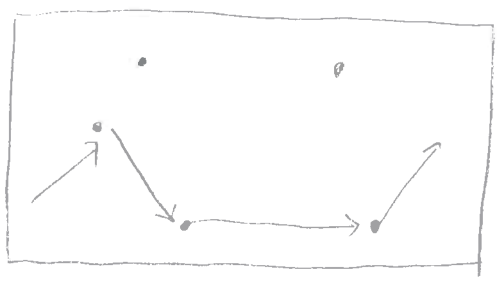
半导体
超导体 → 哈密顿清楚

材料 → 计算

Mahan 4.1

量子输运 quantum transport
- 粒子
- 自旋
- 电荷
- 轨道

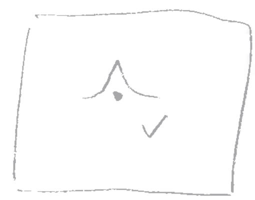
携带能量、动量、信息



晶体

杂质散射　　经典：Drude 模型
　　　　　　量子：格林函数方法

问题描述：在原点处有一个 $V(\vec r)$ 的杂质势场



$$\hat{H}\psi_\lambda(\vec r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)\right]\psi_\lambda(\vec r) = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda(\vec r)$$

① $\varepsilon_\lambda < 0$：定态，电子束缚态

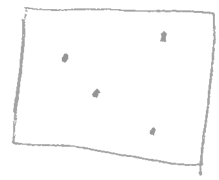
② $\varepsilon_\lambda > 0$：散射，电子散射态　（能量不变，动量被改变）

实际情况： 晶体中有若干杂质（N个）

a. $\frac{N}{V} = n \simeq O(1)$

b. 杂质随机分布（假定）

每个杂质可以分布在晶体的任何地方



杂质散射（格林函数方法）

目标：算由于散射带来的自能修正 $\begin{cases} \text{实部} \longrightarrow \text{能级移动（么<0→束缚）} \\ \text{虚部} \longrightarrow \text{电子寿命} \end{cases}$

杂质势场： $V_0(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} V(\vec{r} - \vec{R}_i)$ → 杂质位置

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_0(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$V_0(\vec{q}) = \int d\vec{r}\, V_0(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \sum_i \int d\vec{r}\, V(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$= \sum_i \int d\vec{r}\, V(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r} - \vec{R}_i)} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i}$$

$$= \sum_i V(\vec{q}) \underbrace{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_i}}_{\rho_i(\vec{q})} = \sum_i V(\vec{q}) \rho_i(\vec{q})$$

$$\rightarrow V_0(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left(\sum_i V(\vec{q}) \rho_i(\vec{q}) \right) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

电子哈密顿量：

$$\hat{V} \xrightarrow{\text{二次量子化}} \int \psi^{+}(\vec{r})\, V(\vec{r})\, \psi(\vec{r})\, d\vec{r} = \int \frac{1}{V}\sum_{\vec{q}\vec{k}\vec{k}'}\left(\sum_i V(\vec{q})\, \rho_i(\vec{q})\right) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \cdot \frac{1}{V} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\, \hat{C}^{+}_{\vec{k}',\sigma}\hat{C}_{\vec{k},\sigma}$$

$$\left(\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \underset{\text{自旋}}{\chi_\sigma}\right) \qquad = \frac{1}{V}\sum_{\vec{q}\vec{k}} \sum_i V(\vec{q})\, \rho_i(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \hat{C}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{C}_{\vec{k},\sigma}$$

杂质位形平均：
① 对所有样品作平均 [Kohn, Luttinger]
② 杂质移动

S矩阵：$S = T\exp\left[-\int_0^\beta V(\tau)\, d\tau\right]$ （虚时标度）

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} T\int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \underline{V(\tau_1) V(\tau_2) \cdots V(\tau_n)}\, d\tau_1 \cdots d\tau_n$$

位形平均：

$$\hat{S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} T\int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \underset{\text{尖括号表示位形平均}}{\langle \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)\cdots\hat{V}(\tau_n)\rangle}\, d\tau_1 \cdots d\tau_n$$

令 $f_n(\vec{q}_1, \vec{q}_2 \cdots \vec{q}_n) \equiv \overline{\rho_{i_1}(\vec{q}_1) \cdots \rho_{i_n}(\vec{q}_n)}$ [对 $\hat{V}(\tau)$ 中的 $\rho_i(\vec{q})$ 作空间平均]

一阶：$f_1(\vec{q}) = \left\langle \sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right\rangle = \sum_i \frac{1}{V} \underset{\delta_{\vec{q},0}}{\int d\vec{R}_i\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_i}}$

$$= \underset{\text{Impurity 数目}}{N_i}\, \delta_{\vec{q},0}$$

二阶：$f_2(\vec{q}_1,\vec{q}_2) = \overline{\rho_i(\vec{q}_1)\rho_i(\vec{q}_2)}$

$$= \left\langle \sum_{ij} e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i} e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j} \right\rangle$$

$$= \left\langle \sum_{i} e^{i(\vec{q}_1+\vec{q}_2)\cdot\vec{R}_i} \right\rangle + \left\langle \sum_{i\neq j} e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i} e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j} \right\rangle$$

$$= N_i\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2,0} + \sum_{i\neq j}\int \frac{d\vec{R}_i\,d\vec{R}_j}{V^2} e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i} e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}$$

$$= N_i\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2,0} + N_i(N_i-1)\,\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2,0}$$

三阶：（作业）

$$f_3(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3) = N_i\,\delta(\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3=0)$$

$$+ N_i(N_i-1)\left(\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2+\vec{q}_3,0} + \delta_{\vec{q}_2,0}\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_3,0} + \delta_{\vec{q}_3,0}\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2,0}\right)$$

$$+ N_i(N_i-1)(N_i-2)\,\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2,0}\,\delta_{\vec{q}_3,0}$$

N阶：

$$f_n(\vec{q}_1,\cdots,\vec{q}_n) = N_i\,\delta_{\sum\vec{q}} + N_i^2\,\delta_{\sum\vec{q}=0}\,\delta_{\sum\vec{q}=0}$$

$$+ N_i^3\,\delta_{\sum\vec{q}=0}\,\delta_{\sum\vec{q}=0}\,\delta_{\sum\vec{q}=0} + \cdots$$

证明三阶位形平均：

$$f_3(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3)=\overline{\rho_i(\vec{q}_1)\rho_j(\vec{q}_2)\rho_l(\vec{q}_3)}$$

$$=\sum_{ijl}\langle e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}\,e^{i\vec{q}_3\cdot\vec{R}_l}\rangle$$

当 $i\neq j\neq l$ 时，

$$\sum_{i\neq j\neq l}\langle e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}\,e^{i\vec{q}_3\cdot\vec{R}_l}\rangle$$

$$=\sum_{i\neq j\neq l}\int\frac{d\vec{R}_i\,d\vec{R}_j\,d\vec{R}_l}{V^3}\,e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}\,e^{i\vec{q}_3\cdot\vec{R}_l}$$

$$=\sum_{i\neq j\neq l}\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2,0}\,\delta_{\vec{q}_3,0}=N_i(N_i-1)(N_i-2)\,\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2,0}\,\delta_{\vec{q}_3,0}$$

当 $i\neq j=l$ 时，

$$\sum_{i\neq j=l}\langle e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}\,e^{i\vec{q}_3\cdot\vec{R}_l}\rangle$$

$$=\sum_{i\neq j=l}\int\frac{d\vec{R}_i\,d\vec{R}_j}{V^2}\,e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i(\vec{q}_2+\vec{q}_3)\cdot\vec{R}_j}=N_i(N_i-1)\,\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2+\vec{q}_3,0}$$

当 $i=j=l$ 时

$$\sum_{i=j=l}\langle e^{i\vec{q}_1\cdot\vec{R}_i}\,e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{R}_j}\,e^{i\vec{q}_3\cdot\vec{R}_l}\rangle$$

$$=\sum_{i=j=l}\int\frac{d\vec{R}_i}{V}\,e^{i(\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3)\cdot\vec{R}_i}=N_i\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3,0}$$

$$f_3(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3)\approx N_i\,\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3,0}+N_i^2\left(\delta_{\vec{q}_1,0}\delta_{\vec{q}_2+\vec{q}_3,0}+\delta_{\vec{q}_2,0}\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_3,0}+\delta_{\vec{q}_3,0}\delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2,0}\right)$$
$$+N_i^3\,\delta_{\vec{q}_1,0}\,\delta_{\vec{q}_2,0}\,\delta_{\vec{q}_3,0}$$