

16 impurity scattering and conductivity

16 impurity scattering and conductivity

本章回到计算金属导体因杂质散射引起的电阻问题。第12章讨论了杂质散射的基本物理，单粒子格林函数如何在对杂质位置平均后获得有限寿命。在第15章中，我们通过 Boltzmann 方程计算电导。现在我们通过微观量子方法重新推导 Boltzmann 方程的结果。这种微观方法的优点，除了给出 Boltzmann 方程的第一性原理的证明外，还可以推广到半经典 Boltzmann 方法无法描述的关联和相干效应。

1979年，在低温条件下，在大的二维样品中观测到电阻率的弱局域修正。同年晚些时候，这一现象得到了理论上的解释，并开始了一项关于量子相干在输运性质中的作用的扩展研究。几年后，在小($\sim \mu m$)的相相干结构中发现了另一种低温干涉效应，即所谓的普适电导涨落(universal conductance fluctuations)。这一发现开创了介观物理学的现代领域。要理解这些较小的系统，我们必须考虑导体的有限尺寸，这是第10章的主题。在本章中，我们将讨论扩展系统，并讨论最重要的由无序引起的量子修正。主要的量子修正正是二维的弱局域效应。我们还讨论了介观样品平均电导的量子修正。

在 1 维中，事情更加复杂，因为所有的状态都是局域化的。在三维中，情况又有所不同，在某些临界杂质散射量下，存在称为 Anderson 局域化的金属-绝缘体跃迁。

基于在第15章中 Fermi 液体描述中得到的物理图像，在本章的第一部分我们假设电子是无相互作用的。在第二部分，我们将加入电子-电子相互作用以及杂质散射，明确地证明无相互作用近似是有效地。这意味着我们将看到质量重整是如何被抵消的。进一步地，为了获得有意义的结论，对流-流关联气泡图进行顶点修正绝对是必要的。这些修正无法仅通过处理单粒子格林函数得到，因此这是双粒子关联效应，它可由相互作用线交叉的气泡图描述。

16.1 Vertex corrections and dressed Green's functions

从电导张量 $\sigma_{\alpha\beta}$ (6.24) 关于推迟流-流关联函数 (6.25) 的 Kubo 公式开始。在此，我们只看电导率的耗散部分，因此取 (6.24) 的实部：

$$Re \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = -\frac{e^2}{\omega} Im \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (16.1)$$

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \frac{ie^2 n(\mathbf{r})}{\omega m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta} \quad (6.24)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = C_{J_0^\alpha(\mathbf{r}) J_0^\beta(\mathbf{r}')}^R(t - t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{J}_0^\alpha(\mathbf{r}, t), \hat{J}_0^\beta(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0 \quad (6.25)$$

注意到 (6.24) 中 σ 的最后一项，即所谓抗磁性，在实部中不出现。实部中仅包含 σ 的第一项，即所谓顺磁性，记为 σ^∇ 。对平移不变系统，我们考虑 Fourier 变换：

$$\sigma_{\alpha\beta}^\nabla(\mathbf{q}; \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (16.2)$$

直流电导可通过 $q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$ 得到，从而长波极限下的直流响应为：

$$\text{Re } \sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} \text{Im } \Pi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (16.3)$$

本章仅考虑各向同性的平移不变系统，从而：

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma \delta_{\alpha\beta} \quad (16.4)$$

特别地，没有磁场，取 $\mathbf{A} = 0$ 。在计算中，我们可取 α 在 x 轴方向。注意到系统在对杂质位置求平均后依然具有平移不变性。

通常，计算推迟格林函数从计算对应的松原格林函数开始。松原流-流关联函数为：

$$\Pi_{xx}(\mathbf{q}, \tau - \tau') = -\frac{1}{\mathcal{V}} \langle T_\tau J_x(\mathbf{q}, \tau) J_x(-\mathbf{q}, \tau') \rangle \quad (16.5)$$

在频域中为：

$$\Pi_{xx}(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_0^\beta d(\tau - \tau') e^{iq_n(\tau - \tau')} \langle J_x(\mathbf{q}, \tau) J_x(-\mathbf{q}, \tau') \rangle \quad (16.6)$$

编时算符可以略去，因为 $\tau > \tau'$ ，再用 $J_x(\mathbf{q}, iq_n)$ 表示 $J_x(\mathbf{q}, \tau)$ ，可以得到

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}(\mathbf{q}, iq_n) &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_0^\beta d(\tau - \tau') e^{iq_n(\tau - \tau')} \\ &\quad \times \frac{1}{\beta} \sum_{iq_l} \frac{1}{\beta} \sum_{iq_m} \langle J_x(\mathbf{q}, iq_l) J_x(-\mathbf{q}, iq_m) \rangle e^{-iq_l \tau} e^{-iq_m \tau'} \end{aligned} \quad (16.7)$$

对 τ 的积分要求 $iq_n = iq_l$ ，最终的结果与 τ' 无关，从而 $iq_n = -iq_m$ ，从而：

$$\Pi_{xx}(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{1}{\mathcal{V}\beta} \langle J_x(\mathbf{q}, iq_n) J_x(-\mathbf{q}, -iq_n) \rangle \quad (16.8)$$

以四动量符号 $\tilde{q} = (iq_n, \mathbf{q})$ ，上式可记为

$$\Pi_{xx}(\tilde{q}) = -\frac{1}{\mathcal{V}\beta} \langle J_x(\tilde{q}) J_x(-\tilde{q}) \rangle \quad (16.9)$$

为了使用图解方法，将流密度写成四动量形式：

$$\begin{aligned}
J_x(\tilde{q}) &= \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} \frac{1}{2m} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (2\mathbf{k} + \mathbf{q})_x c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(\tau) \\
&= \frac{1}{2m} \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (2\mathbf{k} + \mathbf{q})_x c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(ik_n) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(ik_n + iq_n) \\
&\equiv \frac{1}{2m} \frac{1}{\beta} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\tilde{k}} \sum_{\sigma} (2k_x + q_x) c_{\sigma}^\dagger(\tilde{k}) c_{\sigma}(\tilde{k} + \tilde{q}),
\end{aligned} \tag{16.10}$$

以一个顶点来表示它：

$$J_x(\tilde{q}) = \text{Diagram} \quad . \tag{16.11}$$


顶点处四动量守恒，因此动量 $\tilde{q} = (iq_n, \mathbf{q})$ 从顶点左侧流出。

可利用 Feynman 规则画出流-流关联函数的图，其过程类似于 Chapter 13 中的电荷-电荷关联函数。但是此处我们包含和杂质线（Chapter 12）Coulomb 相互作用线（Chapter 13），于是有：



杂质线



Coulomb相互作用线

$$\begin{aligned}
\Pi_{xx}(\tilde{q}) = & \text{Diagram with a shaded rectangular region between two vertices} \\
\equiv & \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
& + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \\
& + \text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} \\
& + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} + \text{Diagram 15} + \text{Diagram 16} \\
& + \dots
\end{aligned} \tag{16.12}$$

通过用全 Green 函数 \mathcal{G} 代替 Green 函数 \mathcal{G}_0 ，可实现对图的部分求和。在这样做的过程中，我们一步就实现了求和 (16.12)，得到了气泡图，其中唯一需要绘制的相互作用线和杂质线是连接上下电子格林函数的线。（16.12）转变为：

$$\begin{aligned}
\Pi_{xx}(\tilde{q}) = & \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
& + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} \\
& + \text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} \\
& + \dots
\end{aligned} \tag{16.13}$$

这里，双线代表由 Dyson 方程表示的全 Green 函数：

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\tilde{k}) &= \text{Diagram 1} \\
&= \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} \\
&= \mathcal{G}_0(\tilde{k}) + \mathcal{G}_0(\tilde{k})\Sigma^{\text{irr}}(\tilde{k})\mathcal{G}(\tilde{k}),
\end{aligned} \tag{16.14}$$

Σ^{irr} 表示不可约自能。例如，在考虑杂质散射的一阶 Born 近似与电子-电子相互作用的 RPA 近似下，不可约自能为：

$$\text{1BA} + \text{RPA:} \quad \Sigma^{\text{irr}}(\tilde{k}) = \text{Diagram 1} \approx \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}, \tag{16.15}$$

RPA 近似意味着以下为所有杂质与相互作用线：

$$\text{wavy line} = \text{wavy line} + \text{wavy line} \circlearrowleft \text{wavy line}, \quad (16.16)$$

$$\text{dashed line} = \text{dashed line} + \text{wavy line} \circlearrowleft \text{dashed line}. \quad (16.17)$$

下一步是根据气泡图中从上到下的线系统地排列这些图。这些图表示顶点修正。为了得到 Π_{xx} 的 Dyson 方程，我们首先介绍不可约线交叉图 (irreducible line-crossing diagram) Λ^{irr} ，它包含所有不能仅各裁剪上下线一次就将其分成两部分的图。

$$\Lambda^{irr} \equiv \text{shaded square} \equiv \text{dashed line with star} + \text{wavy line} + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \quad (16.18)$$

利用 Λ^{irr} ， Π_{xx} 中的图可被重求和为：

$$\begin{aligned}
\Pi_{xx}(\tilde{q}) &= \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \\
&\quad + \text{diagram 4} + \dots \\
&= \text{diagram 1} \times \left(\text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots \right) \\
&\equiv \text{diagram 8} \\
&\equiv - \int d\tilde{k}' \Gamma_{0,x}(\tilde{k}', \tilde{k}' + \tilde{q}) \mathcal{G}(\tilde{k}') \mathcal{G}(\tilde{k}' + \tilde{q}) \Gamma_x(\tilde{k}' + \tilde{q}, \tilde{k}'), \quad (16.19)
\end{aligned}$$

其中未微扰的顶点为：

$$\Gamma_{0,x}(\tilde{k}, \tilde{k} + \tilde{q}) = \frac{1}{2m} (2k_x + q_x) \quad (16.20)$$

‘dressed’ 顶点函数由积分方程给出：

$$\Gamma_x(\tilde{k} + \tilde{q}, \tilde{k}) \equiv \text{diagram 9} = \text{diagram 10} + \text{diagram 11} \quad (16.21a)$$

$$\equiv \Gamma_{0,x}(\tilde{k} + \tilde{q}, \tilde{k}) + \int d\tilde{q}' \Lambda^{\text{irr}}(\tilde{k}, \tilde{q}, \tilde{q}') \mathcal{G}(\tilde{k} + \tilde{q}') \mathcal{G}(\tilde{k} + \tilde{q}' + \tilde{q}) \Gamma_x(\tilde{k} + \tilde{q}' + \tilde{q}, \tilde{k} + \tilde{q}'). \quad (16.21b)$$

现在的问题是 Λ^{irr} 包含哪些图。我们已经看到了如何选择在物理上最重要的自能的例子，包括第12章的杂质散射问题和第13章的相互作用粒子的例子。对于现在情况，一旦 Σ^{irr} 的近似确定，那么选择顶点函数 Γ

就没有任何自由。如果在自能的中包含了某些图，那么我们必须顶点函数中包含对应的图。这来源于一种一般的关系，自能与顶点函数间的 Ward identity。Ward identity 源自连续性方程，不满足意味着粒子数不守恒。因此，物理上有意义的近似必须遵守 Ward identity。在此不推导 Ward identity，只应用其导出的规则：若一个图在 Σ^{irr} 中，那么对应的图一定在 Λ^{irr} 中。

若我们考虑一阶 Born 近似和 RPA 近似，则有：

$$\Lambda^{irr} = \text{[shaded square]} \approx \text{[dashed line with star]} + \text{[wavy line]} \equiv \tilde{W}, \quad (16.22)$$

此时， Γ 的积分方程为：

$$\Gamma_x(\tilde{k} + \tilde{q}, \tilde{k}) = \Gamma_{0,x}(\tilde{k} + \tilde{q}, \tilde{k}) + \int d\tilde{q}' \tilde{W}(\tilde{q}') \mathcal{G}(\tilde{k} + \tilde{q}') \mathcal{G}(\tilde{k} + \tilde{q}' + \tilde{q}) \Gamma_x(\tilde{k} + \tilde{q}' + \tilde{q}, \tilde{k}) \quad (16.23)$$

其中

$$\tilde{W}(\tilde{q}) = W^{RPA}(\tilde{q}) + n_{imp} \frac{u(\mathbf{q})}{\epsilon^{RPA}(q, 0)} \frac{u(-\mathbf{q})}{\epsilon^{RPA}(-q, 0)} \delta_{q_n, 0} \quad (16.24)$$

这种特殊的近似也被称为阶梯和，将 (16.22) 插入到 (16.19) 的第一行，这个名字的意义会更加清晰。为清晰起见，只考虑杂质散射线：

$$\Pi_{xx}(\tilde{q}) = \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]} + \text{[diagram 3]} + \text{[diagram 4]} + \dots \quad (16.25)$$

这组阶梯图的顶点修正称为扩散。