16.4 波恩相互作用散射的电导率

在第 15 章中讨论了,在准粒子极点的微观表象中发现了相互作用重整化的明显矛盾,而此时出现在 Drude 公式中的应该是裸质量 (bare mass),解决这个问题可以利用费曼图分析杂质散射,由于此时对于杂质的散射是弱散射,因此可以利用 FBA 对其进行处理,这时候的相互作用就被包含在了自能中,这样费曼图中的电子线就需要进行 RPA 修正,在这样处理之前,先对相互作用的波矢量进行假设:首先认为杂质散射只有近程作用,这样相互作用势 u(q)就几乎恒定为 u,而由于屏蔽作用,可以认为库伦相互作用是近程的作用,那么此时 q 约等于 0,也就意味 w(q)几乎不依赖于 q,那么此时有:

$$\begin{split} \Gamma_{x}(\mathbf{k},\mathbf{k};&ik_{n}+iq_{n},ik_{n}) = \Gamma_{0,x}(\mathbf{k},\mathbf{k}) \\ &+\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{q}'}\frac{1}{\beta}\sum_{iq_{n}'}\left[n_{\mathrm{imp}}\left|u^{\mathrm{RPA}}(0)\right|^{2}\delta_{q_{n}',0} + W^{\mathrm{RPA}}(0,iq_{n}')\right] \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}',ik_{n}+iq_{n}'+iq_{n})\mathcal{G}(\mathbf{k}+\mathbf{q}',ik_{n}+iq_{n}'+iq_{n}) \\ &\times \Gamma_{x}(\mathbf{k}+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}';ik_{n}+iq_{n},ik_{n}), \end{split} \tag{16.50}$$

而在练习 16.1 中可以轻易的得到由于 K=0,那么 K_x为 0,得到 $\Gamma_x = \mathbf{k}/m$,这样就能够得到电导率公式:

$$\operatorname{Re} \sigma_{xx} = \operatorname{Re} \frac{e^2}{\pi} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{m}} \frac{k^2}{m^2} \left[G^A(\mathbf{k}, 0) G^R(\mathbf{k}, 0) - G^A(\mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{k}, 0) \right], \quad (16.51)$$

由于这里考虑到了杂质产生的自能虚部较小,并且在低温条件下电子-电子相互作用的自能虚部也很小,那么就可以认为 FBA 近似下的自能项远比 RPA 高,因此可以将 G^AG^A项去掉,那么有:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{\pi} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{k_x^2}{m^2} \tau_0^* A(\mathbf{k}, 0)$$

其中 $A(\mathbf{k},0) = 2\pi Z \delta(\tilde{\xi}_k)$ (书中这两处写错了,只有这样才能推到 16.53)

将积分计算完毕后可以得到:

$$\sigma_{xx} = \frac{Ze^2nm^*\tau_0^*}{m^2},$$

紧接着我们对粒子寿命进行重整化:

$$[\tau_0^*]^{-1} = n_{\text{imp}} \sum_{\mathbf{k}'} |u|^2 A(\mathbf{k}, 0)$$

$$= 2\pi Z i n_{\text{imp}} \sum_{\mathbf{k}'} |u|^2 \delta(\tilde{\xi}_k)$$

$$= 2\pi \frac{Zm^*}{m} i n_{\text{imp}} \sum_{\mathbf{k}'} |u|^2 \delta(\xi_k)$$

$$= \frac{Zm^*}{m} [\tau_0]^{-1}.$$

将其回代到上面的电导率公式,即可得到 drude 模型的电导率公式,那么矛盾解除。

16.5 对电导率的弱局域化修正

第一波恩近似只包括了在一个杂质上的一次散射,但是在分析具体系统的时候,第一波恩近似与完整的波恩近似的差别非常小,这是用于其虽然考虑了多次散射,但只考虑了在同一杂质下的多次散射。例如在不同杂质上的散射所叠加导致的干涉效应,就不能利用波恩近似方法解决。这种干涉过程可以用 12.6 的图表表示。

随着温度的降低,相位相干长度就会随之不断增加,这时候量子相干就显得更加重要,当相干长度大于杂质散射的平均自由程的时候,我们就可以认为在不同杂质上的散射之间相互叠加产生了干涉效应。而相干长度是电子保持其量子力学相位也就是其能使用单粒子薛定谔方程进行演化的尺度,当一个电子通过非弹性事件与另一个电子或者声子进行相互作用,那么其能量就会变化,改变其相位。由于这些过程电子波函数的相位可以被认为经历了随机化,其相干长度较为有限,在低温下由于晶格振动减少,因此主要考虑电子与电子的散射,而该过程发生几率与温度平方成正比,那么可以预见在温度极低的时候,相干长度会变得特别大,例如在 4.2K 的时候,典型的相干长度在微米级别,远大于原子的晶格常数。

可以预见在相干长度大于平均自由程,而小于器件长度的情况下,此时依然测不到干涉效应,这是因为在测量中由于相干长度远小于器件长度,那么测量的时候就依然是各个相干区域不同相位的叠加,最终得到了平均值,即自平均效应,但是在1980年前后,通过观察所谓的弱局域化的现象发现,即使在大样本,也就是相干长度远小于器件长度的情况下,也有一类的干涉效应被观测到,而在所谓的介观体系下这种量子干涉现象更为重要,因为这个现象导致的电导涨落的出现。

如果我们去跟踪一个电子, 当这个电子被两个杂质分别散射后所造成的的干涉相因子与两杂质的位置相关, 因此很容易证明, 当取平均值的时候这些相因子就会消失, 那么显而易见的是只有与杂质位置无关的干涉过程才能不受到自平均的影响。

一般来说研究干涉最重要的是研究其中的交叉项 t₁t₂cos (θ₁-θ₂) 而如果能够找到两条路径, 且这两条路径的相对项与杂质的位置无关,那么这种干涉就不会受到自平均效应的影响,并 且由于散射的路径可逆,因此每条路径都有相应的反向路径,这两条路径将会获得完全相同 的相位因子,其相对相位为 0,那么电子就容易返回到同一点,这时候电子的位置就有了倾 向性,也就是弱局域化,而这种干涉在自平均后仍然存在,因此其会对电导率产生一个修正 作用.需要对其进行计算。

首先便是戴森方程:

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon) = G_0^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon) + \int d\mathbf{r}'' G_0^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \epsilon) U_{imp}(\mathbf{r}'') G^R(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \epsilon).$$

简单假设杂质势有如下形式:

$$U_{\rm imp}(\mathbf{r}) \approx \sum_i U_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

那么戴森方程变为:

$$G^R(\mathbf{r},\mathbf{r}',\epsilon) = G^R_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',\epsilon) + \sum_i G^R_0(\mathbf{r},\mathbf{R}_i,\epsilon) U_0 G^R(\mathbf{R}_i,\mathbf{r}',\epsilon).$$

将其展开到二阶,就会有如下的项:

$$\begin{split} G^{R(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\epsilon) = & G_0^R(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{R}_2,\mathbf{r}',\epsilon) \\ & + G_0^R(\mathbf{r},\mathbf{R}_2,\epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,\epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{R}_1,\mathbf{r}',\epsilon) \end{split}$$

这个过程的概率正比于格林函数的模方:

$$\begin{split} \delta|t(\mathbf{r},\mathbf{r}')|^2 &\propto \mathrm{Re}\left[G_0^R(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\epsilon)U_0G_0^R(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\epsilon)U_0G_0^R(\mathbf{R}_2,\mathbf{r}',\epsilon)\right. \\ &\times \left.\left(G_0^R(\mathbf{r},\mathbf{R}_2,\epsilon)U_0G_0^R(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,\epsilon)U_0G_0^R(\mathbf{R}_1,\mathbf{r}',\epsilon)\right)^*\right]. \end{split}$$

那么此时反射就可以令 r'=r 来表示,并将其傅里叶变换到 k 空间后有:

$$\langle \delta | r |^2 \rangle_{\text{imp}} \equiv \langle \delta | t(\mathbf{r} = \mathbf{r}') |^2 \rangle_{\text{imp}}$$

$$\propto \text{Re} \, \frac{1}{\mathcal{V}^4} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3 \mathbf{Q}} G_0^R(\mathbf{Q} - \mathbf{p}_1, \epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{Q} - \mathbf{p}_2, \epsilon) U_0 G_0^R(\mathbf{Q} - \mathbf{p}_3, \epsilon)$$

$$\times G_0^A(\mathbf{p}_1, \epsilon) U_0 G_0^A(\mathbf{p}_2, \epsilon) U_0 G_0^A(\mathbf{p}_3, \epsilon). \tag{16.59}$$

而此时其与 16.25 的费曼图相同,只不过上下支的方向相同,为了使其与电导率的图相似我们需要翻转下面的分支,并将两端的推迟和提前格林函数首尾相连,那么就会有如下的图:

$$\left\langle \delta |r|^2 \right\rangle_{\mathrm{imp}} = G^R$$

$$G^R$$

$$G^R$$

$$G^R$$

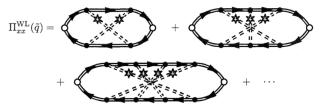
$$G^R$$

$$G^A$$

而这说明, 时间反转路径的干涉想可以利用这种形式的图来求和, 在低温下这是主要的修正项, 将两个以上杂质的干涉图一并加入, 就得到了电导率的量子修正, 现在利用 Kubo 公式来求电导率, 我们将流流关联函数写成如下的形式:

$$\Pi = \Pi^B + \Pi^{\text{WL}}$$

第一项是玻尔兹曼项, 第二项有如下的图表形式:



而在这些图中电子的全格林函数应该具有相应的自能,原则上我们也应该在自能中包含交叉图,但是它们的贡献很小可以忽略,基于同样的理由,这些交叉图的贡献也很小,但是不能被忽略,这是由于其与时间反演路径上的干涉相长造成的,并且我们可以将下面部分翻转,这样就能使得杂质线平行,以便利用原来的梯形图求解的办法:

将所有的图都考虑进来则得到:

$$\begin{split} \Pi^{\text{WL}}_{xx}(\tilde{q}) &= \underbrace{\tilde{k}}_{\tilde{k}+\tilde{q}} \underbrace{\tilde{k}'}_{\tilde{k}'+\tilde{q}} \\ &= -\frac{1}{(2m)^2} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d\tilde{k} \int d\tilde{k}' \left(2k_x + q_x\right) \mathcal{G}(\tilde{k}) \, \mathcal{G}(\tilde{k}+\tilde{q}) \\ &\mathcal{C}(\tilde{k},\tilde{k}',\tilde{q}) \, \mathcal{G}(\tilde{k}') \mathcal{G}(\tilde{k}'+\tilde{q}) \left(2k_x' + q_x'\right), \end{split}$$

其中 C 是所有平行杂质线的和:

为了简单起见,我们令 q=0,并且限制短程的杂质,这样 W(q)为常数,且 $W_0 = n_{imp}|u_0|^2$ 并且记: k+k'=Q,这样 C 就变成:

利用戴森方程则有:

$$\mathcal{C}(\mathbf{Q};ik_n+iq_n,ik_n) = \frac{\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}}W_0\mathcal{G}(\mathbf{Q}-\mathbf{p},ik_n+iq_n)\mathcal{G}(\mathbf{p},ik_n)W_0}{1-\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}}W_0\mathcal{G}(\mathbf{Q}-\mathbf{p},ik_n+iq_n)\mathcal{G}(\mathbf{p},ik_n)}.$$

此时流流关联函数可以写成:

$$\begin{split} \Pi_{xx}^{\mathrm{WL}}(0,iq_n) &= -\frac{1}{(2m)^2} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k'}} (2k_x) \mathcal{G}(\mathbf{k},ik_n) \mathcal{G}(\mathbf{k},ik_n+iq_n) \\ &\times \mathcal{C}(\mathbf{k}+\mathbf{k'};ik_n+iq_n,ik_n) \mathcal{G}(\mathbf{k'},ik_n) \mathcal{G}(\mathbf{k'},ik_n+iq_n) (2k_x'). \end{split}$$

此时推迟格林函数可以写成 g 函数的解析延拓:

$$G^{R}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \mathcal{G}(\mathbf{k}, ik_n \to \varepsilon + i\eta) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau_0}$$

在前一节中得到只有 $G^{A}G^{R}$ 项对弱散射极限有贡献,那么我们分别用延迟/提前频率替换 ik_n+iq_n 以及 ik_n ,并且分别将 ik_n+iq_n 、 ik_n 换成 E+w+in、E-in,并且结合低温和 DC 背景就可以得到:

$$\operatorname{Re} \delta \sigma_{xx}^{\text{WL}} = 2 \times \frac{e^2}{2\pi} \left(\frac{1}{m}\right)^2 \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (k_x k_x') G^R(\mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{k}, 0)$$
$$\times C^{AR}(\mathbf{k} + \mathbf{k}'; 0, 0) G^R(\mathbf{k}', 0) G^A(\mathbf{k}', 0).$$

这里也出现了 G^AG^R 项,但是却不能用 delta 函数来替换它,这是由于 C^{RA} 中也有 G^AG^R 项,因此需要用下面方式处理:

$$C^{RA}(\mathbf{Q}) = \frac{W_0 \zeta(\mathbf{Q})}{1 - \zeta(\mathbf{Q})},$$

$$\zeta(\mathbf{Q}) \equiv \frac{n_{\text{imp}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} |u_0|^2 G^R(\mathbf{Q} - \mathbf{p}, 0) G^A(\mathbf{p}, 0),$$

将推迟/提前格林函数的公式带入则可以得到:

$$\zeta(\mathbf{Q}) = n_{\text{imp}} |u_0|^2 \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{-\xi_{\mathbf{Q}-\mathbf{p}} + i/2\tau_0} \frac{1}{-\xi_{\mathbf{p}} - i/2\tau_0}.$$

首先对 Q=0 的情况进行研究, 此时有:

$$\begin{split} \zeta(0) &= n_{\rm imp} |u_0|^2 d(\varepsilon_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \; \frac{1}{-\xi + i/2\tau_0} \; \; \frac{1}{-\xi - i/2\tau_0} \\ &= n_{\rm imp} |u_0|^2 d(\varepsilon_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\xi^2 + \left(1/2\tau_0\right)^2} = n_{\rm imp} |u_0|^2 d(\varepsilon_F) 2\pi \tau_0 = 1, \end{split}$$

可以看到 C 在 Q=0 处发散,那么可以推断电导率在 Q=0 附近具有最大的贡献率,因此在 Q=0 附近进行泰勒展开:

$$\zeta(\mathbf{Q}) \approx 1 + n_{\text{imp}} |u_0|^2 \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{1}{-\xi_{\mathbf{p}} + i/2\tau_0} \right)^2 \frac{1}{-\xi_{\mathbf{p}} - i/2\tau_0} \left(-\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{Q} + \frac{Q^2}{2m} \right)
+ n_{\text{imp}} |u_0|^2 \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{1}{-\xi_{\mathbf{p}} + i/2\tau_0} \right)^3 \frac{1}{-\xi_{\mathbf{p}} - i/2\tau_0} \left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{Q} \right)^2,$$
(16.74)

由于是对 P 进行求和, 那么 Q 的线性项消失。因此取其一阶和二阶近似, 则得到:

$$\zeta(\mathbf{Q}) \approx 1 + \frac{1}{2\pi\tau_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{-\xi + i/2\tau_0} \right)^2 \frac{1}{-\xi - i/2\tau_0} \left(\frac{Q^2}{2m} \right) \\
+ \frac{1}{2\pi\tau_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{-\xi + i/2\tau_0} \right)^3 \frac{1}{-\xi - i/2\tau_0} \frac{Q^2 v_F^2}{N_{\text{dim}}},$$

对其取下半平面的围道积分,则可以得到:

$$\zeta(\mathbf{Q}) \approx 1 + \frac{2\pi i}{2\pi \tau_0} \left[\left(\frac{1}{i/\tau_0} \right)^2 \frac{Q^2}{2m} + \left(\frac{1}{i/\tau_0} \right)^3 \frac{Q^2 v_F^2}{N_{\mathrm{dim}}} \right]$$

由于τ0 远大于 1, 因此我们保留三次项, 因此我们有:

$$\begin{split} \zeta(\mathbf{Q}) &\approx 1 - \frac{1}{N_{\text{dim}}} Q^2 \ell_0^2 \equiv 1 - D \tau_0 Q^2, \\ \ell_0 &= v_{\text{F}} \tau_0, \qquad D = \frac{v_{\text{F}}^2 \tau_0}{N_{\text{dim}}}, \end{split}$$

由于 O<<10⁻¹ 那么我们有:

$$C^{RA}(\mathbf{Q};0,0) = \frac{W_0(1 - D\tau_0 Q^2)}{D\tau_0 Q^2} \approx \frac{W_0}{\tau_0} \frac{1}{DQ^2}.$$

这时候令 Q=0 就得到:

$$\delta\sigma^{\text{WL}} = 2 \times \frac{e^2}{\pi} \left(\frac{1}{m}\right)^2 \frac{W_0}{\tau_0} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}, Q < \ell_0^{-1}} (-k_x^2) G^R(\mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{k}, 0)$$

$$\times \frac{1}{DQ^2} G^R(\mathbf{Q} - \mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{Q} - \mathbf{k}, 0). \tag{16.80}$$

对格林函数部分进行积分.则可以得到:

$$\begin{split} &\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} k_x^2 G^R(\mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{k}, 0) G^R(-\mathbf{k}, 0) G^A(-\mathbf{k}, 0) \\ &= d(\varepsilon_F) \frac{k_F^2}{N_{\text{dim}}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{\xi^2 + \left(1/2\tau_0 \right)^2} \right)^2 = \frac{4\pi k_F^2}{N_{\text{dim}}} d(\varepsilon_F) \tau_0^3. \end{split}$$

那么最终电导率修正就可以写成:

$$\delta\sigma^{\rm WL} = -\frac{e^2}{\pi} \left(\frac{k_F}{m}\right)^2 \frac{2\tau_0}{N_{\rm dim}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{Q < \ell^{-1}} \frac{1}{DQ^2}. \label{eq:delta_WL}$$

将 O 求和转化为积分则有:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{Q < \ell^{-1}} \frac{1}{DQ^2} = \int_{Q < \ell^{-1}_0} \frac{d\mathbf{Q}}{(2\pi)^{N_{\mathrm{dim}}}} \frac{1}{DQ^2} \propto \int_{Q < \ell^{-1}_0} dQ \frac{Q^{N_{\mathrm{dim}} - 1}}{DQ^2}.$$

很明显这个积分在一二维的时候都是发散的,这是由于我们允许了无限长路径的干涉,但是在现实中干涉现象会因为长路径的散射而退相干,因此我们需要将退相干考虑进去,在这里我们设想散射破坏干涉现象的几率与路径的长度成正比,这样就可以将杂质势由 W_0 改为 $W_0e^{-\gamma}$,其中 $\gamma=I_0/I_\phi$,此时有

$$\zeta(\mathbf{Q},\omega) \approx e^{-\gamma} \left(1 - D\tau_0 Q^2\right)$$

此时 C 被改为:

$$C^{RA}(\mathbf{Q};0,0) = \frac{W_0 e^{-\gamma}}{1 - e^{-\gamma} + e^{-\gamma} DQ^2 \tau_0}.$$

由于γ很小, 那么对 e 指数项进行一阶近似:

$$C^{RA}(\mathbf{Q};0,0) \simeq \frac{W_0}{\tau_0} \, \frac{1}{1/\tau_\phi + DQ^2}.$$

重新对修正后的 C 做积分, 可以得到如下的结果:

$$\begin{split} \int \frac{d\mathbf{Q}}{(2\pi)^{N_{\text{dim}}}} \frac{1}{1/\tau_{\phi} + DQ^2} &= \int_0^{1/\ell_0} dQ \frac{1}{1/\tau_{\phi} + DQ^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\pi} \\ \frac{1}{2\pi}Q \\ \frac{1}{2\pi^2}Q^2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{cases} &\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\tau_{\phi}}{D}} \tan^{-1}\sqrt{\frac{D\tau_{\phi}}{\ell_0^2}}, & 1D \\ &\frac{1}{4D\pi} \ln\left(1 + \frac{D\tau_{\phi}}{\ell_0^2}\right), & 2D \\ &\frac{1}{2\pi^2D\ell_0} - \frac{1}{2\pi^2D\sqrt{D\tau_{\phi}}} \tan^{-1}\sqrt{\frac{D\tau_{\phi}}{\ell_0^2}}, & 3D \end{cases} \end{split}$$

那么此时修正的电导率就有如下形式:

$$\delta\sigma^{WL} \propto \left\{ egin{aligned} -\left(au_\phi
ight)^{1/2}, & ext{1D} \ -\ln\left(rac{ au_\phi}{ au_0}
ight), & ext{2D} \ \left(au_\phi
ight)^{-1/2}, & ext{3D}. \end{aligned}
ight.$$

这是一个很重要的结果, 该结果说明了由于弱局域化校正, 电导率会随着相位相干时间的增加而降低, 在一维中这个校正会超过 drude 模型给出的结果, 而在三维中会由于这种校正出现金属—绝缘体的相变, 而在二维情况下, 这是一种小的校正:

$$\frac{\delta \sigma_{\text{2D}}^{\text{WL}}}{\sigma_0} = -\frac{1}{\pi k_F \ell_0} \ln \left(\frac{\tau_\phi}{\tau_0} \right)$$