Краткие сообщения по физике № 10 1980

ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. А. Рухадзе, В. Ю. Шафер

УДК 533.9

Получены нерелятивистские формулы для равновесной вигнеровской функции распределения электронов во внешнем однородном магнитном поле в приближении свободного электронного газа и с учетом кулоновского обмена между электронами. В простейшем случае квантового предела получено выражение для обменной эффективной массы квазичастиц.

Вигнеровское представление матрицы плотности (называемое ниже функцией распределения - ФР) в силу своей аналогии с классической ФР является удобным инструментом исследования равновесных и кинетических свойств многочастичных систем. В данной работе строится нерелятивистская равновесная ФР электронного газа во внешнем однородном магнитном поле в приближениях самосогласованного поля Хартри (свободные электроны + однородный компенсирующий фон ионов) и Хартри-Фока (с учетом кулоновского обмена между электронами).

I. Приближение Хартри. Вигнеровская ФР заряженных частиц в неоднородном магнитном поле выражается через матрицу плотности по формуле /I/

$$F(\vec{R},\vec{P}) = \int d\vec{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{r}\right)\rho\left(\vec{R}+\frac{\vec{r}}{2},\ \vec{R}-\frac{\vec{r}}{2}\right), \qquad (I)$$

где $\vec{P} = \vec{p} + (e/c)\vec{A}(\vec{R})$, $\vec{p}$ - кинематический импульс, $\vec{A}(\vec{R}) = (1/2)[\vec{B},\vec{R}]$, $\vec{B}$ - магнитная индукция. В свою очередь, матрица плотности в приближении самосогласованного поля имеет вид:

$$\rho(\bar{r},\bar{r}') = \sum_j f(E_j)\varphi_j^*(\bar{r}')\varphi_j(\bar{r}), \tag{2}$$

где $f(E_j) = [1 + \exp\beta(E_j - \zeta)]^{-1}$, $\beta = 1/T$ – обратная температура, ζ – химпотенциал, а $\varphi_j(\bar{r})$ и E_j – волновая функция и энергия электрона в состоянии j.

Для вычисления ФР в приближении Хартри используем в качестве φ_j, E_j известные /2/ волновые функции и уровни энергии свободного электрона в магнитном поле, а к функции $f(E_j)$ применим, следуя /3/, двухстороннее преобразование Лапласа

$$\begin{gathered} f(\zeta) = [1 + \exp(-\zeta)]^{-1} = (2\pi i)^{-1} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \tilde{f}(z)\exp(\zeta z)dz, \\ 0 < \sigma = \operatorname{Re} z < 1, \\ \tilde{f}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\zeta)\exp(-\zeta z)d\zeta = \pi/\sin\pi z. \end{gathered} \tag{3}$$

В результате получим (магнитное поле направлено вдоль оси Oz):

$$F_\lambda(\bar{p}) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{\pi yz}{\sin(\pi yz)} \frac{\exp\left[z(x-\lambda-p_z^2/m\hbar\Omega) - p_\perp^2 \operatorname{th} z/m\hbar\Omega\right]}{z \operatorname{ch} z} dz. \tag{4}$$

Здесь $0 < \sigma = \operatorname{Re} z < 1/y$ (контур C), $\Omega = |e|B/mc$ – циклотронная частота; $x = 2\zeta/\hbar\Omega$, $y = 2T/\hbar\Omega$ – химпотенциал и температура в единицах $\hbar\Omega/2$; $p_\perp^2 = p_x^2 + p_y^2$; $\lambda = \pm\, \operatorname{sign}(e)m/m_0$ – спиновое квантовое число; m, m_0 – эффективная кинетическая и "спиновая" массы электронов.

ФР нормируется на плотность числа частиц:

$$n = (2\pi\hbar)^{-3}\sum_\lambda \int d\bar{p}F_\lambda(\bar{p}). \tag{6}$$

Вычислив интеграл (6), получим условие нормировки

$$\left(\frac{B_0}{B}\right)^{3/2} = \frac{\Gamma(1 + 3/2)}{2\pi i}\int_C \frac{\pi yz}{\sin(\pi yz)} \frac{\exp(xz)\operatorname{ch}(|\lambda|z)}{z^{3/2} \operatorname{sh} z} dz, \tag{7}$$

где $B_0 = (3\pi^2)^{2/3}\hbar c n^{2/3}/|e|$.

В предельных случаях максвелловской статистики (невырождены электроны на всех уровнях Ландау, начиная с нулевого) и фермиевской статистики (при T = 0) ФР имеет вид:

а) Невырожденный случай

$$F(\vec{p}) = \frac{(2\pi\hbar)^3 n}{(2\pi m)^{3/2} T^{1/2} E_\perp(T,\Omega)} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2mT} - \frac{p_\perp^2}{2mE_\perp(T,\Omega)}\right), \qquad (8)$$

где $E_\perp(T,\Omega) = (\hbar\Omega/2)\mathrm{cth}(\hbar\Omega/2T)$ средняя энергия поперечного движения. Заметим, что критерий полного снятия вырождения зависит от магнитного поля:

$$\frac{E_0^{3/2}}{T^{1/2}E_\perp(T,\Omega)} \ll 1, \qquad (9)$$

где $E_0 = (3\pi^2)^{2/3}\hbar^2 n^{2/3}/2m$ энергия Ферми при B = 0.

б) Полное вырождение (T = 0)

$$F_\lambda(\vec{p}) = 2\exp(-p_\perp^2/m\hbar\Omega)\sum_{s=0}^{q}(-1)^s L_s(2p_\perp^2/m\hbar\Omega)\Theta\left[p_z^F(s,\lambda) - |p_z|\right],$$

$$p_z^F(s,\lambda) = (m\hbar\Omega)^{1/2}\sqrt{x-(2s+1+\lambda)}, \quad \Theta(\xi) = \begin{cases} 1, & \text{при } \xi \geq 0, \\ 0, & \text{при } \xi < 0, \end{cases} \qquad (10)$$

$$n = (2\pi\hbar)^{-3} 4\pi (m\hbar\Omega)^{3/2} \sum_\lambda \sum_{s=0}^{q} \sqrt{x-(2s+1+\lambda)}. \qquad (11)$$

Здесь L_s – полином Лагерра. $p_z^F(s,\lambda)$ – фермиевский импульс электронов, принадлежащих s-тому уровню Ландау, а q – номер последнего занятого уровня, удовлетворяющий условию $2q+1+\lambda < x \leq 2(q+1)+1+\lambda$.

Из (10) видно, что ферми-поверхность электронного газа в квантующем магнитном поле представляет собой совокупность $2(q+1)$ плоскостей, перпендикулярных направлению магнитного поля и пересекающих ось p_z в точках $p_z = \pm p_z^F(s)$, $s = 0,1,2\ldots,q$ (для упрощения принятого $\lambda = 0$), а не набор коаксиальных цилиндров, вписанных в сферу Ферми, как часто изображают.

Интеграл (4) вычисляется точно и при произвольных температурах:

$$F_\lambda(\vec{p}) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{2(-1)^s \exp(-p_\perp^2/m\hbar\Omega) L_s(2p_\perp^2/m\hbar\Omega)}{1 + \exp\left[\beta(p_z^2/2m + \hbar\Omega(s + 1/2 + \lambda/2) - \zeta)\right]}. \tag{I2}$$

В таком виде (I2) ФР получена в работе /4/.

2. <u>Приближение Хартри-Фока.</u> ФР с учетом обмена будем строить путем решения уравнения движения для равновесных температурных функций Грина в аппроксимации Хартри-Фока /5/. Для электронов в однородном магнитном поле это уравнение в нерелятивистском случае имеет вид

$$\hat{L}(1)G(1,1') = \hbar\delta(1-1') + \int d\vec{r}_2 V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)G(2,1')\Big|_{\tau_2=\tau_1},$$

$$\hat{L}(1) \equiv \hat{L}(\vec{r}_1,\tau_1) = i\hbar(\partial/\partial\tau_1) - (1/2m)\left[\hat{\vec{P}}_1 - (e/c)\vec{A}(\vec{r}_1)\right]^2 - \mu_0 B,$$

$$0 \leqslant i\tau \leqslant \beta,$$

$$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = - v_{ee}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\rho(\vec{r}_1,\vec{r}_2). \tag{I3}$$

Здесь $G(1,2) \equiv G_\lambda(\vec{r}_1,\vec{r}_2;\tau_1 - \tau_2)$ – функция Грина электронов с определенным значением спинового квантового числа λ; $\hat{\vec{P}}_r = - i\hbar\nabla_r$; $\mu_0 = \mathrm{sign}(\lambda)|e|\hbar/2m_0c$; $v_{ee}(\vec{r})$ – потенциал межэлектронного взаимодействия. Для функции Грина без учета обмена имеем:

$$\hat{L}(1)G_0(1,1') = \hbar\delta(1-1'). \tag{I4}$$

Переходя от (I3) к эквивалентному интегральному уравнению для фурье-коэффициентов

$$G(\vec{r},\vec{r}';Z_\nu) = \int_0^{-i\beta} G(\vec{r},\vec{r}';\tau)\exp(iZ_\nu\tau)d\tau,$$

$$Z_\nu = \pi\nu/(-i\beta) + \zeta, \quad \nu = \pm 1, \pm 3, \ldots, \tag{I5}$$

(ζ – химпотенциал), получим

$$G(\vec{r},\vec{r}';Z_\nu) =$$

$$= G_0(\vec{r},\vec{r}';Z_\nu) + \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 G_0(\vec{r},\vec{r}_1;Z_\nu)V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)G(\vec{r}_2,\vec{r}';Z_\nu); \qquad (16)$$

причем функция $G_0(Z_\nu)$ известна:

$$G_0(\vec{r},\vec{r}';Z_\nu) = \sum_j \frac{\varphi_j^*(\vec{r}')\varphi_j(\vec{r})}{Z_\nu - E_j}. \qquad (17)$$

Решение уравнения (16) записывается формально в виде бесконечного итерационного ряда по степеням потенциала V. Действуя на этот ряд оператором

$$\hat{L}_\nu = \lim_{\tau \to +0i} (1/\beta) \sum_\nu \exp(-iZ_\nu \tau), \qquad (18)$$

преобразующим функцию Грина $G(\vec{r},\vec{r}';Z_\nu)$ в матрицу плотности $\rho(\vec{r},\vec{r}')$,получим разложение последней в бесконечный ряд теории возмущений, который легко суммируется:

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') = \sum_j \varphi_j^*(\vec{r}')\varphi_j(\vec{r})f(E_j + \langle j|V|j\rangle). \qquad (19)$$

Переходя, наконец, от матрицы плотности к ФР по формуле (1), находим окончательно:

$$F_\lambda(\vec{p}) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{2(-1)^s \exp(-p_\perp^2/m\hbar\Omega)L_s(2p_\perp^2/m\hbar\Omega)}{1 + \exp\left[\beta(E^{X\Phi} - \xi)\right]},$$

$$E^{X\Phi}(p_z,s,\lambda) = E^X(p_z,s,\lambda) + \langle p_z,s,\lambda|V|p_z,s,\lambda\rangle,$$

$$(20)$$

$$E^X = p_z^2/2m + \hbar\Omega(s + 1/2 + \lambda/2),$$

$$\langle|V|\rangle = -(2\pi\hbar)^{-4}(m\Omega)^{-1}\int d\vec{p}'d\vec{p}''\delta(p_z'-p_z)\left[2(-1)^s\exp(-p_\perp'^2/m\hbar\Omega)\times\right.$$

$$\left.\times L_s(2p_\perp'^2/m\hbar\Omega)\right]v_{ee}(\vec{p}'-\vec{p}'')F_\lambda(\vec{p}'').$$

Получилась типичная ферми-жидкостная формула: ФР квазичастиц имеет тот же вид (I2), что и у свободных частиц, но закон дисперсии оказывается зависящим от самой ФР.

Применим полученные формулы для вычисления обменной эффективной массы квазичастиц на ферми-поверхности в простейшем случае квантового предела ($s = 0$). Положим также для простоты $\lambda = 0$. Подобно тому, как это делается в теории изотропной ферми-жидкости /5/, определим эффективную массу соотношением

$$m^* = p_z^F \left(\frac{\partial E^F(p_z)}{\partial p_z} \bigg|_{p_z = p_z^F} \right)^{-1}, \tag{2I}$$

где $E^F(p_z)$ энергия квазичастиц при $T = 0$. В качестве $v_{ee}(\vec{p})$ возьмем фурье-образ экранированного кулоновского потенциала

$$v_{ee}(\vec{p}) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{p^2 \varepsilon(p/\hbar, 0)} \tag{22}$$

с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\vec{k},0)$, вычисленной в длинноволновом приближении для газа свободных электронов:

$$\varepsilon(k,0) = 1 + (kr_D)^{-2}, \quad r_D = r_D^F(\text{кв. пр.}) = (E_o/\hbar\Omega)(2E_o/9\pi n e^2)^{1/2}. \tag{23}$$

Выражение для дебаевского радиуса экранирования при $T = 0$ в квантовом пределе получается из общего соотношения $r_D = \left[4\pi e^2 (\partial n/\partial \mathcal{E})_T\right]^{-1/2}$ и условия нормировки (II) при $s = \lambda = 0$. В результате для эффективной массы имеем

$$(m/m^*) \cong 1 + (1/4)\gamma \ln\gamma, \quad \gamma = (9/2(9\pi)^{1/3}) e^2 n^{1/3} \hbar\Omega/E_o^2 \ll 1 \tag{24}$$

(оставлены лишь главные члены разложения по малому параметру γ). Малость γ следует из условия газовости $\eta \sim e^2 n^{1/3}/\langle E_{\text{кин}}\rangle \ll 1$, которое предполагается выполненным.

Для анализа ситуации в квантующем магнитном поле напишем газовый параметр в виде

$$\eta = e^2 n^{1/3} \left[(\partial n/\partial \varepsilon)_T / n\right]. \qquad (25)$$

Отсюда (и из (II)) условие газовости при T = 0 в квантовом пределе (реализуется при $\hbar\Omega > 0,76E_o$) будет

$$\eta^F(\text{кв. пр.}) = 9e^2 n^{1/3} (\hbar\Omega)^2 / 8E_o^3 \ll 1, \qquad (26)$$

что и оправдывает неравенство (24).

Для сравнения укажем, что в отсутствие магнитного поля для обменной эффективной массы получается то же выражение (24) с $\gamma_o = (3/(9\pi)^{1/3}) e^2 n^{1/3}/E_o$ (газовый параметр при B = 0) вместо γ.

Поступила в редакцию
23 июня 1980 г.

Литература

1. Р. Л. Стратонович, ДАН СССР, 109, № 1, 72 (1956).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, "Наука", М., 1974 г., стр. 524.
3. Ю. Б. Румер, ЖЭТФ, 18, 1081 (1948).
4. П. Е. Зильберман, ФТТ, 12, 1697 (1970).
5. Л. Каданов, Г. Бейм, Квантовая статистическая механика, "Мир", М., 1964 г.