
ЛЕКЦИЯ 5

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОМЕНТОВ. ЭЛЕКТРОННЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

1. Применение метода моментов в решении уравнения Больцмана

Если работать в τ -приближении, то уравнение Больцмана записывается в следующем виде:

$$eE \frac{\partial f}{\partial p} = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}).$$

Его решение:

$$f(p) = f^{(0)} + \tau eE \frac{\partial f}{\partial p} = f^{(0)}(p + \tau eE)$$

— разложение равновесной функции со сдвинутым началом координат в ряд Тейлора ($\delta p = eE\tau$).

Рассмотрим, что произойдет с поверхностью Ферми.

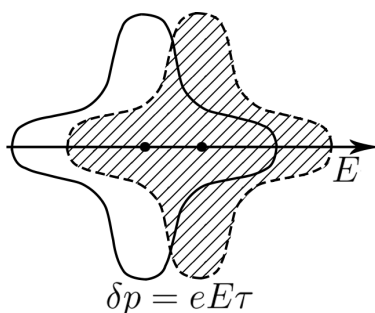


Рис. 5.1



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

В τ -приближении получим смещение поверхности Ферми. Занятые состояния будут теперь не симметричными, а сдвинутыми на величину:

$$\delta p = eE\tau.$$

Чем больше τ , тем сильнее в электрическом поле без столкновений электрон разгоняется. А когда после этого произойдет столкновение, импульс опять прыгает на поверхность Ферми, то есть ускорение прекращается.

В чем недостаток этого решения? В случае анизотропной поверхности Ферми разные участки Ферми должны иметь свое время свободного пробега. Поэтому в тех местах, где столкновение происходит наиболее часто, распределение сдвигается почти на равновесное значение. А у двух других концов поверхности значение τ больше, и поэтому поверхность Ферми станет более круглой.

Видно, что происходит деформация вида поверхности Ферми, если включается электрическое поле при наличии столкновений. Чтобы увидеть, как именно деформируется поверхность Ферми при наличии столкновений, нужно более точно решать это уравнение, отказаться от τ -приближения.

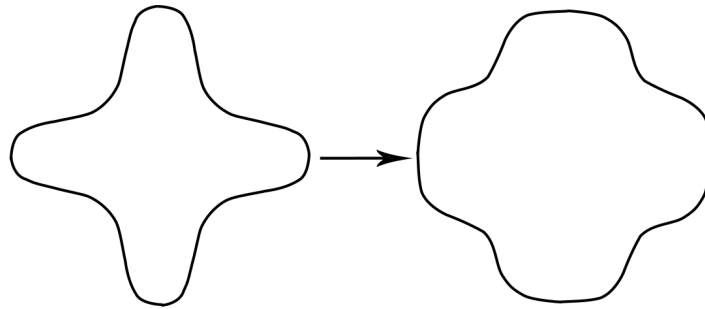


Рис. 5.2

$$eE \frac{\partial f}{\partial p} = - \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| \hat{\Omega} \chi,$$

$$f = f^{(0)} + \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| \chi.$$

$$-e \vec{E} \vec{v} \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| = - \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| \hat{\Omega} \chi.$$

Если обозначить $N = eE\vec{v}$, то получим следующий вид линеаризованного уравнения Больцмана:

$$N = \hat{\Omega} \vec{\chi}.$$

Его нельзя решить точно, поэтому применим метод моментов.

$$\langle \chi N \rangle = \langle \chi \hat{\Omega} \chi \rangle, \text{ где усреднение ведется по поверхности Ферми.}$$

Метод моментов гласит, что из всех функций, нормированных этим условием, наилучшее приближение будет давать та функция, для которой $\langle \chi \hat{\Omega} \chi \rangle$ максимально.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Выражение для тока:

$$j = \sum ev(f - f^{(0)}) = \sum e\vec{v} \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| \vec{\chi},$$

$$j = \sigma E.$$

Электропроводность пропорциональна среднему значению по поверхности Ферми от f и χ :

$$\sigma \sim \langle \vec{v}\vec{\chi} \rangle.$$

τ -приближение дает следующее:

$$\sigma_1 = \frac{ne^2\tau}{m},$$

а дальше следует использовать моменты высших порядков.

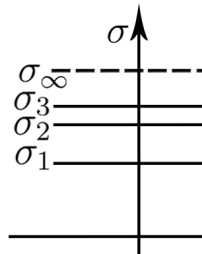


Рис. 5.3

Ограничимся двухмоментным приближением.

Нужно найти такой вид функции χ , чтобы электропроводность была максимальна, из всех возможных функций, имеющих упомянутую нормировку.

$$\chi = A_1\phi_1 + A_2\phi_2.$$

Чтобы разложение было полным, нужно потребовать ортонормированность базисных функций:

$$\langle \phi_i\phi_j \rangle = \delta_{ij}.$$

В двухмоментном приближении уравнение Больцмана, если для краткости опустить множитель $e\vec{E}$, имеет вид:

$$v \simeq \hat{\Omega}(A_1\phi_1 + A_2\phi_2).$$

Домножим на ϕ_1 :

$$\langle \phi_1 v \rangle = \langle \phi_1 \hat{\Omega} \phi_1 \rangle + A_2 \langle \phi_1 \hat{\Omega} \phi_2 \rangle.$$

В задаче электропроводности в качестве первой функции выбирают скорость. Получаем:

$$\langle v^2 \rangle = A_1 \Omega_{11} + A_2 \Omega_{12},$$

где $\Omega_{ik} = \langle \phi_i \hat{\Omega} \phi_j \rangle = \Omega_{ki}$.

Теперь домножим выражение на ϕ_2 . В задаче теплопроводности левая часть уравнения Больцмана есть поток тепла — $V\epsilon$ с точностью до константы. Все члены разложения

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

этого уравнения есть вектора. Они должны быть нечетными функциями от скорости. Значит, функция ортогональна к ϕ_1 .

$$\phi_2 \sim \vec{v}(\epsilon - \epsilon_f),$$

где ϵ_f есть энергия Ферми.

Записываем второе уравнение:

$$0 = A_1\Omega_{12} + A_2\Omega_{22}.$$

Решим систему.

$$A_2 = -A_1 \frac{\Omega_{12}}{\Omega_{22}}$$

— второй коэффициент отличен от нуля только в случае, если оператор столкновений переводит функцию ϕ_1 в функцию ϕ_2 .

$$K \sim A_1 = \frac{\langle v^2 \rangle}{\Omega_{11} - \Omega_{12}^2 / \Omega_{22}}.$$

$$K \sim \sigma = \frac{1}{\rho},$$

$$\rho^{(2)} \sim \Omega_{11} - \frac{\Omega_{12}^2}{\Omega_{22}}.$$

Видно, что $\rho^{(2)} < \rho^{(1)}$, т. к. $\rho^{(1)} = \Omega_{11}$.

Теперь рассмотрим, как метод моментов проявляется на задаче электропроводности при рассеянии электронов на фононах.

$$\text{St}f = \left| \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon} \right| \hat{\Omega} \chi.$$

Есть два процесса. Импульс p «поглощает» фонон q , и получается p' , а с другой стороны, был p , теперь испускается $-q$, и получается опять p' . В обоих случаях $p' = p + q$.

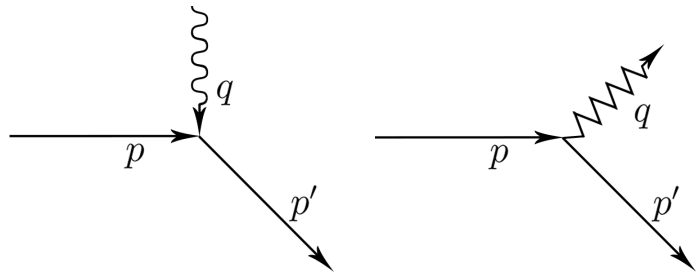


Рис. 5.4

Распишем матричный элемент:

$$\langle \phi_1 | \hat{\Omega} \phi_2 \rangle = \sum w_q \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'} + \omega_q) N_q f_p (1 - f_{p'}) (\phi_1 - \phi'_1) (\phi_2 - \phi'_2),$$

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

где w_q — вероятность рассеяния, а N_q — число фононов.

Если рассмотреть Ω_{11} , то этот элемент окажется пропорциональным квадрату $(\phi_1 - \phi'_1)$:

$$\Omega_{11} = (\phi_1 - \phi'_1)^2.$$

Диагональные элементы являются положительно определенными, благодаря чему имеем симметричный, положительно определенный тензор.

Используем одномоментное приближение для сопротивления. Оно складывается из рассеяния на примесях и на фононах:

$$\rho^{(1)} = \Omega_{11} = \Omega_{im} + \Omega_{ph}.$$

Отсюда получаем правило Маттисена:

$$\rho_{total} = \rho_{im} + \rho_{ph}.$$

Как ρ_{ph} зависит от температуры?

Рассмотрим поверхность Ферми. Для простоты будет считать, что она сферическая. Случай с ρ_{im} будет описываться поворотами по поверхности Ферми, поскольку примеси не меняют энергию электронов.

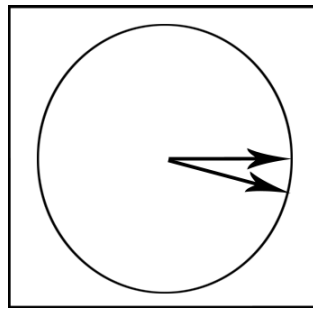


Рис. 5.5

$\Omega_{ph} \sim N_{ph} \sim \frac{\omega_q}{T}$ — это справедливо при высоких температурах.

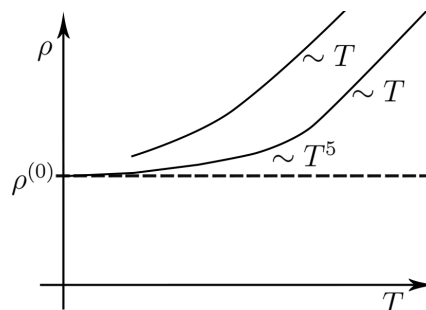


Рис. 5.6

При низких температурах кривая плавно переходит на остаточное сопротивление. Отсюда, казалось бы, не видна необходимость двухмоментного приближения, однако,

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

надо иметь в виду, что еще имеются неучтенные важные процессы, так называемые U -процессы. В случае процессов переброса удобно рассматривать такую поверхность Ферми (рис. 5.7). Кроме столкновений (испускание или поглощение электроном фонона) с изменением на небольшой импульс существуют процессы с перебросом. Первые называются N -процессами, а вторые — U -процессами. Дело в том, что обратное пространство, пространство импульсов — это периодическая функция от квазиимпульса, и поэтому пространство с импульсом p и пространство с импульсом $p + b$, где b — обратный вектор решетки в импульсном пространстве — это одна и та же картинка. Поэтому наряду с нормальными процессами возможны и такие процессы, когда, с одной поверхности Ферми мы переходим на соседнюю. Если рассматриваемый процесс нормальный, то в его рамках поворот импульса на поверхности Ферми будет малым, поэтому при низких температурах нужно много столкновений, чтобы из конкретного направления перейти в направление под большим углом, когда скорость вдоль электрического поля исчезнет. Частота столкновений пропорциональна числу фононов, и при низких температурах закон $\rho \sim T$ меняется на закон $\rho \sim T^5$.

Закон $\sim T^5$ вместо $\sim T^3$ обусловлен тем, что для эффективного торможения при низких температурах требуется $\frac{1}{T^2}$ столкновений.

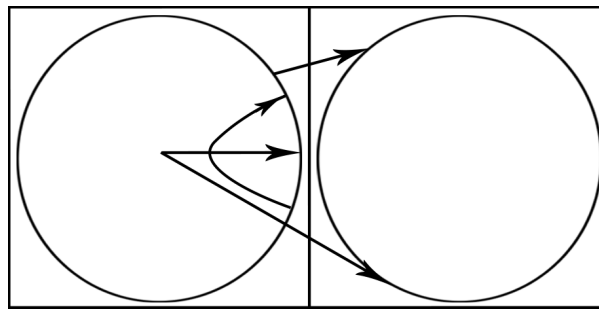


Рис. 5.7

Если учесть U -процессы, то закон $\sim T$ затянется. В частности, если рассматривать переход от $\sim T$ к $\sim T^5$, если не учитывать U -процессы, происходит тогда, когда осуществляется переход через температуру порядка дебаевской температуры, а дебаевская температура порядка комнатной, поэтому переход от одного типа зависимости к другому происходит уже при комнатных температурах.

В щелочных металлах электронов мало, поэтому поверхность Ферми маленькая, и U -процессы роли не играют. Теперь возьмем вместо щелочного металла переходный металл, или даже просто алюминий. В алюминии уже поверхность Ферми подходит, так как там 3 атома в элементарной ячейке.

Есть так называемая экстраполяционная формула Грюнайзена, которая для случая отсутствия U -процессов описывает сумму двух членов: $\sim T$ и $\sim T^5$. Оказывается, что в эксперименте в алюминии, с точки зрения Грюнайзена, переход в закон $\sim T^5$ должен происходить при температурах порядка 100 К, но оказывается, что в алюминии вплоть до 10 К остается линейный закон, и только потом уже переход на остаточные сопротивления. Получается, U -процессы играют очень важную роль в металлах, в которых много атомов в элементарной ячейке, то есть в сложных переходных и редкоземельных металлах.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Роль двухмоментного приближения очень существенна даже в одномоментном приближении опять таки из-за процессов переброса, потому что важны все процессы. Разные участки Ферми имеют разную длину свободного пробега, разное время свободного пробега, разную частоту свободного пробега. Поэтому Ω_{11} — плохое приближение. Нужно обязательно учитывать второе выражение $\frac{\Omega_{12}}{\Omega_{22}}$, которое сильно уменьшает электросопротивление.

Теперь рассмотрим металл с примесями. Для рассеяния электронов на примесях уравнение Больцмана решается точно, и получается тривиальный ответ, что частота столкновений от температуры не зависит и пропорциональна концентрации примесей c . А $\Omega_{\text{фононное}}$, если рассматривать низкие температуры, есть T^5 . Ясно, что при низких температурах Ω_{11} сравнивается с $\Omega_{\text{фононное}}$, и тогда одномоментное приближение является очень плохим, потому что нужно учитывать в этом случае Ω_{12} . Потому что для примесей, как известно из расчетов, неравновесная часть, пропорциональная скорости, является точным отклонением от равновесия. А для случая фононов это не так. Не меньшую роль играет и член $(\epsilon - \epsilon_f)v$. Ω_{12} становится сравнимой с Ω_{22} , член, полученный из второго приближения, становится существенным и сравнивается с Ω_{11} . Поэтому его нужно учитывать. И тогда получается, что, если взять отклонение от правила Матиссена:

$$\Delta = \frac{\rho - \rho_{\text{им}} - \rho_{\text{фотонное}}}{\rho},$$

где ρ есть наблюдаемое сопротивление, и рассмотреть его зависимость от температуры, то увидим, что это отклонение имеет максимум при какой-то температуре.

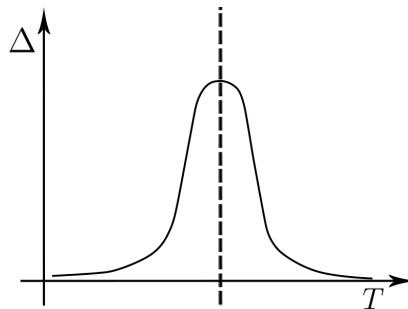


Рис. 5.8

При высоких температурах уже примеси роли не играют. Отклонение максимально тогда, когда $\rho_{\text{им}}$ и $\rho_{\text{фотонное}}$ сравниваются друг с другом. Температура T_c , при которой отклонение максимално, в соответствии с экспериментом есть $T_c \sim c^1/5$, то есть зависимость от концентрации примесей слабая.

2. Квантовые кинетические явления

Начиная с этой части, начнем рассматривать электроны и другие неклассические системы. Постоянная Планка и поверхность Ферми обусловлены квантовой природой электронов, но главные характеристики электронного газа $V = p/m$, $\epsilon = p^2/2m$ саму постоянную Планка не содержат. Её содержат только законы сохранения; там она существенна. Поступательные движения носят квазиклассичный характер, поэтому теплоемкость, если есть только поступательные степени свободы, такая же, как и в классическом газе,

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

если рассматривать бозе-газ. На самом деле, в случае электронов все будет несколько иначе из-за того, что все происходит только на поверхности Ферми, но опять-таки это из-за статистики, а не из-за самого квантового характера движения.

Перейдём к квантовым кинетическим явлениям. Функция распределения в больцмановском случае:

$$f \sim \exp\left(-\frac{p^2}{2mT}\right)$$

— непрерывная функция, определенная при всех импульсах. Газ с поступательными степенями свободы есть очень сложное образование, потому что импульс p принимает макроскопическое число значений.

У электронного спина есть только 2 компоненты: $+1/2$ и $-1/2$. Пусть f_{++} есть вероятность того, что спин направлен вверх, а f_{--} — вероятность того, что спин направлен вниз. Их сумма равна единице. Функция распределения есть матрица:

$$\begin{pmatrix} f_{++} & f_{+-} \\ f_{-+} & f_{--} \end{pmatrix}$$

Выясним, какой смысл имеют недиагональные элементы. M_x есть среднее значение от магнетона Бора, помноженного на матрицу Паули в направлении σ_x . Среднее — это есть шпур двух матриц: матрицы f и матрицы σ_x :

$$M_x = \langle \mu_B \hat{\sigma}_x \rangle = \begin{pmatrix} f_{++} & f_{+-} \\ f_{-+} & f_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \mu_B (f_{+-} + f_{-+}) = 2\mu_B \Re(f_{+-})$$

— f_{+-} и f_{-+} отличаются лишь комплексным сопряжением, т. к. матрица из f является эрмитовой.

3. Электронный пармагнитный резонанс

Рассматривая такие явления как электронный парамагнитный резонанс или спиновое эхо, необходимо писать кинетическое уравнение для такой величины, как двухрядная матрица распределения спинов по направлениям.

Пусть имеется немагнитный материал, в котором есть магнитные примеси (вообще говоря, не со спином $1/2$, а с большим, но для простоты будем рассматривать спин $1/2$). Парамагнитный резонанс получается, когда на эти спины наложено переменное поле, а спиновое эхо будет наблюдаться во время релаксации этих спинов.

Если пренебречь столкновением спинов друг с другом, тогда имеем идеальный газ спинов и, естественно, восприимчивость будет очень просто вычисляться.

Пусть есть магнитное B поле по оси z , и пусть также есть слабое поле $B_1 \cos(\omega_1 t)$, направленное по оси x . Благодаря взаимодействию с x -компонентой начнется прецессия этого магнитного момента вокруг оси z и, ясное дело, что эффект будет максимальным тогда, когда ларморовская частота, частота прецессии, совпадет с ω_1 , то есть в этом случае будет крутиться и меняться в унисон магнитное поле и тогда произойдет парамагнитный резонанс. С точки зрения математики, произойдет такое явление как параметрический резонанс.

Запишем выражение для магнитного момента:

$$M_x = m_x N_{im}$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

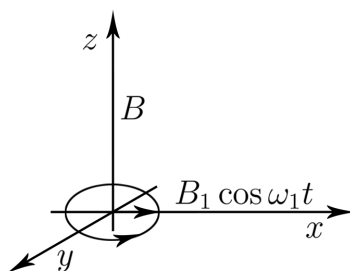


Рис. 5.9

— магнитный момент одного спина, умноженный на число примесей.

Функция распределения выражается как произведение независимых членов:

$$\rho = f_1 f_2 f_3 \dots,$$

и тогда можно записать уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + i\hbar[H, f] = 0 \text{ (если нет столкновений).}$$

$$H = -\mu_B B_z \hat{\sigma}_z - \mu_B \hat{\sigma}_x B_1 \cos(\omega_1 t).$$

$$\frac{\partial f_{++}}{\partial t} + 0 \cdot f_{++} - i\hbar B_x \mu_B \cos(\omega_1 t) [f, \sigma_x]_{++} - i\hbar \mu_B B_z [f, \sigma_z]_{++} = 0,$$

$$[f, \sigma_x]_{++} = \begin{pmatrix} f_{++} & f_{+-} \\ f_{-+} & f_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = f_{+-}.$$

Если есть столкновение электрона с примесями, можно пренебречь столкновениями с другими спинами. Главную роль играет столкновение с фононами, то есть фононы стучаются об атомы, и спин переворачивается, поэтому нужно написать в правой части уравнения Лиувилля

$$-\frac{1}{\tau_{11}} (f_{++} - f_{++}^{(0)})$$

— релаксация диагонального матричного элемента за счет столкновения на фононах.

Решение системы, описывающей парамагнитный резонанс, приведем в следующей лекции.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu