03,12

О включении „статистической“ силы в гамильтониан

© Р.Г. Агаева

Институт физики НАН Азербайджана,
Баку, Азербайджан

E-mail: a.rana@physics.ab.az

(Поступила в Редакцию 5 ноября 2013 г.
В окончательной редакции 27 января 2014 г.)

Предложен метод включения „статистической“ силы в гамильтониан, основанный на методе аналогий. С помощью предложенного метода рассчитан термомагнитный ток. Данный метод пригоден для расчетов как в объемных, так и в низкоразмерных образцах.

1. Введение

Термомагнитный ток в поперечном квантующем магнитном поле был рассчитан многими авторами. Подробный обзор публикаций по этой теме содержится в [1].

Расчет термомагнитного тока в поперечном квантующем магнитном поле связан с принципиальными трудностями. С одной стороны, кинетическое уравнение в поперечном квантующем магнитном поле неприменимо. С другой стороны, термомагнитный ток обусловлен действием на носители зарядов не динамической, а „статистической“ силы. В этом случае „статистическая“ сила пропорциональна градиенту температуры, а как вводить „статистическую“ силу в гамильтониан, было неизвестно. Как следствие, отпадал прямой путь расчета термомагнитного тока в квантующем магнитном поле. Поэтому возникала необходимость поиска окольных путей для решения этой задачи.

Например, в [2] был предложен метод расчета термомагнитного тока в квантующем магнитном поле. Этот метод основывался на предположении, что при локальном термодинамическом равновесии температура может рассматриваться как функция центра циклотронной орбиты электрона [1]. Но полученное в [2] выражение для поперечного термомагнитного тока, перпендикулярного градиенту температуры и квантующему магнитному полю, не удовлетворяло соотношению Эйнштейна. Образцов [3] показал, что необходимо дополнительно учитывать поверхностные токи при расчете поперечного термомагнитного тока в квантовом случае. Эти поверхностные токи связаны с вкладом в ток электронов, движущихся по незамкнутым орбитам вблизи границы образца.

„Статистическая“ сила была впервые включена в гамильтониан в работе [4] при расчете флуктуаций термомагнитного тока. Расчет недиссипативного термомагнитного тока в поперечном квантующем магнитном поле был проведен для специального случая, а именно для объемного образца. Этот расчет основывался на предположении, что наличие температурного градиента в системе аналогично влиянию на нее некоторого внешнего электрического поля. Предложенный подход, позволяющий включить „статистическую“ силу в гамильтониан, представляет собой новый метод расчета термомагнитного тока. Назовем его методом эффективного гамильтониана (МЭГ). В МЭГ в гамильтониан включается не сам градиент температуры как таковой, а градиент некого потенциала, воспроизводящего в нужном приближении эффекты, вызываемые градиентом температуры. И этому потенциалу соответствует некая „статистическая“ сила, носящая фиктивный характер.

Дальнейшие расчеты показали, что МЭГ может быть успешно применен не только в частном случае [4], но и при расчетах термомагнитного тока в различных системах, например в квантовой проволоке [5] и в квантовой пленке (см. далее). Во всех случаях результаты, полученные для термомагнитного тока с помощью МЭГ, совпадают с результатами, вычисленными методами, не включающими „статистическую“ силу в гамильтониан (см., например, [3,6,7]).

2. Общая формула для термомагнитного тока в МЭГ

Приведем общую формулу для расчета термомагнитного тока, полученную с помощью МЭГ. Мы используем [4] для вывода этой формулы.

В МЭГ гамильтониан представляется как

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - k\mathbf{r}\,\mathrm{grad}\,T. \qquad (1)$$

Второе слагаемое в уравнении (1) связано с учетом влияния градиента температуры на гамильтониан равновесной системы $\hat{H}_0$. По аналогии с электрическим полем полагаем, что температура является потенциалом некоторого внешнего поля, напряженность которого есть $-\mathrm{grad}\,T$, а соответствующая потенциальная энергия имеет вид $-k\mathbf{r}\,\mathrm{grad}\,T$. Таким образом, при построении гамильтониана (1) исходим из формального соответствия электростатического потенциала φ температуре T и абсолютного значения заряда электрона e постоянной Больцмана k.

Следует отметить, что соответствие $\varphi \leftrightarrow T$ в методе аналогий ранее встречалось, а соответствие $e \leftrightarrow k$, как нам известно, установлено впервые.

В МЭГ термомагнитный ток в поперечном квантующем магнитном поле при наличии малого однородного градиента температуры дается следующей формулой (см. [4]):

$$j_y = -(ien/\hbar)Tr\big(\hat{\rho}_0[\hat{H}_0, y] + \hat{\rho}_0[\hat{V}, y] + \hat{\rho}_1[\hat{H}_0, y]\big). \quad (2)$$

Здесь $(-e)$ — заряд электрона; квантующее магнитное поле направлено вдоль оси z; $T = T(x)$; j_y — ток вдоль оси y; n — плотность электронов проводимости; координата x изменяется в интервале $-L_x/2 < x < L_x/2$;

$$\hat{V} = -k\delta T_0\left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right) - \frac{\delta}{2}\Bigg[\big(\hat{H}_0 - \xi\big) \times \left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right)\big(\hat{H}_0 - \xi\big)\Bigg], \quad (3)$$

где $\hat{V}$ есть потенциал „статистической“ силы,

$$\delta = [T(x) - T_0]\left[T_0\left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right)\right]^{-1} \ll 1, \; T_0 \equiv T\left(-\frac{L_x}{2}\right),$$

ξ — химический потенциал электронов проводимости; $\hat{\rho}_0$ — равновесная матрица плотности; $\hat{\rho}_1$ — неравновесная добавка к матрице плотности:

$$\hat{\rho}_1 = -\hat{\rho}_0\int_0^{\gamma} d\gamma' \exp\big(\hat{H}_0\gamma'\big)\hat{V}\exp\big(-\hat{H}_0\gamma'\big), \quad \gamma = (kT_0)^{-1}. \quad (4)$$

Вычисления показывают, что при наличии малого постоянного градиента температуры второе слагаемое в гамильтониане (1) сводится к потенциалу $\hat{V}$ некоторого внешнего поля. Таким образом, не $(\hat{H}_0 - k\mathbf{r}\,\mathrm{grad}\,T)$, а $(\hat{H}_0 + \hat{V})$ входит в оператор скорости и в неразложенную по теории возмущений матрицу плотности при расчете термомагнитного тока.

Используя [4], легко убедиться в том, что формула (2) имеет место не в одном частном случае, как в [4], а является обобщенной формулой для расчета термомагнитного тока. Для каждого конкретного $\hat{H}_0$ можно вычислить ток j_y по формуле (2).

3. Расчет термомагнитного тока в квантовой пленке с помощью МЭГ

Рассмотрим квантовую пленку в квантующем магнитном поле $\mathbf{H} \parallel z$. Вектор-потенциал $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$. Тогда

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\big[\hat{p}_x^2 + \big(\hat{p}_y + m\omega_c x\big)^2 + \hat{p}_z^2\big] + \frac{m\omega_0^2x^2}{2}. \quad (5)$$

В (5) $\omega_c = eH/mc$ — циклотронная частота, а частота ω_0 — характеризует ограничивающий параболический потенциал для электрона в зоне проводимости.

Расчет тока (2) будем проводить в представлении когерентных состояний. Эти состояния являются собственными функциями полного набора неэрмитовых Бозе-операторов уничтожения $\hat{A}^-$ для квантовой системы, описываемой гамильтонианом (5).

Построим, следуя [8], когерентные состояния для $\hat{H}_0$, который представим в виде

$$\hat{H}_0 = H_\alpha + H_\beta + H_\gamma, \quad (6)$$

где

$$\hat{H}_\alpha = \frac{1}{2m}\Big[\hat{p}_x^2 + m^2\omega^2\big(x - \hat{x}_0\big)^2\Big] = \hbar\omega\left(\hat{A}^+\hat{A}^- + \frac{1}{2}\right), \quad (7)$$

$$\hat{H}_\beta = \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2\frac{\hat{p}_y^2}{2m}, \quad \hat{H}_\gamma = \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad \omega^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2, \quad (8)$$

$$\hat{x}_0 = -\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2\frac{\hat{p}_y}{m\omega_c},$$

$$\hat{A}^{\mp} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[\big(x - \hat{x}_0\big) \pm \frac{i\hat{p}_x}{m\omega}\right]\exp(\pm i\omega t) \quad (9)$$

α, k_y, k_z — квантовые числа. Запишем волновое уравнение для $\hat{H}_0$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right)\psi = 0. \quad (10)$$

Его решение имеет вид

$$\psi = |\alpha\rangle|k_y\rangle|k_z\rangle. \quad (11)$$

Здесь

$$|k_y\rangle = \exp(ik_y y), \quad |k_z\rangle = \exp(ik_z z), \quad p_y = \hbar k_y, \quad (12)$$

$|\alpha\rangle$ удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к когерентным состояниям, например $\hat{A}^-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, и равно

$$|\alpha\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\Bigg[-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - x_0) - \alpha\exp(-i\omega t)\right)^2 + \frac{\alpha^2\exp(-2i\omega t)}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2}\Bigg]. \quad (13)$$

Следуя [4] (см. (30), (31)) и [8] (см. (22)), вычислим каждое слагаемое формулы (2).

Опустим члены, содержащие в качестве множителя нечетные степени k_y и произведения $\hat{A}^{+k}\hat{A}^{-l}$ при $k \neq l$, так как они обращаются в нуль при интегрировании по k_y и α соответственно. Легко убедиться в том, что $[\hat{H}_0, y] = (-i\hbar/m)(\omega_0/\omega)^2 p_y$. Тогда первый член в (2) обращается в нуль при интегрировании по k_y, а второй член преобразуется к виду

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}_0[\hat{V}, y] = -\frac{\delta}{L_x}\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}_0 x[\hat{H}_0, y]. \quad (14)$$

Используя (9), выразим x через $\hat{A}^-$, $\hat{A}^+$

$$x = \hat{x}_A + \hat{x}_0, \quad \hat{x}_A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\big(e^{i\omega t}\hat{A}^+ + e^{-i\omega t}\hat{A}^-\big). \quad (15)$$

Примем во внимание формулу (4) и тождество (30) из работы [4]. Тогда интегрируя по γ' третий член выражения (2) , получим

$$\operatorname{Sp}\hat{\rho}_1\big[\hat{H}_0, y\big] = -\operatorname{Sp}\hat{\rho}_0\gamma\delta\big(\xi - \gamma^{-1} - \hat{H}_0\big)\hat{x}_0 L_x^{-1}\big[H_0, y\big]. \tag{16}$$

Подставим (14), (16), (6) в выражение для тока (2) и возьмем интегралы по α, k_y, k_z, следуя [4,8] и используя формулы (10), (12) работы [9].

Окончательно получим

$$j_y = -\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 \frac{nck}{H}\left(\frac{\xi}{kT_0} - \frac{\hbar\omega}{2kT_0}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT_0} - 2\right)\frac{\delta T_0}{L_x}. \tag{17}$$

Известно, что при малых отклонениях системы от термодинамического равновесия возникающие токи линейно зависят от термодинамических сил и описываются феноменологическими уравнениями следующего типа (см., например, [1]):

$$j_i = \sum_{l=x,y,z}\left[\sigma_{il}(\mathbf{H})E_l^* - \beta_{il}(\mathbf{H})\frac{\partial T}{\partial l}\right], \tag{18}$$

где $i = x, y, z$, $E_l^* = -\nabla(\varphi - \xi e^{-1})$, φ — электростатический потенциал, а σ_{il}, β_{il} являются компонентами гальваномагнитного и термомагнитного тензоров соответственно. Для простоты мы положили $\varphi = 0$, $\xi = \mathrm{const}$, что никак не влияет на получаемые в работе результаты. Тогда, учитывая, что температура зависит только от x, получим из (18) следующее соотношение:

$$j_y = -\beta_{yx}\frac{\delta T_0}{L_x}. \tag{19}$$

Сравнивая (17) с (19), найдем выражение для β_{yx}

$$\beta_{yx} = \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 \frac{nck}{H}\left(\frac{\xi}{kT_0} - \frac{\hbar\omega}{2kT_0}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT_0} - 2\right). \tag{20}$$

В [7,10], при использовании подхода Образцова [3] решена задача, аналогичная рассмотренной в настоящей работе, но без включения температуры в гамильтониан. В [7] получено, что

$$\beta_{yx} = -\beta_{xy} = -\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 S\,\frac{c}{H}. \tag{21}$$

Следует отметить, что в работах [7,10] дополнительно учитывались поверхностные токи. При использовании МЭГ, как видно из приведенного в настоящей работе расчета β_{yx}, такой необходимости не возникает, что значительно упрощает расчет. Подставим в выражение (21) формулу (18) из работы [10] для энтропии S, используя вычисленную в [10] термоэдс $Q(H)$ для параболической пленки и невырожденной статистики, а также формулу Образцова $Q = -S/en$. Опустим в S член, связанный со спином, и устремим параметр обрезания интеграла в S к бесконечности, так как расчет в базисе когерентных состояний в отличие [7,10] не приводит к расходимости. В итоге получим (20). Таким образом, вычисление недиагональной компоненты термомагнитного тензора с помощью МЭГ, позволяющего включить температуру непосредственно в гамильтониан путем введением „статистической“ силы, приводит к хорошо известному из литературы результату.

Диагональная компонента термомагнитного тензора β_{xx} может быть рассчитана так же, как и β_{yx}. Для этого необходимо вычислить ток j_x, используя МЭГ.

С помощью МЭГ можно вычислить как поперечный, так и продольный диссипативный и недиссипативный термомагнитные токи в 3D-, 2D- и 1D-образцах. Для этого необходимо представить гамильтониан рассматриваемой задачи в виде (1).

4. Выводы

1. Предложен новый метод для расчета термомагнитного тока.

2. Этот метод дает возможность включить „статистическую“ силу в гамильтониан.

3. Установлена аналогия между зарядом электрона и постоянной Больцмана.

4. Отпадает необходимость в учете поверхностных токов при расчете термомагнитного тока.

Автор благодарен Ф.М. Гашимзаде за внимание к работе.

Список литературы

[1] B.M. Askerov. Electron transport phenomena in semiconductors. World Scientific, Singapore (1994). 397 p.
[2] А.И. Ансельм, Б.М. Аскеров.ФТТ **3**, 3668 (1961); **2**, 2310 (1960).
[3] Ю.Н. Образцов. ФТТ **6**, 414 (1964); **7**, 573 (1965).
[4] R.G. Agayeva. J. Phys. C **18**, 5841 (1985).
[5] R.G. Agayeva, Azerb. J. Phys. **XV**, *4*, 3 (2009).
[6] М.Д. Блох. ФТТ **17**, 896 (1975).
[7] Ф.М. Гашимзаде, А.М. Бабаев, Х.А. Гасанов. ФТТ **43**, 1776 (2001).
[8] R.G. Agayeva. Proc. of the Int. Seminar „Group theoretical methods in physics". Gordon and Breach, NY (1984). V. 1. P. 213.
[9] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. Наука, М. (1981). С. 344.
[10] F.M. Gashimzade, A.M. Babayev, Kh.A. Gasanov. Azerb. J. Phys. **XIII**, *2*, 28 (2002).