

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В.Н. Каразина**

А. М. ЕРМОЛАЕВ, Г. И. РАШБА

**Л Е К Ц И И
ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ
И КИНЕТИКЕ**

**6. Метод функций Грина
в физической кинетике**

Учебно-методическое пособие

Харьков 2010

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. ФТИНТ НАН
Украины, профессор **А.С. Ковалев**.

доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической
физики имени академика И.М. Лифшица Харьковского
национального университета имени В.Н. Каразина,
профессор **В.В. Ульянов**.

*Рекомендовано к печати Научно-методическим советом
Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина,
протокол № 1 от 18 ноября 2010 г.*

Ермолаев А.М., Рашба Г.И.

E 74

Лекции по квантовой статистике и кинетике.

6. Метод функций Грина в физической кинетике:

Учебно-методическое пособие для студентов физических
специальностей университетов. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина,
2010. – 99 с.

В учебно-методическом пособии изложен формализм
современной

квантовой статистики и кинетики, основанный на методах
квантовой теории поля. Основное внимание уделено применению
метода квантовых функций Грина и функциональных методов в
теории конденсированного состояния вещества.

В шестой главе показано, как метод функций Грина используется
для вычисления кинетических коэффициентов электронных
проводников в магнитном поле и без него. Основное внимание
уделено электрон-примесному рассеянию, существенному при
низких температурах. Наряду с потенциальным рассеянием
электронов изолированными примесными атомами учитывается
резонансное рассеяние.

УДК 530.145, 530.1 (075.8)

ББК 22.317я73

© Харьковский национальный

университет имени В.Н. Каразина, 2010

© А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, 2010

© Макет обложки Дончик И.Н.

Содержание

6. Метод функций Грина в физической кинетике.....	4
6.1. Примесное рассеяние электронов проводимости.....	4
6.2. Оператор плотности тока в представлении вторичного квантования.....	21
6.3. Плотность тока и функция Грина электронов.....	25
6.4. Теория линейной реакции (метод Кубо).....	26
6.5. Теория линейной реакции (метод функций Грина).....	31
6.6. Формула Кубо для тензора электропроводности.....	33
6.7. Связь тензора проводимости с двухэлектронной функцией Грина.....	35
6.8. Аппроксимация Друде-Лоренца.....	37
6.9. Тензор диэлектрической проницаемости.....	40
6.10. Продольная и поперечная реакция электронов.....	44
6.11. Остаточное сопротивление металлов (метод Кубо).....	46
6.12. Остаточное сопротивление металлов (метод функций Грина).....	48
6.13. Тождество Уорда.....	64
6.14. Функция Грина плотность-плотность.....	68
6.15. Нулевой звук.....	71
6.16. Тензор динамической спиновой восприимчивости электронного газа в магнитном поле.....	74
6.17. Кинетические коэффициенты и корреляционные функции.....	82
Приложение.....	88
Задачи.....	93

6. Метод функций Грина в физической кинетике

6.1. Примесное рассеяние электронов проводимости в проводниках

Среди множества механизмов рассеяния электронов проводимости в проводниках, определяющих кинетические коэффициенты, выделяется электрон-примесное рассеяние, существенное при низких температурах. В этом разделе оно рассматривается методом температурных функций Грина.

Известно, что в идеальном проводнике существуют стационарные состояния электронов проводимости – блоховские волны. Они характеризуются квазиимпульсом \vec{p} и энергией $\varepsilon_{\vec{p}}$. Последнюю в однозонном приближении будем

считать равной $\varepsilon_{\vec{p}} = p^2 / 2m$, где m – эффективная масса электрона. Пусть по объему проводника хаотически распределены немагнитные неподвижные примесные атомы, на которых электроны рассеиваются упруго. Тогда состояния $|\vec{p}\rangle$ уже не будут существовать как угодно долго. Появится затухание этих состояний. Будем считать, что температура проводника настолько низкая, что можно пренебречь рассеянием электронов на колебаниях решетки ионов. Примесное рассеяние электронов будет тогда основным механизмом, обуславливающим конечное электросопротивление проводника. Выясним, как примесные атомы влияют на электронные состояния в проводниках.

Потенциальная энергия электрона, который находится в точке \vec{r} , в поле примесных атомов равна

$$U(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_i} u(\vec{r} - \vec{r}_j), \quad (6.1)$$

где $u(\vec{r} - \vec{r}_j)$ – энергия взаимодействия электрона с примесью в точке \vec{r}_j , N_i – число примесей. В представлении вторичного

квантования гамильтониан электрон-примесного взаимодействия равен (2.141). Входящий в него оператор

$$\rho_e(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}\sigma} a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma}$$

связан с фурье-компонентой оператора плотности электронов

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^+(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}) \quad (6.2)$$

соотношением

$$n(\vec{q}) = \rho_e(-\vec{q}).$$

Обозначения см. в гл. 2.

Одноэлектронную температурную функцию Грина (5.24) представим в виде ряда по степеням энергии электрон-примесного взаимодействия. Для этого запишем ее в представлении Дирака (5.94) с гамильтонианом взаимодействия (2.141). Выполняя разложение температурного оператора рассеяния σ по степеням гамильтониана (2.141), приходим к бесконечному ряду теории возмущений для

$$\text{функции Грина: } G = \sum_{n=0}^{\infty} G_n.$$

В членах ряда для G положения примесных атомов содержатся в сомножителях $\rho(\vec{q}_1) \dots \rho(\vec{q}_n)$. Поскольку положения примесных атомов в образце обычно неизвестны, по ним необходимо выполнить усреднение гриновской функции. При малых концентрациях примесей это усреднение определяется соотношением

$$\left\langle F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_i}) \right\rangle_c = \int \frac{d\vec{r}_1}{V} \dots \int \frac{d\vec{r}_{N_i}}{V} F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_i}). \quad (6.3)$$

Используя формулу

$$\int \frac{d\vec{r}}{V} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'},$$

легко показать, что

$$\left\langle \rho(\vec{q}_1) \right\rangle_c = N_i \delta_{\vec{q}_1, 0},$$

$$\begin{aligned} \langle \rho(\bar{q}_1) \rho(\bar{q}_2) \rangle_C &= N_i \delta_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2, 0} + N_i (N_i - 1) \delta_{\bar{q}_1, 0} \delta_{\bar{q}_2, 0}, \\ \langle \rho(\bar{q}_1) \rho(\bar{q}_2) \rho(\bar{q}_3) \rangle_C &= N_i \delta_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2 + \bar{q}_3, 0} + \\ &+ N_i (N_i - 1) (\delta_{\bar{q}_1, 0} \delta_{\bar{q}_2 + \bar{q}_3, 0} + \delta_{\bar{q}_2, 0} \delta_{\bar{q}_1 + \bar{q}_3, 0} + \delta_{\bar{q}_3, 0} \delta_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2, 0}) + \\ &+ N_i (N_i - 1) (N_i - 2) \delta_{\bar{q}_1, 0} \delta_{\bar{q}_2, 0} \delta_{\bar{q}_3, 0}, \dots \end{aligned}$$

Таким образом, наряду с гиббсовским усреднением члены ряда для G содержат конфигурационное усреднение (6.3).

Выполняя конфигурационное усреднение функции Грина в импульсном представлении, убеждаемся в том, что

$$\langle G_{\sigma_1 \sigma_2}(\bar{k}_1 \tau_1, \bar{k}_2 \tau_2) \rangle_c = G(\bar{k}_1, \tau_1, \tau_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\bar{k}_1 \bar{k}_2}, \quad (6.4)$$

т. е. средняя гриновская функция оказывается диагональной в \bar{k} -представлении.

Каждому члену ряда для средней компоненты Фурье функции Грина $G(\bar{k}, \zeta_s)$ можно сопоставить график (см. р. 5.12). Например, члену первого порядка

$$\left[-G_0(\bar{k}, \zeta_s) \right] \left[-\frac{u_0}{V} \right] N_i \left[-G_0(\bar{k}, \zeta_s) \right] \quad (6.5)$$

в разложении $-G$ соответствует график на рис. 6.1. Здесь

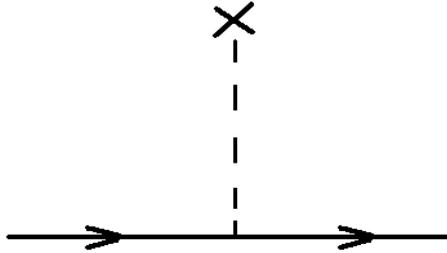


Рис. 6.1. Графическое изображение слагаемого (6.5) в разложении средней функции Грина

$u_0 = u(\vec{q} = 0)$. Слагаемое второго порядка

$$-G_0(\vec{k}, \zeta_s) \sum_{\vec{k}'} N_i \frac{u(\vec{k} - \vec{k}')}{V} G_0(\vec{k}', \zeta_s) \frac{u(\vec{k}' - \vec{k})}{V} G_0(\vec{k}, \zeta_s) \quad (6.6)$$

изображается графиком на рис. 6.2, где $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$.

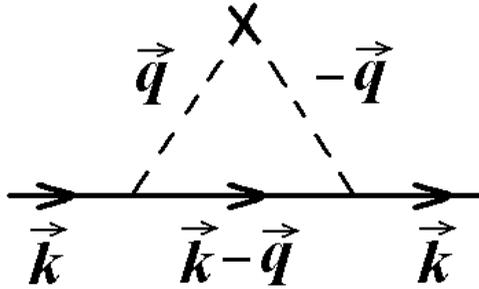


Рис. 6.2. Графическое изображение вклада (6.6) в среднюю функцию Грина

Рассматривая графики на рис. 6.1, 6.2 и графики более высокого порядка, убеждаемся в том, что имеют место следующие правила соответствия между графиками и формулами в разложении $-G(\vec{k}, \zeta_s)$:

$$\begin{aligned}
 -G_0(\vec{k}, \zeta_s) &= \text{---}\xrightarrow{\vec{k}}\text{---}, \\
 -\frac{u(\vec{q})}{V} &= \vec{q} \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array}, \\
 N_i &= \times.
 \end{aligned} \quad (6.7)$$

Энергетическая переменная ζ_s одинакова на всех сплошных линиях. Это следствие упругого характера рассеяния электронов примесными атомами. В каждом узле



выполняется закон сохранения импульса. Сумма импульсов штриховых линий, входящих в крест, равна нулю. По импульсам внутренних электронных линий необходимо выполнять суммирование. Графики соответствуют определенным актам электрон-примесного рассеяния. Например, сумма графиков с одним крестом на рис. 6.3



Рис. 6.3. Графики с одним крестом

отвечает многократному рассеянию электронов одним примесным атомом. График на рис. 6.4 учитывает

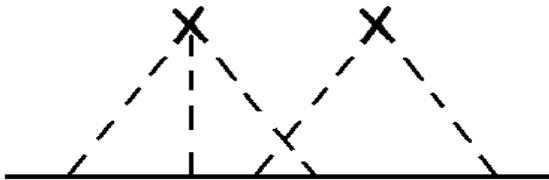


Рис. 6.4. Вклад 5-го порядка в G

интерференционные эффекты при рассеянии на двух примесных атомах. Излагаемая здесь техника вычисления функции Грина называется крестовой. Она разработана С.Эдвардсом и А.А.Абрикосовым, Л.П.Горьковым, И.Е.Дзялошинским (см. сб. Вопросы квантовой теории необратимых процессов, 1961; А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, 1962).

Бесконечная совокупность диаграмм без внешних электронных линий, которые нельзя разделить на две или большее число частей удалением внутренних электронных линий, называется собственно-энергетической частью. Соответствующую ей функцию обозначим $\Sigma(\vec{k}, \zeta_s)$ и будем изображать кружком на диаграммах (см. р. 5.13). Тогда ряд для $-G$ изобразится суммой диаграмм на рис. 6.5. Здесь функции

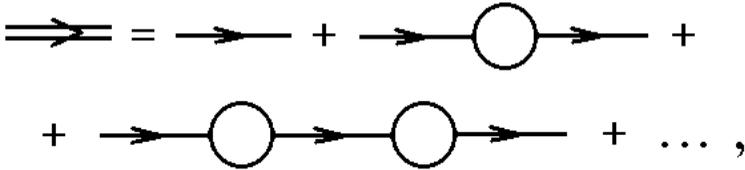


Рис. 6.5. Ряд для G

$-G$ (6.4) сопоставлена двойная линия. Выполняя суммирование этого ряда, приходим к уже известному уравнению Дайсона

$$G(\vec{k}, \zeta_s) = [i\zeta_s - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, \zeta_s)]^{-1}, \quad (6.8)$$

где $\xi_{\vec{k}}$ – энергия электрона, отсчитанная от химпотенциала.

В первом порядке теории возмущений $\Sigma_1 = n_i u_0$. Вычислим Σ во втором порядке по взаимодействию электронов с примесными атомами. Из формулы (6.6) получаем

$$\Sigma_2(\vec{k}, \zeta_s) = n_i \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \left| u(\vec{k} - \vec{k}') \right|^2 \frac{1}{i\zeta_s - \xi_{\vec{k}'},} \quad (6.9)$$

где $n_i = N_i/V$ – концентрация примесных атомов и учтено условие вещественности функции $u(\vec{r})$: $u(-\vec{q}) = u^*(\vec{q})$. Выделяя в (6.9) вещественную и мнимую части, получаем $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$, где

$$\Sigma'_2(\vec{k}, \zeta_s) = -n_i \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \left| u(\vec{k} - \vec{k}') \right|^2 \frac{\xi_{\vec{k}'}}{\zeta_s^2 + \xi_{\vec{k}'},^2}, \quad (6.10)$$

$$\Sigma''_2(\vec{k}, \zeta_s) = -\gamma(\vec{k}, \zeta_s) = -n_i \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \left| u(\vec{k} - \vec{k}') \right|^2 \frac{\zeta_s}{\zeta_s^2 + \xi_{\vec{k}'},^2}.$$

Вещественная часть (6.10) – четная функция ζ_s , а мнимая – нечетная функция этой переменной.

Обычно в кинетических явлениях в металлах, которые будут рассмотрены ниже, нас интересуют электроны вблизи границы Ферми. Для них $|\xi_k|, |\zeta_s| \ll \varepsilon_F$, т. е. $k \sim k_F$. Интеграл в Σ'_2 разбиваем на две части: по значениям k' , далеким от границы Ферми, и по $k' \sim k_F$. Интеграл по далеким областям дает не зависящую от k и ζ_s константу, которая перенормирует химический потенциал. Интеграл по окрестности поверхности Ферми исчезает из-за нечетности подынтегральной функции относительно $k - k_F$, если только $\left| u(\vec{k}) \right|^2$ плавно меняется при $k \sim k_F$.

Ввиду быстрой сходимости интеграла в Σ''_2 существенный вклад в интеграл дает окрестность границы Ферми. Тогда

$$\begin{aligned}
\gamma(\vec{k}, \zeta_s) &= n_i \zeta_s \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} |u(\vec{k} - \vec{k}')|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\delta(\xi - \xi_{\vec{k}'})}{\zeta_s^2 + \xi^2} \approx \\
&\approx n_i \zeta_s \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} |u(\vec{k} - \vec{k}')|^2 \delta(\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'}) \frac{\pi}{|\zeta_s|} = \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \text{sign} \zeta_s,
\end{aligned} \tag{6.11}$$

где

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} = \frac{2\pi n_i}{\hbar} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} |u(\vec{k} - \vec{k}')|^2 \delta(\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'}). \tag{6.12}$$

В (6.11) в аргументе дельта-функции мы положили $\xi = \xi_{\vec{k}}$. Величина $\tau_{\vec{k}}$ представляет собой время жизни состояния электрона с волновым вектором \vec{k} (см. р. 5.13). Оно получено в первом борновском приближении теории рассеяния.

С учетом (6.11) средняя функция Грина приобретает вид

$$G(\vec{k}, \zeta_s) = \left[i\zeta_s - \xi_{\vec{k}} + i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \text{sign} \zeta_s \right]^{-1}. \tag{6.13}$$

Аналитическое продолжение этой функции на верхнюю полуплоскость энергии дает запаздывающую функцию Грина

$$G^+(\vec{k}, \varepsilon) = \left[\varepsilon - \xi_{\vec{k}} + i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \right]^{-1},$$

а продолжение на нижнюю полуплоскость приводит к опережающей функции Грина $G^-(\vec{k}, \varepsilon) = [G^+(\vec{k}, \varepsilon)]^*$. В результате получаем функцию

$$G(\vec{k}, z) = \begin{cases} \left(z - \xi_{\vec{k}} + i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \right)^{-1}, & \text{Im } z > 0, \\ \left(z - \xi_{\vec{k}} - i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \right)^{-1}, & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (6.14)$$

которая имеет разрез вдоль вещественной оси в z -плоскости и аналитична в верхней и нижней полуплоскостях.

Совершая преобразование Фурье, из (6.14) получаем

$$G^+(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t\right)}{\varepsilon - \xi_{\vec{k}} + i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}}}.$$

При $t > 0$ интеграл необходимо дополнить полуокружностью в нижней ε -полуплоскости (в показателе экспоненты $\varepsilon \rightarrow \varepsilon + i0$), а при $t < 0$ – в верхней. Тогда теорема Коши дает:

$$G^+(\vec{k}, t) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \xi_{\vec{k}} t - \frac{t}{2\tau_{\vec{k}}}\right). \quad (6.15)$$

Рассмотрим также

$$G^+(\vec{r}, \varepsilon) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r})}{\varepsilon - \xi_{\vec{k}} + i \frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}}}.$$

В случае сферической поверхности Ферми и $|\varepsilon|, \frac{\hbar}{\tau} \ll \varepsilon_F$, переходя к интегрированию в сферических координатах в импульсном пространстве, получаем

$$G^+(r, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^2 r} \int_0^\infty dp \frac{p \sin \frac{pr}{\hbar}}{\varepsilon - \xi_p + i \frac{\hbar}{2\tau}}.$$

Вблизи поверхности Ферми

$$\xi_p = \frac{p_F}{m}(p - p_F). \quad (6.16)$$

В результате

$$\begin{aligned} G^+(r, \varepsilon) &= \frac{v(0)}{k_F r} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\sin[k(\varepsilon')r]}{\varepsilon - \varepsilon' + i \frac{\hbar}{2\tau}} = \\ &= \frac{v(0)}{2ik_F r} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon' + i \frac{\hbar}{2\tau}} \times \\ &\quad \times \left[\exp\left(ik_F r + i \frac{m\varepsilon' r}{\hbar^2 k_F}\right) - \exp\left(-ik_F r - i \frac{m\varepsilon' r}{\hbar^2 k_F}\right) \right], \end{aligned}$$

где

$$v(0) = \frac{mp_F}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (6.17)$$

– плотность электронных состояний на границе Ферми. Замыкая контур интегрирования в первом слагаемом в верхней ε' -полуплоскости, а во втором – в нижней и снова используя теорему Коши, находим первое слагаемое:

$$G^+(r, \varepsilon) = -\frac{\pi v(0)}{k_F r} \exp\left(ik_F r - \frac{r}{2l}\right), \quad (6.18)$$

где $l = v_F \tau$ – средняя длина свободного пробега электронов. Второе слагаемое равно нулю в силу регулярности подынтегральной функции в нижней ε' -полуплоскости. Таким образом, при распространении электрона вблизи границы

Ферми память о его начальном состоянии $|\vec{k}\rangle$ сохраняется только на длине свободного пробега l .

Спектральная плотность (5.57) функции Грина (6.14) в рассматриваемом приближении равна

$$\rho(\vec{k}, \varepsilon) = \frac{\hbar}{2\pi\tau_{\vec{k}}} \left[(\varepsilon - \xi_{\vec{k}})^2 + \left(\frac{\hbar}{2\tau_{\vec{k}}} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (6.19)$$

В пределе $\tau_k \rightarrow \infty$ она превращается в спектральную плотность свободных электронов

$$\rho_0(k, \varepsilon) = \delta(\varepsilon - \xi_k). \quad (6.20)$$

Вернемся к диаграммам для собственно-энергетической функции с одним крестом. Используя правила соответствия (6.7), получаем для диаграммы на рис. 6.3, содержащей

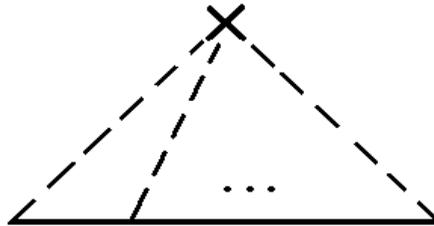


Рис. 6.6. Вклад в Σ

n штриховых линий, выражение

$$\begin{aligned} \Sigma_n(\vec{k}, \zeta_s) &= \frac{N_i}{V^n} \sum_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_{n-1}} u(\vec{k} - \vec{k}_1) u(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \dots u(\vec{k}_{n-1} - \vec{k}) \times \\ &\times \prod_{l=1}^{n-1} (i\zeta_s - \xi_{\vec{k}_l})^{-1}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Видно, что $\sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n \sim N_i$. Диаграммы с одним крестом

существенны при малой концентрации примесных атомов в проводнике. Используя итерационную процедуру типа описанной в р. 5.10, убеждаемся в том, что сумма диаграмм (6.21) с одним крестом может быть записана в виде

$$\Sigma(\vec{k}, \zeta_s) = n_i t(\vec{k}, \vec{k}, \zeta_s), \quad (6.22)$$

где функция $t(\vec{k}, \vec{k}', \zeta_s)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$t(\vec{k}, \vec{k}', \zeta_s) = u(\vec{k} - \vec{k}') + \int \frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3} \frac{u(\vec{k} - \vec{k}_1) t(\vec{k}_1, \vec{k}', \zeta_s)}{i\zeta_s - \xi_{\vec{k}_1}}. \quad (6.23)$$

Это уравнение – мацубаровская версия известного в теории рассеяния уравнения Липпмана-Швингера для матрицы перехода $t(\vec{k}, \vec{k}')$ (см. О.Г. Ситенко, Теория розсіяння, 1993).

Таким образом, процесс суммирования диаграмм с одним крестом эквивалентен решению уравнения (6.23) для функции t . Это уравнение определяет температурную функцию $t(\zeta_s)$ на дискретном множестве точек $z_s = i\zeta_s$ в комплексной плоскости энергии z . Запаздывающая и опережающая функции $t^{\pm}(\vec{k}, \vec{k}', \varepsilon)$ могут быть получены аналитическим продолжением $t(\zeta_s)$ с дискретных точек z_s на верхнюю и нижнюю z -полуплоскости соответственно. Переходя на вещественную ось, получаем

$$t^{\pm}(\vec{k}, \vec{k}', \varepsilon) = u(\vec{k} - \vec{k}') + \int \frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3} \frac{u(\vec{k} - \vec{k}_1) t^{\pm}(\vec{k}_1, \vec{k}', \varepsilon)}{\varepsilon - \xi_{\vec{k}_1} \pm i0}. \quad (6.24)$$

Это известное уравнение для однопримесной матрицы перехода. Зная t^{\pm} , получаем

$$\begin{aligned}\Sigma^\pm(\vec{k}, \varepsilon) &= n_i t^\pm(\vec{k}, \vec{k}, \varepsilon), \\ G^\pm(\vec{k}, \varepsilon) &= \left[\varepsilon - \xi_{\vec{k}} - \Sigma^\pm(\vec{k}, \varepsilon) \right]^{-1}.\end{aligned}\quad (6.25)$$

Амплитуда рассеяния $f_{\vec{k}'\vec{k}}$ электронов примесным центром связана с матричным элементом оператора перехода на энергетической поверхности $\varepsilon = \xi_{\vec{k}}$ соотношением

$$f_{\vec{k}'\vec{k}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} t^+(\vec{k}', \vec{k}).$$

Оптическая теорема позволяет связать мнимую часть $t^+(\vec{k}, \vec{k})$ при $\varepsilon = \xi_{\vec{k}}$ с полным сечением σ рассеяния электронов изолированным примесным атомом:

$$-2 \operatorname{Im} t^+(\vec{k}, \vec{k}) = \hbar \nu_k \sigma(k),$$

где ν_k – скорость электрона. Частота столкновений электронов с примесными атомами τ_k^{-1} связана с сечением рассеяния известным соотношением

$$\tau_k^{-1} = n_i \nu_k \sigma(k), \quad (6.26)$$

т. е.

$$\tau_k^{-1} = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \Sigma^+(k, \xi_k). \quad (6.27)$$

Следовательно, учет всех диаграмм с одним крестом приводит к замене $u(\vec{k} - \vec{k}')$ в формуле (6.12) функцией $t^+(\vec{k}, \vec{k}')$:

$$\tau_k^{-1} = \frac{2\pi n_i}{\hbar} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} |t^+(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \delta(\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'}). \quad (6.28)$$

Другими словами, борновская амплитуда рассеяния электронов изолированным примесным атомом, определяющая частоту столкновений (6.12), заменяется точной.

Среднюю функцию Грина можно выразить через среднее значение многопримесного оператора перехода T (см.

И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, 1982):

$$G = G_0 + G_0 T G_0. \quad (6.29)$$

В однопримесном приближении, когда учитываются лишь диаграммы с одним крестом, имеем

$$T(\vec{k}, \vec{k}') = n_i t(\vec{k}, \vec{k}'), \quad (6.30)$$

$$G(\vec{k}, \zeta_s) = G_0(\vec{k}, \zeta_s) + [G_0(\vec{k}, \zeta_s)]^2 n_i t(\vec{k}, \zeta_s).$$

Рассмотрим случай короткодействующего примесного центра, радиус действия которого меньше длины волны де Бройля электрона. Тогда уравнения (6.23) и (6.24) имеют точные решения:

$$t(\zeta_s) = \frac{u_0}{1 - u_0 P(\zeta_s)}, \quad t^\pm(\varepsilon) = \frac{u_0}{1 - u_0 P^\pm(\varepsilon)}, \quad (6.31)$$

где

$$P(\zeta_s) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} G_0(\vec{k}, \zeta_s), \quad P^\pm(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} G_0^\pm(\vec{k}, \varepsilon), \quad (6.32)$$

$u_0 = u(\vec{q} = 0)$. С учетом тождества (5.52) отсюда получаем

$$P^\pm(\varepsilon) = F_0(\varepsilon) \mp i\pi\nu_0(\varepsilon), \quad (6.33)$$

где

$$\nu_0(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \Pi^+(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) \quad (6.34)$$

– плотность состояний свободных электронов. Функция F_0 связана с ν_0 дисперсионным соотношением

$$F_0(\varepsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\nu_0(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon'}. \quad (6.35)$$

Отношение запаздывающей и опережающей функций Грина определяет фазовый сдвиг s -рассеяния δ электронов примесным центром:

$$\frac{t^+}{t^-} = \exp(2i\delta). \quad (6.36)$$

Подставляя сюда (6.31), учитывая (6.33) и тождество

$$\frac{1+ix}{1-ix} = \exp(2i \operatorname{arctg} x),$$

получаем фазовый сдвиг

$$\delta = \operatorname{arctg} \frac{\pi\nu_0}{F_0 - u_0^{-1}}.$$

Из формул (6.31) и (6.33) видно, что функции $t^\pm(\varepsilon)$ имеют комплексные полюсы в точках $\varepsilon_r \mp i\Gamma$, являющихся корнями уравнения И.М. Лифшица

$$1 - u_0 F_0(\varepsilon) \pm i\pi u_0 \nu_0(\varepsilon) = 0. \quad (6.37)$$

Эти корни отвечают примесным состояниям электронов на изолированных примесных атомах – локальным и квазилокальным (см. цитированную выше книгу И.М.Лифшица, С.А.Гредескула, Л.А.Пастура). Положения ε_r примесных уровней находим из уравнения

$$1 - u_0 F_0(\varepsilon) = 0, \quad (6.38)$$

а их полуширины Γ определяются плотностью состояний ν_0 . В области, где $\nu_0 = 0$, примесный уровень является локальным, а там, где $\nu_0 \neq 0$, – квазилокальным. Его ширина отлична от нуля.

Вблизи квазилокального уровня ε_r используем разложение

$$1 - u_0 F_0(\varepsilon) = -u_0 F_0'(\varepsilon_r)(\varepsilon - \varepsilon_r) + \dots, \quad (6.39)$$

из которого следует

$$\delta(\varepsilon) = -\operatorname{arctg} \frac{\Gamma}{\varepsilon - \varepsilon_r},$$

где

$$\Gamma = \frac{\pi v_0(\varepsilon_r)}{\left| F_0'(\varepsilon_r) \right|} \quad (6.40)$$

– полуширина уровня. Штрихом отмечена производная по энергии. При переходе через точку ε_r фазовый сдвиг резко меняется на π .

Сечение рассеяния электронов примесным атомом связано с функциями v_0 и F_0 соотношением

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \left| e^{2i\delta} - 1 \right|^2 = \frac{2\pi u_0^2 v_0 / \hbar v}{(1 - u_0 F_0)^2 + (\pi u_0 v_0)^2}. \quad (6.41)$$

Если учесть разложение (6.39), получим отсюда известную формулу Брейта-Вигнера для сечения резонансного рассеяния частиц (см. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, 1989). После подстановки σ в (6.26) находим частоту столкновений электронов с короткодействующими примесными атомами:

$$\tau^{-1} = \frac{2}{\hbar} n_i u_0 \frac{\pi u_0 v_0}{(1 - u_0 F_0)^2 + (\pi u_0 v_0)^2}. \quad (6.42)$$

В борновском приближении знаменатель в этой формуле необходимо положить равным единице. Тогда

$$\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i u_0^2 v_0.$$

Если подставить сюда

$$v_0(\varepsilon) = \frac{m^{3/2} \varepsilon^{1/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \quad (6.43)$$

и учесть известную связь длины рассеяния a с u_0

$$a = -\frac{m u_0}{2\pi \hbar^2},$$

получим элементарную формулу кинетической теории

$$\tau^{-1} = 4\pi a^2 v n_i.$$

Эта формула совпадает с (6.26), если в последней под σ понимать полное сечение s -рассеяния электронов $\sigma = 4\pi a^2$.

Отметим, что формулы (6.31), (6.33), (6.35) справедливы для любого закона дисперсии $\varepsilon_{\vec{k}}$ электронов в чистом проводнике. От него зависят функции ν_0 и F_0 . Расходимость интеграла (6.35) в случае закона дисперсии (2.55) требует при вычислении функции Грина суммирования более широкой совокупности диаграмм чем та, которая показана на рис. 6.3 (см. О.М. Ермолаев, Функции Грина в теории твердого тела, 2001). Другой способ избежать упомянутой расходимости – использовать сепарабельный примесный потенциал

$$u = |\eta\rangle u_0 \langle \eta|, \quad (6.44)$$

где u_0 – константа, $\langle \vec{r} | \eta \rangle$ – локализованная функция (см. И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, 1982). Такой потенциал часто используется в теории твердого тела и в ядерной физике.

Из квантовой механики известно, что мелкая и узкая потенциальная яма в трехмерном случае не может образовать связанное состояние частицы. При наличии мелких доноров в электронном проводнике в магнитном поле ситуация иная. В магнитном поле движение электрона похоже на одномерное, а в одномерном случае потенциальная яма как угодно малой интенсивности способна локализовать электрон. Примесные атомы, снимая вырождение уровней Ландау по положению центра электронной “орбиты”, отщепляют от каждого уровня Ландау примесные подуровни. Примесные уровни, отщепленные от нижнего уровня Ландау, попадают в область, где нет состояний Ландау, и оказываются локальными. Подуровни, отщепленные от верхних уровней Ландау, в результате гибридизации с состояниями Ландау становятся квазилокальными. Такие уровни, обусловленные совместным действием на электроны притягивающих примесей и магнитного поля, называются магнитопримесными уровнями, а соответствующие им состояния электронов –

магнитопримесными состояниями (см. М.И.Каганов, А.М.Ермолаев, Письма в ЖЭТФ, 1967, т.6, с.984; ЖЭТФ, 1968, т.54, с.1259). Эти состояния заметно влияют на свойства твердых тел.

6.2. Оператор плотности тока в представлении вторичного квантования

Для вычисления плотности тока в проводящей среде, обусловленного внешним электромагнитным полем, необходимо знать связь оператора плотности тока электронов с полевыми операторами. Получим эту связь.

Ограничимся гейзенберговским гамильтонианом электронов в поле векторного потенциала $\vec{A}(\vec{r}, t)$ и в потенциальном поле $U(\vec{r})$:

$$H(t) = \sum_{\alpha} \int d^3r \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}, t) \times \left\{ \frac{1}{2m} \left[-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + U(\vec{r}) \right\} \psi_{\alpha}(\vec{r}, t). \quad (6.45)$$

Векторный потенциал положим равным $\vec{A} = \vec{A}_0 + \vec{A}'$, где $\text{rot } \vec{A}_0 = \vec{H}$ – квантующее магнитное поле, \vec{A}' – векторный потенциал электромагнитной волны, действующей на электроны. Поле $U(\vec{r})$ обусловлено примесными атомами и дефектами решетки проводника.

Входящие в (6.45) гейзенберговские полевые операторы удовлетворяют уравнениям движения (1.56):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\alpha} = [\psi_{\alpha}, H], \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\alpha}^{+} = [\psi_{\alpha}^{+}, H].$$

Вычисляя входящие в эти уравнения коммутаторы при помощи перестановочных соотношений (5.18), находим

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\alpha &= \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U \right] \psi_\alpha, \\
-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\alpha^+ &= \left[\frac{1}{2m} \left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U \right] \psi_\alpha^+.
\end{aligned} \tag{6.46}$$

Теперь введем гейзенберговский оператор плотности заряда электронов

$$\rho(\vec{r}, t) = e \sum_\alpha \psi_\alpha^+(\vec{r}, t) \psi_\alpha(\vec{r}, t) \tag{6.47}$$

и вычислим его производную по времени:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_\alpha i\hbar \frac{\partial \psi_\alpha^+}{\partial t} \cdot \psi_\alpha + \sum_\alpha \psi_\alpha^+ i\hbar \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t}.$$

Подставляя сюда производные (6.46), получаем

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{e\hbar^2}{2m} \sum_\alpha \nabla \left(\nabla \psi_\alpha^+ \cdot \psi_\alpha - \psi_\alpha^+ \nabla \psi_\alpha \right) + \frac{i\hbar e^2}{mc} \sum_\alpha \nabla \left(\vec{A} \psi_\alpha^+ \psi_\alpha \right).$$

Мы получили квантовое уравнение непрерывности, выражающее закон сохранения заряда:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\operatorname{div} \vec{J}(\vec{r}, t), \tag{6.48}$$

в котором

$$\begin{aligned}
\vec{J}(\vec{r}, t) &= \frac{ie\hbar}{2m} \sum_\alpha \left[\nabla \psi_\alpha^+(\vec{r}, t) \cdot \psi_\alpha(\vec{r}, t) - \psi_\alpha^+(\vec{r}, t) \nabla \psi_\alpha(\vec{r}, t) \right] - \\
&\quad - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{6.49}$$

– гейзенберговский оператор плотности тока электронов. Его можно записать в виде

$$\vec{J} = i \frac{e\hbar}{2m} \sum_\alpha \left[\left(\nabla - \frac{e}{i\hbar c} \vec{A} \right) \psi_\alpha^+ \cdot \psi_\alpha - \psi_\alpha^+ \left(\nabla + \frac{e}{i\hbar c} \vec{A} \right) \psi_\alpha \right]. \tag{6.50}$$

Если $\vec{A} = 0$, отсюда получаем

$$\vec{J}_0(\vec{r}, t) = i \frac{e\hbar}{2m} (\nabla' - \nabla) \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}', t) \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}}. \quad (6.51)$$

Вычислим пространственную фурье-компоненту оператора плотности тока электронов (6.50) в квантующем магнитном поле:

$$\begin{aligned} \vec{J}_0(\vec{q}) &= \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \vec{J}_0(\vec{r}) = \\ &= \frac{ie\hbar}{2m} \sum_{\alpha} \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \left[\left(\nabla - \frac{e}{i\hbar} \vec{A}_0 \right) \psi_{\alpha}^{+} \cdot \psi_{\alpha} - \psi_{\alpha}^{+} \left(\nabla + \frac{e}{i\hbar} \vec{A}_0 \right) \psi_{\alpha} \right]. \end{aligned} \quad (6.52)$$

После интегрирования по частям первое слагаемое в правой части (6.52) содержит

$$\int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \nabla \psi_{\alpha}^{+} \cdot \psi_{\alpha} = - \int d^3r \psi_{\alpha}^{+} \nabla \left(e^{-i\vec{q}\vec{r}} \psi_{\alpha} \right).$$

В результате компонента Фурье (6.52) становится равной

$$\vec{J}_0(\vec{q}) = e \sum_{\alpha} \int d^3r \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) \vec{V}(-\vec{q}) \psi_{\alpha}(\vec{r}), \quad (6.53)$$

где мы ввели оператор скорости электрона в магнитном поле

$$\vec{V} = \frac{1}{m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right), \quad (6.54)$$

а также оператор

$$\vec{V}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \left(\vec{V} e^{i\vec{q}\vec{r}} + e^{i\vec{q}\vec{r}} \vec{V} \right). \quad (6.55)$$

Одночастичный оператор (6.53) связан с операторами рождения $a_{\kappa\sigma}^{+}$ и уничтожения $a_{\kappa\sigma}$ электронов в состоянии Ландау $|\kappa\sigma\rangle$ соотношением

$$\vec{J}_0(\vec{q}) = e \sum_{\kappa\kappa'\sigma} \vec{V}_{\kappa'\kappa}(-\vec{q}) a_{\kappa'\sigma}^{+} a_{\kappa\sigma}. \quad (6.56)$$

Входящие сюда матричные элементы в случае $\vec{A}_0 = (0, Hx, 0)$ и $\vec{q} = (0, q_y, q_z)$ равны (см. M.P.Greene, H.J.Lee, J.J.Quinn, S.Rodriguez, The Physical Review, 1969, V. 177, № 3, p. 1019)

$$\begin{aligned}
V_{\kappa_1 \kappa_2}^x(\vec{q}) &= i\omega_c \frac{\partial}{\partial q_y} \varphi_{n_1 n_2}(q_y) \delta_{k_{1y}, k_{2y} + q_y} \delta_{k_{1z}, k_{2z} + q_z}, \\
V_{\kappa_1 \kappa_2}^y(\vec{q}) &= \frac{\omega_c}{q_y} (n_1 - n_2) \varphi_{n_1 n_2}(q_y) \delta_{k_{1y}, k_{2y} + q_y} \delta_{k_{1z}, k_{2z} + q_z}, \\
V_{\kappa_1 \kappa_2}^z(\vec{q}) &= \frac{\hbar}{m} \left(\frac{q_z}{2} + k_{2z} \right) \varphi_{n_1 n_2}(q_y),
\end{aligned} \tag{6.57}$$

где

$$\begin{aligned}
\varphi_{n_1 n_2}(q_y) &= \sqrt{\frac{n_2!}{n_1!}} \exp\left(-\frac{1}{4} l^2 q_y^2\right) \cdot \left(\frac{l q_y}{\sqrt{2}}\right)^{n_1 - n_2} L_{n_2}^{n_1 - n_2}\left(\frac{l^2 q_y^2}{2}\right), n_1 \geq n_2, \\
\varphi_{n_1 n_2}(q_y) &= (-1)^{n_2 - n_1} \varphi_{n_2 n_1}(q_y), n_1 < n_2, \\
L_n^\alpha(x) &= \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x} x^{n+\alpha} \right)
\end{aligned}$$

– обобщенные полиномы Лагерра, ω_c – циклотронная частота электронов (1.148), l – магнитная длина.

В теории проводимости важную роль играет также оператор плотности тока намагниченности электронов

$$\vec{J}_s(\vec{r}) = c \operatorname{rot} \vec{M}_s(\vec{r}), \tag{6.58}$$

где

$$\vec{M}_s(\vec{r}) = -\mu \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) \vec{\sigma} \psi_{\alpha}(\vec{r}) \tag{6.59}$$

– оператор спиновой намагниченности электронов, μ – величина магнетона Бора, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули.

В отсутствие магнитного поля оператор (6.55) равен

$$\vec{V}(\vec{q}) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\nabla e^{i\vec{q}\vec{r}} + e^{i\vec{q}\vec{r}} \nabla \right).$$

Матричные элементы этого оператора в базисе плоских волн равны

$$\vec{V}_{\vec{k}' \vec{k}}(\vec{q}) = \frac{\hbar}{m} \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}}.$$

Подставляя эту матрицу в (6.56), получаем

$$\vec{J}_0(\vec{q}) = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\vec{k}\sigma} \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right) a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}. \quad (6.60)$$

В дальнейшем это выражение будет использовано при выводе закона Ома и выражения для тензора электропроводности электронов методом функций Грина.

6.3. Плотность тока и функция Грина электронов

Свяжем наблюдаемую плотность тока $\vec{j}(\vec{r}, t)$ электронов в проводящей среде с временной функцией Грина (5.15) при конечной температуре. Для этого воспользуемся приемом, который называется адиабатическим включением взаимодействия. Под взаимодействием здесь мы понимаем взаимодействие электронов с полем $\vec{A}'(\vec{r}, t)$ электромагнитной волны. Предполагается, что поле \vec{A}' медленно включается в момент времени $t_0 = -\infty$, когда система электронов еще находилась в состоянии равновесия, а ее статистический оператор был гиббсовским (см. (4.97)). Тогда вектор плотности тока, индуцированного полем \vec{A}' , равен (см. (4.71))

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \langle \vec{J}(\vec{r}, t) \rangle, \quad (6.61)$$

где \vec{J} – гейзенберговский оператор плотности тока (6.50), а угловыми скобками обозначено равновесное среднее со статоператором (4.97) или (4.89), если число электронов в системе фиксировано. Подставляя выражение (6.50) или (6.49) в формулу (6.61), получаем

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) = & i \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\alpha} \left[\langle \nabla \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \cdot \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) \rangle - \right. \\ & \left. - \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \nabla \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) \rangle \right] - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle. \end{aligned} \quad (6.62)$$

Здесь функция $\vec{A}(\vec{r}, t)$ вынесена за знак среднего, поскольку поле \vec{A} не предполагается квантованным.

Легко убедиться в том, что плотность тока (6.62) связана с временной функцией Грина электронов (5.15) соотношением

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{e\hbar^2}{2m} (\nabla' - \nabla) \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \Big|_{\substack{\vec{r}'=\vec{r} \\ t'=\tau+0}} - \frac{e}{mc} \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle \vec{A}(\vec{r}, t). \quad (6.63)$$

Входящая сюда функция Грина содержит гейзенберговские полевые операторы, удовлетворяющие уравнениям движения (6.46) с учетом поля \vec{A} .

Используя для вычисления входящей в соотношение (6.63) функции Грина температурную технику, формально вводим функции $\vec{j}(\vec{r}, \tau)$ и $\vec{A}(\vec{r}, \tau)$, зависящие от мацубаровского «времени» τ . Мацубаровская плотность тока $\vec{j}(\vec{r}, \tau)$ связана с температурной функцией Грина (5.24) соотношением

$$\vec{j}(\vec{r}, \tau) = \left[i \frac{e\hbar}{2m} (\nabla' - \nabla) - \frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}, \tau) \right] \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \tau; \vec{r}', \tau') \Big|_{\substack{\vec{r}'=\vec{r} \\ \tau'=\tau+0}}. \quad (6.64)$$

Переход от (6.64) к (6.63) осуществляется при помощи процедуры аналитического продолжения, описанной в р. 5.7.

6.4. Теория линейной реакции (метод Кубо)

В этом и следующих разделах будем считать поле \vec{A}' слабым. Получим реакцию системы электронов на слабое внешнее поле в линейном приближении по этому полю. Имея в виду применение этой теории не только к проблеме электропроводности, но и к другим задачам, будем обозначать гамильтониан системы в поле

$$H = H + V, \quad (6.65)$$

где H – не зависящий от времени гамильтониан в отсутствие поля, а V – гамильтониан взаимодействия системы с полем. Предположим, что он зависит от времени по закону

$$V(t) = -x f(t), \quad (6.66)$$

где x – шредингеровский оператор некоторой величины, относящейся к системе, $f(t)$ – заданная функция времени. В качестве примера приведем выражения для гамильтонианов взаимодействия электрического \vec{P} и магнитного \vec{M} дипольных моментов с электрическим \vec{E} и магнитным \vec{H} полями соответственно:

$$V = -\vec{P}\vec{E}(t), \quad V = -\vec{M}\vec{H}(t). \quad (6.67)$$

Здесь \vec{P} и \vec{M} – соответствующие величинам электрического и магнитного дипольных моментов операторы. Роль оператора x в задачах об электрической и магнитной поляризации системы играют компоненты векторов \vec{P} и \vec{M} .

Отклик системы на внешнее поле характеризуется средним значением величины x (см. (4.16)):

$$\bar{x}_t = \text{Sp}[\rho(t)x], \quad (6.68)$$

где $\rho(t)$ – шредингеровский статоператор системы во внешнем поле. Он удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля (4.58):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H + V(t), \rho(t)]. \quad (6.69)$$

Считаем, что в начальный момент $t_0 = -\infty$ внешнее поле отсутствовало, а система находилась в состоянии равновесия со статоператором ρ_0 (4.85). Тогда начальное условие к уравнению (6.69) имеет вид

$$\rho(-\infty) = \rho_0.$$

Поскольку нас интересует отклик (6.68) системы на внешнее поле в линейном приближении по этому полю, выполним линеаризацию уравнения (6.69) по V . Подставляя в уравнение (6.69)

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_1(t) \quad (6.70)$$

и оставляя в этом уравнении только линейные по V члены, получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = [H, \rho_1(t)] + [V(t), \rho_0], \quad (6.71)$$

где

$$\rho_1(-\infty) = 0.$$

Решение уравнения (6.71) ищем в виде

$$\rho_1(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) g(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Ht\right),$$

где $g(t)$ – неизвестный оператор. Он удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial g(t)}{\partial t} = [V_H(t), \rho_0] \quad (6.72)$$

и начальному условию

$$g(-\infty) = 0.$$

Здесь

$$V_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} Ht\right) V(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)$$

– оператор взаимодействия в представлении Гейзенберга. Решение уравнения (6.72) имеет вид

$$g(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t'\right) [V(t'), \rho_0] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t'\right).$$

Это дает неравновесную линейную добавку к равновесному статоператору ρ_0 :

$$\rho_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-t')\right) [V(t'), \rho_0] \exp\left(\frac{i}{\hbar} H(t-t')\right). \quad (6.73)$$

Подставим (6.66), (6.70) и (6.73) в выражение для среднего (6.68). Учтем $\text{Sp}(\rho_0 x) = 0$. Тем самым мы исключаем из рассмотрения системы со спонтанной поляризацией. Тогда линейный отклик системы на внешнее поле оказывается равным

$$\overline{x_t} = \int_{-\infty}^t dt' \alpha(t-t') f(t'), \quad (6.74)$$

где

$$\alpha(t) = \frac{i}{\hbar} \text{Sp}\{\rho_0 [x_H(t), x_H(0)]\}, \quad (6.75)$$

$$x_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right) x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right)$$

– гейзенберговский оператор величины x . При выводе (6.74) мы воспользовались циклической инвариантностью следа (см. р. 1.1) и коммутативностью операторов ρ_0 и $\exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} H t\right)$.

Из формул (6.74) и (6.75) видно, что для расчета среднего значения \bar{x}_t в линейном приближении по полю необходимо знать равновесную запаздывающую функцию Грина

$$-\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \text{Sp} \left\{ \rho_0 [x_H(t), x_H(0)] \right\}, \quad (6.76)$$

где Θ – функция Хевисайда (1.200). Конечный верхний предел в интеграле (6.74) отражает существование принципа причинности: «причина» $f(t')$ предшествует «следствию» \bar{x}_t . Связь между f и \bar{x}_t в (6.74) оказалась нелокальной: значение среднего в момент t определяется значениями $f(t')$ при $t' \leq t$.

Используя фурье-разложение функций \bar{x}_t , f , α в (6.74) (см. (1.194)), получаем алгебраическое соотношение между компонентами Фурье:

$$\bar{x}_\omega = \alpha(\omega) f(\omega), \quad (6.77)$$

где

$$\alpha(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \text{Sp} \left\{ \rho_0 [x_H(t), x_H(0)] \right\} \quad (6.78)$$

– обобщенная восприимчивость системы (см. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Статистическая физика, ч.1, 1995; О.М.Єрмолаев, Г.І.Рашба, Вступ до статистичної фізики і термодинаміки, 2004). Связь (6.78) известна под названием формулы Р.Кубо (1956). Ему же принадлежит приведенный в этом разделе вывод обобщенной восприимчивости. Ее зависимость от частоты ω называется временной (частотной) дисперсией восприимчивости. В следующих разделах мы получим тензор электропроводности электронов с учетом не только временной, но и пространственной дисперсии. Иерархия уравнений для частичных статистических операторов рассмотрена в Приложении.

6.5. Теория линейной реакции (метод функций Грина)

Вернемся к проблеме электропроводности электронной жидкости в проводниках. Гамильтониан электронов будем считать равным (6.65), где H – не зависящая от времени часть, а V – гамильтониан взаимодействия электронов с электромагнитным полем. Последнее в этом разделе считаем слабым. Интересуемся линейными по полю \vec{A}' эффектами. Что касается гамильтониана H , то он в этом разделе конкретизироваться не будет. Он включает все взаимодействия электронов (с примесными атомами и дефектами решетки, с другими квазичастицами, с магнитным полем \vec{H}) кроме взаимодействия с полем слабой электромагнитной волны.

Из формулы (6.45) видно, что гамильтониан взаимодействия электронов с электромагнитной волной в линейном по \vec{A}' приближении равен

$$V(t) = -\frac{e}{2mc} \sum_{\alpha} \int d^3r \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}, t) \times \left[\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right) \vec{A}' + \vec{A}' \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right) \right] \psi_{\alpha}(\vec{r}, t).$$

Чтобы вынести \vec{A}' из-под знака ∇ , в первом слагаемом выполним интегрирование по частям:

$$\int d^3r \psi_{\alpha}^{+} \nabla (\vec{A}' \psi_{\alpha}) = -\int d^3r \nabla \psi_{\alpha}^{+} \cdot \psi_{\alpha} \vec{A}'.$$

Тогда гамильтониан взаимодействия электронов со слабым полем электромагнитной волны будет равен

$$V(t) = -\frac{1}{c} \int d^3r \vec{J}_0(\vec{r}, t) \vec{A}'(\vec{r}, t), \quad (6.79)$$

где

$$\vec{J}_0 = i \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\alpha} \left[\left(\nabla - \frac{e}{i\hbar} \vec{A}_0 \right) \cdot \psi_{\alpha}^{+} \times \psi_{\alpha} - \psi_{\alpha}^{+} \left(\nabla + \frac{e}{i\hbar} \vec{A}_0 \right) \psi_{\alpha} \right] \quad (6.80)$$

– оператор плотности тока в магнитном поле с векторным потенциалом \vec{A}_0 .

Полный оператор плотности тока (6.50) также представим в виде разложения по \vec{A}' :

$$\vec{J} = \vec{J}_0 + \vec{J}', \quad (6.81)$$

где

$$\vec{J}'(\vec{r}, t) = -\frac{e^2 n}{mc} \vec{A}'(\vec{r}, t), \quad (6.82)$$

n – плотность электронов в отсутствие поля \vec{A}' .

Вектор плотности тока, индуцированного электромагнитной волной, вычисляется по формуле (6.61), в которой необходимо выполнить линеаризацию по \vec{A}' . Для этого учтем связь (1.97) гейзенберговского оператора плотности тока с оператором в представлении взаимодействия. В линейном приближении по взаимодействию (6.79) имеем

$$S(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_D(t'), \quad S^+(t, -\infty) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_D(t'), \quad (6.83)$$

где V_D – оператор взаимодействия (6.79) в представлении Дирака. Подставляя разложения (6.81) и (6.83) в (6.61), учитывая (6.79) и (6.82), ограничиваясь линейными по \vec{A}' членами, получаем

$$\begin{aligned} J_k(\vec{r}, t) &= \langle J_{Dk}^0(\vec{r}, t) \rangle + \langle J'_{Dk}(\vec{r}, t) \rangle + \\ &+ \frac{i}{c\hbar} \sum_l \int d^3 r' \int_{-\infty}^t dt' \langle [J_{Dk}^0(\vec{r}, t), J_{Dl}^0(\vec{r}', t')] \rangle A'_l(\vec{r}', t') = \\ &= -\frac{e^2 n}{mc} A'_k(\vec{r}, t) + \frac{i}{c\hbar} \sum_l \int d^3 r' \int_{-\infty}^t dt' \langle [J_{Dk}^0(\vec{r}, t), J_{Dl}^0(\vec{r}', t')] \rangle A'_l(\vec{r}', t'), \end{aligned} \quad (6.84)$$

где угловыми скобками обозначено гиббсовское усреднение, а $k, l = x, y, z$. В этой формуле учтено равенство

$$\langle J_{Dk}^0(\vec{r}, t) \rangle = 0,$$

означающее отсутствие тока без вызывающего этот ток поля.

Мы получили линейную связь (6.84) между “причиной”

\vec{A}' , вызывающей ток, и “следствием” $\vec{j}(\vec{r}, t)$. Эта связь оказывается нелокальной: ток в точке \vec{r} в момент времени t определяется полем \vec{A}' во всех точках пространства при $t' \leq t$. Тем самым учитывается принцип причинности. Под знаком интеграла в (6.84) содержится множитель

$$P_{kl}^+(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \left\langle \left[J_{Dk}^0(\vec{r}, t), J_{Dl}^0(\vec{r}', t') \right] \right\rangle \quad (6.85)$$

– двухвременная запаздывающая функция Грина, собранная на компонентах оператора плотности тока в магнитном поле \vec{A}_0 . В однородной системе эта функция зависит от разностей $\vec{r} - \vec{r}'$ и $t - t'$. Это позволяет совершить фурье-преобразование по этим разностям.

6.6. Формула Кубо для тензора электропроводности

Двухточечная функция (6.85) имеет структуру

$$F(\vec{r} - \vec{r}') = \langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle,$$

где n – некоторый оператор. Фурье-компонента этой функции равна

$$\begin{aligned} F(\vec{q}) &= \int d^3(r-r') F(\vec{r} - \vec{r}') e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} = \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \langle n(\vec{q}_1) n(\vec{q}_2) \rangle \int d^3(r-r') \exp[-i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}') + i\vec{q}_1 \vec{r} + i\vec{q}_2 \vec{r}']. \end{aligned}$$

Здесь V – объем системы. Входящая сюда подынтегральная функция зависит от $\vec{r} - \vec{r}'$, если

$$\langle n(\vec{q}_1) n(\vec{q}_2) \rangle = \delta_{\vec{q}_1, -\vec{q}_2} \langle n(\vec{q}_1) n(-\vec{q}_1) \rangle.$$

Тогда с учетом

$$\int d^3 r e^{-i(\vec{q}_1 + \vec{q}_2)\vec{r}} = V \delta_{\vec{q}_1, -\vec{q}_2}$$

получаем

$$F(\vec{q}) = \frac{1}{V} \langle n(\vec{q})n(-\vec{q}) \rangle.$$

Следовательно, после фурье-преобразования по \vec{r} и t интегральная связь (6.84) становится алгебраической:

$$j_k(\vec{q}, \omega) = -\frac{e^2 n}{mc} A'_k(\vec{q}, \omega) - \frac{1}{c} \sum_l P_{kl}^+(\vec{q}, \omega) A'_l(\vec{q}, \omega), \quad (6.86)$$

где

$$P_{kl}^+(\vec{q}, \omega) = -\frac{i}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Theta(t) e^{i\omega t} \left\langle \left[J_{Dk}^0(\vec{q}, t), J_{Dl}^0(-\vec{q}, 0) \right] \right\rangle \quad (6.87)$$

– компонента Фурье функции (6.85).

Напряженность \vec{E} электрического поля волны связана с векторным потенциалом \vec{A}' известным соотношением

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}'(\vec{r}, t).$$

В компонентах Фурье эта связь принимает вид

$$\vec{E}(\vec{q}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \vec{A}'(\vec{q}, \omega).$$

Выражая \vec{A}' в формуле (6.86) через \vec{E} , получаем закон Ома

$$j_k(\vec{q}, \omega) = \sum_l \sigma_{kl}(\vec{q}, \omega) E_l(\vec{q}, \omega), \quad (6.88)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{kl}(\vec{q}, \omega) &= i \frac{e^2 n}{m\omega} \delta_{kl} + \frac{i}{\omega} P_{kl}^+(\vec{q}, \omega) = \\ &= i \frac{e^2 n}{m\omega} \delta_{kl} + \frac{1}{\hbar\omega V} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\langle \left[J_{Dk}^0(\vec{q}, t), J_{Dl}^0(-\vec{q}, 0) \right] \right\rangle \end{aligned} \quad (6.89)$$

– формула Кубо для тензора электропроводности.

Зависимость тензора (6.89) от \vec{q} называется пространственной дисперсией проводимости, а от ω –

временной. Для вычисления этого тензора необходимо иметь функцию Грина (6.85) и ее компоненту Фурье (6.87).

6.7. Связь тензора проводимости с двухэлектронной функцией Грина

Для вычисления функции (6.87) подставим фурье-компоненту оператора плотности тока электронов в магнитном поле (6.56) в формулу (6.87):

$$P_{kl}^+(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2}{V} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2 \sigma_1 \sigma_2} V_{k_1 k_2}^k(-\vec{q}) V_{k'_1 k'_2}^l(\vec{q}) \times \quad (6.90)$$

$$\times K_{\omega}^+(k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_1; k'_1 \sigma_2, k'_2 \sigma_2).$$

Здесь мы ввели временную компоненту Фурье K_{ω}^+ запаздывающей двухэлектронной функции Грина

$$K_t^+(1, 2; 3, 4) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[a_1^+(t) a_2(t), a_3^+(0) a_4(0) \right] \right\rangle, \quad (6.91)$$

где операторы вторичного квантования взяты в представлении взаимодействия (без поля \vec{A}'), индекс D опущен, $1 \equiv (k_1, \sigma_1), \dots$

Для вычисления функции (6.91) вводим соответствующую ей температурную функцию Грина

$$K_{\tau}(1, 2; 3, 4) = -\left\langle T_{\tau} \left[\bar{a}_1(\tau) a_2(\tau) \bar{a}_3 a_4 \right] \right\rangle. \quad (6.92)$$

Она является частным случаем двухчастичной функции Грина, рассмотренной в pp. 5.4, 5.19. Напомним, что гамильтониан электронов H , входящий в формулы (6.89)-(6.92), не конкретизирован. Он включает все возможные взаимодействия электронов в проводнике. Здесь же мы ограничимся лишь случаем свободных электронов в квантуемом магнитном поле.

Двухчастичная температурная функция Грина свободных электронов равна (5.95). В нашем случае

$$K_{\tau}^0(1,2;3,4) = -\delta_{12}\delta_{34} f_1 f_3 + G_{41}^0(-\tau)G_{23}^0(\tau), \quad (6.93)$$

где f – функция Ферми, а G^0 – одноэлектронная функция Грина (5.70). Первое слагаемое в правой части (6.93) не зависит от τ . Его фурье-компонента пропорциональна $\delta_{\omega_n,0}$ и интереса не представляет. Компонента Фурье второго слагаемого в (6.93) равна

$$K_{\omega_n}^{\prime 0}(1,2;3,4) = \int_0^{\beta} d\tau G_{41}^0(-\tau)G_{23}^0(\tau) e^{i\hbar\omega_n\tau}.$$

Подставляя сюда разложения (5.31), получаем

$$K_{\omega_n}^{\prime 0}(1,2;3,4) = \delta_{14}\delta_{23} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(i\zeta_s - i\hbar\omega_n - \xi_1)(i\zeta_s - \xi_2)}.$$

Входящая сюда сумма вычислена в р. 5.16. Следовательно,

$$K_{\omega_n}^{\prime 0}(1,2;3,4) = \delta_{14}\delta_{23} \frac{f(\xi_1) - f(\xi_2)}{\xi_1 - \xi_2 + i\hbar\omega_n}. \quad (6.94)$$

Для получения запаздывающей функции Грина K_{ω}^{+0} , входящей в (6.90), необходимо совершить аналитическое продолжение функции (6.94) с дискретного множества точек $i\omega_n$ в комплексной плоскости частоты на верхнюю полуплоскость и перейти на вещественную ось. Это достигается тривиальной заменой $i\omega_n \rightarrow \omega + i0$ в (6.94). В результате тензор высокочастотной проводимости (6.89) электронного газа в магнитном поле оказывается равным

$$\begin{aligned} \sigma_{kl}(\vec{q}, \omega) = & i \frac{e^2 n}{m\omega} \delta_{kl} + \\ & + \frac{ie^2}{\omega V} \sum_{k_1 k_2 \sigma} V_{k_1 k_2}^k(-\vec{q}) V_{k_2 k_1}^l(\vec{q}) \frac{f(\varepsilon_{k_1 \sigma}) - f(\varepsilon_{k_2 \sigma})}{\varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_2} + \hbar\omega + i0}, \end{aligned} \quad (6.95)$$

где $\varepsilon_{k\sigma}$ – уровни Ландау (1.147). В отсутствие магнитного поля с учетом матричных элементов $\vec{V}_{\vec{k}'\vec{k}}(\vec{q})$ в р. 6.2 отсюда получаем

$$\sigma_{kl}(\vec{q}, \omega) = i \frac{e^2 n}{m\omega} \delta_{kl} + 2 \frac{ie^2 \hbar^2}{m^2 \omega V} \sum_{\vec{k}} \left(k_k + \frac{q_k}{2} \right) \left(k_l + \frac{q_l}{2} \right) \frac{f(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^-) - f(\varepsilon_{\vec{k}}^-)}{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \varepsilon_{\vec{k}}^- - \hbar\omega - i0}. \quad (6.96)$$

Из формул (6.95) и (6.96) видно, что тензор проводимости имеет как вещественную, так и мнимую части. Из электродинамики известно, что вещественная часть этого тензора ответственна за затухание электромагнитных волн, распространяющихся в проводнике, а мнимая – за их дисперсию. Парадокс о затухании волн в отсутствие механизмов рассеяния электронов в рассматриваемом приближении обсуждается в 10-м томе Курса Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшица, а также в р. 5.17 настоящего пособия. Возникающее здесь затухание электромагнитных волн называется затуханием Ландау.

6.8. Аппроксимация Дрude-Лоренца

Рассмотрим тензор (6.95) электронного газа в магнитном поле в отсутствие пространственной дисперсии ($\vec{q} = 0$). Предположим также, что электроны проводимости упруго рассеиваются на примесных атомах и дефектах решетки, причем эффекты рассеяния можно ввести феноменологически путем замены ω в знаменателе формулы (6.95) слагаемым $\omega + i\nu$, где ν – частота столкновений электронов с рассеивателями. Она связана со средним временем свободного пробега электронов τ соотношением

$$\nu = \frac{1}{\tau} \quad (6.97)$$

(см. р. 6.1).

Матричные элементы оператора скорости электрона в магнитном поле в базисе Ландау (1.146) легко получить из формул (6.57) в пределе $\vec{q} = 0$:

$$\begin{aligned} V_{\kappa_1 \kappa_2}^x &= \frac{i\hbar}{\sqrt{2ml}} \left(\sqrt{n_1} \delta_{n_2, n_1-1} - \sqrt{n_1+1} \delta_{n_2, n_1+1} \right) \delta_{k_{1y}, k_{2y}} \delta_{k_{1z}, k_{2z}}, \\ V_{\kappa_1 \kappa_2}^y &= \frac{\hbar}{\sqrt{2ml}} \left(\sqrt{n_1} \delta_{n_2, n_1-1} + \sqrt{n_1+1} \delta_{n_2, n_1+1} \right) \delta_{k_{1y}, k_{2y}} \delta_{k_{1z}, k_{2z}}, \quad (6.98) \\ V_{\kappa_1 \kappa_2}^z &= \frac{\hbar k_{1z}}{m} \delta_{\kappa_1 \kappa_2}, \end{aligned}$$

где $\kappa = (n, k_y, k_z)$. Тогда поперечная компонента тензора (6.95) будет равна

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\omega) &= i \frac{e^2 n_e}{m(\omega + i\nu)} + \\ &+ \frac{ie^2}{(\omega + i\nu)V} \sum_{\kappa_1 \kappa_2 \sigma} V_{\kappa_1 \kappa_2}^x V_{\kappa_2 \kappa_1}^x \frac{f(\varepsilon_{\kappa_1 \sigma}) - f(\varepsilon_{\kappa_2 \sigma})}{\varepsilon_{\kappa_1} - \varepsilon_{\kappa_2} + \hbar(\omega + i\nu)}. \end{aligned} \quad (6.99)$$

Здесь индекс e мы приписали плотности электронов, чтобы отличить ее от осцилляторного квантового числа.

Входящее в (6.99) произведение матричных элементов оператора скорости с учетом (6.98) равно

$$V_{\kappa_1 \kappa_2}^x V_{\kappa_2 \kappa_1}^x = \frac{\hbar \omega_c}{2m} \left(n_1 \delta_{n_2, n_1-1} + (n_1+1) \delta_{n_2, n_1+1} \right) \delta_{k_{1y}, k_{2y}} \delta_{k_{1z}, k_{2z}}.$$

Это выражение позволяет представить сумму в формуле (6.99) в виде

$$\begin{aligned}
& \sum_{\kappa_1 \kappa_2 \sigma} V_{\kappa_1 \kappa_2}^x V_{\kappa_2 \kappa_1}^x \frac{f(\varepsilon_{\kappa_1 \sigma}) - f(\varepsilon_{\kappa_2 \sigma})}{\varepsilon_{\kappa_1} - \varepsilon_{\kappa_2} + \hbar(\omega + i\nu)} = \\
& = \frac{\omega_c}{2m} \left[\frac{1}{\omega_c + \omega + i\nu} \sum_{n_1 k_{1y}, k_{1z} \sigma} n_1 (f_{n_1 k_{1z} \sigma} - f_{(n_1-1) k_{1z} \sigma}) + \right. \\
& \left. + \frac{1}{-\omega_c + \omega + i\nu} \sum_{n_1 k_{1y}, k_{1z} \sigma} (n_1 + 1) (f_{n_1 k_{1z} \sigma} - f_{(n_1+1) k_{1z} \sigma}) \right].
\end{aligned}$$

В это равенство входит сумма

$$\sum_n n (f_n - f_{n-1}) = \sum_{n=0}^{\infty} n f_n - \sum_{n=1}^{\infty} n f_{n-1}.$$

Сдвигая индекс суммирования $n = 1 + n'$ во втором слагаемом, находим

$$\sum_n n (f_n - f_{n-1}) = \sum_{n=0}^{\infty} n f_n - \sum_{n'=0}^{\infty} (n'+1) f_{n'} = - \sum_n f_n.$$

Аналогично

$$\sum_n (n+1) (f_n - f_{n+1}) = \sum_n f_n.$$

Тогда с учетом соотношения

$$\sum_{n k_y k_z \sigma} f_{n k_z \sigma} = n_e V$$

формула (6.99) для поперечной проводимости электронного газа в магнитном поле принимает вид

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{ie^2 n_e}{m} \frac{\omega + i\nu}{(\omega + i\nu)^2 - \omega_c^2}. \quad (6.100)$$

В результате таких же преобразований получаем

$$\sigma_{yy}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega),$$

$$\sigma_{xy}(\omega) = -\sigma_{yx}(\omega) = -\frac{|e|cn_e}{H} \frac{1}{\left(1 - \frac{\omega + i\nu}{\omega_c}\right)^2}, \quad (6.101)$$

$$\sigma_{zz}(\omega) = i \frac{e^2 n_e}{m(\omega + i\nu)}.$$

Остальные компоненты тензора (6.99) в рассматриваемой модели равны нулю. Эти формулы получены Друде и Лоренцем на основе элементарной кинетической теории металлов.

В предельном случае $H = 0$, $\omega = 0$ компонента (6.100) переходит в известную из курса общей физики проводимость электронов

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m}. \quad (6.102)$$

В дальнейшем мы еще вернемся к этой формуле.

6.9. Тензор диэлектрической проницаемости

Наряду с рассмотренным выше тензором проводимости электронов интерес представляет тензор диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\alpha\beta}$ электронной жидкости в проводниках. Он также может быть вычислен методом функций Грина. Однако, в таких расчетах нет необходимости, поскольку тензоры $\sigma_{\alpha\beta}$ и $\varepsilon_{\alpha\beta}$ связаны между собой. Чтобы получить эту связь, обратимся к уравнениям Максвелла для электромагнитного поля в среде.

Уравнения для микроскопических электрического $\vec{e}(\vec{r}, t)$ и магнитного $\vec{h}(\vec{r}, t)$ полей в среде имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{e} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{h}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{h} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{h} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j}_m + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{e}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{e} &= 4\pi\rho_m, \end{aligned} \quad (6.103)$$

где $\vec{j}_m(\vec{r}, t)$ и $\rho_m(\vec{r}, t)$ – микроскопические плотности тока и заряда. Усредняя уравнения (6.103) по физически бесконечно малым элементам объема и промежуткам времени, получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{B} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi\rho, \end{aligned} \quad (6.104)$$

где $\vec{E} = \vec{e}$, $\vec{B} = \vec{h}$, $\vec{j} = \vec{j}_m$, $\rho = \rho_m$ – усредненные величины. Из уравнений (6.104) следует уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (6.105)$$

выражающее закон сохранения заряда. Этому уравнению можно удовлетворить введением вектора поляризации \vec{P} :

$$\vec{j} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}, \quad \rho = -\operatorname{div} \vec{P}. \quad (6.106)$$

(Отметим, что при наличии пространственной дисперсии выделять из вектора \vec{j} плотность тока намагничности $c \operatorname{rot} \vec{M}$ нецелесообразно.) Тогда, подставляя (6.106) в (6.104), получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{B} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{D} &= 0, \end{aligned} \quad (6.107)$$

где

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} \quad (6.108)$$

– вектор электрической индукции.

Система уравнений (6.107) должна быть дополнена материальным уравнением, связывающим \vec{D} с \vec{E} . Будем считать, что эта связь линейная и однородная, нелокальная:

$$D_\alpha(\vec{r}, t) = E_\alpha(\vec{r}, t) + \sum_\beta \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' Q_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') E_\beta(\vec{r}', t'), \quad (6.109)$$

где $Q_{\alpha\beta}$ – ядро интегральной связи. В пространственно-однородной среде, свойства которой не меняются со временем, оно зависит от разностей $\vec{r} - \vec{r}'$, $t - t'$. Как и (6.84), соотношение (6.109) удовлетворяет принципу причинности. Переходя в (6.109) к компонентам Фурье, получаем

$$D_\alpha(\vec{q}, \omega) = \sum_\beta \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) E_\beta(\vec{q}, \omega), \quad (6.110)$$

где

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} + \int d^3r \int_0^\infty dt Q_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)} \quad (6.111)$$

– тензор диэлектрической проницаемости. Из условия вещественности тензора $Q_{\alpha\beta}$ вытекает

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^*(\vec{q}, \omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(-\vec{q}, -\omega). \quad (6.112)$$

Для получения связи между тензорами σ и ε продифференцируем соотношение (6.108) по времени и, учитывая (6.106), запишем полученное равенство в компонентах Фурье:

$$-i\omega\vec{D}(\vec{q}, \omega) = -i\omega\vec{E}(\vec{q}, \omega) + 4\pi\vec{j}(\vec{q}, \omega).$$

Подставляя сюда (6.88) и учитывая (6.110), получаем искомую связь тензоров σ и ε :

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega). \quad (6.113)$$

Отсюда видно, что

$$\text{Re } \varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{4\pi}{\omega} \text{Im } \sigma_{\alpha\beta}, \quad \text{Im } \varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{4\pi}{\omega} \text{Re } \sigma_{\alpha\beta}. \quad (6.114)$$

Из (6.112) следует, что вещественная часть тензора ε – четная функция частоты, а мнимая – нечетная.

Тензор диэлектрической проницаемости входит в дисперсионное уравнение для электромагнитных волн, распространяющихся в среде. Чтобы получить это уравнение, подействуем на первое уравнение системы (6.107) оператором rot и исключим $\text{rot } \vec{B}$ при помощи третьего уравнения:

$$\text{rot rot } \vec{E} = \nabla \text{div} \vec{E} - \Delta \vec{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}.$$

Переходя здесь к компонентам Фурье и используя (6.110), получаем систему линейных однородных уравнений для электромагнитного поля в среде

$$\sum_{\beta} \left[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) + q_{\alpha} q_{\beta} - q^2 \delta_{\alpha\beta} \right] E_{\beta}(\vec{q}, \omega) = 0. \quad (6.115)$$

Эта система имеет нетривиальные решения, если

$$\det \left[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) + q_{\alpha} q_{\beta} - q^2 \delta_{\alpha\beta} \right] = 0. \quad (6.116)$$

Отсюда находим $\omega_j(\vec{q})$ – спектр электромагнитных волн в проводнике. Индекс j нумерует ветви спектра. Вещественная часть ω_j характеризует дисперсию волны, а мнимая – ее затухание.

Упомянутые в р. 6.1 магнитопримесные состояния электронов влияют на входящий в дисперсионное уравнение (6.116) тензор $\varepsilon_{\alpha\beta}$. На частотах резонансных переходов электронов между уровнями Ландау и магнитопримесными уровнями этот тензор имеет корневые особенности, воспроизводящие особенности плотности состояний электронов в магнитном поле. На этих особенностях формируются новые ветви спектра электромагнитных волн, названные магнитопримесными волнами (см. Э.А.Канер,

А.М.Ермолаев, Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 44, с. 391; ЖЭТФ, 1987, т. 92, с. 2245; Н.В.Глейзер, А.М.Ермолаев, Г.И.Рашба, ФНТ, 1994, т. 20, с. 1169).

6.10. Продольная и поперечная реакция электронов

При наличии пространственной дисперсии тензоров σ и ε они не будут диагональными даже в однородной среде. Существование выделенного направления волнового вектора \vec{q} означает, что в однородной среде каждый из этих тензоров имеет вид

$$\sigma_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) = a(q, \omega)\delta_{\alpha\beta} + b(q, \omega)\frac{q_\alpha q_\beta}{q^2},$$

где функции a и b зависят от $|\vec{q}|$ и ω . Это соотношение принято записывать в виде

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_l \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} + \sigma_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \right). \quad (6.117)$$

Входящие сюда функции $\sigma_l(q, \omega)$ и $\sigma_t(q, \omega)$ характеризуют продольную и поперечную реакцию проводника на внешнее поле. Они связаны с тензором σ соотношениями

$$\sigma_l = \sum_{1 \leq \alpha, \beta \leq 3} \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \sigma_{\alpha\beta}, \quad \sigma_t = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq \alpha, \beta \leq 3} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \right) \sigma_{\alpha\beta}. \quad (6.118)$$

Названия функций σ_l и σ_t связаны с тем, что в случае $\vec{E} = -\nabla\varphi$, т. е. $\vec{E}(\vec{q}, \omega) = -i\vec{q}\varphi(\vec{q}, \omega)$ получаем $\vec{j} = \sigma_l \vec{E}$; если же $\text{div} \vec{E} = 0$, т. е. векторы \vec{q} и \vec{E} перпендикулярны, то $\vec{j} = \sigma_t \vec{E}$. В отсутствие пространственной дисперсии функции σ_l и σ_t совпадают.

Из (6.112) следуют свойства скалярных функций σ_l и σ_t :

$$\sigma_l(q, -\omega) = \sigma_l^*(q, \omega), \quad \sigma_t(q, -\omega) = \sigma_t^*(q, \omega), \quad (6.119)$$

которые при вычислении этих функций позволяют ограничиться лишь областью $\omega \geq 0$.

Тензоры σ и ε как функции частоты удовлетворяют дисперсионным соотношениям, являющимся следствием принципа причинности. В частности,

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) - \delta_{\alpha\beta} &= \frac{1}{\pi} P. \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega')}{\omega' - \omega}, \\ \operatorname{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} P. \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re} \varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega') - \delta_{\alpha\beta}}{\omega' - \omega}. \end{aligned} \quad (6.120)$$

Для справок приведем выражения для функций $\operatorname{Re} \sigma_l$ и $\operatorname{Re} \sigma_t$ свободного электронного газа при нулевой температуре:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sigma_l &= \frac{3\pi e^2 n \omega^2}{2m v_F^3 q^3}, & q \leq 2k_F, & \quad 0 \leq \omega \leq qv_F - \omega_q, \\ \operatorname{Re} \sigma_l &= \frac{3\pi e^2 n \omega}{4\hbar v_F q^3} \left(1 - \frac{\omega_-^2}{q^2 v_F^2} \right), & q \leq 2k_F, & \quad qv_F - \omega_q \leq \omega \leq qv_F + \omega_q, \\ \operatorname{Re} \sigma_l &= 0, & q \leq 2k_F, & \quad \omega \geq qv_F + \omega_q, \\ \operatorname{Re} \sigma_l &= \frac{3\pi e^2 n \omega}{4\hbar v_F q^3} \left(1 - \frac{\omega_-^2}{q^2 v_F^2} \right), & q > 2k_F, & \quad -qv_F + \omega_q \leq \omega \leq qv_F + \omega_q, \\ \operatorname{Re} \sigma_l &= 0, & q > 2k_F, & \quad 0 \leq \omega \leq -qv_F + \omega_q, \quad \omega \geq qv_F + \omega_q; \\ \operatorname{Re} \sigma_t &= \frac{3\pi e^2 n}{4mqv_F} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} - \frac{\omega^2}{q^2 v_F^2} \right), & q \leq 2k_F, & \quad 0 \leq \omega \leq qv_F - \omega_q, \end{aligned}$$

$$\operatorname{Re} \sigma_t = \frac{3\pi e^2 n k_F}{16 m q \omega} \left[1 - \left(\frac{\omega}{q v_F} - \frac{q}{2 k_F} \right)^2 \right]^2, \quad q \leq 2 k_F, \quad q v_F - \omega_q \leq \omega \leq q v_F + \omega_q,$$

$$\operatorname{Re} \sigma_t = 0, \quad q \leq 2 k_F, \quad \omega \geq q v_F + \omega_q,$$

$$\operatorname{Re} \sigma_t = \frac{3\pi e^2 n k_F}{16 m q \omega} \left[1 - \left(\frac{\omega}{q v_F} - \frac{q}{2 k_F} \right)^2 \right]^2, \quad q > 2 k_F, \quad -q v_F + \omega_q \leq \omega \leq q v_F + \omega_q,$$

$$\operatorname{Re} \sigma_t = 0, \quad q > 2 k_F, \quad 0 \leq \omega \leq -q v_F + \omega_q, \quad \omega \geq q v_F + \omega_q.$$

Эти формулы могут быть получены из (6.96) и (6.118) методом, описанным в Приложении 2 к гл. 5. Там же расшифрованы использованные здесь обозначения.

6.11. Остаточное сопротивление металлов (метод Кубо)

Выше отмечалось, что основным механизмом рассеяния электронов проводимости в металлах при низких температурах является рассеяние на примесных атомах и дефектах кристаллической решетки. Именно это рассеяние приводит к конечному электросопротивлению при $T = 0$. Оно называется остаточным сопротивлением. В τ -приближении удельное сопротивление равно

$$\rho = \frac{1}{\sigma}, \quad (6.122)$$

где σ – проводимость (6.102), содержащая феноменологически введенное время релаксации τ . Получим σ методом Кубо, основанным на решении квантового уравнения Лиувилля в линейном по внешнему электрическому полю приближении (см. р. 6.4).

Уравнение Лиувилля с интегралом столкновений в τ -приближении имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H + V] + i\hbar \frac{\rho - \rho_0}{\tau} = 0. \quad (6.123)$$

См. обозначения в р. 6.4. Решая это уравнение в линейном по V приближении, получаем

$$\rho(t) = \rho_0 + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt' e^{-\frac{t'}{\tau}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} [\rho_0, V(t-t')] e^{\frac{i}{\hbar} H t'}. \quad (6.124)$$

В пределе $\tau \rightarrow \infty$ это решение совпадает с (6.73).

Гамильтониан взаимодействия электронов с однородным электрическим полем $\vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$ равен

$$V(t) = -e\vec{E}_0 \sum_a \vec{r}_a e^{-i\omega t}, \quad (6.125)$$

где \vec{r}_a – радиус-вектор a -го электрона. Оператор плотности тока электронов имеет вид

$$\vec{j} = \frac{1}{V} \sum_a e \vec{v}_a, \quad (6.126)$$

где \vec{v}_a – оператор скорости, а V – объем системы. (Мы надеемся, что обозначение гамильтониана (6.125) и объема одной буквой не приведет к недоразумениям.) Усредняя оператор (6.126) со статоператором (6.124), получаем закон Ома

$$j_\alpha(t) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta^0 e^{-i\omega t}, \quad (6.127)$$

в котором

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{i\hbar m V} \int_0^{\infty} dt' e^{i(\omega+i\nu)t'} \sum_{ab} \text{Sp} \left\{ \rho_0 \left[x_{b\beta}, p_{a\alpha}^H(t') \right] \right\} \quad (6.128)$$

– тензор высокочастотной проводимости. Здесь

$$\vec{p}_H(t) = m \vec{v}_H(t)$$

– гейзенберговский (с гамильтонианом H) оператор импульса электрона.

Поскольку рассеяние электронов учитывается частотой столкновений ν , входящий в (6.128) гамильтониан можно взять в простейшем виде

$$H = \sum_a \frac{p_a^2}{2m}.$$

Тогда с учетом соотношений

$$\vec{p}_H(t) = \vec{p}, \quad [\vec{p}, H] = 0, \quad [x_{b\beta}, p_{a\alpha}] = i\hbar \delta_{ba} \delta_{\beta\alpha}$$

получаем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.129)$$

где

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{mV} \int_0^\infty dt' e^{i(\omega+iv)t'} \sum_a \text{Sp} \rho_0.$$

Поскольку $\text{Sp} \rho_0 = 1$, а $\sum_a 1 = N$ – число электронов, из этой формулы находим высокочастотную проводимость (см. (6.101))

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2 n_e}{m(\omega + iv)}. \quad (6.130)$$

В пределе $\omega = 0$ она переходит в формулу (6.102), которая определяет остаточное сопротивление металла (6.122).

6.12. Остаточное сопротивление металлов (метод функций Грина)

В этом разделе методом функций Грина будет получена формула (6.102) для статической проводимости металлов с примесными атомами, в которой

$$\tau = \frac{1}{v_F n_i \sigma_{tr}} \quad (6.131)$$

– время свободного пробега электронов,

$$\sigma_{tr} = \int dO |f(\theta)|^2 (1 - \cos \theta) \quad (6.132)$$

– транспортное сечение рассеяния электронов примесными атомами, $f(\theta)$ – амплитуда рассеяния под углом θ , dO –

элемент телесного угла, n_i – плотность примесных атомов. Остаточное сопротивление металла равно (6.122).

Тензор высокочастотной проводимости равен (6.89), где

$$P_{ik}^+(\vec{q}, \omega) = P_{ik}(\vec{q}, \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0},$$

$P_{ik}(\vec{q}, \omega_n)$ – компонента Фурье температурной функции Грина ток-ток

$$P_{ik}(\vec{q}, \tau) = -\frac{1}{V} \langle T_\tau [J_i(\vec{q}, \tau) J_k(-\vec{q}, 0)] \rangle. \quad (6.133)$$

Индексы 0 и D в (6.85) и (6.87) опущены. Символом $\langle \dots \rangle$ в (6.133) обозначено гиббсовское усреднение, а также усреднение по конфигурациям примесных атомов, описанное в р. 6.1.

Если $\vec{q} = 0$, из (6.133) следует

$$P_{ik}(\omega_n) = P(\omega_n) \delta_{ik},$$

где

$$P(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\hbar\omega_n\tau} P(\tau),$$

$$P(\tau) = -\frac{1}{3V} \langle T_\tau [\vec{J}(\tau) \vec{J}(0)] \rangle. \quad (6.134)$$

Статическая проводимость металла вещественна. Она связана с запаздывающей функцией Грина $P^+(\omega)$ соотношением

$$\sigma = -\lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \text{Im} P^+(\omega) \right], \quad (6.135)$$

которое вытекает из (6.89). Таким образом, для получения проводимости σ необходимо знать $\text{Im} P^+(\omega)$.

Из формул (6.102) и (6.131) видно, что $\sigma \sim n_i^{-1}$. Такую зависимость нельзя получить разложением проводимости в ряд по степеням n_i . Это означает, что при вычислении P^+ нельзя

ограничиться несколькими членами ряда для $P(\omega_n)$. Необходимо просуммировать бесконечную совокупность диаграмм, изображающих $P(\omega_n)$.

Запишем функцию Грина (6.134) в представлении Дирака, выбирая в качестве возмущения гамильтониан электрон-примесного взаимодействия (2.141). Разложим $P(\omega_n)$ в ряд по этому взаимодействию. Среднее значение температурного оператора рассеяния в знаменателе опускаем, ограничиваясь в дальнейшем только связными диаграммами.

Первый член этого ряда отвечает распространению свободных электронов (см. р. 6.7):

$$P_0(\omega_n) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\hbar\omega_n\tau} G_0(\vec{k}, \tau) G_0(\vec{k}, -\tau). \quad (6.136)$$

Поскольку диссипативные процессы здесь не учтены, соответствующий вклад в электросопротивление отсутствует. Поэтому сразу перейдем к анализу следующих членов ряда. Следующий шаг состоит в том, чтобы в формуле (6.136) функции Грина свободных электронов G_0 заменить конфигурационными средними $\langle G \rangle_c$ (6.4) точных функций Грина (аналогичный подход в случае электрон-электронного взаимодействия см. в р. 5.20). Они связаны с собственно-энергетической функцией Σ соотношением (6.8). Мнимая часть Σ^+ связана с временем жизни стационарного состояния электрона $\tau = \nu^{-1}$ соотношением (6.27). Поэтому соответствующий такому приближению вклад в сопротивление оказывается конечным. В этом приближении имеем

$$P^{(0)}(\omega_n) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\hbar\omega_n\tau} G(\vec{k}, \tau) G(\vec{k}, -\tau). \quad (6.137)$$

Выполняя здесь фурье-разложение по τ , получаем

$$P^{(0)}(\omega_n) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G(\vec{k}, \zeta_s) G(\vec{k}, \zeta_s - \hbar\omega_n). \quad (6.138)$$

Функции (6.136) можно сопоставить диаграмму на рис. 6.7.

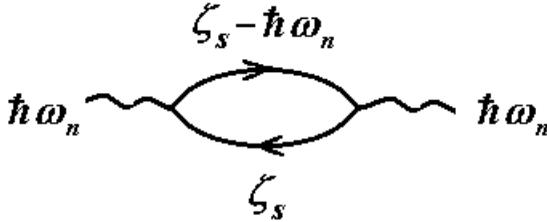


Рис. 6.7. Диаграммное изображение функции (6.136)

Электронным линиям на этой диаграмме отвечают функции Грина G_0 , а вершинам – множители $e\hbar\vec{k}/m$. Ясно, что функция (6.138) изображается такой же диаграммой, в которой тонкие электронные линии заменены двойными.

Вычислим сумму

$$S_{12}(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G_1(\zeta_s) G_2(\zeta_s - \hbar\omega_n). \quad (6.139)$$

С этой целью рассмотрим интеграл в комплексной плоскости энергии

$$I_{12}(\omega_n) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz f(z) G_1(z) G_2(z - i\hbar\omega_n) \quad (6.140)$$

по контуру C на рис. 6.8. В этом интеграле $G(z)$ –

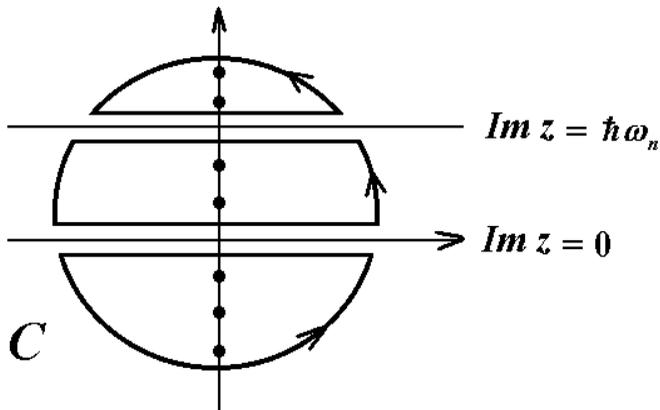


Рис. 6.8. Контур в интеграле (6.140)

аналитическое продолжение функции $G(\zeta_s)$ с дискретной совокупности точек $z_s = i\zeta_s$ на плоскость z , $f(z)$ – функция Ферми (см. р. 5.7). Известно, что интеграл типа Коши

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{z - \varepsilon}, \quad (6.141)$$

где $\rho(\varepsilon)$ – спектральная плотность (5.56) функции Грина, представляет две различные регулярные функции. Одна из них (запаздывающая функция $G^+(z)$) регулярна в верхней полуплоскости z , а другая (опережающая функция $G^-(z)$) – в нижней полуплоскости (см. (6.14)):

$$G(z) = \begin{cases} G^+(z), & \text{Im } z > 0, \\ G^-(z), & \text{Im } z < 0. \end{cases} \quad (6.142)$$

(См. Ф.Д. Гахов, Краевые задачи, 1963). Функция $G(z)$ имеет разрез вдоль вещественной оси в z -плоскости. На рис. 6.8 изображены разрезы функций G_1 и G_2 при $\omega_n > 0$. Точками z_s на мнимой оси отмечены простые полюсы функции Ферми с вычетами $-1/\beta$.

Поскольку $G(z) \rightarrow z^{-1}$ при $z \rightarrow \infty$, интеграл (6.140) по участкам окружности стремится к нулю, когда ее радиус стремится к бесконечности. Следовательно, интеграл (6.140) сводится к сумме интегралов по берегам разрезов на рис. 6.8. С другой стороны, по теореме Коши о вычетах в точках z_s он равен

$$I_{12}(\omega_n) = -S_{12}(\omega_n).$$

Расписывая интегралы по берегам разрезов и учитывая (6.142), получаем

$$\begin{aligned} I_{12}(i\omega_n) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_1^+(\varepsilon) G_2^-(\varepsilon - i\hbar\omega_n) + \\ &+ \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty}^{-\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_1^-(\varepsilon) G_2^-(\varepsilon - i\hbar\omega_n) + \\ &+ \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty + i\hbar\omega_n}^{\infty + i\hbar\omega_n} d\varepsilon' f(\varepsilon') G_1^+(\varepsilon') G_2^+(\varepsilon' - i\hbar\omega_n) + \\ &+ \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty + i\hbar\omega_n}^{-\infty + i\hbar\omega_n} d\varepsilon' f(\varepsilon') G_1^+(\varepsilon') G_2^-(\varepsilon' - i\hbar\omega_n). \end{aligned}$$

Здесь аргумент функции (6.140) мы обозначили $i\omega_n$. В последних двух интегралах сдвинем переменную интегрирования: $\varepsilon' = \varepsilon + i\hbar\omega_n$. Тогда

$$\begin{aligned}
S_{12}(i\omega_n) &= -I_{12}(i\omega_n) = \\
&= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left[G_1^+(\varepsilon) - G_1^-(\varepsilon) \right] G_2^-(\varepsilon - i\hbar\omega_n) - \\
&\quad - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_1^+(\varepsilon + i\hbar\omega_n) \left[G_2^+(\varepsilon) - G_2^-(\varepsilon) \right].
\end{aligned} \tag{6.143}$$

Здесь учтено $f(\varepsilon + i\hbar\omega_n) = f(\varepsilon)$. Аналитическое продолжение этой функции на верхнюю полуплоскость частоты достигается заменой $i\omega_n \rightarrow \omega + i0$. В результате получаем запаздывающую функцию

$$\begin{aligned}
S_{12}^+(\omega) &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left[G_1^+(\varepsilon) - G_1^-(\varepsilon) \right] G_2^-(\varepsilon - \hbar\omega) - \\
&\quad - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) G_1^+(\varepsilon + \hbar\omega) \left[G_2^+(\varepsilon) - G_2^-(\varepsilon) \right].
\end{aligned} \tag{6.144}$$

Подставляя это выражение в аналитическое продолжение функции (6.138), находим

$$\begin{aligned}
P_{(0)}^+(\omega) &= \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \times \\
&\times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \rho(\vec{k}, \varepsilon) \left[G^+(\vec{k}, \varepsilon + \hbar\omega) + G^-(\vec{k}, \varepsilon - \hbar\omega) \right],
\end{aligned} \tag{6.145}$$

где учтено выражение для спектральной плотности

$$-2\pi i \rho(\varepsilon) = G^+(\varepsilon) - G^-(\varepsilon). \tag{6.146}$$

Мнимая часть функции (6.145) равна

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} P_{(0)}^+(\omega) &= -\frac{2\pi}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \times \\ &\times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon) - f(\varepsilon + \hbar\omega)] \rho(\vec{k}, \varepsilon) \rho(\vec{k}, \varepsilon + \hbar\omega). \end{aligned}$$

После разложения этой функции по степеням ω из (6.135) получаем

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) \rho^2(\vec{k}, \varepsilon). \quad (6.147)$$

Эта формула связывает проводимость со спектральной плотностью усредненной функции Грина.

Выясним, как ведет себя выражение (6.147) при $n_i \rightarrow 0$.

В р. 6.1 показано, что в этом пределе

$$\Sigma^+(k, \varepsilon) = \Delta(k, \varepsilon) - i\gamma(k, \varepsilon) \sim n_i.$$

Учтем (6.19) и (6.20). Тогда

$$\lim_{n_i \rightarrow 0} \rho(k, \varepsilon) = \lim_{n_i \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_k - \Delta)^2 + \gamma^2} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_k).$$

Посмотрим теперь, что происходит с функцией $\rho^2(k, \varepsilon)$ при $n_i \rightarrow 0$. Для этого используем тождество

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + \gamma^2} = \frac{1}{\gamma}.$$

Дифференцируя его по параметру γ , находим

$$\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2} \right)^2 = \frac{1}{\gamma}.$$

Отсюда видно, что при $n_i \rightarrow 0$ квадрат спектральной плотности ведет себя как

$$\rho^2 = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\delta(x)}{2\pi\gamma},$$

где $x = \varepsilon - \varepsilon_k - \Delta$. Учитывая это выражение, из (6.147) получаем

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) \frac{1}{2\pi\gamma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (6.148)$$

Если электронный газ вырожден, то

$$-\frac{df}{d\varepsilon} = \delta(\varepsilon). \quad (6.149)$$

Тогда из формулы (6.148) после элементарного интегрирования следует

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_F}{m}, \quad (6.150)$$

где $\tau_F = \hbar/2\gamma_F$ – время жизни фермиевских электронов. Оно отличается от (6.131) отсутствием множителя $1 - \cos\theta$, который играет важную роль в процессах рассеяния электронов.

Чтобы получить формулу (6.150) с транспортным временем свободного пробега электронов, необходимо более

детально проанализировать ряд для функции $P(\omega_n)$. Отметим, что в ряд для $P^{(0)}(\omega_n)$ не входит важный класс диаграмм – вершинные диаграммы (см. вершинную функцию в случае электрон-электронного рассеяния в р. 5.20). Некоторые из них показаны на рис. 6.9. На этих диаграммах штриховые линии

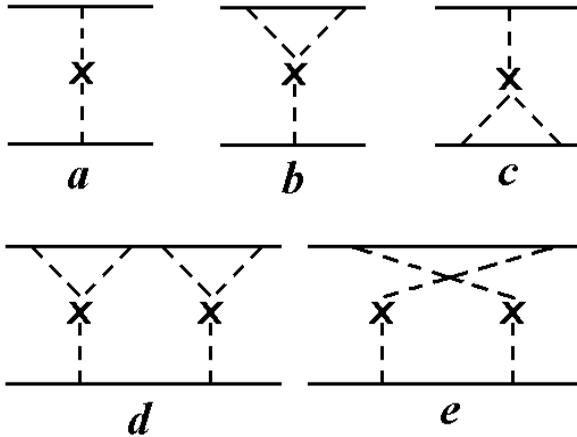


Рис. 6.9. Диаграммы для функции $P(\omega_n)$

электрон-примесного взаимодействия связывают верхнюю и нижнюю электронные линии. Такие диаграммы не сводятся к диаграмме на рис. 6.7.

Введем понятие неприводимой вершинной диаграммы. Это диаграмма, которую нельзя разделить на две или большее число частей путем разрыва верхней и нижней электронных линий. К этому типу относятся диаграммы a, b, c, e на рис. 6.9. Диаграмма d приводимая. Сумму всех неприводимых вершинных диаграмм обозначим $w_{\vec{k}\vec{k}'}(\zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n)$ и сопоставим ей заштрихованный прямоугольник. Это выражение включает бесконечную совокупность диаграмм на рис. 6.10. Внутренним электронным линиям на этих

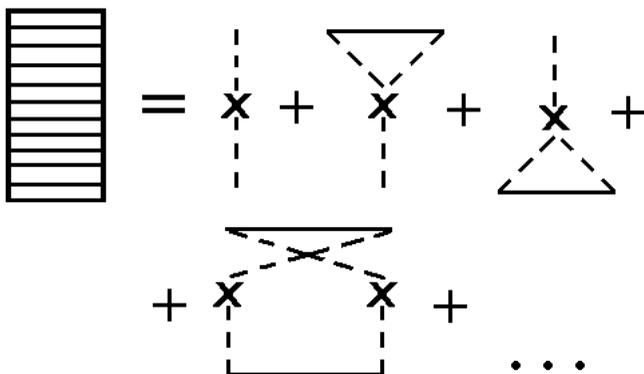


Рис. 6.10. Диаграммы для неприводимой вершинной части

диаграммах соответствуют средние функции Грина (6.8), содержащие эффекты собственной энергии. Акты рассеяния электронов примесными атомами считаются упругими. Поэтому энергетическая переменная на всех верхних электронных линиях одинакова и равна ζ_s , а на нижних она равна $\zeta_s + \hbar\omega_n$. В процессе рассеяния меняется волновой вектор \vec{k} электрона. Важная совокупность неприводимых вершинных диаграмм – «лестница» – сумма диаграмм с одним крестом. Ей соответствует аналитическое выражение

$$n_i t_{\vec{k}\vec{k}'}^{\leftarrow}(\zeta_s) t_{\vec{k}'\vec{k}}^{\rightarrow}(\zeta_s + \hbar\omega_n), \quad (6.151)$$

в котором $t_{\vec{k}\vec{k}'}^{\leftarrow}$ – температурная амплитуда рассеяния. Она удовлетворяет интегральному уравнению (6.23), в котором свободную функцию Грина необходимо заменить точной.

Функции $P(\omega_n)$ можно сопоставить бесконечную совокупность диаграмм на рис. 6.11. Этому ряду соответствует

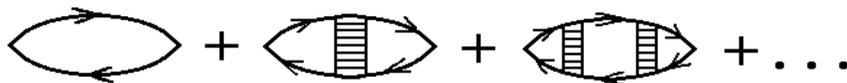


Рис. 6.11. Лестничные диаграммы для $P(\omega_n)$

выражение

$$P(\omega_n) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G(\vec{k}, \zeta_s) G(\vec{k}, \zeta_s + \hbar\omega_n) \vec{k} \vec{K}(\vec{k}, \zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n), \quad (6.152)$$

где введена векторная вершинная функция \vec{K} , которая удовлетворяет интегральному уравнению

$$\vec{K}(\vec{k}, \zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n) = \vec{k} + \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} w_{\vec{k}\vec{k}'}(\zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n) G(\vec{k}', \zeta_s) G(\vec{k}', \zeta_s + \hbar\omega_n) \vec{K}(\vec{k}', \zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n). \quad (6.153)$$

Если эту функцию изобразить заштрихованным треугольником на рис. 6.12, то функции $P(\omega_n)$ можно сопоставить диаграмму

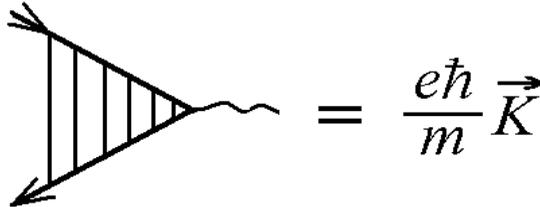


Рис. 6.12. Вершинная функция \vec{K}

на рис. 6.13. На этой диаграмме электронным линиям

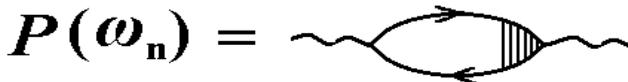


Рис. 6.13. Сумма лестничных диаграмм для P

соответствуют точные функции Грина. Интегральное уравнение (6.153) изображено на рис. 6.14.

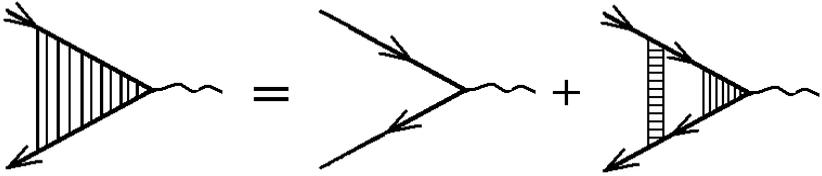


Рис. 6.14. Графическое изображение интегрального уравнения (6.153)

Подынтегральная функция в (6.152) зависит от ζ_s и $\zeta_s + \hbar\omega_n$, поэтому целесообразно ввести

$$F(\zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(\vec{k}, \zeta_s) G(\vec{k}, \zeta_s + \hbar\omega_n) \vec{k} \vec{K}(\vec{k}, \zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n). \quad (6.154)$$

Тогда

$$P(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_s F(\zeta_s, \zeta_s + \hbar\omega_n).$$

Для вычисления этой суммы вводим интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_c dz f(z) F(z, z + i\hbar\omega_n)$$

по контуру, изображенному на рис. 6.8. (При $\omega_n > 0$ второй разрез проходит вдоль линии $\text{Im } z = -\hbar\omega_n$.) После вычислений,

описанных выше, получаем

$$P(\omega_n) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \times \\ \times \left[F(\varepsilon + i0, \varepsilon + i\hbar\omega_n) - F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i\hbar\omega_n) + \right. \\ \left. + F(\varepsilon - i\hbar\omega_n, \varepsilon + i0) - F(\varepsilon - i\hbar\omega_n, \varepsilon - i0) \right].$$

Аналитическое продолжение этого выражения на верхнюю полуплоскость комплексной частоты дает запаздывающую функцию

$$P^+(\omega) = \\ = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) [F(\varepsilon + i0, \varepsilon + \hbar\omega + i0) - F(\varepsilon - i0, \varepsilon + \hbar\omega + i0) + \\ + F(\varepsilon - \hbar\omega - i0, \varepsilon + i0) - F(\varepsilon - \hbar\omega - i0, \varepsilon - i0)].$$

Мнимая часть этой функции равна

$$\text{Im } P^+(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon) - f(\varepsilon + \hbar\omega)] \times \\ \times [\text{Re } F(\varepsilon + i0, \varepsilon + \hbar\omega + i0) - \text{Re } F(\varepsilon - i0, \varepsilon + \hbar\omega + i0)].$$

Из (6.153) и (6.154) видно, что $F(z, z') = F(z', z)$. Поэтому величина $F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0)$ вещественная. В результате

$$\sigma = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) [F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0) - \text{Re } F(\varepsilon + i0, \varepsilon + i0)]. \quad (6.155)$$

В случае вырожденных электронов учтем равенство (6.149). Тогда для вычисления проводимости необходимо знать $F(-i0, i0)$ и $F(i0, i0)$. Отличный от нуля вклад в σ обусловлен слагаемым

$$F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0) = \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \times \\ \times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(\vec{k}, \varepsilon - i0) G(\vec{k}, \varepsilon + i0) \vec{k} \vec{K}(\vec{k}, \varepsilon - i0, \varepsilon + i0).$$

Здесь

$$G(\vec{k}, \varepsilon - i0) G(\vec{k}, \varepsilon + i0) = \frac{\pi \rho(\vec{k}, \varepsilon)}{\gamma(\vec{k}, \varepsilon)}. \quad (6.156)$$

Следовательно,

$$F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0) = \\ = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{k} \vec{K}(\vec{k}, \varepsilon - i0, \varepsilon + i0) \frac{\rho(\vec{k}, \varepsilon)}{\gamma(\vec{k}, \varepsilon)}. \quad (6.157)$$

Произведение (6.156) содержится также в уравнении (6.153) для вершинной функции $\vec{K}(\vec{k}, \varepsilon - i0, \varepsilon + i0)$. Следовательно, в изотропной системе, которую мы рассматриваем, векторная вершина должна иметь вид

$$\vec{K}(\vec{k}, \varepsilon - i0, \varepsilon + i0) = \vec{k} a(k, \varepsilon),$$

где $a(k, \varepsilon)$ – скалярная вершинная функция. Из (6.153) и (6.156) получаем для нее интегральное уравнение:

$$a(k, \varepsilon) = 1 + \\ + \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} w_{\vec{k}\vec{k}'}(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0) \frac{\pi \rho(k', \varepsilon)}{\gamma(k', \varepsilon)} \frac{\vec{k} \vec{k}'}{k^2} a(k', \varepsilon). \quad (6.158)$$

Функция (6.157) связана с a соотношением

$$F(\varepsilon - i0, \varepsilon + i0) = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 a(k, \varepsilon) \frac{\rho(k, \varepsilon)}{\gamma(k, \varepsilon)}. \quad (6.159)$$

В пределе $n_i \rightarrow 0$ главную роль в сумме на рис. 6.10 играют диаграммы с одним крестом. Для них

$$w_{\bar{k}\bar{k}'}(-i0, +i0) = n_i |t_{\bar{k}\bar{k}'}|^2.$$

В этом случае уравнение (6.158) при $\varepsilon = 0$ принимает форму

$$a(k) = 1 + \pi n_i \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_{k'}) |t_{kk'}|^2 \frac{\bar{k}\bar{k}' a(k')}{k^2 \gamma(k')}.$$

Из этого уравнения получаем

$$a(k_F) = 1 + a(k_F) \frac{\gamma - \gamma_t}{\gamma}, \quad (6.160)$$

где

$$\gamma_t(k) = \pi n_i \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} |t_{kk'}|^2 \delta(\varepsilon_{k'}) \left(1 - \frac{\bar{k}\bar{k}'}{k^2} \right).$$

Уравнение (6.160) имеет решение $a = \gamma/\gamma_t$. Подставляя его в (6.159), находим

$$F(-i0, +i0) = \frac{2\pi}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \frac{\delta(\varepsilon_k)}{\gamma_t(k)}.$$

Учитывая это выражение в (6.155), получаем

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \hbar \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \frac{\delta(\varepsilon_k)}{\gamma_t(k)} = \\ &= \frac{2}{3} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 \delta(\varepsilon_k) \tau_{tr}(k),\end{aligned}\tag{6.161}$$

где

$$\tau_{tr}^{-1} = \frac{2\gamma_t}{\hbar} = \frac{2\pi}{3} n_i \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} |t_{kk'}(\varepsilon_k)|^2 \delta(\varepsilon_{k'}) \left(1 - \frac{\vec{k}\vec{k}'}{k^2} \right)$$

– известное соотношение для транспортного времени релаксации. Выполняя элементарное интегрирование в (6.161), приходим к проводимости (6.102) с транспортным временем свободного пробега электронов.

Отметим, что полученный в этом разделе результат справедлив для металлов, у которых $k_F l \gg 1$. В полупроводниках и в низкоразмерных системах при низких температурах это неравенство может нарушаться. Тогда необходимо учитывать более широкий класс диаграмм для функции P . В частности, учет диаграмм типа e на рис. 6.9 с пересекающимися штриховыми линиями приводит к квантовым интерференционным поправкам к полученному в этом разделе выражению для проводимости. Соответствующий круг явлений получил название слабая локализация. Изложение теории слабой локализации электронов в неупорядоченных проводниках выходит за рамки этого пособия.

6.13. Тожество Уорда

В предыдущем разделе показано, что для вычисления двухэлектронной функции Грина, входящей в формулу Кубо для проводимости металла, необходимо знать вершинную функцию \vec{K} . В некоторых случаях ее можно найти, если известна собственно-энергетическая функция Σ . Эти функции связаны соотношением

$$\bar{K}(\bar{k}, \zeta_s) = \bar{k} + \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial \bar{k}} \Sigma(\bar{k}, \zeta_s), \quad (6.162)$$

которое называется тождеством Уорда. Убедимся в его справедливости.

Вершинная функция удовлетворяет уравнению

$$\bar{K}(\bar{k}, \zeta_s) = \bar{k} + \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} w_{\bar{k}\bar{k}'}(\zeta_s, \zeta_s) \left[G(\bar{k}', \zeta_s) \right]^2 \bar{K}(\bar{k}', \zeta_s), \quad (6.163)$$

которое следует из (6.153) при $\omega_n = 0$. При вычислении неприводимой вершины w ограничимся совокупностью диаграмм с одним крестом на рис. 6.15. Диаграммы с одним

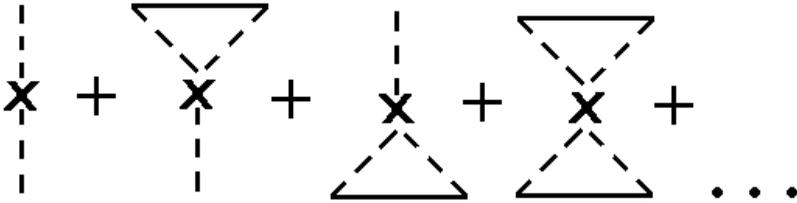


Рис. 6.15. Диаграммы с одним крестом для w

крестом для собственно-энергетической функции показаны на рис. 6.16. Сумма этих диаграмм равна

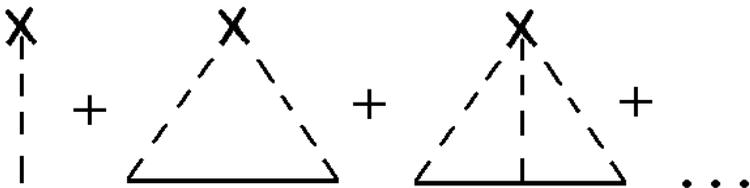


Рис. 6.16. Диаграммы с одним крестом для Σ

$$\begin{aligned} \Sigma(\vec{k}, \zeta_s) = n_i \times \\ \times \left[v_{\vec{k}\vec{k}} + \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}\vec{k}_1} v_{\vec{k}_1\vec{k}} G(\vec{k}_1, \zeta_s) + \right. \\ \left. + \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}\vec{k}_1} v_{\vec{k}_1\vec{k}_2} v_{\vec{k}_2\vec{k}} G(\vec{k}_1, \zeta_s) G(\vec{k}_2, \zeta_s) + \dots \right], \end{aligned}$$

где

$$v_{\vec{k}\vec{k}'} = \int d^3r v(r) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}.$$

Внутренним электронным линиям на диаграммах отвечают точные функции Грина G .

Получим более общее тождество, чем (6.162). Для этого рассмотрим разность

$$\begin{aligned} \Sigma(k+q) - \Sigma(k) = n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}\vec{k}_1} v_{\vec{k}_1\vec{k}} [G(k_1+q) - G(k_1)] + \\ + n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}\vec{k}_1} v_{\vec{k}_1\vec{k}_2} v_{\vec{k}_2\vec{k}} [G(k_1+q)G(k_2+q) - G(k_1)G(k_2)] + \dots, \end{aligned}$$

где $k = (\vec{k}, \zeta_s)$, $q = (\vec{q}, \omega_n)$ — четырехмерные волновые векторы. Этот ряд можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Sigma(k+q) - \Sigma(k) = \\ = n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} G(k_1) G(k_1+q) t_{\vec{k}\vec{k}_1}(\zeta_s) t_{\vec{k}_1+\vec{q}, \vec{k}+\vec{q}}(\zeta_s + \hbar\omega_n) \times \\ \times [\Sigma(k_1+q) - \Sigma(k_1) + \varepsilon_{\vec{k}_1+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}_1} - i\hbar\omega_n] = \\ = n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} t_{\vec{k}\vec{k}_1}(\zeta_s) t_{\vec{k}_1+\vec{q}, \vec{k}+\vec{q}}(\zeta_s + \hbar\omega_n) [G(k_1+q) - G(k_1)]. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что величина

$$\Lambda(k, k+q) = \Sigma(k+q) - \Sigma(k) + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - i\hbar\omega_n \quad (6.164)$$

удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \Lambda(k, k+q) &= \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - i\hbar\omega_n + \\ &+ n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} G(k_1) G(k_1+q) \times \\ &\times t_{\vec{k}\vec{k}_1}(\zeta_s) t_{\vec{k}_1+\vec{q}, \vec{k}+\vec{q}}(\zeta_s + \hbar\omega_n) \Lambda(k_1, k_1+q). \end{aligned} \quad (6.165)$$

Функция Λ пропорциональна q , поэтому можно определить векторную вершину \vec{K} при $\omega_n = 0$ соотношением:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Lambda(k, k+q) = \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \vec{K}(\vec{k}, \zeta_s). \quad (6.166)$$

Если это выражение подставить в уравнение (6.165), положить $\omega_n = 0$, а затем перейти к пределу $\vec{q} \rightarrow 0$, то получим

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \vec{K}(\vec{k}, \zeta_s) &= \frac{\hbar^2}{m} \vec{k} \vec{q} + \\ &+ n_i \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} [G(k_1)]^2 t_{\vec{k}\vec{k}_1}(\zeta_s) t_{\vec{k}_1\vec{k}}(\zeta_s) \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \vec{K}(\vec{k}_1, \zeta_s). \end{aligned}$$

Учитывая здесь сумму диаграмм с одним крестом (6.151), приходим к уравнению (6.153) для \vec{K} . Таким образом, \vec{K} в (6.166) совпадает с вершиной, определенной в предыдущем разделе.

Рассмотрим уравнение (6.164) при $\omega_n = 0$. Подставим в левую часть этого уравнения (6.166), а правую часть разложим по степеням q . Тогда из (6.164) при $\vec{q} \rightarrow 0$ получим

$$\frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \vec{K}(\vec{k}, \zeta_s) = \frac{\hbar^2}{m} \vec{k} \vec{q} + \vec{q} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \Sigma(\vec{k}, \zeta_s).$$

Поскольку вектор \vec{q} произвольный, это уравнение эквивалентно тождеству Уорда (6.162).

6.14. Функция Грина плотность-плотность

Рассмотрим линейную реакцию электронного газа в проводнике на слабый внешний скалярный потенциал электрического поля $\varphi(\vec{r}, t)$. Гамильтониан взаимодействия электронов с этим полем имеет вид

$$V(t) = e \int d^3 r n(\vec{r}, t) \varphi(\vec{r}, t), \quad (6.167)$$

где n – оператор плотности электронов. Используя теорию линейной реакции, изложенную в р. 6.5, получаем обусловленное внешним потенциалом отклонение плотности электронов от равновесного значения $\langle n \rangle$:

$$\delta n(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \int_{-\infty}^t dt' \langle [\delta n(\vec{r}, t), \delta n(\vec{r}', t')] \rangle e\varphi(\vec{r}', t'), \quad (6.168)$$

где $\delta n = n - \langle n \rangle$, а остальные обозначения см. в р. 6.5. Если ввести запаздывающую функцию Грина плотность-плотность D^+ соотношением

$$i\hbar D^+(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \Theta(t - t') \langle [\delta n(\vec{r}, t), \delta n(\vec{r}', t')] \rangle,$$

то равенство (6.168) можно переписать в виде

$$\delta n(\vec{r}, t) = \int d^3 r' \int_{-\infty}^{\infty} dt' D^+(\vec{r}t, \vec{r}'t') e\varphi(\vec{r}', t').$$

В однородной среде после фурье-преобразования получаем отсюда

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = D^+(\vec{q}, \omega) e\varphi(\vec{q}, \omega). \quad (6.169)$$

Для вычисления D^+ введем температурную функцию Грина

$$D(\vec{r}\tau, \vec{r}'\tau') = -\langle T_\tau [\delta n(\vec{r}, \tau), \delta n(\vec{r}', \tau')] \rangle. \quad (6.170)$$

Ее фурье-компонента имеет спектральное представление (см. п. 5.6)

$$D(\vec{q}, \omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho(\vec{q}, \omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad (6.171)$$

где

$$\rho(\vec{q}, \omega) = \frac{(2\pi)^3}{\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \sum_{lm} \rho_l^{(0)} |\langle l | \delta n | m \rangle|^2 \delta(\vec{q} - \vec{k}_{ml}) \delta(\omega - \omega_{ml})$$

– спектральная плотность. Здесь

$$\hbar\vec{k}_{ml} = \vec{p}_m - \vec{p}_l, \quad \hbar\omega_{ml} = E_m - E_l,$$

\vec{p}_l и E_l – импульс и энергия системы в состоянии $|l\rangle$, $\rho_l^{(0)}$ – функция распределения Гиббса. Спектральное представление запаздывающей функции Грина D^+ получаем из (6.171) заменой $i\omega_n \rightarrow \omega + i0$.

Приведем результаты расчета функции (6.170) с учетом межэлектронного взаимодействия. Для этого необходимо перейти к представлению Дирака, разложить D в ряд по степеням взаимодействия и воспользоваться теоремой Вика (см. п. 5.12). Каждому члену ряда сопоставляем диаграмму Фейнмана. Легко заметить, что диаграммы для $D(\vec{q}, \omega_n)$ имеют вид на на рис. 5.13. Следовательно,

$$\nu(\vec{q}) D(\vec{q}, \omega_n) = U_{eff}(\vec{q}, \omega_n) \Pi(\vec{q}, \omega_n),$$

откуда получаем

$$D(\vec{q}, \omega_n) = \frac{\Pi(\vec{q}, \omega_n)}{1 - \nu(\vec{q}) \Pi(\vec{q}, \omega_n)}.$$

См. pp. 5.15, 5.16. В результате индуцированное внешним полем изменение плотности электронов равно

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = \frac{\Pi^+(\vec{q}, \omega)}{1 - \nu(\vec{q}) \Pi^+(\vec{q}, \omega)} e\varphi(\vec{q}, \omega). \quad (6.172)$$

Полюсы этой функции определяют спектр плазменных волн в электронном газе и характер экранирования внешнего поля электронами (см. pp. 5.17, 5.18). Экранирование в вырожденном электронном газе рассмотрено в р. 5.18. Здесь же мы рассмотрим это явление в больцмановском газе.

Будем считать, что потенциал φ обусловлен сторонним точечным зарядом $Z|e|$, погруженным в электронный газ:

$$\varphi(r) = \frac{Z|e|}{r}, \quad \varphi(\vec{q}, \omega) = \frac{4\pi Z|e|}{q^2} 2\pi\delta(\omega).$$

Ограничимся выражением для Π^+ в приближении хаотических фаз (см. р. 5.16). Тогда вещественная и мнимая части Π^+ равны (5.173) и (5.174). Согласно (6.172) индуцированная плотность заряда равна

$$\begin{aligned} \delta\rho(r) &= e\delta n(r) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \delta\rho(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)} = \\ &= Z|e| \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{\nu(q)\Pi^+(q, 0)}{1 - \nu(q)\Pi^+(q, 0)}. \end{aligned}$$

Это выражение легко представить в виде

$$\delta\rho(r) = -Z|e| \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{q_D^2 g(q\lambda)}{q^2 + q_D^2 g(q\lambda)}, \quad (6.173)$$

где q_D – дебаевское волновое число,

$$g(y) = \frac{2\sqrt{\pi}}{y} \Phi\left(\frac{y}{4\sqrt{\pi}}\right), \quad \lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{1/2}$$

– тепловая длина волны де Бройля электрона. Асимптотики функции Φ равны (5.176), поэтому

$$g(y) = \begin{cases} 1 + O(y^2), & y \ll 1, \\ \frac{8\pi}{y^2}, & y \gg 1. \end{cases}$$

В случае $q\lambda \ll 1$ отсюда следует

$$g(q\lambda) \approx g(0) = 1.$$

Тогда

$$\delta\rho(r) = -\frac{Z|e|q_D^2}{4\pi r} e^{-q_D r}. \quad (6.174)$$

Из формулы (6.173) видно, что полный индуцированный заряд равен

$$\delta Q = \int d^3r \delta\rho(r) = -Z|e|,$$

т.е. сторонний заряд полностью экранируется электронами на большом расстоянии.

6.15. Нулевой звук

В р. 5.17 показано, что в заряженной ферми-системе могут существовать продольные колебания плотности, частота которых близка к плазменной частоте. Выясним, существуют ли подобные колебания в неидеальной ферми-системе нейтральных частиц при низких температурах. Ниже мы увидим, что короткодействующий потенциал отталкивания частиц обеспечивает существование таких колебаний. Эти колебания плотности имеют линейный спектр $\omega = c_0 q$ и называются нулевым звуком. Он предсказан Л.Д.Ландау в 1957 году (см. т. IX Курса Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшица).

Нулевой звук отличается от обычного звука, спектр которого также линейный: $\omega = c_1 q$. Обычный звук распространяется в условиях, когда система находится в состоянии локального равновесия, т.е. $\omega\tau \ll 1$, где τ – среднее время свободного пробега частиц. Для распространения нулевого звука необходимо, чтобы выполнялось неравенство $\omega\tau \gg 1$.

Рассмотрим взаимодействующую систему нейтральных ферми-частиц при $T = 0$. Найдем ее отклик на импульсное возмущение

$$U(\vec{r}, t) = U_0 e^{i\vec{q}_0 \vec{r}} \delta(t), \quad (6.175)$$

$$U(\vec{q}, \omega) = U_0 (2\pi)^3 \delta(\vec{q} - \vec{q}_0),$$

где \vec{q}_0 – некоторый волновой вектор. Гамильтониан взаимодействия системы с этим возмущением имеет вид

$$V(t) = \int d^3r n(\vec{r}, t) U(\vec{r}, t). \quad (6.176)$$

Как и в предыдущем разделе, в линейном приближении по (6.176) находим отклонение плотности системы от равновесного значения:

$$\delta n(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)} \frac{\Pi^+(\vec{q}, \omega)}{1 - \nu(q)\Pi^+(\vec{q}, \omega)} U(\vec{q}, \omega),$$

где $\nu(q)$ – фурье-компонента энергии межчастичного взаимодействия. С учетом (6.175) получаем отсюда

$$\delta n(\vec{r}, t) = U_0 e^{i\vec{q}_0 \vec{r}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{\Pi^+(\vec{q}_0, \omega)}{1 - \nu(q_0)\Pi^+(\vec{q}_0, \omega)}. \quad (6.177)$$

Из (6.177) видно, что дисперсионное уравнение для нулевого звука имеет вид

$$1 - \nu(q)\Pi^+(\vec{q}, \omega) = 0. \quad (6.178)$$

Его решение имеет вещественную и мнимую части: $\omega = \omega_q - i\gamma_q$, где ω_q – спектр звука, а γ_q – декремент затухания.

Будем считать, что межчастичное взаимодействие короткодействующее, т.е. $\nu(q) \approx \nu(0) = \nu_0$. Используем приближение хаотических фаз для функции Π^+ (см. р. 5.16 и Приложение 2 к гл. 5). Если $T = 0$, $q \rightarrow 0$, а $x = \omega/qv_F$ фиксировано, то

$$\operatorname{Re} \Pi^+(q, qx) = -\frac{mp_F}{\pi^2 \hbar^3} \left(1 - \frac{x}{2} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right), \quad (6.179)$$

$$\operatorname{Im} \Pi^+(q, qx) = \begin{cases} -\frac{mp_F}{2\pi \hbar^3} x, & q \rightarrow 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & q \rightarrow 0, \quad x > 1. \end{cases} \quad (6.180)$$

Незатухающие колебания плотности возможны лишь в области $x > 1$, где мнимая часть (6.180) отсутствует. В этой области дисперсионное уравнение (6.178) с учетом (6.179) можно записать так:

$$\psi(x) = \frac{x}{2} \ln \left(\frac{x+1}{x-1} \right) - 1 = \frac{\pi^2 \hbar^3}{mp_F v_0}. \quad (6.181)$$

Ищем решение этого уравнения в виде $\omega_q = c_0 q$. Для него $x = c_0 / v_F > 1$, т.е. скорость c_0 распространения нулевого звука превышает фермиевскую скорость частицы. Решение уравнения (6.181) существует при $v_0 > 0$, что соответствует отталкиванию частиц (рис. 6.17). Абсцисса точки пересечения

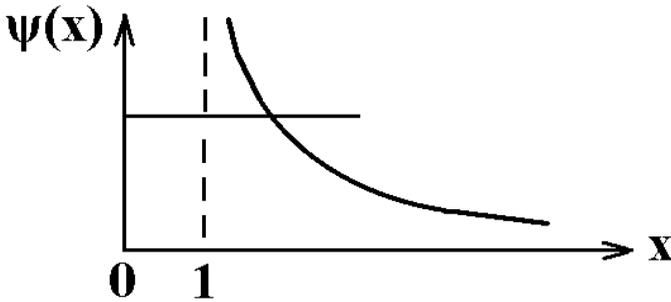


Рис. 6.17. Графическое решение уравнения (6.181)

кривой $\psi(x)$ с горизонтальной прямой дает искомое решение.

Получим приближенное решение уравнения (6.181) в случае слабой ($\nu_0 \ll \hbar^3/m\rho_F$) и сильной ($\nu_0 \gg \hbar^3/m\rho_F$) связи. В случае слабой связи решение x находится вблизи единицы, поэтому левую часть в уравнении (6.181) можно положить равной

$$\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2}{x-1} \right).$$

Тогда

$$c_0 = \nu_F \left[1 + 2 \exp \left(-2 - \frac{2\pi^2 \hbar^3}{m\rho_F \nu_0} \right) \right], \quad \nu_0 \ll \frac{\hbar^3}{m\rho_F}. \quad (6.182)$$

Если же связь сильная, то $x \gg 1$. Это позволяет левую часть уравнения (6.181) представить в виде $1/3x^2$. В результате

$$c_0 = \left(\frac{n\nu_0}{m} \right)^{1/2}, \quad \nu_0 \gg \frac{\hbar^3}{m\rho_F}, \quad (6.183)$$

где n – плотность частиц. Из уравнений (6.182) и (6.183) видно, что скорость нулевого звука неаналитически зависит от ν_0 . Такую зависимость нельзя получить на основе теории возмущений по интенсивности межчастичного взаимодействия.

6.16. Тензор динамической спиновой восприимчивости электронного газа в магнитном поле

Рассмотрим еще одно применение изложенной в р. 6.5 теории линейного отклика – реакцию электронных спинов в проводнике на слабое переменное магнитное поле $\vec{h}(\vec{r}, t)$. Будем считать, что система электронов проводимости находится в квантующем магнитном поле \vec{H} .

Получим выражение для оператора спиновой намагниченности электронов в представлении вторичного квантования. В координатном представлении он равен

$$\vec{M}(\vec{r}) = -\mu \sum_{a=1}^N \vec{\sigma}_a \delta(\vec{r} - \vec{r}_a), \quad (6.184)$$

где μ – величина магнетона Бора, $\vec{\sigma}_a$ и \vec{r}_a – матрицы Паули и радиус-вектор a -го электрона, N – их число. Аддитивный оператор (6.184) связан с полевыми операторами соотношением

$$\vec{M}(\vec{r}) = -\mu \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\sigma} \psi_{\alpha}(\vec{r}),$$

где α – спиновая переменная. Пространственная фурье-компонента оператора (6.184) равна

$$\vec{M}(\vec{q}) = \int d^3r \vec{M}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} = -\mu \sum_a \vec{\sigma}_a e^{-i\vec{q}\vec{r}_a}. \quad (6.185)$$

Чтобы выразить этот оператор через операторы вторичного квантования a и a^{\dagger} , используем одночастичный базис Ландау $\{|\kappa\sigma\rangle\}$, где κ – набор орбитальных квантовых чисел электрона в магнитном поле \vec{H} , σ – спиновое квантовое число. Базисная функция имеет вид

$$\langle \vec{r}\alpha | \kappa\sigma \rangle = \varphi_{\kappa}(\vec{r}) \chi_{\sigma}(\alpha), \quad (6.186)$$

где $\varphi_{\kappa}(\vec{r})$ – орбитальная волновая функция электрона, а $\chi_{\sigma}(\alpha)$ – спиновая. Энергия электрона в состоянии (6.186) равна

$$\varepsilon_{n\sigma}(k_z) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\sigma}{2} \hbar\Omega_0. \quad (6.187)$$

Здесь $\Omega_0 = 2\mu H/\hbar$ – частота спиновых переходов, а остальные обозначения см. в р. 1.7. Оператор (6.185) связан с операторами вторичного квантования соотношением

$$\vec{M}(\vec{q}) = -\mu \sum_{\kappa\kappa'\alpha\alpha'} \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha} I_{\kappa'\kappa}(-\vec{q}) a_{\kappa'\alpha}^{\dagger} a_{\kappa\alpha}, \quad (6.188)$$

где $\vec{\sigma}_{\alpha'\alpha} = \langle \alpha' | \vec{\sigma} | \alpha \rangle$ – матричные элементы матриц Паули в базисе (6.186), а

$I_{\kappa'\kappa}(\vec{q}) = \langle \kappa' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \kappa \rangle$ – матричные элементы плоской волны в этом же базисе. Они обладают очевидным свойством

$$I_{\kappa\kappa'}(\vec{q}) = I_{\kappa'\kappa}^*(-\vec{q}). \quad (6.189)$$

В дальнейшем будут использованы циркулярные компоненты матриц Паули

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y),$$

равные

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.190)$$

Они позволяют записать циркулярные компоненты вектора (6.188)

$$M_{\pm} = \frac{1}{2}(M_x \pm iM_y)$$

в виде

$$\vec{M}_{\pm}(\vec{q}) = -\mu \sum_{\kappa\kappa'} I_{\kappa'\kappa}(-\vec{q}) a_{\kappa'\pm}^+ a_{\kappa\mp},$$

где индексы \pm у операторов a и a^+ соответствуют двум ориентациям спина электрона.

Гамильтониан взаимодействия электронных спинов с магнитным полем \vec{h} имеет вид

$$V(t) = -\int d^3r \vec{M}(\vec{r}) \vec{h}(\vec{r}, t), \quad (6.191)$$

Обусловленная полем \vec{h} спиновая намагниченность электронов равна

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = \langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle,$$

где $\vec{M}(\vec{r}, t)$ – гейзенберговский оператор (6.184), а угловыми скобками обозначено гиббсовское усреднение. Повторяя выкладки, изложенные в р. 6.5, получаем линейный отклик электронных спинов на слабое поле \vec{h} :

$$M_i(\vec{r}, t) = \sum_l \int d^3r' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{il}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') h_l(\vec{r}', t'), \quad (6.192)$$

где

$$\chi_{il}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \langle [M_i(\vec{r}, t), M_l(\vec{r}', t')] \rangle \quad (6.193)$$

– тензор спиновой восприимчивости электронного газа. Входящие в него операторы намагниченности записаны в представлении Дирака. В однородной системе имеем связь фурье-компонент

$$M_i(\vec{q}, \omega) = \sum_l \chi_{il}(\vec{q}, \omega) h_l(\vec{q}, \omega), \quad (6.194)$$

где

$$\chi_{il}(\vec{q}, \omega) = \frac{i}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Theta(t) e^{i\omega t} \langle [M_i(\vec{q}, t), M_l(-\vec{q}, 0)] \rangle \quad (6.195)$$

– формула Кубо для тензора спиновой восприимчивости. Она связывает этот тензор с компонентой Фурье двухвременной запаздывающей функции Грина

$$-\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [M_i(\vec{q}, t), M_l(-\vec{q}, t)] \rangle. \quad (6.196)$$

Подставляя сюда оператор (6.188), получаем связь тензора χ с запаздывающей двухэлектронной функцией Грина K^+ :

$$\begin{aligned} \chi_{il}(\vec{q}, \omega) = & -\frac{\mu^2}{V} \times \\ & \times \sum_{\kappa_1 \dots \kappa_4} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_4} \sigma_{\alpha_2 \alpha_1}^i \sigma_{\alpha_4 \alpha_3}^l I_{\kappa_2 \kappa_1}(-\vec{q}) I_{\kappa_4 \kappa_3}(\vec{q}) K_{\omega}^+(\kappa_2 \alpha_2, \kappa_1 \alpha_1; \kappa_4 \alpha_4, \kappa_3 \alpha_3) \end{aligned} \quad (6.197)$$

(см. аналогичную формулу (6.90)). Для вычисления входящей сюда функции K_{ω}^+ необходимо раньше получить температурную функцию K_{ω_n} , а затем совершить ее аналитическое продолжение.

Общие свойства тензора (6.197) хорошо известны (см. А.И.Ахиезер, В.Г.Барьяхтар, С.В.Пелетминский, Спиновые волны, 1967; В.Г.Барьяхтар, В.Н.Криворучко, Д.А.Яблонский, Функции Грина в теории магнетизма, 1984). Вследствие инвариантности уравнения Шредингера относительно инверсии времени выполняются соотношения Онсагера

$$\chi_{il}(\vec{q}, \omega, \vec{H}) = \chi_{li}(-\vec{q}, \omega, -\vec{H}).$$

Следствием принципа причинности являются дисперсионные соотношения

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\chi_{il}(\vec{q}, \omega) - \chi_{il}(\vec{q}, \infty)] &= \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} \chi_{il}(\vec{q}, \omega')}{\omega' - \omega}, \\ \operatorname{Im} \chi_{il}(\vec{q}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re}[\chi_{il}(\vec{q}, \omega') - \chi_{il}(\vec{q}, \infty)]}{\omega' - \omega}. \end{aligned}$$

Связь восприимчивости с тепловыми флуктуациями намагниченности составляет содержание флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \{M_i(\vec{q}, t) M_l(-\vec{q}, 0)\}_s \rangle = \hbar V \operatorname{cth} \frac{\beta \hbar \omega}{2} \operatorname{Im} \chi_{il}^s(\vec{q}, \omega),$$

где $\{ab\}_s = (ab + ba)/2$ — симметризованное произведение операторов, индексом s у χ_{il} обозначена симметричная часть тензора.

Как и в р. 6.7, ограничимся при вычислении тензора (6.197) случаем свободных электронов в поле \vec{H} . Тогда

$$\begin{aligned} \chi_{il}(\vec{q}, \omega) &= -\frac{\mu^2}{V} \times \\ &\times \sum_{\kappa_1 \kappa_2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \sigma_{\alpha_2 \alpha_1}^i \sigma_{\alpha_1 \alpha_2}^l |I_{\kappa_1 \kappa_2}(\vec{q})|^2 \frac{f(\varepsilon_{\kappa_1 \alpha_1}) - f(\varepsilon_{\kappa_2 \alpha_2})}{\varepsilon_{\kappa_1 \alpha_1} - \varepsilon_{\kappa_2 \alpha_2} - \hbar \omega - i0}. \end{aligned} \quad (6.198)$$

Из формулы (6.198) при $\vec{q} = 0$ находим для циркулярных компонент $\chi_{\pm} = \chi_{xx} \pm i\chi_{yx}$ тензора восприимчивости электронов выражения

$$\operatorname{Re} \chi_{\pm}(\omega) = \frac{2}{\hbar} \mu^2 \frac{n_{\mp} - n_{\pm}}{\omega \pm \Omega_0},$$

$$\operatorname{Im} \chi_{\pm}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \mu^2 (n_{\pm} - n_{\mp}) \delta(\omega \pm \Omega_0),$$

где n_{α} – плотность электронов со спиновым квантовым числом α . Эти формулы используются в теории электронного спинового резонанса.

Если $T = 0$ и $\vec{q} \parallel \vec{H}$, из формулы (6.198) получаем (см. П.С.Зырянов, В.И.Окулов, В.П.Силин, ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 1295):

$$\chi_{\pm}(q, \omega) = \frac{m^2 \mu^2 \omega_c}{2\pi^2 \hbar^3 q} \times$$

$$\times \sum_{n=0}^N \left\{ \ln \left| \frac{[V_n^{\pm}(q) - w_{\pm}][V_n^{\mp}(q) + w_{\pm}]}{[V_n^{\mp}(-q) - w_{\pm}][V_n^{\pm}(-q) + w_{\pm}]} \right| + \right. \quad (6.199)$$

$$\left. + i\pi \int_{V_n^{\mp}(-q)}^{V_n^{\pm}(q)} dv \delta(v - w_{\pm}) + i\pi \int_{V_n^{\mp}(q)}^{V_n^{\pm}(-q)} dv \delta(v + w_{\pm}) \right\},$$

где

$$w_{\pm} = \frac{(\omega \pm \Omega_0)}{q}, \quad V_n^{\alpha}(q) = v_n^{\alpha} + \frac{\hbar q}{2m},$$

v_n^{α} – скорость фермиевского электрона на уровне Ландау n^{α} , N – номер последнего заполненного уровня Ландау. (Не путать плотность электронов n_{α} и номер уровня Ландау n^{α} с проекцией спина $\alpha = \pm 1$.) Продольная компонента χ_{zz} в этом случае равна

$$\chi_{zz} = \sum_{\alpha} \chi_{zz}^{\alpha},$$

$$\chi_{zz}^{\alpha} = \frac{m^2 \mu^2 \omega_c}{4\pi^2 \hbar^3 q} \sum_{n=0}^{N_{\alpha}} \int_{V_n^{\alpha}(-q)}^{V_n^{\alpha}(q)} d\nu \left[\left(\nu + u + i \frac{\nu}{q} \right)^{-1} + \left(\nu - u - i \frac{\nu}{q} \right)^{-1} \right], \quad (6.200)$$

где

$$u = \frac{\omega}{q}, \quad N_{\alpha} = \left[\frac{\varepsilon_F}{\hbar \omega_c} - \frac{1}{2} - \frac{\alpha \Omega_0}{2 \omega_c} \right]$$

– целая часть выражения в скобках, ε_F – энергия Ферми, ν – частота релаксации продольной спиновой намагниченности.

В квазиклассическом приближении $\hbar \omega_c \ll \varepsilon_F$ сумму в (6.199) можно заменить интегралом. В результате получим

$$\operatorname{Re} \chi_{\pm}(q, \omega) = \chi_0 \left[1 \mp \frac{\omega}{2q\nu_F} \ln \left| \frac{\pm \omega + \Omega_0 + q\nu_F}{\pm \omega + \Omega_0 - q\nu_F} \right| \right], \quad (6.201)$$

$$\operatorname{Im} \chi_{\pm} = \chi_0 \frac{\pi \omega}{2q\nu_F},$$

где $\chi_0 = 2\mu^2 \nu_F$ – спиновая восприимчивость Паули, ν_F – плотность состояний свободных электронов (6.17) на поверхности Ферми.

Формулы (6.199) и (6.200) используются для изучения спиновых волн в ферми-жидкости неферромагнитных металлов в магнитном поле, предсказанных В.П.Силиным. Если считать электрон-электронное взаимодействие сильно экранированным, дисперсионное уравнение для поперечных спиновых волн с левой и правой круговой поляризацией, которые распространяются вдоль поля \vec{H} , в приближении случайных фаз будет иметь вид

$$\frac{2\mu^2}{I} = \chi_{\pm}(q, \omega), \quad (6.202)$$

где константа I учитывает s -волновую часть электрон-электронного взаимодействия. Она связана с первым членом B_0 разложения обменной части функции ферми-жидкостного взаимодействия Ландау в ряд по полиномам Лежандра соотношением

$$|B_0| = \frac{I}{\hbar\Omega_0}(n_- - n_+).$$

В квазиклассическом приближении $|B_0| = v_F I$.

Уравнение (6.202) имеет решение $\omega(q) - i\gamma(q)$, где $\omega(q)$ – спектр спиновой волны, $\gamma(q)$ – декремент затухания. В чистом проводнике при низких температурах он равен нулю в областях на плоскости (q, ω) , где $\text{Im } \chi_{\pm} = 0$. Границы этих областей можно найти из законов сохранения энергии и z -компоненты импульса в процессе поглощения магнона электроном, а также правил отбора $\Delta n = 0$, $\Delta\sigma = \pm 1/2 - (\mp 1/2) = \pm 1$ и принципа Паули. В областях, где $\text{Im } \chi_{\pm} \neq 0$, существует затухание Ландау, обусловленное переходами электронов между подуровнями n^{\pm} , которые сопровождаются перебросом спина электрона $\pm 1/2 \rightarrow \mp 1/2$.

При наличии магнитопримесных уровней энергии электронов в неидеальных проводниках картина распространения волн становится богаче. Вблизи частот резонансных переходов электронов между магнитопримесными уровнями и уровнями Ландау в окнах прозрачности для волн существуют новые ветви в спектре спиновых волн, которые называются магнитопримесными спиновыми волнами. Эти волны могут быть обнаружены в опытах по измерению сечения неупругого магнитного рассеяния нейтронов током спиновой намагниченности электронов проводимости (см. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов, Спиновые волны в неферромагнитных проводниках с примесными состояниями электронов, 2006).

6.17. Кинетические коэффициенты и корреляционные функции

Рассмотрим проводник в постоянном электрическом поле $\vec{E} = -\nabla\varphi$. В состоянии равновесия электрохимический потенциал электронов $\bar{\mu} = \mu + e\varphi$ и температура T постоянны вдоль проводника. При наличии градиентов $\nabla\bar{\mu}$ и ∇T существуют потоки заряда электронов \vec{J} и тепла $\vec{q} = \vec{J}_\varepsilon - \mu\vec{J}$, где \vec{J}_ε – вектор плотности потока энергии. При слабом отклонении системы от состояния равновесия потоки J_i^α будут линейными однородными функциями термодинамических сил X_i^α , которые вызывают эти потоки:

$$J_i^\alpha = \sum_{\beta k} L_{ik}^{\alpha\beta} X_k^\beta. \quad (6.203)$$

Здесь $L_{ik}^{\alpha\beta}$ – кинетические коэффициенты; индексами α, β обозначены силы и потоки, а $i, k = x, y, z$. Выбор сил и потоков неоднозначен. Выберем термодинамические силы в виде

$$\vec{X}^1 = -\frac{1}{T}\nabla\bar{\mu}, \quad \vec{X}^2 = \nabla\frac{1}{T}. \quad (6.204)$$

Тогда потоки будут равны

$$\vec{J}^1 = \vec{J}, \quad \vec{J}^2 = \vec{q}, \quad (6.205)$$

а линейные законы (6.203) примут вид

$$J_i = -\frac{1}{T} \sum_k L_{ik}^{11} \nabla_k \bar{\mu} + \sum_k L_{ik}^{12} \nabla_k \frac{1}{T},$$

$$q_i = -\frac{1}{T} \sum_k L_{ik}^{21} \nabla_k \bar{\mu} + \sum_k L_{ik}^{22} \nabla_k \frac{1}{T}. \quad (6.206)$$

Потоки и силы выбраны так, чтобы производство энтропии в единице объема образца

$$\dot{s} = \sum_{\alpha} \vec{J}^\alpha \vec{X}^\alpha, \quad (6.207)$$

равнялось

$$\dot{s} = -\vec{J} \frac{1}{T} \nabla \bar{\mu} + \bar{q} \nabla \frac{1}{T}.$$

Тогда кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношениям Онсагера

$$L_{ik}^{\alpha\beta} = L_{ki}^{\beta\alpha}. \quad (6.208)$$

Если температура и химический потенциал постоянны, то из (6.206) находим

$$eJ_i = \sum_k \sigma_{ik} E_k,$$

где

$$\sigma_{ik} = \frac{e^2}{T} L_{ik}^{11}$$

– тензор электропроводности. Теплопроводность образца измеряется при $\vec{J} = 0$. Тогда соотношения (6.206) дают

$$q_i = -\sum_k \kappa_{ik} \nabla_k T,$$

где

$$\kappa = \frac{1}{T^2} \left(L^{(22)} - L^{(21)} L^{(11)-1} L^{(12)} \right)$$

– тензор теплопроводности. В случае $\vec{J} = 0$, $\nabla \mu = 0$ имеем

$$E_i = \sum_k Q_{ik} \nabla_k T,$$

где

$$Q = \frac{1}{eT} L^{(11)-1} L^{(12)}$$

– дифференциальная термоэлектродвижущая сила. Таким образом, для расчета тензоров σ , κ , Q необходимо знать коэффициенты L . Свяжем их с корреляционными функциями

$$\left\langle J_i^\alpha(t) J_k^\beta \right\rangle, \quad (6.209)$$

собранными на операторах потоков в гейзенберговском представлении. Эти операторы и статистический оператор в

$\langle \dots \rangle$ определяются гамильтонианом H равновесной системы взаимодействующих электронов.

Теория явлений переноса в неоднородных средах в присутствии электрического поля, градиента температуры и плотности электронов детально изложена в литературе (см. А.И.Ахиезер, С.В.Пелетминский, Методы статистической физики, 1977; Д.Н.Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, 1971). Здесь мы ограничимся только методом Люттингера, в основе которого лежит представление эффекта термических возмущений через механические возмущения (см. J.M.Luttinger, Phys. Rev., 1964, A 135, 1505; G.D.Mahan, Many-Particle Physics, 1981). Будем считать, что имеется добавка к гамильтониану H системы электронов, равная $Fe^{\delta t}$, действие которой эквивалентно неоднородностям системы. Множитель $e^{\delta t}$ ($\delta > 0$) учитывает адиабатическое включение вспомогательного поля в момент $t = -\infty$.

При наличии F квантовое уравнение Лиувилля для статистического оператора ρ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H + F e^{\delta t}, \rho(t)].$$

Решение этого уравнения позволяет найти потоки \vec{J} и \vec{J}_ε .

Будем считать, что в момент $t = -\infty$ система электронов проводимости находилась в состоянии равновесия. Ее статоператор в этот момент обозначим ρ_0 . Слабое возмущение $Fe^{\delta t}$ адиабатически включается и вызывает отклонение состояния системы от равновесного. Статоператор в момент t становится равным $\rho_0 + f e^{\delta t}$. В линейном приближении по F имеем для неравновесной добавки к ρ_0 выражение

$$f = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} [F(-t), \rho_0]$$

(см. р. 6.4). Возмущение F вызывает поток

$$\bar{J}^\alpha = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \text{Sp} \left\{ \rho_0 \left[\bar{J}^\alpha, F(-t) \right] \right\}. \quad (6.210)$$

Чтобы найти F , отождествляем энергию \dot{F} , которая передается системе за единицу времени, с выделяемой в объеме V проводника мощностью:

$$\dot{F} = VT\dot{s}.$$

Подставим сюда (6.207):

$$\dot{F} = VT \sum_\alpha \bar{J}^\alpha \bar{X}^\alpha.$$

После интегрирования этого выражения по времени получаем

$$F = VTt \sum_{\beta k} J_k^\beta X_k^\beta.$$

В результате поток (6.210) равен

$$J_i^\alpha = \frac{i}{\hbar} VT \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{\partial}{\partial \delta} \sum_{\beta k} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \left\langle \left[J_i^\alpha, J_k^\beta(-t) \right] \right\rangle X_k^\beta.$$

Сравнивая это выражение с (6.203), находим формулу Кубо для кинетических коэффициентов

$$L_{ik}^{\alpha\beta} = \frac{i}{\hbar} VT \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \left\langle \left[J_i^\alpha, J_k^\beta(-t) \right] \right\rangle. \quad (6.211)$$

Она связывает кинетические коэффициенты с равновесными корреляционными функциями (6.209). В случае сил (6.204) и потоков (6.205) эти соотношения принимают вид

$$\begin{aligned}
L_{ik}^{11} &= VT \frac{i}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^{\infty} dt e^{-\delta t} \langle [J_i, J_k(-t)] \rangle, \\
L_{ik}^{12} &= VT \frac{i}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^{\infty} dt e^{-\delta t} \langle [J_i, q_k(-t)] \rangle, \\
L_{ik}^{21} &= VT \frac{i}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^{\infty} dt e^{-\delta t} \langle [q_i, J_k(-t)] \rangle, \\
L_{ik}^{22} &= VT \frac{i}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \delta} \int_0^{\infty} dt e^{-\delta t} \langle [q_i, q_k(-t)] \rangle.
\end{aligned} \tag{6.212}$$

Эти формулы подобны (6.89), (6.195). Для вычисления кинетических коэффициентов (6.212) могут быть использованы изложенные выше методы.

Преобразуем формулы (6.212), используя тождество Кубо:

$$[A, e^{-\beta H}] = -i\hbar e^{-\beta H} \int_0^{\beta} d\lambda \dot{A}(-i\hbar\lambda),$$

где A – произвольный оператор (см. цитированную выше книгу Д.Н.Зубарева). С учетом этого тождества из (6.210) получаем

$$J_i(\vec{r}) = - \int_0^{\infty} dt e^{-\delta t} \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{F}(-t - i\hbar\lambda) J_i(\vec{r}) \rangle. \tag{6.213}$$

В случае электропроводности добавка F к гамильтониану равна гамильтониану взаимодействия электронов с электрическим полем (6.167). Вычислим производную \dot{V} и учтем уравнение непрерывности (6.48). Получим

$$\dot{F}(-t) = - \int d^3 r e \operatorname{div} \vec{J}(\vec{r}, -t) \varphi(\vec{r}).$$

После интегрирования по частям находим отсюда

$$\dot{F}(-t) = - \int d^3 r e \vec{J}(\vec{r}, -t) \vec{E}.$$

В результате поток (6.213) равен

$$J_i(\vec{r}) = e \sum_k \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \int_0^\beta d\lambda \int d^3r' \langle J_k(\vec{r}', -t - i\hbar\lambda) J_i(\vec{r}) \rangle E_k.$$

Выполняя усреднение этого выражения по объему образца, приходим к закону Ома (6.88) при $q=0$, $\omega=0$ и формуле Кубо для тензора статической проводимости:

$$\sigma_{ik} = \frac{e^2}{V} \int_0^\infty dt e^{-\delta t} \int_0^\beta d\lambda \langle J_k(-t - i\hbar\lambda) J_i \rangle. \quad (6.214)$$

Здесь J_i – пространственная компонента Фурье оператора $J_i(\vec{r})$ при $\vec{q}=0$.

Убедимся в том, что выражение (6.214) совпадает с вещественной частью (6.89) при $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$. Для этого вводим базис $\{|n\rangle\}$ – собственные состояния гамильтониана H (см. (5.43)). В этом базисе статоператор ρ_0 диагонален, а матричные элементы гейзенберговского оператора потока частиц равны

$$\langle n | J_i(-t - i\hbar\lambda) | m \rangle = \langle n | J_i | m \rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) + \lambda (E_n - E_m) \right].$$

Подставляя это выражение в (6.214) и вычисляя интегралы по t и λ , получаем

$$\sigma_{ik} = \frac{\pi e^2 \hbar \beta}{V} \sum_{mn} \rho_m^{(0)} \langle m | J_i | n \rangle \langle n | J_k | m \rangle \delta(E_m - E_n), \quad (6.215)$$

где $\rho_m^{(0)}$ – гиббсовская функция распределения. Таким же способом можно преобразовать тензор (6.89). Тогда его равенство тензору (6.215) при $q=0$, $\omega=0$ становится очевидным.

Приложение

В р. 4.15 были введены частичные статистические операторы и матрицы плотности, пригодные для описания как равновесных, так и неравновесных систем. Здесь, следуя Н.Н.Боголюбову, мы приводим систему уравнений для этих операторов, лежащих в основе теории явлений переноса в макроскопических системах (см. Н.Н.Боголюбов, Избранные труды, тт. 1-3, 1970; Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.), Введение в квантовую статистическую механику, 1984).

Исходим из квантового уравнения Лиувилля (4.58) для полного статоператора

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H(t), \rho(t)].$$

Применяя к этому уравнению операцию взятия следа $\text{Sp}_{(2\dots N)}$ по

переменным 2-й, ..., N -й частиц, получаем

$$i\hbar \frac{\partial \rho_1(1)}{\partial t} = \sum_{1 \leq r \leq N} \left[\text{Sp}_{(2\dots N)} H(r) \rho - \text{Sp}_{(2\dots N)} \rho H(r) \right] + \sum_{1 \leq r < s \leq N} \left[\text{Sp}_{(2\dots N)} U(r, s) \rho - \text{Sp}_{(2\dots N)} \rho U(r, s) \right]. \quad (\text{П.1})$$

Гамильтониан системы в этом уравнении записан в виде

$$H = \sum_{1 \leq r \leq N} H(r) + \sum_{1 \leq r < s \leq N} U(r, s),$$

где $H(r)$ – гамильтониан r -й частицы во внешнем поле,

$U(r, s)$ – гамильтониан взаимодействия r -й и s -й частиц.

Остальные обозначения см. в р. 4.15. Используя свойство следа произведения операторов

$$\text{Sp}_{(r)} H(r) \rho = \text{Sp}_{(r)} \rho H(r), \quad (\text{П.2})$$

переписываем первое слагаемое в правой части уравнения (П.1) в виде

$$\begin{aligned}
& \sum_{1 \leq r \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} H(r) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho H(r) \right] = \\
& = \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} H(1) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho H(1) = \\
& = H(1) \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho H(1) = \\
& = H(1) \rho_1(1) - \rho_1(1) H(1) = [H(1), \rho_1(1)].
\end{aligned} \tag{П.3}$$

В \sum_r мы выделили слагаемое с $r=1$, а в остальных слагаемых воспользовались равенством (П.2). Кроме того, гамильтониан $H(1)$ вынесен за знак $\operatorname{Sp}_{(2 \dots N)}$. В общем случае он не коммутирует с одночастичным статоператором $\rho_1(1) = \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho$.

Во втором слагаемом в правой части уравнения (П.1) снова используем равенство (П.2). Тогда

$$\begin{aligned}
& \sum_{1 \leq r < s \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} U(r, s) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho U(r, s) \right] = \\
& = \sum_{2 \leq s \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} U(1, s) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho U(1, s) \right].
\end{aligned}$$

Здесь в \sum_r выделено слагаемое с $r=1$. Остальные слагаемые равны нулю в силу (П.2). Учтем теперь свойства симметрии (4.206), (4.207). Из них следует равенство

$$\begin{aligned}
& \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} U(1, s) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho U(1, s) = \\
& = \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} U(1, 2) \rho - \operatorname{Sp}_{(2 \dots N)} \rho U(1, 2)
\end{aligned}$$

для $s = 2, \dots, N$. Следовательно,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{1 \leq r < s \leq N} \left[\text{Sp}_{(2 \dots N)} U(r, s) \rho - \text{Sp}_{(2 \dots N)} \rho U(r, s) \right] = \\
 & = (N-1) \left\{ \text{Sp}_{(2)} \left[U(1, 2) \text{Sp}_{(3 \dots N)} \rho \right] - \text{Sp}_{(2)} \left[\text{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(1, 2) \right] \right\} = \quad (\text{П.4}) \\
 & = (N-1) \left[\text{Sp}_{(2)} U(1, 2) \rho_2(1, 2) - \text{Sp}_{(2)} \rho_2(1, 2) U(1, 2) \right].
 \end{aligned}$$

Здесь $N-1$ – число слагаемых в сумме $\sum_{2 \leq s \leq N}$. Учитывая (П.3) и (П.4), записываем уравнение (П.1) в виде

$$i\hbar \frac{\partial \rho_1}{\partial t} = [H(1), \rho_1(1)] + (N-1) \text{Sp}_{(2)} [U(1, 2), \rho_2(1, 2)]. \quad (\text{П.5})$$

Отсюда видно, что в уравнение для одночастичного статоператора входит двухчастичный статоператор.

Применим теперь к обеим частям уравнения (4.58) операцию $\text{Sp}_{(3 \dots N)}$. Получим

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \rho_2(1, 2)}{\partial t} & = \sum_{1 \leq r \leq N} \left[\text{Sp}_{(3 \dots N)} H(r) \rho - \text{Sp}_{(3 \dots N)} \rho H(r) \right] + \\
 & + \sum_{1 \leq r < s \leq N} \left[\text{Sp}_{(3 \dots N)} U(r, s) \rho - \text{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(r, s) \right]. \quad (\text{П.6})
 \end{aligned}$$

Первое слагаемое в правой части этого уравнения равно

$$\begin{aligned}
& \sum_{1 \leq r \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} H(r) \rho - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho H(r) \right] = \\
& = \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} H(1) \rho - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho H(1) + \\
& + \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} H(2) \rho - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho H(2) = \tag{П.7} \\
& = [H(1) + H(2)] \rho_2(1,2) - \rho_2(1,2) [H(1) + H(2)] = \\
& = [H(1) + H(2), \rho_2(1,2)].
\end{aligned}$$

Здесь в \sum_r выделены слагаемые с $r=1,2$, не равные нулю.

Аналогично получаем второе слагаемое в правой части уравнения (П.6)

$$\begin{aligned}
& \sum_{1 \leq r < s \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} U(r,s) \rho - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(r,s) \right] = \\
& = \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} U(1,2) \rho - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(1,2) + \\
& + \sum_{3 \leq s \leq N} \left[\operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} U(1,s) \rho + \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} U(2,s) \rho - \right. \\
& \left. - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(1,s) - \operatorname{Sp}_{(3 \dots N)} \rho U(2,s) \right] = \tag{П.8} \\
& = U(1,2) \rho_2(1,2) - \rho_2(1,2) U(1,2) + \\
& + (N-2) \left\{ \operatorname{Sp}_{(3)} [U(1,3) + U(2,3)] \rho_3(1,2,3) - \right. \\
& \left. - \operatorname{Sp}_{(3)} \rho_3(1,2,3) [U(1,3) + U(2,3)] \right\}.
\end{aligned}$$

Складывая (П.7) и (П.8), получаем уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_2(1,2)}{\partial t} = [H_2(1,2), \rho_2(1,2)] + (N-2) \text{Sp}_{(3)} [U(1,3) + U(2,3), \rho_3(1,2,3)], \quad (\text{П.9})$$

где

$$H_2(1,2) = H(1) + H(2) + U(1,2)$$

– гамильтониан одной пары частиц.

Для s -частичного оператора ρ_s сразу можно написать уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \rho_s(1, \dots, s)}{\partial t} = [H_s(1, \dots, s), \rho_s(1, \dots, s)] + (N-s) \text{Sp}_{(s+1)} \left\{ \sum_{1 \leq r \leq s} [U(r, s+1), \rho_{s+1}(1, \dots, s+1)] \right\}. \quad (\text{П.10})$$

Здесь $H_s(1, \dots, s)$ – гамильтониан s частиц, изолированных от остальных. Придавая в уравнении (П.10) числу s значения $s = 1, 2, \dots$, получаем цепочку зацепляющихся уравнений Боголюбова для частичных статоператоров.

Уравнения (П.5), (П.9), (П.10) позволяют получить ρ_1, ρ_2, \dots независимо от ρ , если только известны их начальные выражения в момент t_0 .

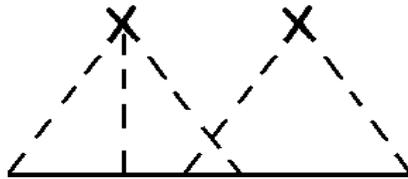
Если бы в уравнении (П.10) не было члена с $\text{Sp}_{(s+1)}$, то

комплекс s частиц двигался бы так, как если бы остальных частиц не было. Если межчастичное взаимодействие слабое, влияние остальных частиц на s -частичный комплекс можно учесть по теории возмущений. В противном случае приходится

прибегать к аппроксимациям, позволяющим оборвать цепочку на каком-то этапе, например, выразить ρ_3 через ρ_1 и ρ_2 . Тогда для ρ_1 и ρ_2 получается замкнутая система уравнений, которая часто используется в теории конденсированного состояния вещества. Применение этого метода в теории явлений переноса в конденсированных средах см. в цитированных книгах Н.Н.Боголюбова и его учеников.

Задачи

1. Разработайте диаграммную технику для электрон-примесной системы в квантующем магнитном поле.
2. Получите уравнение Дайсона и итерационный ряд для собственно-энергетической функции $\Sigma_{\alpha\alpha'}(\vec{r}t, \vec{r}'t')$ в координатном представлении.
3. Оцените вклад «пересекающегося» графика



в собственно-энергетическую функцию.

4. Вычислите интеграл (6.12) в случае $u(\vec{k} - \vec{k}') \approx u_0$.
5. Найдите решение уравнения (6.23) в случае сепарабельного примесного потенциала $|\eta\rangle u_0 \langle \eta|$. Учтите магнитное поле.

6. Исследуйте рассеяние электронов на немагнитных и магнитных примесных атомах в проводниках с гамильтонианом взаимодействия

$$U = \sum_j \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) u(\vec{r} - \vec{r}_j) \psi(\vec{r}) + \sum_{j'} \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \vec{S}_{j'} u'(\vec{r} - \vec{r}_{j'}) \psi(\vec{r}),$$

где $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули, $\vec{S}_{j'}$ – оператор спина примесного атома в точке $\vec{r}_{j'}$, $\int d\vec{r}$ включает суммирование по спиновой переменной. Найдите борновскую частоту столкновений электронов.

7. Найдите положения и ширины примесных уровней энергии электронов в поле короткодействующих примесей и в магнитном поле (см. А.М.Ермолаев, ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 1259).
8. Получите вклад примесных уровней электронов в плотность состояний.
9. Исследуйте возможность образования примесных уровней в одномерных и двумерных проводниках. Найдите их положения и ширины (см. В.В.Ульянов, Задачи по квантовой механике и квантовой статистике, 1980).
10. Вычислите функцию F_0 (6.35) и исследуйте решения уравнения (6.37) в случае хаббардовской плотности состояний

$$v_0(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi w^2} (w^2 - \varepsilon^2)^{1/2}, & |\varepsilon| \leq w, \\ 0, & |\varepsilon| > w, \end{cases}$$

$$\int_{-w}^w d\varepsilon \nu_0(\varepsilon) = 1,$$

где $2w$ – ширина полосы спектра невозмущенных примесями электронов.

11. Найдите спектральную плотность средней функции Грина электронов в проводнике (5.57) с учетом локальных и резонансных состояний электронов на короткодействующих примесях. Учтите магнитное поле.
12. Получите уравнение непрерывности (6.48) с учетом электрон-электронного взаимодействия.
13. Найдите оператор плотности потока энергии электронов и оператор тензора напряжений в представлении вторичного квантования. Сформулируйте законы сохранения энергии и импульса в локальной форме (см. Д.Н.Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, 1971).
14. Вычислите матричные элементы (6.57).
15. Получите выражение (6.58) (см. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, 1989).
16. Используя формулы (6.63) и (6.64), найдите проводимость электронного газа в поле примесных атомов и в слабом электромагнитном поле (см. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, 1962).
17. Найдите связь вектора плотности потока энергии электронов в проводниках с функцией Грина.

18. Запишите соотношение (6.84) в компонентах Фурье в случае пространственно-неоднородной среды.
19. Получите формулу Кубо для тензора теплопроводности электронного газа.
20. Вычислите матричные элементы (6.98).
21. Найдите мнимые части функций $\sigma_l(q, \omega)$ и $\sigma_t(q, \omega)$ для электронного газа при нулевой температуре и для бoльцмановского электронного газа (см. Приложение 2 к гл. 5).
22. Получите выражения для термоэлектрических и термомагнитных кинетических коэффициентов электронов в проводниках с учетом их рассеяния на короткодействующих примесных атомах (см. Б.М.Аскеров, электронные явления переноса в полупроводниках, 1985).
23. Рассмотрите влияние локальных и резонансных состояний электронов на примесных атомах на спектр и затухание электромагнитных волн проводниках в магнитном поле (см. Э.А.Канер, А.М.Ермолаев, ЖЭТФ, 1987, т. 92, с. 2245; А.М. Ермолаев, Г.И.Рашба, А.И.Шурдук, ФНТ, 1993, т. 19, с. 220).
24. Получите коэффициент электронной теплопроводности металлов с учетом вершинных поправок.
25. Исследуйте влияние магнитного поля на экранирование точечного заряда в трехмерном, двумерном электронном газе и на поверхности нанотрубки.
26. Покажите, что скорость обычного звука в ферми-газе

$$c_1 = \left(\frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} \right)^{1/2},$$

где mn – плотность газа, P – давление, при $T = 0$ равна $c_1 = v_F / \sqrt{3}$.

27. Исследуйте влияние свободного пробега частиц на затухание нулевого звука.

28. Получите формулы (6.199) и (6.200).

29. Найдите на плоскости (q, ω) области, в которых мнимые части выражений (6.199) и (6.200) отличны от нуля.

30. Используя (6.201) в дисперсионном уравнении (6.202) для знака « \leftrightarrow », покажите, что при $B_0 < 0$ в области $\omega < \Omega_0$ существуют квазиклассические поперечные электронные спиновые волны, спектр которых имеет вид

$$\omega(q) = \Omega_0 (1 + B_0) \left[1 + \frac{1}{3B_0} \left(\frac{qv_F}{\Omega_0} \right)^2 \right],$$

где $qv_F \ll \Omega_0$.

31. Исследуйте влияние примесных атомов на спектр и затухание спиновых волн в неферромагнитных металлах в магнитном поле (см. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов, Спиновые волны в неферромагнитных проводниках с примесными состояниями электронов, 2006).

32. Представьте тензор (6.211) в виде (6.214).

33. Из (6.215) в случае $H = \sum_a h_a$ получите формулу Гринвуда-

Пайерлса

$$\sigma_{ik} = \frac{2\pi e^2 \hbar}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) \sum_{k_1 k_2} v_{k_1 k_2}^i v_{k_2 k_1}^k \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k_1}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k_2}),$$

где $|k\rangle$ – собственный вектор гамильтониана электрона \hat{h} , $v_{k_1 k_2}$ – матричные элементы оператора скорости электрона, f – функция Ферми. Представьте этот тензор в виде

$$\sigma_{ik} = i \frac{2e^2 \hbar}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) - f(\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon')(\varepsilon - \varepsilon' - i0)} \Phi_{ik}(\varepsilon, \varepsilon'),$$

где

$$\Phi_{ik}(\varepsilon, \varepsilon') = \text{Sp} [v_i \delta(\varepsilon - h) v_k \delta(\varepsilon' - h)],$$

$$\delta(\varepsilon - h) = \frac{1}{2\pi i} [G^-(\varepsilon) - G^+(\varepsilon)],$$

$$G^\pm(\varepsilon) = (\varepsilon - h \pm i0)^{-1}$$

– оператор резольвенты.

34. Докажите соотношения Онсагера (6.208).

35. Используйте метод температурных функций Грина для изучения термомагнитных явлений в проводниках с короткодействующими примесными атомами (см.

В.Г.Барьяхтар, С.В.Пелетминский, ЖЭТФ, 1965, т. 48, с. 187; В.В.Корнеев, А.Н.Старостин, В.Цимдаль, ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 2240).

Навчальне видання

Єрмолаєв Олександр Михайлович

Рашба Георгій Ілліч

**Лекції з квантової статистики і кінетики
6. Метод функцій Гріна у фізичній кінетиці**

Відповідальний за випуск О.І. Любимов

Коректор *О.В. Гавриленко*

Макет обкладинки *І.М. Дончик*

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 3.23. Обл.-вид. арк. 4.04.

Наклад 50 прим. Зам. № 159/10.

Видавець і виготовлювач

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Видавництво ХНУ імені В.Н. Каразіна

61077, Харків, пл. Свободи, 4. Тел. 705-24-32

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09.