

ВКЛАД В КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ГАЗАХ, ОБУСЛОВЛЕННЫЙ КВАНТОВОЙ ИНТЕРФЕРЕНЦИЕЙ

В.В.Афонин, Ю.М.Гальперин, В.Л.Гуревич

Обсуждается квантовый интерференционный вклад в коэффициент диффузии и проводимость электронов в газах. При комнатных температурах и давлении в несколько атмосфер относительная величина этого вклада может составить несколько десятых процента. Показано, что межатомные столкновения обеспечивают дополнительный механизм релаксации фазы электронной волновой функции, обычно несущественный в твердом теле.

В настоящей статье приводятся результаты расчета квантового интерференционного вклада ΔD в коэффициент диффузии D электронов, которые испытывают рассеяние на атомах инертного газа. Коэффициент диффузии $D = D_0 + \Delta D$ зависит от температуры газа T и давления P ; он связан с проводимостью соотношением Эйнштейна.

Согласно классической теории величина D_0 определяется длиной l (или временем τ) свободного пробега электронов. Наша цель – вычислить квантовый вклад ΔD , обусловленный интерференцией состояния электрона, испытавшего многократное рассеяние, с состоянием, обращенным во времени. Мы рассмотрим случай $p l \gg \hbar$ (p – характерное значение импульса электрона). В этом случае относительная величина квантовой поправки $|\Delta D| / D_0$ мала.

Впервые квантовые поправки такого типа изучались в работах^{1, 2} для случая грязных металлов или полупроводников при низких температурах, когда основной источник рассеяния электронов – статические дефекты, а сами электроны подчиняются статистике Ферми. Мы здесь рассматриваем диффузию невырожденных электронов в трехмерном газе. При этом – что особенно важно – температура газа предполагается высокой, и при вычислении поправки принято во внимание, что атомы газа могут двигаться. Квантовую поправку можно отдельить на опыте путем наложения магнитного поля (см.³ и цитированную там литературу).

Для относительной величины поправки мы получаем, в полной аналогии с¹

$$\Delta D / D_0 \simeq - (\hbar / p l)^2 (\tau / \tau_\varphi)^{1/2}, \quad (1)$$

где $p \simeq \sqrt{mT}$ – импульс электрона, а τ_φ – время релаксации фазы электронной волновой функции³, которое нам и предстоит определить.

Ниже приводятся наглядные физические соображения, иллюстрирующие проделанный нами (с помощью мацубаровской диаграммной техники) расчет величины (1). Поле $U(\mathbf{r}, t)$, создаваемое атомами газа, рассеивающими электроны, случайным образом зависит от пространственной координаты \mathbf{r} и медленно изменяется во времени. Медленность обусловлена тем, что масса атома M во много раз больше массы электрона m . Как известно^{1, 2}, за квантовую поправку ответственны электронные траектории с самопересечением. Для ее су-

ществования необходима малость параметра $\omega\tau$,¹⁾ где $\hbar\omega$ – характерное изменение энергии электрона ϵ при столкновении. Оно составляет, грубо говоря, $(m/M)^{1/2}\epsilon$.

Пусть полное время движения электрона по замкнутой траектории есть t , а s – координата на ней, которую параметризуем временем движения по траектории: $s_1 = s(t_1)$. Разность фаз при движении электрона в прямом и обратном направлениях есть

$$\Delta\varphi = \hbar^{-1} \int_0^t dt_1 [U(s_1, t_1) - U(s_1, t - t_1)]. \quad (2)$$

Вычислим, далее, среднее $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle$, где усреднять будем по всем реализациям случайного поля $U(s, t)$. Время, за которое это среднее станет порядка единицы, и есть τ_φ .

В каждый момент времени $U(s)$ зависит от пространственной координаты s случайнным образом. Соответственно $\langle U(s_1, t)U(s_2, t) \rangle \propto \delta(s_1 - s_2)$. Поскольку координата s параметризуется временем, мы положим:

$$\langle U(s_1, t)U(s_2, t) \rangle = \alpha \delta(t_1 - t_2). \quad (3)$$

Параметр α определим ниже из физических соображений. Примем во внимание, что корреляция между случаем полем и скоростью его изменения отсутствует: $\langle U(s_1, t)\dot{U}(s_2, t) \rangle = 0$.

При вычислении $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle$ с помощью (2) возникают разновременные корреляторы вида $\langle U(s, t_1)U(s, t_2) \rangle$. Зависимость этой величины от времени обусловлена не только свободным движением атомов, а и их столкновениями, благодаря которым корреляция затухает. Выделим это затухание в виде особого множителя:

$$\langle U(s_1, t_1)U(s_2, t_2) \rangle = \langle U(s_1, t_1)U(s_2, t_2) \rangle_0 e^{-\gamma|t_1 - t_2|}, \quad (4)$$

где γ^{-1} – время свободного пробега атомов, а символ $\langle \rangle_0$ означает усреднение по их свободному (бесстолкновительному) движению.

Будем считать, что за время t случайное поле изменяется мало. Разлагая при вычислении $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle$ поле $U(s, t)$ по степеням t и принимая во внимание, что

$$\langle \dot{U}(s_1, t)U(s_2, t) \rangle_0 = -\langle \dot{U}(s_1, t)\dot{U}(s_2, t) \rangle_0,$$

мы находим:²⁾

$$\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle = \frac{1}{3\hbar^2} \alpha \omega^2 \langle U^2 \rangle_0 t^3 + \frac{2\alpha}{\hbar^2} \gamma \langle U^2 \rangle_0 t^2, \quad t > 0. \quad (5)$$

Здесь мы воспользовались порядковым соотношением: $\langle \dot{U}^2 \rangle_0 = \omega^2 \langle U^2 \rangle_0$, где ω – введенная выше частота, связанная с неупругостью электрон-атомных столкновений. Величина $\alpha \langle U^2 \rangle_0 / \hbar^2$ имеет размерность обратного времени и, по смыслу вывода, относится к одному столкновению электрона. По порядку величины она равна τ^{-1} . Окончательно:

$$\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle = (t/\tau_\varphi^{(3)})^3 + (t/\tau_\varphi^{(2)})^2; \quad \tau_\varphi^{(3)} \simeq \tau^{1/3}/\omega^{2/3}; \quad \tau_\varphi^{(2)} \simeq \sqrt{\tau/\gamma}, \quad (6)$$

так что величина τ_φ , фигурирующая в (1) по порядку величины есть наименьшее из времен $\tau_\varphi^{(3)}$ и $\tau_\varphi^{(2)}$. Имеются, таким образом, два источника релаксации фазы. Один обусловлен непосредственно нестационарностью случайного потенциала; другой – затуханием кор-

¹⁾ Для взаимодействия электронов с фононами критерий такого типа, а также оценка времени $\tau_\varphi^{(3)}$ были указаны в⁴.

²⁾ На существование механизма релаксации недиагональной части матрицы плотности, пропорциональной t^3 , было впервые указано Каганом и Кононцом⁷.

реляции его флюктуаций во времени. Последний член в формуле (6) возникает из-за того, что электрон, двигаясь по петле в противоположных направлениях, рассеивается на одном и том же атоме в разные моменты времени t_1 и $t - t_1$. Если при этом сами атомы сталкиваются друг с другом, то состояния системы электрон + атом уже не получаются друг из друга инверсией времени, так как при достаточно большой разности времен атом с подавляющей вероятностью будет иметь другой импульс. Здесь очень важно то, что столкновения атомов делают систему необратимой во времени.

Критерием существования интерференционных эффектов являются условия $\tau_{\varphi}^{(3)} \gg \tau$ (что эквивалентно $\omega\tau \ll 1$) и $\tau_{\varphi}^{(2)} \gg \tau$, т. е. $\gamma^{-1} \gg \tau$.

Зависимость ΔD от магнитного поля находится по формулам работы⁵. Только в них следует учесть существование дополнительного канала релаксации фазы, связанного со вторым слагаемым в (6).³⁾

Численные оценки проделаем для случая Xe при $T = 300$ К и $P = 10$ ат. При этом $m/M = 4,2 \cdot 10^{-6}$, а $\omega = (T/\hbar)(m/M)^{1/2} \simeq 10^{-11}$ с. Сечение рассеяния электрона атомом Xe при этих энергиях порядка 10^{-14} см²⁶; отсюда $\omega\tau \simeq 10^{-2}$; $\tau/\tau_{\varphi}^{(3)} \simeq 4,5 \cdot 10^{-2}$, $\tau \simeq 10^{-13}$ с. Время $\tau_{\varphi}^{(2)}$ оказывается того же порядка, что и $\tau_{\varphi}^{(3)}$, если считать, что сечения рассеяния атомов друг на друге и электронов на атомах одного порядка. При этом $|\Delta D|/D_0 \simeq 2 \cdot 10^{-3}$, $D_0 \simeq 3$ см²/с, а критическое магнитное поле, при котором относительное изменение ΔD порядка его максимального значения, есть $H_c \simeq c\hbar/eD_0\tau_{\varphi} \simeq 3 \cdot 10^3$ Э (см. ³).

Экспериментальное изучение квантовых поправок позволит получить важные сведения, касающиеся как кинетики электронов в газах, так и кинетических процессов в самих газах. Особенно интересно было бы, увеличивая давление, перейти к случаю, когда эти поправки не малы. Исследование этого случая, для которого теория пока отсутствует, позволило бы пролить свет на кинетические процессы в неидеальных газах и жидкостях и механизмы электронной проводимости в этих условиях и тем самым стимулировать развитие новых физических представлений.

Авторы выражают сердечную благодарность А.Л.Шеланкову за дискуссию и ценные советы, касающиеся качественного вывода выражения для $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle$.

Литература

1. Горьков Л.П., Паркин А.И., Хмельницкий Д.Е. Письма в ЖЭТФ, 1979, **30**, 248.
2. Abrahams E., Ramakrishnan T.V. J. Non-Cryst. Sol., 1980, **35/36**, 15.
3. Lee P.A., Ramakrishnan T.V. Rev. Mod. Phys., 1985, **57**, 287.
4. Альтшуллер Б.Л., Аронов А.Г., Паркин А.И., Хмельницкий Д.Е. ЖЭТФ, 1981, **81**, 768.
5. Афонин В.В., Гальперин Ю.М., Гуревич В.Л. ЖЭТФ, 1985, **88**, 2190.
6. Hoffmann C.R., Skarsgard H.M. Phys. Rev., 1969, **178**, 168.
7. Каган Ю., Кононец Ю.В. ЖЭТФ, 1973, **64**, 1042.

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
7 ноября 1986 г.

3) Отметим, что такая зависимость в твердых телах до сих пор не наблюдалась, так как во всех экспериментах выполнялось условие $\omega\tau \gg 1$. При его выполнении фаза сбивается за счет одного столкновения, и зависимость $\Delta D/H$ оказывается другой.