауссовым.

В случае гауссова потенциала следующие поправки будут иметь порядок $\sim V^2/\varepsilon_{\mathbf{k}}^2$, что даёт малость $\sim \hbar/\varepsilon_k \tau \sim 1/kl$, где τ и $l = v_k \tau$ – соответственно время релаксации и длина свободного пробега. То есть критерий применимости кинетического уравнения таков:

$$kl \sim \frac{\varepsilon_k \tau}{\hbar} \gg 1. \quad (245)$$

Этот параметр характеризует то, насколько “классической” является система. В частности, проводимость

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} k_F l \quad (246)$$

должна быть $\gg e^2/h$. Соответственно, сопротивление $\rho \ll h/e^2 = 25.8$ кОм.

XI. Слабая локализация

Кинетическое уравнение описывает транспортные явления с точностью до квантового параметра

$$\frac{\hbar}{\varepsilon_F \tau} \sim \frac{1}{k_F l} \ll 1. \quad (247)$$

При этом проводимость описывается формулой

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi\hbar} k_F l = \frac{e^2}{h} k_F l. \quad (248)$$

Отсюда следует, что возможные поправки к результатам кинетического уравнения имеют порядок e^2/h . Вклады в проводимость такой величины измеримы, поэтому имеет смысл их обсуждать. Именно такого порядка наблюдается “клюв” в сопротивлении при уменьшении магнитного поля. Более того, эти поправки имеют универсальный характер и показывают, будут ли все частицы локализованы при увеличении беспорядка или останется металлическая проводимость. Наконец, такие “квантовые” поправки аномальным образом зависят от температуры и магнитного поля, что, во-первых, позволяет их выделить на фоне классической проводимости, и, во-вторых, определять с их помощью параметры труднодоступные в других экспериментах.

Что же было пропущено в классическом подходе, который рассматривал электроны свободно движущимися между столкновениями? Рассмотрим низкую температуру, когда основной механизм рассеяния – упругий, на примесях, которые будем считать для простоты короткодействующими. Единственное, что не учитывалось – это волновая природа электрона, которая и может проявиться в виде квантовых поправок $\sim e^2/h$. То есть можно попытаться учесть, что у электрона есть фаза, как у волны.

Рассмотрим вероятность W прохождения электрона от одного контакта до другого под действием электрического поля. Электрон может это сделать различным образом: баллистически (то есть двигаясь по прямой мимо примесей), совершив одно столкновение, два и так далее. То есть имеется бесконечно много различных путей, по которым электрон может двигаться. В квантово-механическом подходе вероятность прохождения электрона через образец вычисляется как квадрат полной амплитуды прохождения по всем путям:

$$A = \sum_i A_i, \quad W = |A|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^*. \quad (249)$$

То есть к классическому первому слагаемому, равному сумме вероятностей пройти по всем независимым путям, нужно добавить ещё последнее – интерференционное слагаемое. Но, казалось бы, оно должно быть очень малым. Действительно, фаза, набираемая электроном на прямом участке длины r равна $k_F r$. Поэтому если рассмотреть два пути, отличающихся хотя бы на одно рассеяние, то разница их длин будет порядка длины свободного пробега l . Тогда разница фаз имеет порядок $k_F l \gg 1$ – она огромна, и при суммировании интерференционного слагаемого по всем траекториям мы получим ноль.

Это действительно так, но не для всех траекторий. Есть отдельный класс путей, на которых интерференция существенна. Это – траектории с самопересечением. Дело в том, что их пройти можно двумя способами – проходя петлю по и против часовой стрелки. В квантовой механике это – две различных траектории, и они имеют различные амплитуды вероятности прохождения. А фаза, набираемая электроном, в обоих случаях будет абсолютно одинаковой, поскольку эти два процесса связаны операцией инверсии времени – электрон проходит по “петле”, просто в двух противоположных направлениях. Действительно, фаза, набираемая на каждом прямом участке между столкновениями, есть

$$\varphi_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_1^2 \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_{21} = \frac{1}{\hbar} (-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}_{12} = \varphi_{12}. \quad (250)$$

Поскольку амплитуды вероятности рассеяния назад A_1 и A_2 имеют одинаковые фазы, их вклад в вероятность возврата в два раза больше, чем рассчитанный классически:

$$W_{cl} = |A_1|^2 + |A_2|^2, \quad W_{quant} = |A_1 + A_2|^2 = 2W_{cl}. \quad (251)$$

То есть петля из примесей служит резонатором для электронных волн. Распространяясь по нему в противоположных направлениях, электронные волны интерферируют и образуют стоячую волну. Электроны как бы “зависают”, и вероятность распространения по таким траекториям уменьшается. Электроны немного локализуются примесями, поэтому данное явление называется *слабая локализация*.

Из-за таких петлевых траекторий распространение по образцу замедляется, проводимость уменьшается, а сопротивление, соответственно, увеличивается. Причиной служит волновая природа электронов, то есть относительная поправка к проводимости должна иметь порядок $\Delta\sigma/\sigma \sim -e^2/h$. Однако ещё нужно оценить относительное количество траекторий с самопересечением.

XI.1. Оценка поправки к проводимости

Можно получить оценку для относительного вклада в проводимость. За промежуток времени dt вернуться в окрестность исходной точки смогут только те электроны, которые находятся в площади $dS = v_F \lambda_F dt$ от неё. Здесь $\lambda_F = 2\pi/k_F$ – длина волны де Броиля электрона, и учтено, что прийти в исходную точку нужно с точностью до λ_F , чтобы была интерференция. А площадь, в которой может находиться электрон в момент времени t , есть $S_{diff} = Dt$. Отсюда получаем:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \int_{\tau}^{L^2/D} \frac{dS}{S_{diff}} = - \frac{1}{k_F l} \ln \left(\frac{L^2}{l^2} \right). \quad (252)$$

Здесь мы обрезали интегрирование на нижнем пределе временем рассеяния τ , так как без рассеяния электрон не сможет вернуться, а на верхнем пределе – временем диффузационного достижения границ образца. Видно, что в двумерном случае поправка логарифмически усиlena.

Если рассмотреть объёмный образец или проволоку, то аналог площади S_{diff} будет равняться, соответственно $(Dt)^{3/2}$ и \sqrt{Dt} , а $dS = v_F \lambda_F^2 dt$ и $dS = v_F dt$. Поэтому получим:

$$\Delta\sigma_3 \approx -\text{const} + \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{L}, \quad \Delta\sigma_1 \approx -\frac{e^2}{\hbar} L. \quad (253)$$

Различная зависимость от размера системы приводит к различному поведению систем размерности 3,2 и 1 при нуле температур при увеличении силы беспорядка. Этот вопрос рассматривается в теории квантовых фазовых переходов, где характеристикой системы (управляющим параметром) предполагается контактанс g – соответствующим образом обезразмеренная проводимость.

Ту же формулу можно получить и более формальным путём. Пусть \mathcal{P} – классическая плотность вероятности электрону замкнуть петлю. Тогда, поскольку нужно попасть в площадь $\lambda_F l$, поправка к проводимости выражается через неё следующим образом:²

$$\Delta\sigma = -\sigma \frac{\lambda_F l}{\pi} \mathcal{P} = -\frac{e^2}{\pi \hbar} l^2 \mathcal{P}. \quad (254)$$

Замыкание петли, то есть возврат электрона в её начало, может произойти после столкновений с 1,2,3... примесями. Поэтому

$$\mathcal{P} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{P}_n, \quad (255)$$

² Для получения множителя $1/\pi$ нужно провести расчёт с помощью функций Грина.

где \mathcal{P}_n – вероятность вернуться после столкновений с n примесями.

Введём $P(r)$ – классическую плотность вероятности частице, стартовавшей из начала координат, совершившей первое столкновение вблизи точки \mathbf{r} . Она даётся выражением

$$P(r) = \frac{e^{-r/l}}{2\pi rl}. \quad (256)$$

Тогда вероятность вернуться после n столкновений в точку \mathbf{r}_0 есть

$$\mathcal{P}_n = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n P(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \dots P(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n) P(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_0). \quad (257)$$

Этот интеграл можно выразить через фурье-образ функции $P(r)$:

$$\mathcal{P}_n = \sum_{\mathbf{q}} (P_q)^{n+1}, \quad P_q = \int d\mathbf{r} P(r) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (258)$$

Тогда

$$\mathcal{P} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} (P_q)^{n+1} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{P_q^2}{1 - P_q}, \quad (259)$$

и поправка к проводимости

$$\Delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi\hbar} l^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{P_q^2}{1 - P_q}. \quad (260)$$

Беря интеграл по d^2q , получим, что он расходится при $q \rightarrow 0$:

$$P_q = \left\langle \frac{1}{1 + iql \cos \varphi} \right\rangle_{\varphi} \approx 1 - (ql)^2/2; \quad \Delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi\hbar} l^2 \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q}{(ql)^2/2} \quad (261)$$

Этот “диффузионный” полюс обрезается на обратном размере системы: $q_{\min} = 1/L$. В результате модуль поправки к проводимости логарифмически растёт с L :

$$\Delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \left(\frac{L^2}{l^2} \right). \quad (262)$$

XI.2. Сбой фазы и аномальная температурная зависимость проводимости

Мы видим, что к проводимости есть поправка, определяемая вероятностью возврата. Это позволяет трактовать её как изменение сечения рассеяния. То есть, с учётом квантовых эффектов, сечение рассеяния даже на изотропных примесях имеет пик при рассеянии точно на угол $\theta = \pi$. Ширина этого пика, то есть точность возврата, имеет

порядок $1/k_F l \ll 1$, поскольку в проводимость вносят вклад только те процессы, которые приводят к рассеянию частицы в область площадью $\sim \lambda_F l$ вблизи первой примеси. Аналогичное явление имеет место и для световых волн. В экспериментах по рассеянию света на мутной среде наблюдается пик в рассеянии точно назад.

Отсюда ясно, что эта поправка к проводимости чувствительна к процессам потери когерентности. То есть если за время прохода петли у электрона изменится фаза волновой функции, то интерференции не будет, отрицательная поправка к проводимости будет меньше, проводимость будет ближе к классическому друдэвскому значению. Сбой фазы волновой функции происходит из-за процессов межэлектронного взаимодействия. Темп соответствующего процесса растёт степенным образом с температурой, обычно – линейно. Поэтому при конечной температуре вместо размера системы под логарифмом стоит длина сбоя фазы:

$$\delta\sigma(T) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln\left(\frac{L_\phi^2(T)}{l^2}\right) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln\left(\frac{\tau_\phi(T)}{\tau}\right), \quad \tau_\phi = L_\phi^2/D. \quad (263)$$

Время сбоя фазы много длиннее времени релаксации импульса: $\tau_\phi \gg \tau$. Эта формула описывает вклад в проводимость, аномально – логарифмически – зависящий от температуры.

XI.3. Магнитосопротивление в классически слабых полях

Поскольку интерференция происходит на траекториях, связанных операцией инверсии времени, процессы или внешние параметры, “чувствительные” к инверсии времени, влияют на поправку к проводимости. Такой параметр – магнитное поле. Действительно, из-за эффекта Ааронова-Бома, фазы на двух траекториях отличаются на удвоенный поток магнитного поля через петлю:

$$\varphi = \frac{1}{\hbar} \oint \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot d\mathbf{r} = \varphi(0) \pm \frac{e}{\hbar c} BS, \quad \Delta\varphi = 2\frac{e}{\hbar c} BS. \quad (264)$$

Оценим величину поля, в котором квантовая поправка к проводимости будет подавляться. Для этого нужны поля $\frac{e}{\hbar c} BL_\phi^2 \sim 1$. В реальных системах это – $10 \dots 100$ Gs, то есть поля очень слабые. Классическое магнитосопротивление в таких полях отсутствует, а квантовые поправки измеряются. Из подгонки теоретическими выражениями, параметрически зависящими от τ_ϕ , удаётся определять время сбоя фазы при различных температурах.

XI.4. Влияние спиновой релаксации

Если в системе есть спин-зависимые процессы, то они существенным образом влияют на интерференционную поправку к проводимости. Время спиновой релаксации не просто перенормирует τ или τ_ϕ , а приводит к смене знака квантовой поправки.

Наиболее понятно это влияние можно проиллюстрировать на системе с линейным по \mathbf{k} спин-орбитальным расщеплением спектра типа Рашбы. В этом случае спин электрона жёстко связан с направлением импульса – он тоже лежит в плоскости и перпендикулярен \mathbf{k} . Тогда после обхода петли, когда импульс повернулся на 180 градусов, то же самое случится и со спином. В результате фермионная волновая функция умножится на i , и $A_\circlearrowleft = iA_1$. При обходе петли в противоположном направлении спин повернётся в другую сторону, и множитель изменится на $-i$, так что $A_\circlearrowright = -iA_1$. В результате $A_\circlearrowleft A_\circlearrowright^* = -|A_1|^2$, то есть изменится знак интерференционной поправки к проводимости: она станет положительной. Иногда об этом явлении говорят как об *антилокализации*.

Расчёт показывает, что независимые вклады в проводимость дают 4 интерференционных канала, соответствующие 4 возможным состояниям суммарного спина электрона до и после прохождения петли. При этом триплетные каналы дают отрицательный вклад, как и бесспиновые частицы, а синглетный канал – положительный:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim -\frac{1}{k_F l} \int_{\tau}^{\tau_\phi} \frac{dt}{t} \left(\frac{3}{2} e^{-t/\tau_s} - \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{k_F l} \left[\frac{3}{2} \ln \left(\frac{\tau_s}{\tau} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\tau_\phi}{\tau} \right) \right]. \quad (265)$$

Здесь предполагается, что время спиновой релаксации короче, чем фазовой. Спиновая релаксация не влияет на синглетный канал, а триплетный вклад подавляет. Видно, что второе слагаемое доминирует и отличается множителем $-1/2$ от ответа без спиновой релаксации. То есть знак поправки противоположный. Важно, что τ_s , в отличие от τ_ϕ , не зависит от температуры. Поэтому можно, меняя температуру, переходить от слабой антилокализации к локализации.

Магнитное поле подавляет и эту интерференцию. При антилокализации поправка положительна, поэтому магнитное поле, возвращая проводимость к классическому значению, уменьшает её. Вместо отрицательного имеет место положительное магнитосопротивление.

XII. Проводимость при сильной локализации

При низких температурах носители локализуются на дефектах, примесях и других несовершенствах, неизбежно присутствующих в образце. Энергии локализованных электронов лежат ниже дна зоны проводимости, а волновые функции сосредоточены в конечной области пространства: $\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi)$, где \mathbf{r}_0 – координата центра локализации, а ξ называется длиной локализации. Координаты центров занимают случайные положения в образце.

В случае локализации на примесях, даже идентичных, примесной уровень $-E_0$ расплывается в зону из-за хаотических дальнодействующих электрических полей примесей, которые меняют энергию локализации на всех центрах. В результате все центры имеют разные энергии: два центра с одинаковой энергией находятся на бесконечном состоянии друг от друга. Получается, что энергии ε локализованных состояний распределены квазинепрерывно, поэтому можно ввести понятие зоны локализованных состояний (в случае локализации на примесях в легированном полупроводнике – примесной зоны), в которой имеется плотность состояний $g(\varepsilon)$. Положение уровня Ферми и плотность состояний вычисляются с помощью самосогласованной процедуры. В нулевом приближении плотность состояний имеет вид колокола, центр которого ниже дна зоны проводимости на энергию E_0 , а уровень Ферми располагается немного выше центра.

При конечной температуре $T \sim E_0$ носители могут, поглотив фонон, делокализоваться и внести вклад в проводимость. Вероятность такого процесса пропорциональна Больцмановской экспоненте, поэтому сопротивление образца в таком режиме зависит от температуры по закону Аррениуса:

$$R = R_0 \exp(E_0/T). \quad (266)$$

По температурной зависимости $\ln R$ судят о выполнении этих предсказаний.

XII.1. Прыжковая проводимость

При более низких температурах $T < E_0$ делокализация невозможна, и возникает перенос заряда по локализованным состояниям. Он осуществляется в результате “прыжков”, то есть туннелирования с одного центра локализации на другой. Это туннелирование не может быть резонансным, поэтому требует поглощения фонона. Следовательно,

вероятность прыжка $i \rightarrow j$ ($\varepsilon_i > \varepsilon_j$) имеет две малости – туннельную и температурную:

$$\frac{1}{\tau_{ji}} \propto e^{-2r_{ij}/\xi} e^{-\varepsilon_{ij}/T}. \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j. \quad (267)$$

Соединим мысленно каждую пару центров локализации воображаемым сопротивлением $R_{ji} \propto \tau_{ji}$. Получится сетка случайных сопротивлений, называемая сеткой Миллера-Абрахамса. Сопротивление образца равно сопротивлению такой сетки резисторов, которые можно считать равными $R_0 \exp(2r_{ij}/\xi + \varepsilon_{ij}/T)$ с одинаковыми R_0 .³

Рассчитать сопротивление этой сетки невозможно, но точно это делать и не нужно. Решение задачи упрощается, потому что сопротивления между далеко расположеными узлами экспоненциально велики, и ток через них точно не потечёт. На этом основан принцип решения задачи: из сетки одно за другим убираются самые большие сопротивления до тех пор, пока сохраняется её односвязность. В итоге останется бесконечный кластер, по которому и осуществляется транспорт в неупорядоченной системе. Сопротивление образца будет равно самому большому сопротивлению, которое пришлось оставить. Аппарат, позволяющий таким образом рассчитывать сопротивление неупорядоченных систем, называется *теорией протекания*. Она определяет перколяционный радиус r_c – характерное расстояние между центрами локализации в кластере – при заданной концентрации центров n . Ясно, что $r_c = \alpha_d n^{-1/d}$, где $d = 2, 3$ – размерность пространства. Численные расчёты позволяют определить $\alpha_{2,3}$.

XII.2. Прыжки на ближайшие центры

Относительно простой случай – это режим, когда идут прыжки только на ближайшие центры. Наиболее вероятно, что исходное и конечное состояния будут по энергии вблизи максимума плотности состояний, то есть $\varepsilon_i \sim \varepsilon_j \sim E_0$. А поскольку первое из них должно быть занятым, а второе – свободным, их энергии локализации удовлетворяют неравенству $\varepsilon_i > \mu > \varepsilon_j$. Поэтому для прыжков на ближайшие соседи имеем

$$R = R_0 \exp(|\mu - E_0|/T). \quad (268)$$

³ Можно показать, что $R_0 = T/(e^2 \Gamma)$, где Γ – темп переходов $i \rightarrow j$ в отсутствие внешнего поля, равный темпу обратных переходов $j \rightarrow i$.

Получается, что температурный множитель одинаков для всех пар, и сопротивление есть

$$R = R_0 \exp\left(\frac{|\mu - E_0|}{T} + \frac{2r_c}{\xi}\right) = R_0 \exp\left(\frac{|\mu - E_0|}{T} + \frac{2\alpha_d}{\xi n^{1/d}}\right). \quad (269)$$

В случае легированного полупроводника ξ – это боровский радиус: $\xi = a_B = \hbar^2 \kappa / (me^2)$, он известен из других измерений. Полученные из численного моделирования значения $\alpha_{2,3}$ хорошо согласуются с зависимостями сопротивления от концентрации при не слишком низких температурах.

Экспериментальные данные существуют для большого разброса концентраций – она варьировалась на 3 порядка величины. При этом сопротивление меняется на целых 12 порядков! И в диапазоне $T = 1 \dots 10$ К сопротивление экспоненциально зависит от $1/T$. Но наклон меняется с E_0/T при $T \approx 4 \dots 10$ К на $|\mu - E_0|/T$ при $T \approx 1 \dots 4$ К

XII.3. Прыжки с переменной длиной. Закон Мотта

При $T \ll |\mu - E_0|$ уже трудно найти пару ближайших соседей из заполненного и пустого состояния. Действительно, большинство локализованных носителей имеют энергию $\approx E_0$, и, следовательно, они заняты. Поэтому транспорт будет идти по некоторой полосе вблизи энергии Ферми, и вопрос состоит в том, какова её ширина ε .

В такой полосе находится $N(\varepsilon) = g\varepsilon$ состояний на единицу объёма, где g – плотность состояний на уровне Ферми. Важное предположение: будем считать, что g не меняется на промежутке шириной ε вблизи μ . Среднее расстояние между центрами локализации $\bar{r}_{ij} \approx N^{-1/d}$, где $d = 2, 3$ – размерность пространства. И, поскольку разница энергий между ними $\sim \varepsilon$, вероятность прыжка имеет вид

$$W_{ji} \propto \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T} - \frac{2}{\xi N^{1/d}(\varepsilon)}\right) = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T} - \frac{2}{\xi g^{1/d} \varepsilon^{1/d}}\right). \quad (270)$$

Видно, что имеется оптимальная ширина полоски: если она будет очень широкой, то не будет активации, а если слишком узкой, то придётся прыгать на очень длинное расстояние, что не выгодно. Оптимальная ширина находится из минимизации показателя экспоненты:

$$\varepsilon_{\text{opt}} \approx \left(\frac{T}{g^{1/d} \xi}\right)^{d/(d+1)}. \quad (271)$$

Отсюда следует, что полоса, в которой происходит транспорт, а с ней и длина прыжка, зависят от температуры. Это объясняет название данного режима.

Сопротивление зависит от температуры как $\exp(\varepsilon_{\text{opt}}/T)$, что даёт

$$R = R_0 \exp \left[\left(\frac{T_M}{T} \right)^{\frac{1}{d+1}} \right], \quad T_M = \frac{1}{g\xi^d}. \quad (272)$$

Величина T_M и зависимость $-\ln R \propto 1/T^{1/4}$ (или $1/T^{1/3}$ в двумерии) называются соответственно температурой и законом Мотта.

Закон Мотта наблюдается в экспериментах при низких температурах, но только в тех образцах, вблизи которых есть металлический электрод.

XII.4. Кулоновская щель. Закон Эфроса-Шкловского

В большинстве образцов показатель экспоненты не подчиняется закону Мотта. Принципиальная ошибка вышеизложенных рассуждений – игнорирование роли кулоновского взаимодействия. Его можно не учитывать только при сильной экранировке, в остальных же случаях оно приводит к новым результатам. Кулоновское взаимодействие существенно изменяет плотность локализованных состояний. На уровне Ферми плотность состояний g , как мы сейчас увидим, обращается в ноль.

Рассмотрим два центра, i и j , в некой полосе ε вблизи уровня Ферми. Пусть первый центр занят, а второй свободен: $E_i < \mu < E_j$ (здесь удобнее пользоваться энергиями E , а не энергиями локализации $\varepsilon = -E$). С учётом кулоновского отталкивания эти два центра не могут находиться на близком расстоянии.

Расстояние между центрами можно оценить следующим образом. При мысленном переносе электрона с i на j энергия системы меняется. Это изменение энергии должно быть положительным – иначе в равновесии электрон занимал бы уровень j , а не i . Изменение энергии при переходе $i \rightarrow j$ есть

$$E_j - E_i - \frac{e^2}{\kappa r_{ij}} > 0. \quad (273)$$

Здесь последнее слагаемое можно интерпретировать как притяжение электрона к оставленной им дырке, то есть так же, как экситонный эффект.

Определяя отсюда $\bar{r}_{ij} \approx e^2/[\kappa(\varepsilon_j - \varepsilon_i)] \approx e^2/\kappa\varepsilon$, получаем количество состояний в полоске ε

$$N_d(\varepsilon) \approx \frac{1}{\bar{r}_{ij}^d} \approx \left(\frac{\kappa\varepsilon}{e^2} \right)^d, \quad (274)$$

и плотность состояний

$$g_d(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = d\left(\frac{\kappa}{e^2}\right)^d \varepsilon^{d-1}, \quad g_d(0) = 0. \quad (275)$$

То есть существует щель в плотности состояний на уровне Ферми. Её причиной является кулоновское взаимодействие, поэтому она называется *кулоновской щелью*. Эта щель – “мягкая”: плотность состояний обращается точно в ноль только в одной точке, а вблизи энергии Ферми она растёт как ε^2 или как $|\varepsilon|$ соответственно в 3D и 2D системах.

Такое поведение плотности состояний меняет температурную зависимость сопротивления. Снова минимизируя показатель экспоненты

$$\frac{1}{\tau_{ji}} \propto \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T} - \frac{2e^2}{\xi\kappa\varepsilon}\right), \quad (276)$$

получим

$$\varepsilon_{\text{opt}} \approx \sqrt{T \frac{e^2}{\kappa\xi}}, \quad (277)$$

и для сопротивления

$$R = R_0 \exp\left[\left(\frac{T_{\text{ES}}}{T}\right)^{1/2}\right], \quad T_{\text{ES}} = \frac{e^2}{\kappa\xi}. \quad (278)$$

Величина T_{ES} и зависимость $-\ln R \propto 1/T^{1/2}$ (для обеих размерностей $d = 2, 3$) называются температурой и законом Эфроса-Шкловского. Эта зависимость наблюдается при низких температурах 0.01...1 К в 90 % экспериментов.

XIII. Проводимость квантовых точечных контактов

Современная технология позволяет располагать сверху двумерного электронного газа металлические электроды, на которые можно подавать напряжение. Если это напряжение отрицательно, то под ними для электронов образуется энергетический барьер, и они могут распространяться только в узком зазоре между электродами. Ширина такого зазора может быть несколько сотен нанометров, то есть меньше длины свободного пробега в двумерном газе без электродов. Он представляет собой баллистический одномерный канал (квантовую проволоку), соединяющий два больших двумерных электронных резервуара. Такая структура называется квантовым точечным контактом.

Электронные состояния в точечном контакте локализованы в поперечных направлениях и могут распространяться только вдоль контакта. Энергия электрона, распространяющегося с волновым вектором k , есть $E_n + \varepsilon_k$, где ε_k – кинетическая энергия, например $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ (m – эффективная масса), а E_n ($n = 0, 1, 2 \dots$) – энергии размерного квантования в потенциале, создаваемом электродами.

Пусть канал имеет ширину W , тогда количество подзон под уровнем Ферми есть максимальное число электронных полуволн, которые могут уместиться на длине W : $M = 2W/\lambda_F$ (или $M = \sqrt{\mu/(\hbar^2\pi^2/2mW^2)}$). Изменяя энергию Ферми можно заполнять или опустошать одномерные подзоны размерного квантования.

XIII.1. Проводимость идеальной квантовой проволоки

Рассмотрим ситуацию, когда между берегами контакта приложена разность потенциалов U . Это означает, что левый и правый берега находятся в равновесии с термостатами, имеющими разные химические потенциалы μ_L и μ_R ($eU = \mu_L - \mu_R$). Рассчитаем электрический ток при баллистическом распространении по одномерному каналу. Рассмотрим одну заполненную подзону:

$$j_1 = e \sum_{k>0} v_k [f_0(\varepsilon_k - \mu_L) - f_0(\varepsilon_k - \mu_R)]. \quad (279)$$

Здесь f_0 – равновесная функция распределения, скорость, как обычно, $v_k = \hbar^{-1} d\varepsilon_k / dk$, и учтено, что электроны, вылетающие из левого и правого контактов, имеют скорости $\pm v_k$. Переходя к интегрированию по энергии, видим, что скорость сокращается, и

получается универсальный результат:

$$j_1 = e \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} v_k [f_0(\varepsilon_k - \mu_L) - f_0(\varepsilon_k - \mu_R)] = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\varepsilon_k (-f'_0)(\mu_L - \mu_R) = \frac{e^2}{h} U. \quad (280)$$

Видно, что каждая одномерная подзона вносит вклад в проводимость, равный e^2/h .

Если заполнено M одномерных подзон размерного квантования, то, с учётом спина, проводимость есть

$$G = 2M \frac{e^2}{h}. \quad (281)$$

Зависимость проводимости от энергии Ферми, которая контролируется внешним напряжением, имеет при низкой температуре вид ступенчатой функции, которая возрастает на $2e^2/h$ при каждом пересечении дна очередной одномерной подзоны.

XIII.2. Диссипация энергии

Одномерный канал, по которому летят электроны, – баллистический. То есть в нём ни импульс, ни энергия, не теряются. В то же время, мы получили конечную проводимость, а, значит, и конечное выделение тепла в такой квантовой проволоке. Где же теряется энергия?

Для ответа на этот вопрос нужно следить за энергией электрона E . Она на $\mu_L - E$ ниже уровня Ферми в левом резервуаре и выше на $E - \mu_R$ уровня Ферми в правом. Попадая в правый резервуар, электрон термализуется (испускает фонон), теряя при этом избыток энергии. Также термализуется и дырка, оставшаяся от него в левом резервуаре. Дырка имела избыток энергии $\mu_L - E$. В результате решётке отдаётся энергия $\mu_L - E + E - \mu_R = eU$. Поглощаемая мощность есть $Uj = GU^2$. Видно, что поглощение происходит в левом и правом контактах (в истоке и в стоке). Поэтому $R_c = 1/G = h/(2Me^2)$ называют *контактным сопротивлением*.

Ясно, что равновесность распределения в контактах нарушается вблизи их краёв. Это происходит на расстоянии порядка $v_F \tau_\varepsilon$, где τ_ε – время испускания фонона.

XIII.3. Формула Ландауэра

В реальности длина баллистических квантовых контактов ненамного превосходит их ширину. Поэтому более адекватной является рассмотрение плавного потенциала,

ограничивающего движение электронов в поперечном направлении. В такой ситуации волновая функция электрона в одномерной подзоне n , налетающего на контакт слева, имеет вид

$$\psi_n^{\rightarrow}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r_n e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ t_n e^{-ikx}, & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (282)$$

Здесь амплитудные коэффициенты отражения r_n и пропускания t_n определяются свойствами потенциала, ограничивающего контакт. В результате среднее значение скорости справа равно $v_k |t_n|^2$, и проводимость поэтому имеет вид (формула Ландауэра)

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n |t_n(E_F)|^2 = \frac{2e^2}{h} \sum_n \mathcal{T}_n(E_F). \quad (283)$$

Здесь $\mathcal{T}_n = |t_n|^2 \leq 1$ – зависящий от энергии коэффициент пропускания. Было учтено, что коэффициенты пропускания слева направо и справа налево совпадают. Коэффициент пропускания ступенчатым образом зависит от энергии электрона.

Возможность отражения назад от контакта уменьшает проводимость. Соответственно уменьшается и поглощаемая мощность.

Усиление отражения от контакта связано, кроме прочего, и с усилением когерентного рассеяния назад, то есть со слабой локализацией. Магнитное поле, перпендикулярное плоскости контакта, уменьшает когерентное отражение от контакта и увеличивает его проводимость. Величину характерного поля можно оценить как $(eB/\hbar c)WL \sim 1$. Для контакта с размерами ~ 10 нм получаем $B \sim 0.1$ Тл.

XIII.4. Диффузионный предел

Рассмотрим теперь, как изменяется проводимость канала при добавлении примесей.

При наличии одной примеси в канале его проводимость есть $G = \frac{2Me^2}{h}\mathcal{T}_1$, где \mathcal{T}_1 – коэффициент пропускания канала с одной примесью. Сопротивление проволоки $R = 1/G$ удобно представить в виде суммы

$$R = \frac{h}{2e^2 M \mathcal{T}_1} = \frac{h}{2e^2 M} + \frac{h(1 - \mathcal{T}_1)}{2e^2 M \mathcal{T}_1} \equiv R_c + R_w, \quad (284)$$

где второе слагаемое, добавившееся к контактному сопротивлению идеальной проволоки, описывает сопротивление самой проволоки.

Если рассмотреть две примеси с коэффициентами пропускания \mathcal{T}_1 и \mathcal{T}_2 и отражения $\mathcal{R}_{1,2} = 1 - \mathcal{T}_{1,2}$, то полный коэффициент пропускания будет

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_1\mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_1\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1\mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_1\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1\mathcal{R}_2\mathcal{R}_1\mathcal{T}_2 + \dots = \frac{\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2}{1 - \mathcal{R}_1\mathcal{R}_2} = \frac{\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2}{\mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 - \mathcal{T}_1\mathcal{T}_2}. \quad (285)$$

Отсюда следует:

$$\frac{1 - \mathcal{T}}{\mathcal{T}} = \frac{\mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 - 2\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2}{\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2} = \frac{1 - \mathcal{T}_1}{\mathcal{T}_1} + \frac{1 - \mathcal{T}_2}{\mathcal{T}_2}. \quad (286)$$

Видно, что вклады в сопротивление проволоки $R_w \propto (1 - \mathcal{T})/\mathcal{T}$ некогерентно складываются из вкладов отдельных рассеивателей. Поэтому для N рассеивателей имеем:

$$\frac{1 - \mathcal{T}(N)}{\mathcal{T}(N)} = N \left\langle \frac{1 - \mathcal{T}_i}{\mathcal{T}_i} \right\rangle, \quad (287)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по рассеивателям, и для пропускания

$$\mathcal{T}(N) = \frac{1}{1 + N \langle (1 - \mathcal{T}_i)/\mathcal{T}_i \rangle}. \quad (288)$$

Для рассеивателей, распределённых по длине проволоки с плотностью \mathcal{N} имеем $N = \mathcal{N}L$, откуда

$$\mathcal{T}(N) = \frac{l}{L + l}, \quad l = \frac{1}{\mathcal{N} \langle (1 - \mathcal{T}_i)/\mathcal{T}_i \rangle} = \frac{1}{\mathcal{N} \langle \mathcal{R}_i/\mathcal{T}_i \rangle}. \quad (289)$$

Смысл длины l становится понятным, если рассмотреть предел слабых рассеивателей $\mathcal{R}_i \ll 1$: при этом $1/l \approx \mathcal{N} \langle \mathcal{R}_i \rangle$, то есть $1/l$ есть плотность вероятности рассеяния (назад).

Отсюда полное сопротивление N частей проволоки

$$R = \frac{h}{2e^2 M \mathcal{T}(N)} = \frac{h}{2e^2 M} \left(1 + \frac{L}{l} \right) \approx \frac{h}{2e^2 M} \frac{L}{l}. \quad (290)$$

Видно, что для длинной проволоки $L \gg l$ вклад контактного сопротивления мал.

Поскольку число заполненных подзон $M = k_F W / \pi$, сопротивление $R_w = \rho_w L / W$, где ρ_w – удельное сопротивление, и проводимость $\sigma_w = 1/\rho_w$ имеет вид

$$\sigma_w = \frac{e^2}{h} k_F l_d, \quad l_d = \frac{2}{\pi} l. \quad (291)$$

Мы получили, что при непрерывном распределении рассеивателей (в диффузационном пределе) проводимость контакта описывается формулой Друдэ, в которой роль длины свободного пробега играет l_d .

XIV. Эффект Шубникова-де Гааза

Кинетическое уравнение даёт выражение для тензора сопротивления в магнитном поле при произвольном значении $\omega_c\tau$, но при $\omega_c, 1/\tau \ll \varepsilon_F/\hbar$. В данной лекции мы рассмотрим явления, имеющие место в более сильных полях, когда $\hbar\omega_c \lesssim \varepsilon_F$, то есть когда под уровнем Ферми располагается конечное число уровней Ландау. Такие классически-сильные поля также называются *квантующими*. При этом кинетическое уравнение неприменимо, потому что компоненты волнового вектора в сильном магнитном поле перестают коммутировать: как известно из квантовой механики $[k_\alpha k_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma e/\hbar c$, где \hat{e} – полностью антисимметричный тензор Леви-Чивита. Поэтому для получения точных выражений для проводимости системы требуется оперировать матрицей плотности или функциями Грина, что выходит за рамки данного курса. Мы не будем получать точные выражения, но рассчитаем величины, которые отражают основные черты проводимости в квантующих полях.

Сначала мы рассмотрим объёмные системы, а затем – двумерные. В трёхмерной задаче об электроне в магнитном поле $\mathbf{B} \parallel z$ состояние электрона характеризуется набором (k_z, n, k_y, s) . Здесь $s = \pm 1/2$ – проекция спина на z , а волновая функция зависит от трёх других переменных:

$$\psi_{k_z nk_y}(\mathbf{r}) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} \phi_n\left(\frac{x - x_0}{l_B}\right), \quad x_0 = -k_y l_B^2, \quad l_B = \sqrt{\hbar c/eB}. \quad (292)$$

Энергия же зависит только от k_z , n и s – имеется набор одномерных подзон:

$$\varepsilon_{n,s}(k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) - g\mu_B s B_z. \quad (293)$$

В двумерном случае волновая функция локализована по z , и энергия зависит только от n и s , то есть спектр полностью дискретен.

XIV.1. Плотность состояний в трёхмерных системах

Поведение проводимости в квантующих полях определяется плотностью состояний.

Рассчитаем плотность состояний с проекцией спина s в магнитном поле:

$$g_s(\varepsilon) = \sum_{n,k_z,k_y} \delta[\varepsilon - \varepsilon_{n,s}(k_z)]. \quad (294)$$

Суммирование по k_y даёт $1/(2\pi l_B^2)$, и остаётся проинтегрировать по k_z :

$$g_s(\varepsilon) = g(\varepsilon_s) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \delta \left[\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \varepsilon_s \right], \quad \varepsilon_s \equiv \varepsilon + g\mu_B s B_z. \quad (295)$$

Аргумент δ -функции обращается в ноль при $k_z = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon_s - \hbar\omega_c (n + \frac{1}{2})]}$, поэтому получаем:

$$g(\varepsilon_s) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \frac{2}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \sum_n \frac{\Theta[\varepsilon_s - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})]}{\sqrt{\varepsilon_s - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})}}. \quad (296)$$

Получилась корневая плотность состояний, характерная для одномерных подзон. Она имеет вид суммы таких “корней”, повторяющихся с периодом $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_c$.

Проводимость при нулевой температуре определяется плотностью состояний на уровне Ферми $g_{\text{tot}}(\varepsilon_F)$. Поэтому даже без точного расчёта уже можно сделать вывод о том, что проводимость будет осциллирующей функцией от $\varepsilon_F/\hbar\omega_c \propto 1/B_z$. Такие осцилляции наблюдаются при низких температурах во многих проводящих системах (металлах, полупроводниках) и называются осцилляциями Шубникова-де Гааза.

Наличие зеемановского расщепления означает магнитный момент системы \mathbf{M} . Из-за осцилляций плотности состояний M_z/B_z не является постоянной, а осциллирует с тем же периодом. Осцилляции намагниченности называются эффектом де Гааза-ван Альфвена. Намагниченность – не кинетическая, а термодинамическая величина, для её расчёта достаточно знать лишь равновесную функцию распределения, поэтому можно получить для M_z точное выражение с помощью методов статистической физики.

Для выяснения основных особенностей магнитоосцилляций преобразуем плотность состояний (296) к более удобной форме, где периодичность будет в явном виде. Рассмотрим значения полей, при которых уровень Ферми проходит через высокие номера уровней Ландау: $n \approx \varepsilon_F/\hbar\omega_c = 5 \dots 10$. Поскольку $n \gg 1$, можно перейти в (296) от суммирования по n к интегрированию. Тогда, вводя вместо n новую переменную интегрирования $\hbar\omega_c n$, убеждаемся, что зависимость от ω_c пропадает, и мы получаем трёхмерную плотность состояний

$$\bar{g}(\varepsilon_s) \propto \sqrt{\varepsilon_s}. \quad (297)$$

Чтобы учесть квантование спектра, рассчитаем сумму (296) более точно. Для этого

используем формулу суммирования Пуассона: ⁴

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dne^{2\pi i kn} f(n) + \frac{f(0)}{2}. \quad (298)$$

Слагаемое с $k = 0$ даёт плавный вклад (297), а с $k \neq 0$ – осцилляции:

$$g(\varepsilon_s) = \bar{g}(\varepsilon_s) \left\{ 1 + 2\text{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\hbar\omega_c}{2\sqrt{\varepsilon_s}} \int_0^{\infty} dne^{2\pi i kn} \frac{\Theta[\varepsilon_s - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})]}{\sqrt{\varepsilon_s - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})}} \right\}. \quad (299)$$

Здесь учтено, что последнее слагаемое в формуле Пуассона даёт малый вклад. Переходя к переменной $x = \hbar\omega_c(n + 1/2)/\varepsilon_s$, получаем:

$$g(\varepsilon_s) = \bar{g}(\varepsilon_s) \left\{ 1 + 2\text{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^1 dx \frac{\exp[2\pi ik(x\varepsilon_s/\hbar\omega_c - 1/2)]}{2\sqrt{1-x}} \right\}. \quad (300)$$

Вводя переменную $y = \sqrt{1-x}$, получаем

$$g(\varepsilon_s) = \bar{g}(\varepsilon_s) \left\{ 1 + 2\text{Re} \sum_{k=1}^{\infty} e^{2\pi ik(\varepsilon_s/\hbar\omega_c - 1/2)} \int_0^1 dy \exp(-2\pi iy^2 k \varepsilon_s / \hbar\omega_c) \right\}. \quad (301)$$

Так как $2\pi k \varepsilon_s \gg \hbar\omega_c$, аргумент экспоненты быстро осциллирует. Поэтому вклад в интеграл даётся малыми y , и можно продлить интегрирование до ∞ . А такой интеграл вычисляется:

$$\int_0^{\infty} dy \exp(-i\alpha y^2) = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}}. \quad (302)$$

В результате плотность состояний в спиновой подзоне s имеет вид

$$\begin{aligned} g(\varepsilon_s) &= \bar{g}(\varepsilon_s) \left[1 + 2\text{Re} \sum_{k=1}^{\infty} e^{2\pi ik\varepsilon_s/\hbar\omega_c} (-1)^k e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{8k\varepsilon_s}} \right] \\ &= \bar{g}(\varepsilon_s) \left[1 + \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_s}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \cos(2\pi k \varepsilon_s / \hbar\omega_c - \pi/4)}{\sqrt{k}} \right]. \end{aligned} \quad (303)$$

Плотность состояний является плавной функции энергии, не зависящей от поля, на которую накладываются осцилляции с периодом $\varepsilon_s/\hbar\omega_c$. Амплитуда этих осцилляций имеет относительную малость $\sqrt{\hbar\omega_c/\varepsilon_s} \ll 1$. Кроме того, она спадает с ростом номера k , поэтому можно приближённо учитывать только слагаемое с $k = 1$.

⁴ Формула Пуассона получается из равенства $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x}$, которое умножают на $f(x)$ и интегрируют по x от 0 до ∞ .

XIV.2. Проводимость в трёхмерных системах

В проводимость вносят вклад носители, энергии которых лежат в полоске шириной T вблизи уровня Ферми. Это учитывается следующим образом:

$$\sigma \propto \sum_{s=\pm 1/2} \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon + g\mu_B s B_z) [-f'_0(\varepsilon)]. \quad (304)$$

Обычно в полупроводниках зеемановское расщепление меньше циклотронного, а, значит, оно много меньше энергии Ферми: $g\mu_B B_z \lesssim \hbar\omega_c \ll \varepsilon_F$. Поэтому при суммировании по s его можно учитывать только в аргументе косинуса:

$$\sigma \propto \int_0^\infty d\varepsilon \bar{g}_{\text{tot}}(\varepsilon) \left[1 + \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon}} \sum_{k=1}^\infty \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} \cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{\pi k g m}{2m_0}\right) \right] [-f'_0(\varepsilon)]. \quad (305)$$

Несмотря на то, что энергия Ферми превышает как циклотронную энергию, так и температуру, отношение этих двух малых энергий $T/\hbar\omega_c$ может быть произвольным. Поэтому положим $\varepsilon = \varepsilon_F$ только в плавных слагаемых:

$$\sigma \propto \bar{g}_{\text{tot}}(\varepsilon_F) \left\{ 1 + \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_F}} \sum_{k=1}^\infty \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} \cos\left(\frac{\pi k g m}{2m_0}\right) \int_0^\infty d\varepsilon \cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) [-f'_0(\varepsilon)] \right\}, \quad (306)$$

а оставшийся интеграл вычислим более точно. Вводя переменную $\epsilon = \varepsilon - \varepsilon_F$, лежащую в интервале $(-\varepsilon_F, \infty)$, при интегрировании по ней заменяем нижний предел на $-\infty$. Тогда из чётности функции $[-f'_0(\epsilon)] = 1/[4T \cosh^2(\epsilon/2T)]$ получаем

$$\cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \int_{-\infty}^\infty d\epsilon \cos\left(\frac{2\pi k\epsilon}{\hbar\omega_c}\right) [-f'_0(\epsilon)] = \cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \frac{kz}{\sinh(kz)}, \quad (307)$$

где z определяется отношением тепловой и циклотронной энергий:

$$z = \frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_c}. \quad (308)$$

Мы получили магнитоосцилляции проводимости в виде

$$\sigma \propto \bar{g}_{\text{tot}}(\varepsilon_F) \left[1 + \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_F}} \sum_{k=1}^\infty \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} \cos\left(\frac{\pi k g m}{2m_0}\right) \cos\left(\frac{2\pi k\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \frac{kz}{\sinh(kz)} \right]. \quad (309)$$

Осцилляции, в отличие от плавной части сопротивления, очень чувствительны к нагреву системы. Видно, что когда $z \ll 1$, справедлив результат при нулевой температуре, а при $z \sim 1$ осцилляции сильно подавляются. Они практически экспоненциально

затухают при температурах $T \sim \hbar\omega_c/10$, то есть при разогреве от 2 до 10 К амплитуда осцилляций уменьшается на порядок. Это обусловлено температурным размытием электронного энергетического распределения.

При выводе мы не принимали во внимание рассеяние электронов. Качественно роль столкновений легко оценить. Если среднее время столкновений равно τ , то неопределенность в энергии электрона порядка \hbar/τ . Эта величина играет ту же роль, что и температура. Поэтому можно ожидать, что учет столкновений приводит к новому экспоненциальному множителю. Это соответствует действительности:

$$\sigma \propto \bar{\sigma} \left[1 + \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_F}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} \cos\left(\frac{\pi k g m}{2m_0}\right) \cos\left(\frac{2\pi k \varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \frac{kz}{\sinh(kz)} e^{-k\pi/(\omega_c\tau)} \right]. \quad (310)$$

Отметим, что здесь τ описывает уширение уровней, поэтому оно является полным уходным временем. Его ещё называют квантовым временем рассеяния и обозначают τ_q , чтобы отличить от транспортного времени τ_{tr} .

Иногда полученную формулу пишут в приближённом виде, вводя температуру Дингля $T_D = \hbar/(2\pi\tau_q)$:

$$\sigma_{osc}(T) \propto \cos\left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \exp\left[-\frac{2\pi^2(T + T_D)}{\hbar\omega_c}\right]. \quad (311)$$

Из периода осцилляций Шубникова-де Гааза определяют концентрацию носителей, а из температурной зависимости – квантовое время рассеяния и циклотронную массу.

XIV.3. Эффект в двумерных системах

Посмотрим, что изменится для двумерных систем. Поскольку спектр полностью дискретный, вместо (296) имеем

$$g(\varepsilon_s) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_n \hbar\omega_c \delta\left[\varepsilon_s - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]. \quad (312)$$

Применяя формулу Пуассона и учитывая уширение уровней за счёт рассеяния, получаем

$$g(\varepsilon_s) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos\left(\frac{2\pi k \varepsilon_s}{\hbar\omega_c}\right) e^{-k\pi/(\omega_c\tau_q)} \right]. \quad (313)$$

Видно, что амплитуда осцилляций имеет малость по сравнению с плавной частью только из-за рассеяния. То есть эффект магнитоосцилляций усилен по сравнению с 3D

системами. Далее будем считать параметр $\exp[-\pi/(\omega_c \tau_q)] \ll 1$ и удерживать только слагаемое с $k = 1$.

Учёт температурного размытия осцилляций и суммирование по спиновым подзонам полностью аналогичны 3D случаю. Поэтому осцилляции малой амплитуды описываются величиной δ :

$$\delta = \cos\left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(\frac{\pi gm}{2m_0}\right) e^{-\pi/\omega_c \tau_q} \frac{z}{\sinh z}, \quad z = \frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_c}. \quad (314)$$

Аргумент магнитоосциллирующего множителя может быть переписан через двумерную концентрацию N :

$$\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} = \frac{2\pi N \Phi_0}{B_z}, \quad \Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{|e|} = 2.05 \times 10^{-7} \text{ Э см}^2. \quad (315)$$

Видно, что при $N = 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $B \sim 1 \text{ Тл} \equiv 10^4 \text{ Э}$ осцилляции будут быстрыми: $\cos\left(2\pi \frac{2.05}{B_z/T}\right)$.

Точные выражения для тензора сопротивления имеют вид:

$$\rho_{xx} = \frac{m}{N e^2 \tau_{\text{tr}}} (1 - 4\delta), \quad \rho_{yx} = \frac{B_z}{N e c} \left[1 + \frac{2}{(\omega_c \tau_{\text{tr}})^2} \delta \right]. \quad (316)$$

XV. Квантовый эффект Холла

Формулы для эффекта Шубникова-де Гааза при увеличении магнитного поля дают осцилляции σ_{xx} с большой амплитудой. Ну а когда уровни Ландау станут полностью расщеплёнными, так что беспорядок уже не будет приводить к их перекрытию, продольная проводимость обратится в ноль. Потому что если уровень Ферми находится в щели между уровнями, то на нём нет носителей. А поскольку

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad (317)$$

в ноль обратится и продольное сопротивление ρ_{xx} .

При этом холловская проводимость отлична от нуля, поскольку она – недиссипативная величина и определяется всеми электронами под уровнем Ферми. Формула (316) для ρ_{xy} приводят к восстановлению классического результата: $\rho_{xy} = B/(NeC)$. Согласуется ли это с экспериментом?

Данные эксперимента: ρ_{xx} действительно обращается в ноль, имея ненулевые значения (пики) в определённых магнитных полях. При этом холловское сопротивление двумерной системы в сильном магнитном поле имеет на зависимости от B плато. На них ρ_{xy} равно целой части от $h/e^2 \approx 25.8$ кОм, точность квантования 10^{-8} – фон Клитцинг (1980). Нобелевская премия (1985) за целочисленный квантовый эффект Холла (ЦКЭХ), h/e^2 – квант сопротивления – также обозначается как R_K и называется постоянной фон Клитцинга.

Использование: определение постоянной тонкой структуры, применения в метрологии ...

XV.1. Бесконечный образец

В отсутствие беспорядка имеются бесконечно узкие уровни Ландау. Поэтому продольная проводимость отлична от нуля только при дискретных значениях магнитного поля – когда какой-либо уровень Ландау проходит через уровень Ферми. То есть зависимость $\sigma_{xx}(B)$ представляет собой набор бесконечно узких пиков, между которыми она обращается в ноль. В принципе, эта картина описывает эксперимент.

Холловская проводимость: в чистом образце все N электронов делокализованы и, двигаясь в скрещенных электрическом и магнитном полях, имеют скорость дрейфа

cE_x/B . Поэтому ток $j = eNcE_x/B$, а проводимость $\sigma_{xy} = Nec/B$ – классический результат. Этот ответ удобно переписать на языке уровней Ландау. Вводят фактор заполнения:

$$\nu = 2\pi l_B^2 N \quad (318)$$

– он принимает целые значения, когда уровень Ферми лежит в щели между уровнями Ландау и равен числу полностью заполненных уровней. Можно записать холловскую проводимость как $\sigma_{xy} = \nu e^2/h$. Отсюда видно, что вклад в холловскую проводимость от любого полностью заполненного уровня Ландау в чистом образце равен e^2/h . Однако $\nu \propto 1/B$ непрерывно изменяется с полем, поэтому такой подход не даёт плато, а приводит к линейной зависимости $\rho_{xy} \propto B$ – противоречие с экспериментом.

Ключевую роль, приводящую к квантованию холловской проводимости, играет беспорядок. Предположим, что случайный потенциал $V(x, y)$ слабый и плавный – соответственно на масштабах $\hbar\omega_c$ и l_B : $|V| \ll \hbar\omega_c$, $|\nabla V| \ll \hbar\omega_c/l_B$. Тогда можно показать, что электроны двигаются по его эквипотенциалам: если x_0, y_0 – координаты центра циклотронной орбиты, а ε – энергия, отсчитанная от центра уровня Ландау, то движение описывается классическим уравнением $V(x_0, y_0) = \varepsilon$. Таким образом, случайный потенциал полностью снимает большое вырождение уровня Ландау – энергии всех $1/(2\pi l_B^2)$ электронов на единицу площади $\varepsilon(x_0, y_0)$ различны. Электроны локализованы вблизи минимумов и максимумов случайного потенциала, вокруг которых они врачаются в противоположные стороны: их скорость есть $\mathbf{v} = (-1/e)\nabla V \times \mathbf{B}/B^2$. И есть только одна энергия – в центре уровня Ландау, которой соответствуют делокализованные состояния.

Отсюда следует, что с увеличением магнитного поля, когда на уровне Ландау стало больше посадочных мест, начинают заполняться локализованные состояния. Продольная проводимость при этом не меняет свой зависимости от поля: остаётся нулевой при всех полях, кроме дискретных значений, при которых делокализованное состояние совпадает с уровнем Ферми. То есть опять $\sigma_{xx}(B)$ – набор бесконечно-узких пиков, конечную ширину даёт короткодействующая (неплавная) часть потенциала беспорядка. Это соответствует эксперименту.

Также отсюда получается и квантование холловской проводимости: пока уровень Ферми пересекает локализованные состояния проводимость не изменяется. При проходе через центр уровня Ландау происходит скачок в σ_{xy} .

Так мы объяснили появления плато в холловской проводимости. Но почему каждый уровень Ландау вносит тот же самый вклад e^2/h , что и в чистом образце, даже при наличии беспорядка, так сильно меняющего все состояния?

Дело в том, что рассеяние между уровнями Ландау очень слабое: беспорядок уширяет плотность состояний, делая её конечной и между уровнями Ландау, но эти поправки экспоненциально малы. В то же время, хотя беспорядок локализует почти все состояния, проводимость полностью заполненного уровня Ландау он изменить не может. Это понятно, если рассмотреть многочастичную волновую функцию всех электронов на заполненном уровне Ландау $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$. В отсутствие беспорядка она даёт проводимость e^2/h , а беспорядок лишь может сдвинуть полную энергию, но никаких изменений в волновой функции не производит – потому, что других многочастичных состояний нет. Ей не с кем смешиваться, поэтому и вклад в проводимость не изменится. Получается, что почти все одночастичные состояния локализованы, но возрастает роль малого количества делокализованных – они вносят такой же вклад в холловскую проводимость, что и все состояния в чистом образце.

То есть мы получили, что $\sigma_{xy} = [\nu]e^2/h$, где целая часть $[\nu]$ – количество (заполненных) уровней Ландау под уровнем Ферми. Каждый заполненный уровень Ландау вносит в проводимость одинаковый вклад e^2/h , но ток переносится только электронами из узкой зоны делокализованных состояний. Если менять положение уровня Ферми (или магнитное поле), то он войдёт в зону локализованных состояний. Однако, проводимость не будет меняться, пока уровень Ферми не пересечёт зону делокализованных состояний (т.е. пока не пройдёт через центр уровня Ландау). В этот момент холловская проводимость изменится на e^2/h , после чего уровень Ферми опять попадёт в зону локализованных состояний, и проводимость не будет меняться. Поэтому на зависимости $\sigma_{xy}(B)$ имеются плато, переход между которыми происходит скачком.

Компоненты тензора сопротивления на плато:

$$\rho_{xy} = \frac{1}{\sigma_{xy}} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{[\nu]}, \quad \rho_{xx} = 0. \quad (319)$$

XV.2. Конечный образец

Физическая природа квантования становится ясной, если учесть конечность образца.

Рассмотрим образец в виде полоски. В нём все состояния квантованные, волновой

вектор k_y пробегает конечное число дискретных значений с шагом $2\pi/L_y$, и то же самое происходит с центрами циклотронных орбит $x_0 = -k_y l_B^2$. Энергия теперь начинает зависеть от k_y , а, значит, и от x_0 . Состояния в “объёме”, т.е. те состояния, у которых x_0 далеко от краёв, мало отличаются от состояний в бесконечном образце. Но вблизи краёв отличие существенно: их уровни энергии загибаются вверх из-за отталкивания от края. Получается, что, когда уровень Ферми лежит в щели между уровнями Ландау, его пересекают $[\nu]$ одномерных подзон – ровно столько, сколько под ним находится уровней Ландау. Квазиклассически их можно воспринимать как электроны, движущиеся по “скачущим” орбитам.

В отсутствие электрического поля краевые состояния имеют скорость, направленную по и против оси y соответственно на правом и левом краях. Направления этих скоростей меняются на противоположные при инверсии направления магнитного поля: $\mathbf{v} = (-1/e)\nabla U \times \mathbf{B}/B^2$, где $U(\mathbf{r})$ – потенциал края образца, отталкивающий электроны. То есть имеются краевые каналы, циркулирующие по или против часовой стрелки. Поэтому они называются киральными. Ясно, что в отсутствие приложенного напряжения электрический ток не течёт – в любой резистор втекает и вытекает одинаковое число носителей в единицу времени, поэтому разность потенциалов на его концах не возникает. А когда к образцу приложена разность потенциалов ΔU , по краю течёт электрический ток $j_1 = (e^2/h)\Delta U$, потому что любой одномерный канал вносит вклад в проводимость, равный e^2/h . Количество одномерных каналов равно $[\nu]$, поэтому полный ток есть $[\nu]j_1$. В результате холловская проводимость $\sigma_{xy} = [\nu]e^2/h$.⁵

Высокая точность квантования связана с тем, что краевые состояния устойчивы к беспорядку. Это ясно и из квазиклассической картины (после рассеяния на примеси электрон продолжает двигаться вдоль края в ту же сторону), и из квантовой механики (рассеяние назад должно сопровождаться перескоком на противоположный край образца, но это – очень маловероятный процесс).

⁵ В том, что краевой ток вносит вклад именно в холловскую проводимость можно убедиться, рассмотрев реальную экспериментальную ситуацию, когда через образец пропускается ток, а измеряется напряжение, то есть вычисляя сопротивление. При этом продольного напряжения не возникает, а поперечное как раз вызывается краевым током и равно $U_\perp = h/(e^2[\nu])j$.

XV.3. Аргумент Лафлина и топология

Аргумент Лафлина: квантование холловской проводимости связано с калибровочной инвариантностью. Будем считать, что энергия Ферми лежит в щели между уровнями Ландау. Сделаем калибровочное преобразование $A_y \rightarrow A_y - \phi/L_y$, где ϕ – постоянная, имеющая размерность магнитного потока. То есть будем считать, что магнитный поток адиабатически медленно меняется от нуля до ϕ (удобно представить, что образец скручен в цилиндр вокруг оси x). При этом энергетические уровни системы не могут измениться, и всё, что происходит – сдвиг волнового вектора $k \rightarrow k + (e/\hbar c)\phi/L_y$. Значит, при $\phi = 2\pi\hbar c/e \equiv hc/e$ все k увеличиваются на одно минимально возможное значение: $k \rightarrow k + 2\pi/L_y$. Это соответствует сдвигу центра орбиты $x_k = -kl_B^2$ на минимально возможное значение, то есть в соседнее положение. Значит, на каждом уровне Ландау ровно один электрон переходит с левого края на правый. А это означает, что за время Δt , за которое происходит изменение магнитного потока от нуля до $\phi = hc/e$, генерируется электрический ток $j = [\nu]e/\Delta t$. А по закону электромагнитной индукции в контуре возникает эдс $\mathcal{E} = -\dot{\phi}/c = -\phi/(c\Delta t)$. Отсюда $j = -([\nu]ec/\phi)\mathcal{E}$, то есть $\sigma_{xy} = [\nu]e^2/h$.

Связь холловской проводимости с калибровочной инвариантностью позволяет записать её в виде $\frac{e^2}{\hbar}\mathcal{C}$, где \mathcal{C} – некий двумерный интеграл по тору, который обязан быть целым – как заряд в единицах 4π в теореме Гаусса.⁶ Такой объект – целочисленный интеграл – называется топологическим инвариантом, поскольку, как и в теореме Гаусса, он не меняется при изменении поверхности, по которой происходит интегрирование. Поэтому холловская проводимость является топологическим инвариантом.

Исследование холловской проводимости и её связи с краевыми состояниями привело к новым подходам в физике твёрдого тела. Системы оказалось удобно классифицировать по наличию или отсутствию в них краевых состояний на фоне объёмной щели. Оказывается, в некоторых системах всегда существуют такие краевые состояния, какой бы ни был беспорядок. Они существуют, если некий топологический инвариант – двумерный интеграл, имеющий целочисленные значения, – отличен от нуля. Твёрдые тела с локализованными состояниями в объёме и проводящими краевыми состояниями

⁶ Тор возникает потому, что волновая функция электрона при включении магнитного потока умножается на фазу, которую достаточно рассматривать меняющейся от 0 до 2π . Если рассмотреть два потока ϕ_x, ϕ_y , меняющих как A_x , так и A_y , то областью изменения соответствующих фаз будет тор $[0, 2\pi] \otimes [0, 2\pi]$.

называются топологическими изоляторами. Их реализация возможна и без магнитного поля – всё зависит от зонной структуры.

“Премия по фундаментальной физике” (премия Мильнера – совладельца Mail.ru, превышающая нобелевскую примерно в три раза) в 2013 году была присуждена “За теоретическое предсказание и экспериментальное открытие топологических изоляторов” трём учёным. А в 2016 году – “За теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи” – была дана нобелевская премия другим трём учёным.

Итак, холловская проводимость определяется краевыми каналами. По её величине можно сразу определить, сколько краевых каналов пересекают уровень Ферми, то есть сколько заполнено уровней Ландау. При этом продольная проводимость зависит от поля так же, как и в бесконечном образце: она отлична от нуля только когда уровень Ферми пересекает центр уровня Ландау – на переходе между плато. Ширина пика σ_{xx} в конечном образце ненулевая не только из-за беспорядка, но и из-за того, что эквипотенциалей, соединяющих края образца, конечное число.

XV.4. ДКЭХ

Дробный квантовый эффект Холла (ДКЭХ): в образцах высокого качества при низкой концентрации электронов наблюдаются плато ρ_{xy} при дробных факторах заполнения: $1/3, 2/3, 1/5, 2/5, 3/5 \dots$ – на нижнем уровне Ландау; $4/3, 5/3, 7/5, 5/2, 12/5, 13/5, \dots$ – на верхних уровнях Ландау.

В ДКЭХ ключевую роль играет взаимодействие между электронами. Задача о взаимодействующих электронах является сложной для теоретического анализа, а из-за их большого количества в реальном образце ($\sim 10^{11}$) – сложной и для численных расчётов.

Для объяснения Лафлин предложил волновую функцию для заполнения $\nu = 1/m$, $m = 3, 5, 7 \dots$. Эта волновая функция давала энергию немного меньшую, чем приближение Хартри-Фока. Также эта функция даёт меньшую энергию, чем вигнеровский кристалл – состояние, при котором электроны выстраиваются в образце в треугольную решётку. Расчёт холловской проводимости на таком состоянии даёт $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{m}$.

Нобелевская премия (1998) Лафлину и экспериментаторам Штёрмеру и Тсуи.