

Квантовый транспорт в двумерных системах

Содержание

I. Кинетическое уравнение	3
I.1. Свойства интеграла столкновений	7
II. Времена релаксации	9
II.1. Точечные дефекты и экранированные примеси	10
II.2. Кулоновские примеси	10
II.3. Системы с линейным спектром	11
III. Проводимость электронного газа	13
III.1. Проводимость на конечной частоте: вывод из кин. уравнения	15
III.2. Проводимость на конечной частоте: вывод из кв.-мех. рассмотрения непрямых оптических переходов	16
IV. Циклотронный резонанс. Классический эффект Холла	19
IV.1. Изотропная дисперсия	19
IV.2. Циклотронный резонанс в системах с анизотропной массой	20
IV.3. Циклотронная масса при произвольном законе дисперсии	21
IV.4. Квантовый циклотронный резонанс	22
IV.5. Классический эффект Холла	23
V. Расчёт проводимости методом функций Грина	25
V.1. Выражение для проводимости через функцию Грина	26
V.2. Функция Грина при рассеянии на примесях при нулевой температуре	27
V.3. Функция Грина в координатном представлении	30
V.4. Вычисление проводимости на конечной частоте (анизотропное рассеяние)	31
VI. Функция Грина и проводимость в магнитном поле	33
VI.1. Проводимость в классическом магнитном поле	34

VII. Осцилляции Шубникова-де Гааза	36
VII.1. Осцилляции проводимости	37
VII.2. Температурное затухание осцилляций	37
VII.3. Роль спинowego расщепления Зеемана	38
VIII. Слабая локализация	40
VIII.1. Расчёт веерных диаграмм	40
VIII.2. Связь с классической плотностью вероятности возврата	41
VIII.3. Сбой фазы и аномальная температурная зависимость проводимости	42
VIII.4. Магнитосопротивление в классически слабых полях	43
VIII.5. Влияние спиновой релаксации	44
IX. Квадратичные по электрическому полю вклады в функцию распределения	46
IX.1. Разогрев электронов	46
IX.2. Выстраивание электронных импульсов	47
X. Фотогальванический эффект	50
X.1. Симметричный анализ	50
X.2. Расчёт из кинетического уравнения	51

I. Кинетическое уравнение

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 квантовый транспорт проявляется наиболее ярко, характерны тем, что электроны заполняют часть зоны Бриллюэна вблизи минимума зоны проводимости. Это значит, что характерные значения k далеки от границ зоны Бриллюэна $\pm 2\pi/a_0$, где a_0 – постоянная решётки, а характерные энергии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ много меньше, чем величины разрешённых и запрещённых зон:

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

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 $u_{c\mathbf{0}}$, 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.

В идеальном кристалле в отсутствие внешних полей электрон с волновым вектором $\mathbf{k}$ 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. 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

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U + V. \quad (5)$$

Состояние системы описывается матрицей плотности. Уравнение для неё имеет вид

$$i\hbar\dot{\rho} = [\mathcal{H}_0 + U + V, \rho]. \quad (6)$$

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

$$i\hbar\dot{\rho}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = (\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\rho_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}_1} [(U + V)_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1}(U + V)_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}]. \quad (7)$$

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 (7). По дороге мы сформулируем критерии применимости кинетического уравнения.

Напишем уравнение (7) для $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$:

$$i\hbar\dot{f}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}_1} [(U + V)_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}\rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}(U + V)_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}]. \quad (8)$$

Матричный элемент потенциальной энергии внешних полей:

$$U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\mathbf{F} \cdot \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (9)$$

Поэтому первое слагаемое в правой части:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}_1} (U_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}) &= i\mathbf{F} \cdot \sum_{\mathbf{k}_1} \left(\frac{\partial \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} + \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \frac{\partial \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}_1} \right) \\ &= -i\mathbf{F} \cdot \sum_{\mathbf{k}_1} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \left(\frac{\partial \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}_1} + \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}}{\partial \mathbf{k}} \right) = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -i\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (10)$$

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

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}, \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (11)$$

Рассмотрим рассеяние на идентичных произвольно расположенных примесях. В этом случае

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad V_{\mathbf{q}} = V_0(\mathbf{q}) \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}, \quad (12)$$

где $\mathbf{R}_i$ – координаты примесей, а $V_0(\mathbf{q})$ – фурье-компонента потенциала одной примеси. Отсюда видно, что в первом порядке по V возникают комбинации функции распределения с множителями $e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}$, исчезающими после усреднения по расположениям примесей. Неисчезающий вклад от потенциала рассеяния в кинетическое уравнение возникает во втором порядке по V . Для его нахождения мы запишем уравнение для тех недиагональных элементов матрицы плотности, которые присутствуют в правой части уравнения для $f_{\mathbf{k}}$:

$$i\hbar \dot{f}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}_1} (V_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}), \quad (13)$$

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

$$i\hbar \dot{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} = (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'}). \quad (14)$$

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 $t \rightarrow -\infty$.

$$\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} (\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}',\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'}). \quad (15)$$

Подстановка в уравнение (8) даёт:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \left[\frac{\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}', \mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} - (\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right]. \quad (16)$$

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

$$V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} = V_0(\mathbf{q}) V_0(\mathbf{q}') \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_j} = V_0(\mathbf{q}) V_0(\mathbf{q}') \left(\sum_{i \neq j} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_j} + \sum_i e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} \right). \quad (17)$$

Первое слагаемое содержит быстро осциллирующие вклады, которые уйдут при усреднении по расположению примесей. Второе слагаемое возникло от матричных элементов рассеяния на одной и той же примеси. Оно описывает независимое рассеяние всеми примесями и пропорционально количеству (концентрации) примесей N_i . Оно характеризует рассеяние, которое имело бы место в отсутствие интерференции электронных волн, рассеянных разными примесями, то есть некогерентное рассеяние. Именно оно может дать вклад, не исчезающий после усреднения по $\mathbf{R}_i$, если

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' = \mathbf{0}. \quad (18)$$

Но тогда элементы матрицы плотности в правой части (16) сведутся к функции распределения:

$$-\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} N_i |V_0(\mathbf{q})|^2 \left[\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} - (\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right]. \quad (19)$$

Здесь использована вещественность потенциала примеси: $V_0(-\mathbf{q}) = V_0^*(\mathbf{q})$.¹ 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

$$-\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} N_i |V_0(\mathbf{q})|^2 (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar s} + \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\hbar s} \right). \quad (20)$$

Видно, что сумма в круглых скобках чисто мнимая. Переходя к пределу $s \rightarrow 0$ и используя правило

$$\text{Im} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i0} = -\pi \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}), \quad (21)$$

получаем кинетическое уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'}). \quad (22)$$

¹ Величина $N_i |V_0(\mathbf{q})|^2$ есть ничто иное как фурье-компонента $\mathcal{K}(\mathbf{q})$ коррелятора потенциала рассеяния $\mathcal{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle_{\text{imp}}$.

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

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (23)$$

Полученная формула соответствует борновскому приближению теории возмущений – в ответ вошёл матричный элемент, рассчитанный на невозмущённых функциях (в данном случае – плоских волнах). Видно, что в борновском приближении справедлив принцип детального равновесия:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (24)$$

Однако, в третьем порядке по V этот принцип нарушается. Если рассчитать следующую поправку, она также будет отлична от нуля при рассеянии на одной и той же примеси. Её асимметричная часть:

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(a)} = \frac{(2\pi)^2}{\hbar} N_i \sum_{\mathbf{k}''} \text{Im} \{ V_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') V_0(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''}) = -W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(a)}. \quad (25)$$

Можно представлять асимметричное рассеяние как рассеяние на клине или треугольнике.

Ясно, что можно получить и более высокие по степени V вклады в интеграл столкновений. Они имеют малость $\sim \hbar/\varepsilon_k \tau \sim 1/kl$, где τ и $l = v_k \tau$ – соответственно время релаксации и длина свободного пробега.

I.1. Свойства интеграла столкновений

Интеграл столкновений – правая часть кинетического уравнения – равен разности приходного и уходящего слагаемых. Заметим, что при упругом рассеянии он линеен по функции распределения.

В случае рассеяния не на примесях, а на фононах он имеет следующий вид:

$$\text{St}[f_{\mathbf{k}}] = - \sum_{\mathbf{k}'} [W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) - W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'} (1 - f_{\mathbf{k}})], \quad (26)$$

где вероятность рассеяния

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, \pm, \nu} |M(\mathbf{q}, \nu)|^2 \left(N_{\nu\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}' - \mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar \Omega_{\nu\mathbf{q}}). \quad (27)$$

Здесь $N_{\nu\mathbf{q}}$ и $\Omega_{\nu\mathbf{q}}$ – 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 (фр  лиховского) взаимодействия $|M_{PO}|^2 \sim q$. В случае рассеяния 2D электронов на 3D фононах закон сохранения квазиимпульса выполняется только для компонент в плоскости: $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, а матричный элемент

$$M_{2D}(\mathbf{q}) = M_{3D}(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{\infty} dz \varphi^2(z) e^{iq_z z}, \quad (28)$$

$\varphi(z)$ – 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 $N_{\nu\mathbf{q}}$ – распределение Бозе-Эйнштейна, а $f_{\mathbf{k}}$ – функция Ферми-Дирака с одинаковыми температурами:

$$N = \frac{1}{e^{\hbar\Omega/T} - 1}, \quad f_0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/T} + 1}, \quad (29)$$

так как при этом справедливы равенства

$$(N + 1) = e^{\hbar\Omega/T} N, \quad 1 - f_{\mathbf{k}} = e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_F)/T} f_{\mathbf{k}}, \quad (30)$$

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

$$(N + 1)f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'}) = Nf_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}}). \quad (31)$$

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 реш  тки T .

II. Времена релаксации

Вернёмся к упругому рассеянию. В этом случае интеграл столкновений имеет вид (22)

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

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 рассеянии на примесях не релаксирует:

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

Анизотропные поправки релаксируют за характерные времена:

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

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

Если матричный элемент рассеяния на примеси 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 спинтроники.

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):

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

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 квадратом фурье-образа потенциала примесей.

Вычислим времена релаксации для актуальных механизмов рассеяния двумерных электронов.

II.1. 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 уходящему:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0|^2 g_{2D} = \frac{N_i |V_0|^2}{\hbar^3} \equiv \frac{1}{\tau}. \quad (43)$$

II.2. 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:

$$V_0(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon q} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon k \sin(\theta/2)}, \quad |V_0(k, \theta)|^2 = \left(\frac{e^2}{2\pi\epsilon}\right)^2 \frac{1}{4m\epsilon_k(1 - \cos \theta)}. \quad (45)$$

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

$$\frac{1}{\tau_1(\epsilon_k)} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \left(\frac{e^2}{2\pi\epsilon}\right)^2 \frac{g_{2D}}{4m\epsilon_k}, \quad \frac{1}{\tau_2(\epsilon_k)} = \frac{1}{\tau_1(\epsilon_k)} \left\langle \frac{1 - \cos 2\theta}{1 - \cos \theta} \right\rangle_\theta = \frac{2}{\tau_1(\epsilon_k)}, \quad \frac{1}{\tau_3(\epsilon_k)} = \frac{3}{\tau_1(\epsilon_k)}. \quad (46)$$

II.3. 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 линейен: $\epsilon_c = -\epsilon_v = \epsilon_k = \hbar v_0 k$, а волновые функции двухкомпонентны. В зоне проводимости:

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

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 $\langle u_{c\mathbf{k}'} | u_{c\mathbf{k}} \rangle$ также модифицирует зависимость времён релаксации от энергии. Квадрат матричного элемента:

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

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: уходящее время расходится, а времена релаксации гармоник прямо пропорциональны энергии электрона:

$$\frac{1}{\tau_n(\varepsilon_k)} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \left(\frac{e^2 \hbar v_0}{2\pi\epsilon} \right)^2 \frac{g(\varepsilon_k)}{2\varepsilon_k^2} \left\langle \frac{1 - \cos n\theta}{1 - \cos \theta} \frac{1 + \cos \theta}{2} \right\rangle_\theta \propto \frac{1}{\varepsilon_k}. \quad (55)$$

Вычисление даёт:

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

III. Проводимость электронного газа

По функции распределения вычисляются макроскопические величины, измеряемые в эксперименте. Например, концентрация электронов и плотность электрического тока

$$N(\mathbf{r}, t) = \sum_{\nu \mathbf{k}} f_{\nu \mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = e \sum_{\nu \mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\nu \mathbf{k}}(\mathbf{r}, t). \quad (57)$$

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.

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:

$$e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (58)$$

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 :

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f_0'(\varepsilon_p) = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}^{(1)}]. \quad (59)$$

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

$$\text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}^{(1)}] = -\frac{f_{\mathbf{p}}^{(1)}}{\tau_1}. \quad (60)$$

Отсюда получаем:

$$f_{\mathbf{p}}^{(1)} = e\tau_1(\varepsilon_p) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} [-f_0'(\varepsilon_p)]. \quad (61)$$

Плотность электрического тока:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\nu \mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} e\tau_1(\varepsilon_p) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} [-f_0'(\varepsilon_p)] = \mathbf{E} e^2 \sum_{\nu \mathbf{p}} \frac{v_{\mathbf{p}}^2}{2} \tau_1(\varepsilon_p) [-f_0'(\varepsilon_p)] \equiv \sigma \mathbf{E}. \quad (62)$$

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

$$-f'_0(\varepsilon_p) \approx \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_F). \quad (63)$$

Отсюда получаем соотношение Эйнштейна:

$$\sigma = e^2 g_{\text{tot}}(\varepsilon_F) D(\varepsilon_F), \quad (64)$$

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:

$$N = \sum_{\nu p} f_0(\varepsilon_p). \quad (65)$$

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:

$$\sum_{\nu p} [-f'_0(\varepsilon_p)] = \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F}, \quad (66)$$

и проводимость

$$\sigma = e^2 \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F} \frac{v_F^2 \tau_{\text{tr}}}{2}. \quad (67)$$

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 $\varepsilon_F = m v_F^2 / 2$ концентрация $N = g_{2D} \varepsilon_F$ линейна по ε_F . Поэтому

$$\sigma = \frac{N e^2 \tau_{\text{tr}}}{m}. \quad (68)$$

При линейной дисперсии $\varepsilon_F = v_0 p_F$

$$N = \sum_{\nu} \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon_p) d\varepsilon_p \propto \varepsilon_F^2, \quad (69)$$

и проводимость

$$\sigma = \frac{N e^2 \tau_{\text{tr}} v_0^2}{\varepsilon_F}. \quad (70)$$

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 (67), где в случае параболической дисперсии транспортное время есть

$$\tau_{\text{tr}} = \frac{\langle \varepsilon_p \tau_1(\varepsilon_p) \rangle}{\langle \varepsilon_p \rangle}, \quad \langle \Phi(\varepsilon_p) \rangle = \int_0^{\infty} d\varepsilon_p \Phi(\varepsilon_p) [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (71)$$

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

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}e^{-i\omega t} + c.c. \quad (72)$$

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

$$f_{\mathbf{p}}(t) = f_{\mathbf{p}}(\omega)e^{-i\omega t}. \quad (73)$$

Тогда кинетическое уравнение примет вид

$$-i\omega f_{\mathbf{p}}(\omega) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f'_0(\varepsilon_p) = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}(\omega)] = -\frac{f_{\mathbf{p}}(\omega)}{\tau_1}. \quad (74)$$

Это уравнение сводится к случаю нулевой частоты, если произвести замену

$$\frac{1}{\tau_1} \rightarrow \frac{1}{\tau_1} - i\omega \equiv \frac{1}{\tau_{1\omega}}, \quad \tau_{1\omega} = \frac{\tau_1}{1 - i\omega\tau_1}. \quad (75)$$

Отсюда сразу следует, что

$$\sigma(\omega) = e^2 \sum_{\nu \mathbf{p}} \frac{v_p^2}{2} \frac{\tau_1(\varepsilon_p)}{1 - i\omega\tau_1(\varepsilon_p)} [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (76)$$

В случае вырожденного электронного газа

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma(0)}{1 - i\omega\tau_{\text{tr}}}. \quad (77)$$

Энергия, поступающая в единицу времени в электронную систему,

$$Q = \langle \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \rangle_t = 2|E|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)], \quad (78)$$

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

$$Q \propto \frac{\tau_{\text{tr}}}{1 + (\omega\tau_{\text{tr}})^2}. \quad (79)$$

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 не прямых 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

$$\mathcal{H}_{e\text{-}phot}(\mathbf{p}) = -\frac{e}{c}\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = -\frac{e}{i\omega}\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, \quad (80)$$

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

Второй порядок теории возмущений:

$$M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{V_{\mathbf{p}'\mathbf{k}}U_{\mathbf{k}\mathbf{p}}}{\varepsilon_i - \varepsilon_k} + \frac{U_{\mathbf{p}'\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}\mathbf{p}}}{\varepsilon_i - \varepsilon_k}. \quad (81)$$

В нашем случае $V_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} = V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{k})$ – матричный элемент рассеяния, $U_{\mathbf{p}'\mathbf{k}} = \mathcal{H}_{e-photon}(\mathbf{p}')\delta_{\mathbf{p}'\mathbf{k}}$ – матричный элемент взаимодействия со светом. Энергия системы в исходном состоянии $\varepsilon_i = \varepsilon_p + \hbar\omega$. В первом слагаемом, когда сначала поглощается фотон, $\varepsilon_k = \varepsilon_p$, а во втором слагаемом, когда сначала происходит рассеяние, энергия промежуточного состояния системы $\varepsilon_k = \varepsilon_{p'} + \hbar\omega$. Поэтому

$$M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = -\frac{e}{i\omega} V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \mathbf{E} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}} + \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}}{\hbar\omega} \right). \quad (82)$$

Вероятность поглощения фотона:

$$W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega) [f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_{p'})]. \quad (83)$$

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

$$W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 |E|^2 \frac{(v_{\mathbf{p},x} - v_{\mathbf{p}',x})^2}{(\hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega) [f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_p + \hbar\omega)]. \quad (84)$$

Углы отсчитываются от направления $\mathbf{E}$.

Поглощаемая мощность

$$Q = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \nu} \hbar\omega W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}. \quad (85)$$

Подстановка выражения для вероятности даёт:

$$Q = |E|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \nu} \frac{f_0(\varepsilon_p) - f_0(\varepsilon_p + \hbar\omega)}{\hbar\omega} (v_{\mathbf{p},x} - v_{\mathbf{p}',x})^2 \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega). \quad (86)$$

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

$$Q = |E|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \nu} v_p^2 [-f'_0(\varepsilon_p)] \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} N_i |V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{p})|^2 (1 - \cos \theta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p). \quad (87)$$

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

$$Q = |E|^2 \left(\frac{e}{\omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \nu} \frac{v_p^2}{\tau_1(\varepsilon_p)} [-f'_0(\varepsilon_p)]. \quad (88)$$

Сравнивая с выражением для проводимости (76), окончательно получаем

$$Q = 2|E|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)], \quad (89)$$

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 не прямых оптических переходов.

IV. Циклотронный резонанс. Классический эффект Холла

Рассмотрим электронный газ, помещённый во внешнее магнитное поле $\mathbf{B} \parallel z$. Его проводимость существенно зависит от поля, причём по-разному в разных диапазонах. Сначала рассмотрим классический диапазон, когда магнитное поле воздействует на электроны силой Лоренца. Она входит в кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + e\mathbf{E}_{\parallel} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} + \frac{e}{c}(\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (90)$$

IV.1. Изотропная дисперсия

Рассмотрим сначала электроны с изотропной дисперсией. Слагаемое с магнитным полем имеет в этом случае вид:

$$(\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} = -B_z \frac{v}{p} \frac{\partial}{\partial \varphi_{\mathbf{p}}}, \quad (91)$$

то есть оно не изменяет номер фурье-гармоники. Поэтому электрическое и магнитное поле индуцируют также только первые фурье-гармоники, и уравнение для линейной по $\mathbf{E}$ поправки f_1 имеет вид

$$\frac{f_1}{\tau_{1\omega}} + e\mathbf{E}_{\parallel} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f'_0 - \frac{eB_z v}{c} \frac{\partial f_1}{p \partial \varphi_{\mathbf{p}}} = 0. \quad (92)$$

С учётом того, что $\mathbf{E}_{\parallel} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = v_p(e^{i\varphi_{\mathbf{p}}} E_- + e^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} E_+)/2$, решение имеет вид:

$$f_1 = f_+ e^{i\varphi_{\mathbf{p}}} + f_- e^{-i\varphi_{\mathbf{p}}}, \quad (93)$$

где $f_{\pm}$ удовлетворяют уравнениям

$$\left(\frac{1}{\tau_{1\omega}} \mp i\omega_c \right) f_{\pm} = e(-f'_0) \frac{E_{\mp}}{2} v_p. \quad (94)$$

Здесь предполагается, что $eB_z > 0$, и введена циклотронная частота

$$\omega_c = \frac{|eB_z| v_p}{c} \equiv \frac{|eB_z|}{m_c c}, \quad m_c(\varepsilon_p) = \frac{p}{v_p}. \quad (95)$$

Плотность тока:

$$j_x + ij_y = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} (v_x + iv_y) f_{\nu} e^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} = \frac{E_+}{2} e^2 \sum_{\nu, \mathbf{p}} v_p^2 (-f'_0) \frac{\tau_1}{1 - i(\omega - \omega_c)\tau_1}. \quad (96)$$

Для вырожденной статистики получаем:

$$j_x + ij_y = (E_x + iE_y) \frac{Ne^2\tau_{\text{tr}}/m_c(\varepsilon_F)}{1 - i(\omega - \omega_c)\tau_{\text{tr}}} \equiv \sigma(\omega, \omega_c)(E_x + iE_y), \quad (97)$$

где учтено:

$$N = \sum_{\nu} \frac{p_F^2}{4\pi\hbar^2}. \quad (98)$$

Мы получили, что при σ^- поляризации ($E_+ \neq 0$) ток резонансно усиливается при условии $\omega = \omega_c$. При противоположной σ^+ поляризации имеем

$$j_x - ij_y = (E_x - iE_y) \frac{Ne^2\tau_{\text{tr}}/m_c}{1 - i(\omega + \omega_c)\tau_{\text{tr}}} = \sigma(\omega, -\omega_c)(E_x - iE_y), \quad (99)$$

и резонанса нет (излучение распространяется в направлении $+z$). При инверсии направления магнитного поля активной становится противоположная круговая поляризация.

Поглощённая мощность:

$$Q = \langle \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}^* \rangle_t + c.c. = \frac{1}{2} [j_+(E^*)_- + j_-(E^*)_+] + c.c. = |E|^2 \text{Re} \{ [\sigma(\omega, \omega_c) + \sigma(\omega, -\omega_c)] + P_{\text{circ}} [\sigma(\omega, -\omega_c) - \sigma(\omega, \omega_c)] \}. \quad (100)$$

Видно, что при круговой поляризации будет резонанс поглощения при одном из направлений поля. При линейной поляризации ($P_{\text{circ}} = 0$) резонанс есть при любом направлении поля, но величина поглощённой мощности в 2 раза меньше, чем при активной круговой поляризации.

При параболической дисперсии резонанс имеет место при $\omega = |eB_z|/(mc)$. При непараболической изотропной дисперсии положение резонанса зависит от концентрации из-за зависимости $m_c(\varepsilon_F)$. Например, в графене дисперсия линейна, $\varepsilon_p = v_0 p$, и эффективная масса $m_c(\varepsilon_F) = p_F/v_0$. А поскольку концентрация есть $N = p_F^2/(\pi\hbar^2)$, циклотронная частота

$$\omega_c = \frac{|eB_z|}{\hbar c} \frac{v_0}{\sqrt{\pi N}}, \quad B_{\text{CR}} \propto \sqrt{N}, \quad N_{\text{CR}} \propto B^2. \quad (101)$$

При невырожденной статистике положение резонанса меняется с температурой.

IV.2. Циклотронный резонанс в системах с анизотропной массой

Рассмотрим двумерную систему с анизотропной массой. В главных осях имеются два значения m_x, m_y :

$$\varepsilon_p = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y}, \quad v_{x,y} = \frac{p_{x,y}}{m_{x,y}}. \quad (102)$$

Концентрация связана с энергией Ферми соотношением

$$N = \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi \hbar^2} \varepsilon_F. \quad (103)$$

Интеграл столкновений кинетического уравнения, вообще говоря, не сводится к τ -приближению. Но если анизотропия невелика, то так можно сделать:

$$-i\omega f_1 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_p f'_0 + \frac{eB_z}{c} \left(v_y \frac{\partial}{\partial p_x} - v_x \frac{\partial}{\partial p_y} \right) f_1 = -\frac{f_1}{\tau}. \quad (104)$$

Вычисление, аналогичное анизотропному случаю, даёт:

$$j_x - \frac{eB_z}{m_x c} \tau_\omega j_y = \frac{Ne^2 \tau_\omega}{m_x} E_x, \quad (105)$$

$$j_y + \frac{eB_z}{m_y c} \tau_\omega j_x = \frac{Ne^2 \tau_\omega}{m_y} E_y. \quad (106)$$

Решая эти уравнения, легко найти проводимость. Положение резонанса находится из нулей определителя:

$$\frac{1}{\tau_\omega^2} + \frac{(eB_z/c)^2}{m_x m_y} = 0, \quad \omega = \pm \frac{|eB_z|}{\sqrt{m_x m_y} c} - \frac{i}{\tau}. \quad (107)$$

Циклотронная частота определяется средним геометрическим масс. Этот ответ можно получить и рассматривая движение электрона в магнитном поле, то есть игнорируя внешнее электрическое поле и рассеяние.

Вывод в 3D случае абсолютно аналогичен. Если, как в Si и Ge, поверхности постоянной энергии – эллипсоиды вращения, характеризующиеся массами: $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p_z^2/(2m_{\parallel}) + p_{\perp}^2/(2m_{\perp})$, то циклотронная частота есть

$$\omega_c = \frac{|eB|}{c} \sqrt{\frac{\cos^2 \theta}{m_{\perp}^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_{\parallel} m_{\perp}}}, \quad (108)$$

где θ – угол между направлением магнитного поля и осью z . Ориентируя поле вдоль различных направлений, например, вдоль осей [001] и [111] в Si, из положения резонанса определяют массы.

IV.3. Циклотронная масса при произвольном законе дисперсии

Движение по классической циклотронной орбите описывается уравнением

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} \mathbf{v}_p \times \mathbf{B}. \quad (109)$$

Умножив это уравнение скалярно на $\mathbf{v}_p = \partial \varepsilon_p / \partial \mathbf{p}$, получим

$$\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial \mathbf{p}} \cdot \dot{\mathbf{p}} = \frac{d\varepsilon_p}{dt} = 0. \quad (110)$$

То есть носитель движется в импульсном пространстве по траектории $\varepsilon_p = \text{const}$.

Если эта траектория замкнута, то период обращения по ней

$$T_c = \oint dt = \oint \frac{dl_p}{eB_z v_p / c} = \frac{c}{eB_z} \oint \frac{dl_p}{v_p}, \quad (111)$$

где интегрирование идёт вдоль траектории. С другой стороны, рассмотрим площадь S , ограниченную траекторией:

$$S = \int dp_x dp_y = \oint dl_p \int dp_\perp = \int d\varepsilon_p \oint \frac{dl_p}{v_p}. \quad (112)$$

Здесь $p_\perp$ – величина компоненты импульса, перпендикулярного траектории. Сравнивая эти выражения, получаем:

$$T_c = \frac{c}{eB_z} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}, \quad \omega_c \equiv \frac{2\pi}{T_c} = \frac{eB_z}{m_c c}, \quad (113)$$

то есть циклотронная масса есть

$$m_c = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}. \quad (114)$$

В случае изотропной дисперсии $S = \pi p^2$, и $m_c = p dp / d\varepsilon = p/v$.

IV.4. Квантовый циклотронный резонанс

Выше мы рассмотрели циклотронное движение классически. Такой подход верен, когда поля не слишком сильные, при $\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F$. В сильных полях и при низких температурах электроны занимают уровни Ландау с номерами $n = 0, 1, 2, \dots$, и нужно их рассматривать исходя из квантовой теории.

Взаимодействие со светом описывается с высокой точностью дипольным приближением, а у дипольного момента есть матричные элементы только между соседними уровнями Ландау. Поэтому циклотронный резонанс в этой ситуации происходит с поглощением фотона при переходе электрона $n \rightarrow n + 1$. Закон сохранения энергии требует:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega. \quad (115)$$

Если спектр изотропный параболический, то отличий от классического условия нет: условие резонанса есть $\omega = \omega_c = |eB|/mc$. С ростом поля на всех уровнях растёт плотность состояний (она равна $1/(2\pi l_B^2) = eB/(2\pi\hbar c)$, то есть линейно растёт с полем). Уровни с большими номерами “выходят” из-под уровня Ферми, который можно считать постоянным.

Условие циклотронного резонанса сильно видоизменяется при непараболическом спектре. Рассмотрим для определённости графен с линейной дисперсией. Эффективный гамильтониан

$$\mathcal{H} = v_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = v_0 \begin{pmatrix} 0 & p_- \\ p_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{n>0} = \begin{pmatrix} A\phi_{n-1} \\ C\phi_n \end{pmatrix}, \quad E_n = \pm \frac{\hbar v_0}{l_B} \sqrt{2n}. \quad (116)$$

Условие резонанса:

$$\omega = \frac{v_0 \sqrt{2}}{l_B} (\sqrt{n+1} - \sqrt{n}). \quad (117)$$

Поскольку с ростом магнитного поля энергии уровней нарастают медленнее, чем плотность состояний на них, электроны занимают всё более нижние уровни при практически неизменном их положении. Это может рассматриваться как скачкообразное понижение уровня Ферми с ростом магнитного поля. Частота резонанса при этом сильно меняется с полем (растёт).

При больших энергиях $E_n \gg \hbar\omega$ имеем:

$$\omega \approx \frac{\hbar v_0}{\sqrt{2n} l_B} = \frac{eB}{c} \frac{v_0^2}{E_n}, \quad (118)$$

то есть циклотронная масса $m_c = E_n/v_0^2$ в соответствии с классическим рассмотрением.

IV.5. Классический эффект Холла

Из полученных формул при нулевой частоте имеем ($eB_z > 0$):

$$j_x + ij_y = \frac{e^2 v_F^2 \tau_{tr}/2}{1 + i\omega_c \tau_{tr}} \frac{\partial N}{\partial \epsilon_F} (E_x + iE_y), \quad \text{т.е.} \quad \sigma_{xx} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau_{tr})^2}, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \omega_c \tau_{tr} \sigma_{xx}. \quad (119)$$

Видно, что диагональная проводимость имеет, как и в нулевом поле, нечётное количество диссипативных постоянных. В σ_{xy} , напротив, чётное их количество. Это различие объясняется тем, что в ней есть ещё множитель B_z , который нечётен по отношению к операции инверсии времени.

Вводя тензор сопротивлений $\mathbf{E} = \hat{\rho}\mathbf{j}$ с компонентами

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad (120)$$

получаем

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0}, \quad \rho_{xy} = \frac{\omega_c \tau_{\text{tr}}}{\sigma_0} = \frac{B_z}{Nec}. \quad (121)$$

То есть классического магнитосопротивления в вырожденном газе нет, а холловское сопротивление линейно зависит от поля.

При невырожденной статистике магнитосопротивление обусловлено зависимостью $\tau_1(\varepsilon_p)$:

$$\sigma_{xx} = \frac{Ne^2}{m} \left\langle \frac{\tau_1}{1 + (\omega_c \tau_1)^2} \right\rangle, \quad \sigma_{yx} = \frac{Ne^2}{m} \omega_c \left\langle \frac{\tau_1^2}{1 + (\omega_c \tau_1)^2} \right\rangle. \quad (122)$$

Здесь было удобно ввести

$$\langle \Phi \rangle = \frac{\sum_{\nu, \mathbf{p}} \Phi(\varepsilon_p) \varepsilon_p(-f'_0)}{\sum_{\nu, \mathbf{p}} \varepsilon_p(-f'_0)}, \quad \tau_{\text{tr}} = \langle \tau_1 \rangle. \quad (123)$$

При малых $\omega_c \tau_{\text{tr}}$ отсюда получается:

$$\rho_{xx} \approx \frac{1}{\sigma_0} \left(1 + \omega_c^2 \frac{\langle \tau_1^3 \rangle \langle \tau_1 \rangle - \langle \tau_1^2 \rangle^2}{\langle \tau_1 \rangle^2} \right), \quad \rho_{xy} = \frac{B_z}{Nec} \frac{\langle \tau_1^2 \rangle}{\langle \tau_1 \rangle^2}. \quad (124)$$

V. Расчёт проводимости методом функций Грина

Определим величину, равную упорядоченному по времени произведению волновых функций, усреднённого по основному состоянию системы:

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle T[\psi(\mathbf{r}, t)\psi^\dagger(\mathbf{r}', t')] \rangle, \quad T(AB) = AB\theta(t - t') - BA\theta(t' - t). \quad (125)$$

Здесь $\psi(\mathbf{r}, t)$ – операторы в гайзенберговском представлении. Поскольку при совпадающих временах G равна матрице плотности, с её помощью можно вычислять средние значения различных величин, например концентрацию:

$$N(\mathbf{r}, t) = -iG(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \Big|_{t' \rightarrow t+0, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (126)$$

Или плотность тока. По определению ($\hat{\mathbf{v}} = -i\hbar\nabla/m$):

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{ie\hbar}{2m} \{ [\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)] \psi(\mathbf{r}, t) - \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla\psi(\mathbf{r}, t) \} = -\frac{e}{2} \{ [\hat{\mathbf{v}}\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)] \psi(\mathbf{r}, t) - \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{v}}\psi(\mathbf{r}, t) \} \\ &= -\frac{e}{2} \{ \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) [\psi^\dagger(\mathbf{r}, t')\psi(\mathbf{r}', t) - \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\psi(\mathbf{r}, t)] \}_{t' \rightarrow t+0, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \\ &= i\frac{e}{2} \{ \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) [G(\mathbf{r}', t; \mathbf{r}, t') - G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')] \}_{t' \rightarrow t+0, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \\ &= ie \left\{ \frac{\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}') - \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r})}{2} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \right\}_{t' \rightarrow t+0, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (127)$$

Волновые функции удовлетворяют уравнению Шрёдингера

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_r \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (128)$$

Поэтому

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_r \right) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\{\psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\psi(\mathbf{r}, t)\} i\frac{\partial}{\partial t} \theta(t' - t) = \{\psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\psi(\mathbf{r}, t)\} \delta(t' - t). \quad (129)$$

При совпадающих временах

$$\{\psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\psi(\mathbf{r}, t)\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (130)$$

откуда следует

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_r \right) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t' - t). \quad (131)$$

То есть упорядоченное по времени произведение ψ -операторов есть функция Грина уравнения Шрёдингера.

V.1. Выражение для проводимости через функцию Грина

Рассмотрим функцию Грина в слабом внешнем электромагнитном поле. Возмущение есть

$$\hat{U}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}). \quad (132)$$

Поэтому функция Грина в поле $\tilde{G}$ удовлетворяет уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_r - U \right) \tilde{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t' - t). \quad (133)$$

В первом порядке по полю $\tilde{G} = G + \delta G$, где добавка удовлетворяет уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}_r \right) \delta G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = U(\mathbf{r}, t) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'). \quad (134)$$

Его решение:

$$\delta G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \int d\mathbf{r}_1 \int dt_1 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) U(\mathbf{r}_1, t_1) G(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}', t'). \quad (135)$$

Отсюда следует выражение для электрического тока:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = ie \left\{ \frac{\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}') - \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r})}{2} \int d\mathbf{r}_1 dt_1 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) \left(-\frac{e}{c} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}_1, t_1) \cdot \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}', t') \right. \\ \left. - \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \right\}_{t' \rightarrow t+0, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (136)$$

Здесь учтено, что оператор тока во внешнем поле отличается от оператора скорости на величину $(-e/mc)\mathbf{A}$. Связанное с ним слагаемое даёт концентрацию N , и вводя проводимость согласно

$$\mathbf{j}(\omega, \mathbf{q}) = \hat{\sigma}(\omega, \mathbf{q}) \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}, \quad (137)$$

получим:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{q} = \mathbf{0}) = \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} \\ + \frac{e^2}{\omega} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \int dt e^{-i\omega t} \int dt_1 \left\{ \frac{\hat{v}_\alpha(\mathbf{r}) - \hat{v}_\alpha(\mathbf{r}')}{2} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) \hat{v}_\beta(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}', t) \right\}_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (138)$$

Интегрируя по частям по $d\mathbf{r}'$, получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \int dt e^{-i\omega t} \int dt_1 \hat{v}_\alpha(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) \hat{v}_\beta(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}, t). \quad (139)$$

Поскольку без электрического поля задача стационарна, функция Грина зависит от разности времён: $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, t - t_1)$. Переходя к фурье-образу по разности времён, $G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$, получим:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \hat{v}_\alpha(\mathbf{r}) G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \hat{v}_\beta(\mathbf{r}_1) G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}). \quad (140)$$

V.2. Функция Грина при рассеянии на примесях при нулевой температуре

По определению

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle \psi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \theta(t - t') - \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}, t) \theta(t' - t) \rangle. \quad (141)$$

Если известны точные решения уравнения Шрёдингера ϕ_k , то ψ -операторы выражаются через них:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k \hat{a}_k \phi_k(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon_k t}, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \phi_k^*(\mathbf{r}) e^{i\varepsilon_k t}. \quad (142)$$

Поэтому

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}') e^{-i\varepsilon_k(t-t')} \left[\langle \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \rangle \theta(t - t') - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle \theta(t' - t) \right]. \quad (143)$$

Здесь учтено, что средние по основному состоянию от произведения двух фермионных операторов диагональны:

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = \langle \hat{n}_k \rangle = f_k = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_k), \quad \langle \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \rangle = 1 - f_k = \theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F). \quad (144)$$

Фурье-образ по времени:

$$\begin{aligned} G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -i \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}') \int_0^\infty d\tau \left[e^{i(\varepsilon - \varepsilon_k)\tau} \theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) - e^{-i(\varepsilon - \varepsilon_k)\tau} \theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \right] \\ &= -i \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}') \left[\theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \frac{i}{\varepsilon - \varepsilon_k + i0} - \theta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \frac{i}{-(\varepsilon - \varepsilon_k) + i0} \right] \\ &= \sum_k \frac{\phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \varepsilon_k + i0 \text{sign}(\varepsilon_k - \varepsilon_F)}. \end{aligned} \quad (145)$$

Видно, что функция Грина имеет полюс при $\varepsilon = \varepsilon_k$. Поэтому знак $(\varepsilon_k - \varepsilon_F)$ можно заменять на знак $(\varepsilon - \varepsilon_F)$:

$$G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_k \frac{\phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \varepsilon_k + i0 \text{sign}(\varepsilon - \varepsilon_F)} \equiv \sum_k \frac{\phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \xi_k + i0 \text{sign}(\varepsilon)}, \quad (146)$$

где введены энергии, отсчитанные от уровня Ферми:

$$\xi_k = \varepsilon_k - \varepsilon_F, \quad \epsilon = \varepsilon - \varepsilon_F. \quad (147)$$

Вводят опережающую (G^A) и запаздывающую (G^R) функции Грина, являющиеся аналитическими функциями энергии в соответственно верхней и нижней полуплоскостях.

Через мнимую часть функции Грина выражается плотность состояний:

$$g(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = -\frac{1}{\pi} \int d\mathbf{r} \text{Im} G_\varepsilon^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}). \quad (148)$$

При наличии рассеивающего потенциала $V(\mathbf{r})$ к функции Грина появляются поправки.

$$\begin{aligned} G &= (\varepsilon - \mathcal{H} - V)^{-1} \equiv (G_0^{-1} - V)^{-1} = [G_0^{-1} (1 - G_0 V)]^{-1} = (1 - V G_0)^{-1} G_0 \\ &= G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots \end{aligned} \quad (149)$$

Рассмотрим простой и актуальный случай свободных электронов в отсутствие внешних полей. Тогда $k = (\mathbf{p}, \nu)$, и удобно перейти к фурье-образам. Без учёта рассеяния функция Грина зависит от разности координат $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, поэтому её фурье образ зависит от одной переменной: $G_\varepsilon^0(\mathbf{p})$. Функция Грина в конкретном потенциале примесей зависит от их расположения. Но мы будем интересоваться усреднённой функцией Грина, которая уже зависит от $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и её фурье-образ также зависит от одного импульса $G_\varepsilon(\mathbf{p})$.

Поправки к функции Грина удобно изображать диаграммами, на которых функции G и G^0 изображаются сплошными линиями (тонкой и толстой), а матричные элементы рассеивающего потенциала – пунктирными. Если рассеяние идёт на случайно расположенных примесях, то, как мы уже знаем, для вычисления наблюдаемых необходимо каждый матричный элемент рассеяния умножить на матричный элемент рассеяния на той же примеси – только тогда после усреднения получится конечная величина. Поэтому концы штриховых линий замыкаются.

Вклад, квадратичный по V , даёт диаграмма с одной примесной линией:

$$\delta G_\varepsilon(\mathbf{p}) = G_\varepsilon^0(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{p}'} G_\varepsilon^0(\mathbf{p}') |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 G_\varepsilon^0(\mathbf{p}) \quad (150)$$

Поскольку $G_\varepsilon^0(\mathbf{p})$ имеет полюс при $p = p_\varepsilon \equiv \sqrt{2m\varepsilon}$, импульсы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ имеют одинаковые длины, и усреднение по углам идёт по кругу:

$$\delta G_\varepsilon(\mathbf{p}) = [G_\varepsilon^0(\mathbf{p})]^2 \int d\varepsilon_{p'} g_{2D} G_\varepsilon^0(\mathbf{p}') \langle |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 \rangle_{\theta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}} = \pm i\pi [G_\varepsilon^0(\mathbf{p})]^2 g_{2D} \langle |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 \rangle_{\theta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}}. \quad (151)$$

Здесь знак полувычета различен для опережающей и запаздывающей функций Грина: он равен $\text{sign}(\varepsilon - \varepsilon_F)$. Вещественная постоянная описывает перенормировку энергии Ферми за счёт взаимодействия с примесями, учитывать её не будем. Вспоминая выражение для уходного времени при рассеянии на примесях, получаем существенный вклад в функцию Грина:

$$\delta G_\varepsilon(\mathbf{p}) = \pm \frac{i}{2\tau_0} [G_\varepsilon^0(\mathbf{p})]^2. \quad (152)$$

То есть учёт одной примесной линии соответствует борновскому приближению теории рассеяния.

Замкнутые линии могут пересекаться. Такие диаграммы соответствуют интерференции в рассеянии на различных примесях. Диаграмма с одним пересечением даёт вклад

$$\delta G_\varepsilon(\mathbf{p}) = [G_\varepsilon^0(\mathbf{p})]^2 \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{p}''} |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 G_\varepsilon^0(\mathbf{p}') |V_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}''}|^2 G_\varepsilon^0(\mathbf{p}'') G_\varepsilon^0(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}' + \mathbf{p}). \quad (153)$$

Видно, что интегрирование по углам ограничено условием равенства модулей всех аргументов функций Грина. Поэтому вклад отличается от предыдущего в $\hbar/(\varepsilon\tau) \sim \hbar/(\varepsilon_F\tau) \ll 1$ раз.

Мы установили, что в рамках применимости кинетического уравнения важны только диаграммы без пересечений. Их можно все просуммировать и получить уравнение Дайсона:

$$G_\varepsilon(\mathbf{p}) = G_\varepsilon^0(\mathbf{p}) + G_\varepsilon^0(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{p}'} G_\varepsilon(\mathbf{p}') |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 G_\varepsilon(\mathbf{p}). \quad (154)$$

В этом уравнении функция Грина есть и в левой, и в правой частях. Такой подход называется самосогласованным борновским приближением (SCBA). Решение этого уравнения будем искать в виде

$$G_\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_p - \Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})}, \quad (155)$$

где $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ называется собственно-энергетической частью. Деля уравнение Дайсона на GG^0 , получим выражение для Σ в рамках SCBA:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}'} |V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2 G_\varepsilon(\mathbf{p}'). \quad (156)$$

Вещественная часть $\text{Re}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ – малая поправка к энергии ε , описывающая перенормировку энергии электрона за счёт рассеяния. Её в дальнейшем не учитываем. Мнимая же часть определяется полюсным вкладом и имеет вид:

$$\text{Im}\Sigma = \pm \frac{1}{2\tau_0}. \quad (157)$$

Поэтому функции Грина свободных электронов есть

$$G_\varepsilon^{A,R}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_p \pm i/(2\tau_0)}. \quad (158)$$

V.3. Функция Грина в координатном представлении

Переходя в $\mathbf{r}$ -пространство, получим выражение для функции Грина в координатном представлении:

$$G^{R,A}(\boldsymbol{\rho}) = \int d^2p \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\rho}}}{\varepsilon - \xi_p \pm i/(2\tau)}. \quad (159)$$

Найдём функцию Грина на расстояниях, превосходящих длину волны электрона $\hbar/p$, то есть при $p\rho \gg 1$. При этом фаза в числителе быстро осциллирует, и мы вычислим этот интеграл приближённо, пользуясь методом стационарной фазы. Вычисляя интеграл по углу θ между $\mathbf{p}$ и $\boldsymbol{\rho}$, находим точки стационарности фазы $\varphi = p\rho \cos \theta$. Это – точки, где $d \cos \theta / d\theta = 0$, то есть $\theta = 0, \pi$.

Вычислим запаздывающую функцию Грина G^R . Она отлична от нуля, если в неё есть полюсной вклад от верхней полуплоскости комплексной переменной p . Поэтому $\theta = \pi$ вклада не вносит. При $\theta = 0$ разлагая

$$\cos \theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2}, \quad (160)$$

получим, что интеграл по углам примерно равен

$$\langle e^{ip\rho \cos \theta} \rangle_\theta \approx e^{ip\rho} \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{-ip\rho \theta^2/2}. \quad (161)$$

Интеграл, благодаря быстрому убыванию подынтегральной функции, можно брать в пределах от $-\infty$ до ∞ :

$$\langle e^{ip\rho \cos \theta} \rangle_\theta \approx \frac{e^{ip\rho}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta e^{-ip\rho \theta^2/2} = \frac{e^{ip\rho}}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi}{-ip\rho}} = \frac{e^{ip\rho}}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi}{p\rho}} e^{i\pi/4}. \quad (162)$$

Беря далее интеграл по энергии, получаем:

$$G^R(\rho) = g_{2D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi_p}{\epsilon - \xi_p + i/(2\tau)} \frac{e^{ip\rho}}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi}{p\rho}} e^{i\pi/4} = -ig_{2D} e^{ip_F \rho - \rho/(2l)} \sqrt{\frac{2\pi}{p_F \rho}} e^{i\pi/4}. \quad (163)$$

В запаздывающую функцию Грина $G^A = (G^R)^*$ вклад дают углы вблизи $\theta = \pi$.

Видно, что учёт упругого рассеяния приводит к умножению функций Грина на $\exp[-\rho/(2l)]$, где $l = v_F \tau$ – длина свободного пробега.

V.4. Вычисление проводимости на конечной частоте (анизотропное рассеяние)

Переходя к фурье-образам функций Грина получаем из формулы для проводимости:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \sum_{\nu, \mathbf{p}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} v_{\alpha}(\mathbf{p}) \langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) v_{\beta}(\mathbf{p}) G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}. \quad (164)$$

Усреднение по примесям приводит как к усреднённым функциям Грина, так и к перенормировке “токовой вершины” – диаграммам с примесными линиями, соединяющими две функции Грина. Для удобства вычисления интегралов добавим и вычтем вклад с усреднёнными функциями Грина при нулевой частоте:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \sum_{\nu, \mathbf{p}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} v_{\alpha}(\mathbf{p}) \left[\langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) v_{\beta}(\mathbf{p}) G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}} \pm v_{\beta}(\mathbf{p}) \langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}^2 \right]. \quad (165)$$

Интеграл с нулевой частотой вычисляется с помощью соотношения

$$v_{\beta}(\mathbf{p}) \langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}^2 = \frac{\partial}{\partial p_{\beta}} \langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}, \quad (166)$$

следующего из явного вида усреднённой функции Грина. Интегрируя по частям, получим, что этот вклад в точности сокращает первое “калибровочное” слагаемое:

$$\frac{e^2}{\omega} \sum_{\nu, \mathbf{p}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} v_{\alpha}(\mathbf{p}) v_{\beta}(\mathbf{p}) \langle G_{\varepsilon}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}^2 = -\frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta}, \quad (167)$$

Это соотношение аналогично тождеству Уорда в теории поля.

Остался интеграл, в который входит разность от произведений функций Грина. Он определяется областью вблизи поверхности Ферми, поэтому его можно брать с помощью теоремы о вычетах. Квадрат функции Грина поэтому вклада не даст, поскольку при данном ε при интегрировании по ξ_p всегда найдётся полуплоскость, где функция

Грина аналитична. Интеграл же с произведением разных функций Грина содержит перенормированную вершину $\tilde{\mathbf{v}}$, определяемая как

$$\langle G_\varepsilon(\mathbf{p})\mathbf{v}(\mathbf{p})G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}} \equiv \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}, \omega) \langle G_\varepsilon(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}} \langle G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{p}) \rangle_{\text{imp}}. \quad (168)$$

Она удовлетворяет уравнению типа уравнения Дайсона:

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}, \omega) = \mathbf{v}(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}'} |V(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 G_\varepsilon(\mathbf{p}') G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{p}') \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}', \omega) \quad (169)$$

(здесь функции Грина – усреднённые по беспорядку). Интеграл в правой части сходится и поэтому может быть вычислен с помощью ТФКП. Две функции Грина G_ε и $G_{\varepsilon+\omega}$ имеют различные мнимые части только если $\varepsilon < 0 < \varepsilon + \omega$. Поэтому перенормированная вершина отлична от нуля только в этом интервале, где

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}, \omega) = \mathbf{v}(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}'} |V(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 G_\varepsilon^R(\mathbf{p}') G_{\varepsilon+\omega}^A(\mathbf{p}') \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}', \omega). \quad (170)$$

Решение есть $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}) = \Lambda \mathbf{v}(\mathbf{p})$. Производя интегрирование, получим, что интеграл по ξ_p даёт вклад, равный $\tau_{0\omega}$. Поэтому

$$\Lambda = 1 + \frac{1/\tau_0 - 1/\tau_1}{1/\tau_0 - i\omega} \Lambda, \quad \text{т.е.} \quad \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{p}) = \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\tau_{1\omega}}{\tau_{0\omega}}. \quad (171)$$

Видно, что при изотропном рассеянии вершина не перенормируется. Отсюда проводимость:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{\omega} \int_{-\omega}^0 \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{\nu, \mathbf{p}} \frac{\tau_{1\omega}}{\tau_{0\omega}} v_\alpha v_\beta G_\varepsilon^R(\mathbf{p}) G_{\varepsilon+\omega}^A(\mathbf{p}) = \frac{Ne^2 \tau_{\text{tr}}/m}{1 - i\omega \tau_{\text{tr}}} \delta_{\alpha\beta}. \quad (172)$$

Мы получили формулу Друдэ с правильным (транспортным) временем и правильной частотной зависимостью, а время τ_0 ушло из ответа, как и должно быть.

VI. Функция Грина и проводимость в магнитном поле

Вычисления проводимости свободных электронов с помощью функций Грина являются более громоздкими, чем с помощью кинетического уравнения. Однако во внешнем магнитном поле в 2D системах энергетический спектр электронов является полностью дискретным, и без функций Грина не обойтись.

Мы рассмотрим простую зону с параболическим законом дисперсии. Электроны на уровнях Ландау имеют энергии

$$E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2), \quad (173)$$

кратность вырождения каждого уровня равна $1/(2\pi l_B^2) = |eB|/(2\pi\hbar c)$, а волновые функции в калибровке Ландау имеют вид

$$\Psi_{nky}(\mathbf{r}) = e^{iky} \phi_n(x + k_y l_B^2), \quad (174)$$

где $\phi_n(x)$ – функции гармонического осциллятора. Плотность состояний в отсутствие беспорядка имеет вид бесконечно узких пиков:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_n \delta(E - E_n). \quad (175)$$

Видно, что пики не перекрываются в сколь угодно слабом поле.

Усреднённая по беспорядку функция Грина в рамках самосогласованного борновского приближения (SCBA) имеет вид

$$G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{nky} \frac{\Psi_{nky}(\mathbf{r}) \Psi_{nky}^*(\mathbf{r}')}{\varepsilon - E_n - \Sigma} \equiv \sum_{nky} G_\varepsilon(n) \Psi_{nky}(\mathbf{r}) \Psi_{nky}^*(\mathbf{r}'). \quad (176)$$

Уравнение для собственно-энергетической части:

$$\Sigma(\varepsilon) = N_i |V_0|^2 \sum_{n, ky} \frac{1}{\varepsilon - E_n - \Sigma(\varepsilon)} = \frac{\hbar}{2\pi\tau} \sum_n \frac{\hbar\omega_c}{\varepsilon - E_n - \Sigma(\varepsilon)}. \quad (177)$$

Мы рассматриваем случай изотропного рассеяния. Тогда проводимость даётся выражением (140), в которое входят функции Грина, усреднённые по беспорядку:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \hat{v}_\alpha(\mathbf{r}) G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \hat{v}_\beta(\mathbf{r}_1) G_{\varepsilon+\omega}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}) \\ &= \frac{iNe^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{nn'kyk'_y} \langle nky | \hat{v}_\alpha | n'k'_y \rangle G_\varepsilon(n') \langle n'k'_y | \hat{v}_\beta | nky \rangle G_{\varepsilon+\omega}(n). \end{aligned} \quad (178)$$

В магнитном поле имеет смысл вычислять величину

$$\sigma \equiv \sigma_{xx} + i\sigma_{yx}, \quad (179)$$

которая описывает отклик на σ^- поляризованное поле: $j_x + ij_y = \sigma(E_x + iE_y)$. Матричные элементы оператора скорости в магнитном поле отличны от нуля только между соседними уровнями Ландау:

$$\langle nk_y | \hat{v}_x + i\hat{v}_y | n-1, k'_y \rangle = \delta_{k_y, k'_y} i \sqrt{\frac{2n\hbar\omega_c}{m}}, \quad (180)$$

поэтому

$$\langle nk_y | \hat{v}_x + i\hat{v}_y | n'k'_y \rangle \langle n'k'_y | \hat{v}_x | nk_y \rangle = \delta_{k_y, k'_y} \delta_{n', n-1} \frac{n\hbar\omega_c}{m}, \quad (181)$$

и получается:

$$\sigma = \frac{iNe^2}{m\omega} + \frac{e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_n \frac{n\hbar\omega_c}{m} G_\varepsilon(n-1) G_{\varepsilon+\omega}(n). \quad (182)$$

Аналогично тому, как мы действовали в нулевом магнитном поле, добавим и вычтем слагаемое

$$\frac{e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{1}{2\pi l_B^2} \int_0^\infty dn \frac{n\hbar\omega_c}{m} G_\varepsilon(n) G_\varepsilon(n). \quad (183)$$

Вводя новую переменную интегрирования ε_n , мы видим, что это слагаемое не зависит от поля и уничтожает первое “калибровочное” слагаемое. Поэтому

$$\sigma = \frac{e^2\omega_c^2}{2\pi\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[\sum_n n G_\varepsilon(n-1) G_{\varepsilon+\omega}(n) - \int_0^\infty dn n G_\varepsilon(n) G_\varepsilon(n) \right]. \quad (184)$$

VI.1. Проводимость в классическом магнитном поле

Нас будет интересовать ситуация с энергией Ферми, превосходящей циклотронное расщепление, когда актуальны высокие номера уровней Ландау:

$$n \approx \frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} \gg 1. \quad (185)$$

Рассчитаем методом функций Грина проводимость в классических полях, считая кинетический параметр $\omega_c\tau$ произвольным.

Самое грубое приближение – заменить суммирование по n на интегрирование. Сделаем так при вычислении собственно-энергетической части, получим

$$\Sigma \approx \pm \frac{i\hbar}{2\tau} \quad (186)$$

– результат, не учитывающий магнитное поле. Проводимость:

$$\sigma = \frac{e^2 \omega_c^2}{2\pi\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int_0^\infty dn \, n [G_\varepsilon(n-1)G_{\varepsilon+\omega}(n) - G_\varepsilon(n)G_\varepsilon(n)]. \quad (187)$$

Интеграл определяется номерами $n \approx \varepsilon_F/\hbar\omega_c \gg 1$. Поэтому интегрирование можно продлить до $n = -\infty$ и воспользоваться теоремой о вычетах. Тогда, как и в нулевом поле, второе слагаемое вклада не даст, а первое даст вклад только при $-\omega < \varepsilon - \varepsilon_F < 0$ (отсчитываем ε от ε_F). Всё отличие от вычисления в нулевом поле – сдвиг аргумента одной из функций Грина на единицу. Это приводит к появлению $\omega - \omega_c$ вместо ω :

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau/m}{1 - i(\omega - \omega_c)\tau}. \quad (188)$$

Мы получили правильное выражение для высокочастотной проводимости в классическом магнитном поле. Оно включает в себя и циклотронный резонанс.

VII. Осцилляции Шубникова-де Гааза

Для учёта квантования Ландау при расчёте собственно-энергетической части и проводимости применим формулу суммирования Пуассона:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn e^{2\pi i k n} f(n) + \frac{f(0)}{2}. \quad (189)$$

В уравнении для $\Sigma(\varepsilon)$ слагаемое с $k = 0$ даст результат в нулевом поле, а с $k \neq 0$ — поправки. При $k > 0$ интегрирование выполняется по полюсам с замыканием контура в верхней полуплоскости комплексной переменной n , а при $k < 0$ — в нижней. При $\text{Im}\Sigma > 0$ полюса $E_n = \varepsilon - \Sigma$ лежат в нижней полуплоскости комплексной переменной n . Поэтому ненулевой вклад будет только от слагаемых с $k < 0$:

$$\Sigma(\varepsilon) = \frac{i\hbar}{2\tau} + \frac{i\hbar}{\tau} \sum_{k=-\infty}^{-1} \exp \left[2\pi i k \left(\frac{\varepsilon - \Sigma(\varepsilon)}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (190)$$

(последнее слагаемое в формуле Пуассона даёт малый вклад). Не учитывая, как обычно, вещественную часть Σ , получаем:

$$\text{Im}\Sigma(\varepsilon) = \frac{\hbar}{2\tau} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos \left(\frac{2\pi k \varepsilon}{\hbar\omega_c} \right) e^{-2\pi \text{Im}\Sigma(\varepsilon)/\omega_c} \right]. \quad (191)$$

В умеренных магнитных полях, когда $\omega_c \tau \lesssim 1$, но мал квантовый параметр

$$\exp(-\pi/\omega_c \tau) \ll 1, \quad (192)$$

то есть когда между двумя рассеяниями электрон успевает совершить не более одного циклотронного оборота, можно найти поправку к собственно-энергетической части с помощью итераций:

$$\text{Im}\Sigma(\varepsilon) = \frac{\hbar}{2\tau} \left[1 - 2 \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon}{\hbar\omega_c} \right) e^{-\pi/\omega_c \tau} \right]. \quad (193)$$

Из зависимости от $\omega_c \tau$ видно, что этот результат не получить по теории возмущений.

В таком подходе можно вычислить слабоосциллирующую плотность состояний:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{r} \text{Im} G_{\varepsilon}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = g_{2D} \left[1 - 2 \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon}{\hbar\omega_c} \right) e^{-\pi/\omega_c \tau} \right]. \quad (194)$$

Плотность состояний имеет вид постоянной с малой осциллирующей добавкой. Период осцилляций равен циклотронной энергии, а их амплитуда экспоненциально нарастает с ростом поля. Такие же осцилляции будут и в проводимости.

VII.1. Осцилляции проводимости

В нулевом и слабом поле проводимость полностью определялась интегралом по участку $0 < \epsilon < -\omega$, и в квантующем магнитном поле этот интервал тоже даст существенный вклад. Интегрируя по полюсам, получим:

$$\sigma \propto \frac{1}{\omega} \int_{-\omega}^0 d\epsilon \frac{Ne^2\tau/m}{1 - i(\omega - \omega_c)\tau + (\delta_{\epsilon+\omega} + \delta_\epsilon)/2}, \quad \delta_\epsilon = -2 \cos\left(\frac{2\pi(\epsilon_F + \epsilon)}{\hbar\omega_c}\right) e^{-\pi/\omega_c\tau}. \quad (195)$$

Разлагая до первого порядка по δ и беря интеграл

$$\frac{1}{\omega} \int_{-\omega}^0 d\epsilon (\delta_{\epsilon+\omega} + \delta_\epsilon)/2 = \cos\left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \frac{\sin(2\pi\omega/\omega_c)}{2\pi\omega/\omega_c} e^{-\pi/\omega_c\tau}, \quad (196)$$

получаем осцилляции проводимости и гармоники циклотронного резонанса.

На нулевой частоте компоненты тензора проводимости есть

$$\sigma_{xx} = \frac{Ne^2\tau/m}{1 + (\omega_c\tau)^2} \left[1 - 4\delta \frac{(\omega_c\tau)^2}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right], \quad (197)$$

$$\sigma_{yx} = \frac{Ne^2\omega_c\tau^2/m}{1 + (\omega_c\tau)^2} \left[1 + 2\delta \frac{1 + 3(\omega_c\tau)^2}{(\omega_c\tau)^2[1 + (\omega_c\tau)^2]} \right]. \quad (198)$$

Здесь δ – малая величина, осциллирующая с полем:

$$\delta = \cos\left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) e^{-\pi/\omega_c\tau}. \quad (199)$$

Вычисляя компоненты тензора магнитосопротивления, получаем:

$$\rho_{xx} = \frac{m}{Ne^2\tau} (1 - 4\delta), \quad \rho_{yx} = \omega_c\tau \frac{m}{Ne^2\tau} \left(1 + \frac{2}{(\omega_c\tau)^2} \delta \right). \quad (200)$$

Заметим, что при анизотропном рассеянии под τ следует понимать транспортное время релаксации, но не везде. Экспонента, описывающая нарастание осцилляций с полем, получена из плотности состояний (из функций Грина). Она не имеет прямого отношения к проводимости, и поэтому там стоит полное ухонное время. Его, чтобы отличить от транспортного, иногда называют квантовым временем.

VII.2. Температурное затухание осцилляций

Осцилляции, в отличие от плавной части сопротивления, очень чувствительны к температуре. Как мы сейчас увидим, осцилляции 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.

В диаграммной технике температуру можно учесть с помощью техники Мацубары или Келдыша. Но точный ответ получается и из следующих соображений. При конечной температуре вклад в проводимость вносят электроны с энергиями, лежащими в полоске $\sim T$ вблизи энергии Ферми. Поэтому осциллирующую величину δ_ϵ нужно усреднить:

$$\delta(T) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \delta_\epsilon, \quad (201)$$

где f_0 – равновесная функция распределения. Беря интеграл, получаем:

$$\delta(T) = \cos \left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) e^{-\pi/\omega_c\tau} \frac{z}{\sinh z} \quad z = \frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_c}. \quad (202)$$

Видно, что когда $z \ll 1$, справедлив результат при нулевой температуре, а при $z \sim 1$ осцилляции сильно подавляются. Это обусловлено температурным размытием электронного энергетического распределения.

Иногда полученную формулу пишут в приближённом виде, вводя температуру Дингля:

$$\delta(T) \propto \cos \left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) \exp \left(-\frac{2\pi^2(T + T_D)}{\hbar\omega_c} \right), \quad T_D = \frac{\hbar}{2\pi\tau}. \quad (203)$$

То есть амплитуда осцилляций уменьшается из-за нагрева и из-за рассеяния.

VII.3. Роль спинowego расщепления Зеемана

В магнитном поле из-за эффекта Зеемана возникает спиновое расщепление электронных уровней Δ . Обычно оно меньше циклотронного, но может быть и наоборот, если поле приложено под углом к 2D газу или в структуре имеются магнитные примеси, которые за счёт обменного взаимодействия увеличивают зеемановское расщепление.

Наличие спинowego расщепления практически не влияет на проводимость в классических полях. Действительно, проводимость есть сумма по двум спиновым подзонам, и, особенно если время релаксации не зависит от энергии Ферми, проводимость не чувствительна к спиновому расщеплению. Яркий эффект возникает в режиме квантовых осцилляций. Действительно, хотя проводимость и равна сумме по подзонам, в каждой из них роль энергии Ферми играет величина $\epsilon_F \pm \Delta/2$ (ϵ_F – расстояние от уровня Ферми до середины между днищами энергетических подзон). Складывая осциллирующие

части проводимостей в подзонах, получим, что

$$\delta = \frac{1}{2} \sum_{\pm} \cos \left(\frac{2\pi(\varepsilon_F \pm \Delta/2)}{\hbar\omega_c} \right) e^{-\pi/\omega_c\tau} = \cos \left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{\pi\Delta}{\hbar\omega_c} \right) e^{-\pi/\omega_c\tau}. \quad (204)$$

Поскольку и Δ , и ω_c обычно линейны по магнитному полю, дополнительный множитель от поля не зависит. Но, изменяя зеемановское расщепление, можно сильно менять амплитуду шубниковских осцилляций, в том числе и полностью подавить осцилляции первого порядка. Тогда появляются осцилляции второго порядка, имеющие удвоенную частоту:

$$\delta_2 = \cos \left(\frac{4\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi\Delta}{\hbar\omega_c} \right) e^{-2\pi/\omega_c\tau}. \quad (205)$$

Они как раз максимальны при полуцелых $\Delta/\hbar\omega_c$, когда амплитуда первого порядка в точности ноль.

VIII. Слабая локализация

Кинетическое уравнение описывает транспортные явления с точностью до квантового параметра

$$\frac{\hbar}{\varepsilon_F \tau} \sim \frac{1}{k_F l} \ll 1. \quad (206)$$

При этом проводимость описывается формулой Друдэ $\sigma = Ne^2\tau/m$. Поскольку концентрация $N = k_F^2/(2\pi)$, $\hbar k_F/m = v_F$, а длина свободного пробега $l = v_F\tau$, формулу Друдэ можно переписать как

$$\sigma = \frac{e^2}{2\pi\hbar} k_F l = \frac{e^2}{h} k_F l. \quad (207)$$

Отсюда следует, что возможные поправки имеют порядок e^2/h . Вклады в проводимость такой величины измеряются, поэтому имеет смысл их обсуждать. 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.

VIII.1. Расчёт веерных диаграмм

Мы будем рассчитывать квантовые поправки к проводимости диаграммными методами. Как мы уже знаем, проводимость описывается петлевой диаграммой. При изотропном рассеянии, которым мы здесь и ограничимся, примесных линий внутри петли нет – они есть только в усреднённых по беспорядку функциях Грина. Попробуем найти другие диаграммы, дорисовывая примесные линии. Например, можно учесть отброшенные пересекающиеся линии в верхней и нижней функциях Грина. Они дадут поправки ко времени рассеяния как раз порядка $1/(k_F l)$. Однако, такие поправки не имеют аномальной зависимости от внешних параметров, поэтому они не интересны.

Перейдём тогда к примесным линиям, соединяющим опережающую и запаздывающую функции Грина. Добавлять вертикальные линии не имеет смысла, так как они, как мы знаем, приводят лишь к перенормировке вершин, то есть к замене уходного времени на транспортное. При изотропном рассеянии таких поправок просто нет – все

такие диаграммы равны нулю из-за интегрирования векторной вершины. Тогда можно попробовать нарисовать веерные диаграммы.

Рассчитывая вклад веерной диаграммы, получаем:

$$\Delta\sigma = -\frac{(el)^2}{2\pi\hbar}W, \quad W = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{n=2}^{\infty} (P_q)^n = \sum_{\mathbf{q}} \frac{P_q^2}{1-P_q}, \quad P_q = \mathcal{N}_i V_0^2 \sum_{\mathbf{k}} G^R(\mathbf{k}) G^A(-\mathbf{k} + \mathbf{q}). \quad (208)$$

Отметим, что поправка отрицательна – мы нашли вклад, уменьшающий проводимость.

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

$$P_q = \left\langle \frac{1}{1 - iql \cos \varphi} \right\rangle_{\varphi} \approx 1 - (ql)^2/2; \quad W = \int \frac{1/l}{2\pi} \frac{dq}{(ql)^2/2} \quad (209)$$

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

$$\delta\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \left(\frac{2L^2}{l^2} \right) \approx -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \left(\frac{L^2}{l^2} \right). \quad (210)$$

VIII.2. Связь с классической плотностью вероятности возврата

Смысл величины P_q понятен, если перейти в реальное пространство:

$$P(r) = V_0^2 G^R(r) G^A(r) = \frac{e^{-r/l}}{2\pi r l}. \quad (211)$$

Видно, что $P(r)$ – плотность вероятности частице, стартовавшей из начала координат, совершить первое столкновение вблизи точки $\mathbf{r}$. Также понятен и смысл сумм

$$\sum_{\mathbf{q}} (P_q)^n = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{n-1} P(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1) P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \dots P(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_0) \quad (212)$$

(здесь введена координата $\mathbf{r}_0$, от которой интеграл не зависит). Из этой формулы видно, что она выражает классическую вероятность частице, стартовавшей из точки $\mathbf{r}_0$, вернуться обратно в точку $\mathbf{r}_0$ после n столкновений. Отсюда следует, что сумма W – это плотность вероятности найти частицу в исходной точке после любого количества столкновений, то есть классическая плотность вероятности возврата.

Можно получить оценку для относительного вклада в проводимость. За промежуток времени dt вернуться в исходную точку смогут только те электроны, которые находятся в площади $dS = v_F \lambda_F dt$ от неё. Здесь $\lambda_F = 1/k_F$ – длина волны де Бройля электрона.

А площадь, в которой может находиться электрон в момент времени t есть $S_{diff} = Dt$. Отсюда получаем:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim - \int_{\tau}^{L^2/D} \frac{dS}{S_{diff}} = -\frac{1}{k_F l} \ln \left(\frac{L^2}{l^2} \right). \quad (213)$$

Здесь мы обрезали интегрирование на нижнем пределе временем рассеяния τ , так как без рассеяния электрон не сможет вернуться, а на верхнем пределе – временем диффузионного достижения границ образца.

Если рассмотреть объёмный образец или проволоку, то площадь 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:

$$\Delta\sigma_3 \approx -\text{const} + \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{L}, \quad \Delta\sigma_1 \approx -\frac{e^2}{\hbar} L. \quad (214)$$

Различная зависимость от размера системы приводит к различному поведению систем размерности 3, 2 и 1 при нуле температур при изменении силы беспорядка. Этот вопрос рассматривается в теории квантовых фазовых переходов, где характеристикой системы (управляющим параметром) предполагается кондактанс g – соответствующим образом обезразмеренная проводимость. Вводится логарифмическая производная кондактанса по размеру системы и предполагается, что она полностью определяется значением кондактанса:

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L}, \quad \beta = \beta(g). \quad (215)$$

Развита однопараметрическая скейлинговая теория перехода металл-изолятор. Поскольку в одномерии $\beta_1(g) < 0$, делается вывод, что все состояния локализованы. В трёхмерии возможен переход металл-изолятор, а в двумерии $\beta_2(g) = -1/g$. Бета-функция всюду отрицательна, перехода металл-изолятор нет, но она стремится при больших g к нулю, поэтому двумерие – пограничный случай.

VIII.3. Сбой фазы и аномальная температурная зависимость проводимости

Мы видим, что к проводимости есть поправка, определяемая вероятностью возврата. Процессы рассеяния назад вносят вклад по следующей причине. Дело в том, что электрон может рассеяться назад от n примесей как пройдя их последовательно $1, 2 \dots n$, так и $n, n-1 \dots 2, 1$. 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

$$\varphi_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_1^2 \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_{21} = \frac{1}{\hbar} (-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}_{12} = \varphi_{12}. \quad (216)$$

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:

$$W_{cl} = |A_1|^2 + |A_2|^2, \quad W_{quant} = |A_1 + A_2|^2 = 2W_{cl}. \quad (217)$$

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:

$$\delta\sigma(T) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \left(\frac{L_\phi^2(T)}{l^2} \right) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln \left(\frac{\tau_\phi(T)}{\tau} \right), \quad \tau_\phi = L_\phi^2/D. \quad (218)$$

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

VIII.4. 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:

$$\varphi = \frac{1}{\hbar} \oint \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot d\mathbf{r} = \varphi(0) - BS, \quad \Delta\varphi = 2BS. \quad (219)$$

Оценим величину поля, в котором квантовая поправка к проводимости будет подавляться. Для этого нужны поля $BL_\phi^2 \sim 1$. В реальных системах это – 10 ... 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.

VIII.5. 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 . При обходе петли в противоположном направлении спин повернётся в другую сторону, и множитель изменится на $-i$. В результате 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:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim -\frac{1}{k_{Fl}} \int_{\tau}^{\tau_\phi} \frac{dt}{t} \left(\frac{3}{2} e^{-t/\tau_s} - \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{k_{Fl}} \left[\frac{3}{2} \ln \left(\frac{\tau_s}{\tau} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\tau_\phi}{\tau} \right) \right]. \quad (220)$$

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.

IX. 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?

IX.1. Разогрев электронов

Типичной является следующая иерархия времён:

$$\tau_{\text{tr}} \ll \tau_{ee} \ll \tau_{e-ph}. \quad (221)$$

То есть при выводе из равновесия в первую очередь распределение изотропизуется, а затем вступают в игру межчастичные процессы. После вывода системы из равновесия они за характерное время τ_{ee} устанавливают распределение

$$f_{\mathbf{p}} = \left[\exp \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu_e}{T_e} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (222)$$

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:

$$N = \sum_{\nu, \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}} = \frac{m}{\pi \hbar^2} T_e \ln (e^{\mu_e/T_e} + 1) = g_{2D} \mu_e + O(e^{-\mu_e/T_e}). \quad (223)$$

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

В единицу времени электронный газ в электрическом поле получает энергию $Q = 2|E|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)]$. Эта энергия расходуется на увеличение температуры. Баланс энергии устанавливается за счёт её передачи фононам. Энергия, переданная в единицу времени от электронов фононной системе, есть

$$Q = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}'})\hbar\Omega_{\mathbf{q}}W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^+(\mathbf{q}) - f_{\mathbf{k}'}(1 - f_{\mathbf{k}})\hbar\Omega_{\mathbf{q}}W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^-(\mathbf{q})]. \quad (224)$$

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

$$f_{\mathbf{k}} \approx f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + (T_e - T) \frac{\partial f_0}{\partial T}. \quad (225)$$

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:

$$2|E|^2 \text{Re}[\sigma(\omega)] = N \frac{T_e - T}{\tau_T}. \quad (226)$$

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

$$T_e - T = 2|E|^2 \tau_T \frac{e^2 \tau_{\text{tr}} / m}{1 + (\omega \tau_{\text{tr}})^2}. \quad (227)$$

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:

$$Q = N \frac{\bar{\varepsilon}(T_e) - \bar{\varepsilon}(T)}{\tau_\varepsilon}. \quad (228)$$

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

$$\bar{\varepsilon}(T) = \frac{\varepsilon_F}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{6 \varepsilon_F}, \quad (229)$$

откуда получаем

$$\frac{1}{\tau_T} = \frac{\pi^2 T}{3 \varepsilon_F} \frac{1}{\tau_\varepsilon}. \quad (230)$$

При $T \rightarrow 0$ время релаксации температуры τ_T остаётся конечным, а τ_ε стремится к нулю.

IX.2. Выстраивание электронных импульсов

Электрическое поле во втором порядке приводит и к анизотропным поправкам к функции распределения электронов. Для их нахождения подставим в полевое слагаемое кинетического уравнения

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + e \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}_{\text{imp}}[f_{\mathbf{p}}] \quad (231)$$

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 $E_\alpha E_\beta^*$:

$$-e^2 E_\alpha E_\beta^* \frac{\partial}{\partial p_\beta} (\tau_{1\omega} f'_0 v_\alpha) + c.c. = \text{St}_{\text{imp}}[f_p]. \quad (232)$$

Производная вычисляется так:

$$\frac{\partial}{\partial p_\beta} (\tau_{1\omega} f'_0 v_\alpha) = (\tau_{1\omega} f'_0)' v_\alpha v_\beta + \tau_{1\omega} f'_0 \frac{\partial v_\alpha}{\partial p_\beta}. \quad (233)$$

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

$$-e^2 E_\alpha E_\beta^* \left\{ (\tau_{1\omega} f'_0)' \left(v_\alpha v_\beta - \frac{v_p^2}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m} [\varepsilon_p (\tau_{1\omega} f'_0)' + \tau_{1\omega} f'_0] \right\} + c.c. \quad (234)$$

Второе слагаемое $-\frac{e^2}{m}|E|^2(\varepsilon_p \tau_{1\omega} f'_0)'$ изотропно и релаксирует за время τ_{ee} , которое много длиннее, чем τ_{tr} . Первое – анизотропное – слагаемое содержит вторые фурье-гармоники $e^{\pm 2i\varphi_p}$. Поэтому соответствующая поправка f_2 релаксирует за время τ_2 . Билинейную комбинацию амплитуд электрического поля удобно разложить на симметричную и антисимметричную части:

$$E_\alpha E_\beta^* = \frac{E_\alpha E_\beta^* + E_\alpha^* E_\beta}{2} + \frac{E_\alpha E_\beta^* - E_\alpha^* E_\beta}{2}. \quad (235)$$

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

$$-e^2 (\tau_{1\omega} f'_0)' \left[\left(v_x^2 - \frac{v_p^2}{2} \right) |E_x|^2 + \left(v_y^2 - \frac{v_p^2}{2} \right) |E_y|^2 + 2v_x v_y \frac{E_x E_y^* + E_y^* E_x}{2} \right] + c.c. = -\frac{f_2}{\tau_2}. \quad (236)$$

Вводя угловую координату импульса φ_p , получаем:

$$f_2 = 2\tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_p \left[\cos 2\varphi_p \frac{|E_x|^2 - |E_y|^2}{2} + \sin 2\varphi_p \frac{E_x E_y^* + E_y^* E_x}{2} \right]. \quad (237)$$

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

$$f_2 = 2|E|^2 \tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_p \cos(2\varphi_p - 2\alpha). \quad (238)$$

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

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

$$\mathbf{v}_p = v_0 \frac{\mathbf{p}}{p} = v_0 \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}}. \quad (239)$$

Видно, что в этом случае $\partial v_x / \partial p_y \neq 0$, что несколько усложняет вычисление степени выстраивания импульсов в графене.

Х. 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 симметричный анализ, чтобы установить, какие вклады вообще можно было бы ожидать.

Х.1. Симметричный анализ

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

$$j_\alpha = \chi_{\alpha\beta\gamma} E_\beta E_\gamma^*. \quad (240)$$

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:

$$A_1 : E^2 = E_x^2 + E_y^2 \quad A_2 : E_x E_y^* - E_x^* E_y, \quad E : (j_x, j_y), (|E_x|^2 - |E_y|^2, -E_x E_y^* - E_x^* E_y). \quad (241)$$

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

$$j_x = \chi(E_x^2 - E_y^2), \quad j_y = -2\chi E_x E_y. \quad (242)$$

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

$$j_x = \chi|E|^2 \cos 2\alpha, \quad j_y = -\chi|E|^2 \sin 2\alpha. \quad (243)$$

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

$$j_x + ij_y = \chi(E_x - iE_y)^2 = \chi|E|^2 e^{-2i\alpha}. \quad (244)$$

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

Х.2. Расчёт из кинетического уравнения

Микроскопически величину χ можно получить из кинетического уравнения:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} + e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}[f_{\mathbf{p}}]. \quad (245)$$

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

$$\mathbf{j} = e \sum_{\nu, \mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}). \quad (246)$$

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.

Если же выйти за рамки борновского приближения, то появляется асимметричная часть $W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a = -W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$ [см. (25)]:

$$W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a = \frac{(2\pi)^2}{\hbar} N_i \sum_{\mathbf{p}''} \text{Im}\{V_0(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')V_0(\mathbf{p}'' - \mathbf{p})V_0(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\}\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'})\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p''}). \quad (247)$$

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:

$$\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a [f_2(\mathbf{p}) + f_2(\mathbf{p}')] + \frac{\delta f_{\mathbf{p}}}{\tau_1} = 0. \quad (248)$$

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

$$\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = -\frac{2}{\hbar} T_{\mathbf{p}\mathbf{p}}, \quad (249)$$

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

$$\sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}',-\mathbf{p}} \equiv \sum_{\mathbf{p}'} W_{-\mathbf{p}',-\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (250)$$

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 $\mathbf{p}$:

$$\delta f_{\mathbf{p}} = (-\tau_1) \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_2(\mathbf{p}'), \quad \delta f_{-\mathbf{p}} = (-\tau_1) \sum_{\mathbf{p}'} W_{-\mathbf{p}'-\mathbf{p}}^a f_2(\mathbf{p}') = (-\tau_1) \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a f_2(\mathbf{p}') = -\delta f_{\mathbf{p}}. \quad (251)$$

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:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{p},\nu} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} (-\tau_1) \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a f_2(\mathbf{p}'). \quad (252)$$

Подставляя f_2 в виде (238), получаем

$$\mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{p},\nu} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} (-\tau_1) \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a 2|E|^2 \tau_2 \frac{e^2}{m} \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \varepsilon_{\mathbf{p}} \cos(2\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\alpha). \quad (253)$$

Для компоненты j_x :

$$j_x = -2|E|^2 \frac{e^3}{m} \sum_{\mathbf{p}, \nu} v_p \tau_1 \tau_2 \varepsilon_p \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \cos \varphi_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \cos(2\varphi_{\mathbf{p}'} - 2\alpha). \quad (254)$$

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

$$\chi = -2 \frac{e^3}{m} \sum_{\mathbf{p}, \nu} v_p \tau_2 \varepsilon_p \left(\frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} f'_0 \right)' \Xi, \quad \Xi = \tau_1 \sum_{\mathbf{p}'} \langle W_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^a \cos 2\varphi_{\mathbf{p}'} \cos \varphi_{\mathbf{p}} \rangle_{\varphi_{\mathbf{p}}}. \quad (255)$$

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

$$\chi = -\frac{2e^3 \tau_{\text{tr}}}{\pi \hbar^2 (1 + \omega^2 \tau_{\text{tr}}^2)} \frac{d(\Xi \varepsilon_F v_F \tau_2)}{d\varepsilon_F}. \quad (256)$$

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.