МИНИСТЕРСТВО ОБЩЕГО И ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра общей и теоретической физики

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА

Часть II

*Методические указания к спецкурсу
для студентов 4 курса специализации "Теоретическая физика"*

Издательство " Самарский университет"
1999

Печатается по решению Редакционно-издательского совета Самарского государственного университета

Данные методические указания составлены на основе лекций для студентов физического фикультета специализации “Теоретическая физика”. Во второй части методических указаний в рамках метода функций Грина рассмотрена теория линейной реакции неравновесных систем на внешние механические возмущения и ее приложения к задачам о ферромагнитном резонансе и вычислении электропроводности нормальных металлов.

Составитель доц. Е.К.Башкиров

Рецензент доц. А.В.Горохов

Редактор Т.И.Кузнецова
Компьютерная верстка, макет Е.К.Башкиров

ЛР № 020316 от 04.12.96. Подписано в печать 15.02.99. Формат 60х84/16. Бумага офсетная.
Объем 1,75 уч.-изд.л. Тираж 120 экз. Заказ № 141
Издательство “Самарский университет”, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1.
УОП СамГУ, ПЛД № 67-43 от 19.02.98

Содержание

1 Линейная реакция системы на внешние механические возмущения

В статистической термодинамике неравновесных процессов механическими возмущениями называются возмущения, представляющие действие внешних полей, которые можно полностью описать добавлением к гамильтониану соответствующей энергии взаимодействия системы с полем. Возмущения, которые не допускают такого представления, называются термическими. Причиной таких возмущений может быть совершаемая над системой работа через изменение ее объема, или взаимодействие с другими ансамблями (обладающими другой температурой или химическим потенциалом). В этом случае изменение внешних параметров влияет на функцию распределения или статистический оператор не прямым, а косвенным образом; оно создает статистически неравновесное состояние, которое затем стремится к равновесному, если нет препятствующих этому воздействий. Лишь в случае, когда возмущение вызвано внешними полями, оно непосредственно влияет на функцию распределения, с чем и связана относительная простота изучения механических возмущений.

Рассмотрим реакцию квантовомеханической системы с гамильтонианом H, не зависящим от времени, на включение внешнего механического возмущения H_t^1. Будем считать, что возмущение включается адиабатически при $t = -\infty$. Для описания адиабатического включения взаимодействия воспользуемся следующим приемом. Добавим в спектральное разложение оператора возмущения множитель $e^{\varepsilon t}$, где ε малое положительное число. Понятно, что при $\varepsilon \to 0$ указанный множитель обращается в нуль для $t = -\infty$. Далее мы должны провести вычисления макроскопических параметров и уже в конечных формулах перейти к пределу $\varepsilon \to 0$.

Таким образом, для адиабатически включаемого взаимодействия мы имеем

$$H_t^1 = \frac{e^{\varepsilon t}}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} H_\omega^1, \quad (\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0). \tag{1}$$

Вычислим среднее значение некоторой динамической переменной $\mathcal{O}$ при действии возмущения (1). По определению среднего

$$< \mathcal{O}(t) >= Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\}, \tag{2}$$

где статистический оператор $\rho(t)$ удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H + H_t^1, \rho(t)] \tag{3}$$

и начальному условию

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T,V)e^{-H/kT}, \tag{4}$$

которое означает, что при $t = -\infty$ система находилась в состоянии статистического равновесия и описывалась каноническим ансамблем Гиббса (как и в работе [15] везде в дальнейшем будем полагать для упрощения записей $\hbar \equiv 1$). Для начального условия можно применить также и большой канонический ансамбль Гиббса

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T,V,N)e^{-(H-\mu N)}/kT.$$

Считая возмущение H_t^1 малым, решение уравнения (3) будем искать в виде

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_t^1, \tag{5}$$

с начальным условием

$$\rho_t^1|_{t=-\infty} = 0.$$

Подставляя представление (5) в уравнение Лиувилля (3), получим

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\rho_0 + \rho_t^1) = [H, \rho_0] + [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{6}$$

Учитывая, что невозмущенный гамильтониан H коммутирует с равновесным статистическим оператором ρ_0 и равновесный статистический оператор ρ_0 не зависит от времени, мы можем переписать уравнение (6) в виде

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{7}$$

Ограничим себя исследованием линейной реакции системы на малые механические возмущения. Тогда мы можем пренебречь последним слагаемым в уравнении (7), имеющим второй порядок малости по возмущению. В результате получаем:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0]. \tag{8}$$

Для того, чтобы избавиться от первого слагаемого в правой части уравнения (8), перейдем к представлению взаимодействия для ρ_t^1:

$$\rho_t^1(t) = e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt}. \tag{9}$$

Умножая (8) на мнимую единицу и дифференцируя по времени, имеем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = -He^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt} + He^{iHt} i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 e^{-iHt} + e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt}H,$$

или

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [\rho_t^1(t), H] + He^{iHt}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1\right)e^{-iHt}. \tag{10}$$

Подставляя во второе слагаемое в правой части (10) выражение (8) и взаимно уничтожая члены $[H, \rho_t^1(t)]$ и $[\rho_t^1(t), H]$, получаем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [H_t^1(t), \rho_0], \tag{11}$$

где $H_t^1(t) = e^{iHt}H_t^1 e^{-iHt}$– оператор возмущения в представлении взаимодействия. При выводе (11) мы учли также коммутативность невозмущенного гамильтониана H и начального равновесного статистического оператора ρ_0.

С учетом начального условия $\rho_t^1(t)|_{t\to-\infty} = 0$ решение уравнения (11) имеет вид

$$\rho_t^1(t) = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[H_{t'}^1(t'), \rho_0]. \tag{12}$$

Умножая правую и левую части уравнения (12) слева на e^{-iHt}, а справа на e^{iHt}, получаем решение для статистического оператора ρ_t^1

$$\rho_t^1 = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt' e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}. \tag{13}$$

Тогда среднее значение динамической переменной $\mathcal{O}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} &< \mathcal{O}(t) >= Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\} = \\ &= Sp\{\mathcal{O}\rho_0\} + Sp\{\mathcal{O}\rho_t^1\} = \\ &=< \mathcal{O} > -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt' Sp\{e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}\mathcal{O}\}, \end{aligned} \tag{14}$$

где $< \mathcal{O} >$ - равновесное среднее для динамической переменной $\mathcal{O}$. Проводя циклическую перестановку операторов под знаком шпура, мы можем переписать формулу (14) в следующем виде:

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} >= -i \int_{-\infty}^{t} dt' < [\mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t')] >. \tag{15}$$

где $< \ldots >= Sp\{\ldots \rho_0\}$ означает усреднение по равновесному статистическому оператору.

Формулу (15) можно сделать более симметричной, если использовать под знаком интеграла тета-функцию Хевисайда:

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} >= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \Theta(t - t') < [\mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t')] > . \tag{16}$$

Наконец, вводя запаздывающую двухвременную температурную функцию Грина:

$$<< A(t); B(t') >>^r = -i\Theta(t - t') < [A(t), B(t')] >, \tag{17}$$

для приращения среднего значения динамической переменной $\mathcal{O}$ получаем так называемую формулу Кубо

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} >= \int_{-\infty}^{\infty} dt' << \mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t') >>^r . \tag{18}$$

Физический смысл запаздывающих двухвременных функций Грина состоит в том, что они описывают реакцию системы на мгновенное δ - образное возмущение вида

$$H^1_t = B\delta(t - t'),$$

где B - не зависящий от времени оператор.

Для такого возмущения приращение среднего любой динамической величины определяется непосредственно запаздывающей функцией Грина

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} >=<< \mathcal{O}(t), B(t') >>^r . \tag{19}$$

(отсюда и название для величин (17) по аналогии с теорией дифференциальных уравнений, где функции Грина являются решениями уравнений с δ - образными неоднородностями).

Связь между приращением средних для динамических переменных и запаздывающей функцией Грина становится особенно простой при переходе к Фурье-образам соответствующих величин.

Введем Фурье-разложение запаздывающей функции Грина:

$$<< A(t); B(t') >>^r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE(t-t')} << A|B >>^r_E . \qquad (20)$$

Подставляя разложение (20) в формулу Кубо (18), получаем

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} > = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dEdt' << \mathcal{O}|H^1_{t'} >>^r_E e^{-iE(t-t')}.$$

В правой части последнего выражения воспольземся также Фурье- разложением для оператора возмущения вида (1). Тогда

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} > = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega dEdt' e^{\varepsilon t'} << \mathcal{O}|H^1_\omega >>^r_E e^{-iE(t-t')} e^{-i\omega t'}. \qquad (21)$$

Используя интегральное представление для δ - функции

$$\delta(\omega - E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i(\omega-E)t'},$$

формулу (21) можно записать в виде

$$< \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} > = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega << \mathcal{O}|H^1_\omega >>^r_{E=\omega+i\varepsilon} e^{-i\omega t}. \qquad (22)$$

Тогда Фурье-компонента приращения среднего значения динамической переменной будет непосредственно связана с Фурье-компонентой запаздывающей функции Грина

$$< \Delta\mathcal{O} > = < \mathcal{O}(t) > - < \mathcal{O} > = << \mathcal{O}|\mathcal{H}^\infty_\omega >>^\nabla_{\omega+)\epsilon} . \qquad (23)$$

Часто внешнее поле (1) можно представить в виде

$$H^1_t = -\sum_i B_j A_j(t),$$

где B_j - операторная часть внешнего поля, а $A_j(t)$ - зависящая от времени амплитуда внешнего поля. В этом случае формулу (23) можно записать в виде

$$< \Delta\mathcal{O}_i(\omega) >= \chi_{ij}(\omega)A_j(\omega), \qquad (24)$$

где $\chi_{ij}(\omega) = - << \mathcal{O}_i|B_j >>^r_\omega$ - комплексная обобщенная восприимчивость системы. Например, если внешнее возмущение представляет собой электрическое поле, то

$$H^1_t = -\sum_\alpha P_\alpha E_\alpha(t).$$

Здесь P_α - проекция α оператора дипольного момента системы. Тогда средний ток представляем как:

$$< j_\alpha(\omega) >= \sigma_{\alpha\beta}(\omega)E_\beta(\omega),$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = - << j_\alpha|P_\beta >>_\omega \qquad (25)$$

- тензор электропроводности системы.

Далее мы перейдем к рассмотрению приложений теории линейной реакции к задачам о ферромагнитном резонансе и вычислении проводимости металлов.

2 Ферромагнитный резонанс

Если на спиновую систему наложить постоянное магнитное поле $\vec{\mathcal{H}}$ и перпендикулярно к нему - переменное радиочастотное поле $\vec{h}(t)$, то при частоте переменного поля, близкой к частоте свободной прецессии спинов вокруг направления вектора $\vec{\mathcal{H}}$, резко возрастает передача энергии от поля $h(t)$ к спиновой системе. Рассмотрим это явление на основе развитой ранее теории.

Пусть спиновая система состоит из N одинаковых спинов $1/2$, помещенных в узлах решетки f. Для того, чтобы не учитывать энергию размагничивания, будем считать образец неограниченным. Постоянное подмагничивающее поле будем считать направленным по оси z. В этом случае гамильтониан спиновой системы H можно взять в виде (40) из работы [15].

Ограничимся рассмотрением случая, когда длина волны радиочастотного поля много больше размеров образца, и поле можно считать однородным. Кроме того положим, что радиочастотное поле $\vec{h}$ перпендикулярно подмагничивающему полю и лежит, следовательно, в плоскости (x, y). Тогда оператор взаимодействия спиновой системы с переменным полем запишется в виде

$$H_t^1 = -\mu \sum_\omega e^{-i\omega t} \vec{h}_\omega \vec{S}, \tag{26}$$

где $\vec{S} = \sum_f \vec{S}_f$ - полный спин системы, μ - магнитный момент спина.

Считая возмущение малым, мы можем согласно формуле (24) представить приращение Фурье-образа среднего значения вектора намагниченности при адиабатном включении взаимодействия

$$< \Delta M^\alpha(\omega) >= \mu\Delta < S^\alpha(\omega) >= \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta,$$

где магнитная восприимчивость

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -2\pi\mu^2 << S^\alpha | S^\beta >>_\omega^r .$$

Здесь мы учли, что Фурье-образ оператора возмущения

$$H_\omega^1 = 2\pi \sum_\beta S^\beta h_\omega^\beta.$$

Из свойств симметрии функций Грина следует, что

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \chi_{\alpha\beta}^*(-\omega). \tag{27}$$

Соответственно, приращение временного среднего имеет вид

$$< \Delta M^\alpha(t) >= \sum_{\beta\omega} e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta. \tag{28}$$

Для оператора возмущения H_t^1 используется также форма записи

$$H_t^1 = -\mu \sum_{\omega>0} \left(e^{-i\omega t} \vec{h}_\omega \vec{S} + e^{i\omega t} \vec{h}_{-\omega}^* \vec{S} \right), \tag{29}$$

где $h_{-\omega}^\alpha = h_\omega^{*\alpha}$. Тогда взамен формулы (28) имеем

$$< \Delta M^\alpha(t) >= \sum_{\beta,\omega>0} \left(e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta + e^{i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(-\omega) h_\omega^{\beta *} \right). \tag{30}$$

Так как восприимчивость χ выражается линейно через функции Грина, то их полюсы будут определять поведение χ в области резонанса. Явный вид χ определяется явным видом гамильтониана взаимодействия.

При описании ферромагнетиков удобно ввести операторы

$$S^{\pm} = S^x \pm iS^y$$

(свойства этих операторов описаны в [15]) и функции Грина

$$G_{11}(\omega) = << S^+|S^+ >>^r_\omega, \quad G_{12}(\omega) = << S^+|S^- >>^r_\omega,$$

$$G_{21}(\omega) = << S^-|S^+ >>^r_\omega, \quad G_{11}(\omega) = << S^-|S^- >>^r_\omega .$$

Тогда компоненты тензора χ будут выражаться через функции $G_{11}, G_{12}, G_{21}, G_{22}$:

$$\chi_{xx}(\omega) = -\frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xz}(\omega) = \chi_{zx}(\omega) = \chi_{zy}(\omega) = 0,$$

$$\chi_{yz}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{zz} = \chi_{st},$$

где χ_{st} - статическая восприимчивость. Энергия, поглощенная спиновой системой из радиочастотного поля за единицу времени, численно равна работе, совершенной полем за это же время. Определим последнюю следующим образом:

$$\frac{d}{dt}A(t) = \sum_\alpha h^\alpha(t)\frac{d}{dt}\Delta < M^\alpha(t) >=$$

$$= \sum_{\alpha\beta,\omega\omega'>0} \omega' \left\{h^\alpha_\omega e^{-i\omega t} + h^{\alpha *}_\omega e^{i\omega t}\right\} \left\{\chi_{\alpha\beta}(\omega)h^\beta_{\omega'} e^{-i\omega' t} - \chi_{\alpha\beta}(-\omega')h^{\beta *}_{\omega'} e^{i\omega' t}\right\}. \quad (31)$$

Средняя мощность, поглощаемая системой, равна

$$W = -\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T \frac{d}{dt}A(t)dt.$$

Используя (31), получаем отсюда следующее выражение:

$$W = -i \sum_{\alpha\beta,\omega>0} \omega \left\{ \chi^{*}_{\alpha\beta}(\omega) h^{\alpha}_{\omega} h^{\beta^*}_{\omega} - \chi_{\alpha\beta}(\omega) h^{\alpha^*}_{\omega} h^{\beta}_{\omega} \right\}. \qquad (32)$$

В случае линейно поляризованного поля $h^{\alpha}_{\omega} = h^{\alpha*}_{\omega}$ и формула (32) принимает вид

$$W = - \sum_{\alpha\beta,\omega>0} 2\omega Im \chi_{\alpha\beta}(\omega) h^{\alpha}_{\omega} h^{\beta}_{\omega}. \qquad (33)$$

Из (33) следует, что поглощение энергии спиновой системой определяется в случае линейно поляризованного поля мнимой частью тензора восприимчивости. В окрестности полюсов функций Грина восприимчивость резко возрастает и поглощение имеет резонансный характер.

Предположим, что функции Грина $G_{ij}(\omega)$ в некотором приближении имеют полюса в нижней полуплоскости $\omega = \pm\omega_R - i\Gamma$ ($\Gamma > 0$ - описывает затухание тех спиновых волн, которые возбуждаются при ферромагнитном резонансе)

$$G_{ij} \sim \frac{1}{\omega \pm \omega_R + i\Gamma}.$$

В этом случае нетрудно показать, что (см., например, [4]) мощность, поглошаемая системой, имеет вид

$$W \simeq \sum_{\alpha\beta,\omega>0} \chi^{0}_{\alpha\beta} h^{\alpha}_{\omega} h^{\beta}_{\omega} \frac{\omega^2 \omega_R \Gamma}{(\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\omega\Gamma)^2},$$

где $\chi^{0}_{\alpha\beta}$ - некоторые постоянные.

При приближении частоты внешнего поля к собственной частоте системы ω_R поглощение возрастает и достигает при $\omega \sim \omega_R$ максимального значения

$$W_{max} \sim \frac{\omega_R}{\Gamma}.$$

Таким образом, введение затухания как мнимых частей функций Грина равноценно учету перераспределения энергии в системе между различными степенями свободы. В результате имеет место диссипация энергии, поглощаемой при резонансе.

Перейдем теперь к вычислению компонент тензора магнитной восприимчивости χ в рамках рассматриваемой модели изотропного неограниченного ферромагнетика.

В [15]для системы с гамильтонианом H нами была вычислена в приближении Тябликова функция Грина вида $<< S_f^+|S_{f'}^- >>_\omega^r$, которая оказалась равной

$$<< S_f^+|S_{f'}^- >>_\omega^r = \sum_{\vec{q}} \frac{\delta_{ff'}\sigma}{\omega - E(\vec{q}) + i\varepsilon} e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f'})}, \tag{34}$$

где $E(\vec{q}) = \omega_R + \frac{1}{2}\{J(0) - J(\vec{q})\}$ - энергия элементарных возбуждений в ферромагнитном кристалле.

Здесь $\omega_R = \mu\mathcal{H}$ - зеемановская энергия магнитного момента μ во внешнем магнитном поле $\mathcal{H}$, σ - относительная намагниченность на один узел и $J(\vec{q})$ - Фурье-компонента обменного взаимодействия спинов в узлах решетки. Суммирование по волновым векторам $\vec{q}$ в формуле (34) производится по N значениям в пределах первой зоны Бриллюэна.

Тогда функция Грина G_{12} есть

$$G_{12}(\omega) = << S^+|S^- >>_\omega^r = \sum_{ff'} << S_f^+|S_{f'}^- >>_\omega^r =$$

$$= \frac{N\sigma}{\omega - E(\vec{q}=0) + i\varepsilon} = \frac{N\sigma}{\omega - \omega_R + i\varepsilon}.$$

Нетрудно также вычислить и остальные функции Грина. Они оказываются равными

$$G_{21}(\omega) = -\frac{N\sigma}{\omega + \omega_R + i\varepsilon}$$

и

$$G_{11}(\omega) = G_{22}(\omega) = 0.$$

Тогда легко вычислить действительные и мнимые части компонент тензора магнитной проницаемости

$$Re\chi_{xx}(\omega) = P\frac{\chi_0}{1 - (\omega/\omega_R)^2}.$$

$$Im\chi_{xx}(\omega) = \frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega - \omega_R) - \delta(\omega + \omega_R)\},$$

$$Re\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega - \omega_R) + \delta(\omega + \omega_R)\},$$

$$Im\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\omega}{\omega_R}P\frac{\chi_0}{1 - (\omega/\omega_R)^2}.$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \chi_{xx}(\omega), \quad \chi_{xy}(\omega) = -\chi_{yx}(\omega),$$

где $\chi_0 = \frac{N\sigma\mu^2}{2\omega_R}$.

В рассмотренном случае резонансная частота ω_R совпадает с частотой ларморовской прецессии спина вокруг направления постоянного поля $\mathcal{H}$. Так как ω_R - энергия элементарного возбуждения (спиновой волны) с $\vec{q} = 0$, то это означает, что при резонансе (в линейном приближении) возбуждаются только такие спиновые волны.

Форма линии в рассматриваемом случае имеет δ - образный вид.

Если в спиновой системе учесть затухание, что можно сделать феноменологически, смещая полюсы функций Грина в комплексную плоскость: $\omega \pm \omega_R \to \omega \pm \omega_R + i\Gamma$, где Γ - величина затухания для спиновых волн с $\vec{q} = 0$, мы можем получить более реалистичные формулы для компонент тензора восприимчивости [4]. Форма линии в этом случае будет лоренцевской.

3 Кинетика электронов проводимости

3.1 Общий формализм

Полный гамильтониан электрон-фононной системы с учетом эффектов экранирования электронами проводимости потенциалов ионов и рассеяния электронов на примесях выберем в виде (вывод гамильтониана можно найти в [14])

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph} + H_{imp}. \tag{35}$$

Здесь

$$H = \sum_{k\lambda} \omega_{k\lambda} b^{+}_{k\lambda} b_{k\lambda}$$

- гамильтониан свободного фононного поля; $b^{+}_{k\lambda}(b_{k\lambda})$- оператор рождения (уничтожения) фонона с частотой $\omega_{k\lambda}$ и поляризацией λ.

$$H = \sum_{p} \varepsilon_p a^{+}_p a_p$$

- гамильтониан электронов проводимости: $a^{+}_p(a_p)$ - оператор рождения (уничтожения) электрона проводимости с кинетической энергией ε_p, квазимпульсом $\vec{p}$ и спиновым числом σ $(p \equiv (\vec{p}, \sigma))$.

$$H_{el-ph} = \sum_{k\lambda} F_{k\lambda}(b^{+}_{k\lambda} + b_{k\lambda})\rho_{-k}$$

- гамильтониан электрон-фононного взаимодействия; $\rho_k = \sum_p a_p^+ a_{p+k}$ (здесь и в дальнейшем мы используем обозначения $a_{p+k} \equiv a_{\vec{p}+\vec{k},\sigma}$) - Фурье-компонента плотности электронов (точнее плотность вероятности распределения электронов в металле). Матричный элемент $F_{k\lambda}$ имеет вид

$$F_{k\lambda=l} \sim ig\frac{k}{\sqrt{2\omega_k}}\frac{1}{\sqrt{V}}, \quad g \sim const.$$

Поскольку во взаимодействии с электронами принимают участие только продольные фононы, индекс продольной поляризации у матричного элемента электрон-фононного взаимодействия мы указывать не будем.

И, наконец,

$$H_{imp} = \sum_{q \neq 0} V_i(q) S(\vec{q}) \rho_{-\vec{q}}$$

-гамильтониан, описывающий взаимодействие (рассеяние) электронов с примесями; $V_i(q)$ - Фурье-компонента потенциала рассеяния в примесном узле; $S(\vec{q})$ описывает распределение примесей

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N} e^{-i\vec{q}\vec{l}} C_l,$$

где $\vec{l}$ - радиус-вектор, определяющий положение узлов в решетке, N - число узлов решетки, $C_l = 0$ в узлах основной решетки и $C_l = 1$ в примесных узлах.

Как обычно при рассмотрении кристаллов конечного размера (с конечным числом узлов N) мы накладываем на систему циклические граничные условия, которые приводят, в частности, к тому, что квазиимпульс принимает дискретный набор значений.

Рассеяние электронов на фононах и примесях приводит к появлению конечного сопротивления металлов. Рассмотрим проводимость металлов в продольном электрическом поле $\vec{E}(t, \vec{r})$. Как известно, продольное электрическое поле можно описать с использованием только скалярного потенциала $\varphi(t, \vec{r})$:

$$\vec{E}(t, \vec{r}) = -\nabla\varphi(t, \vec{r}).$$

Соответственно, для Фурье-образов имеем

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = -i\vec{k}\varphi(\vec{k}, \omega).$$

Оператор возмущения возьмем в стандартном виде

$$H_t^1 = e\int e\rho(\vec{r})\varphi(t, \vec{r})d\vec{r}. \qquad (36)$$

Скалярный потенциал в (36) мы можем разложить в трехмерный ряд Фурье по пространственным координатам (разложение по плоским волнам) в силу его периодичности по данным переменным и в интеграл Фурье по временной переменной

$$\varphi(t,\vec{r}) = \frac{1}{2\pi}e^{\epsilon t}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\frac{1}{V}\sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}}\varphi(\vec{k},\omega). \qquad (37)$$

Плотность электронного газа в (36) можно представить в виде

$$\rho(\vec{r}) = \Psi^+(\vec{r})\Psi(\vec{r}),$$

где $\Psi^+(\vec{r})(\Psi(\vec{r}))$ - оператор рождения (уничтожения) электрона в точке $\vec{r}$.

Переходя к представлению вторичного квантования по плоским волнам

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_p a_p e^{i\vec{p}\vec{r}}, \qquad \Psi(\vec{r})^+ = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_p a_p^+ e^{-i\vec{p}\vec{r}},$$

где V - объем системы N электронов и, учитывая разложение (26) для гамильтониана возмущения, получаем (при адиабатическом включении взаимодействия)

$$H_t^1 = \frac{e^{\epsilon t}}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\frac{1}{V}\sum_k \varphi(\vec{k},\omega)e\rho_{-k},$$

где, как уже было сказано ранее, ρ_k - Фурье-компонента электронной плотности

$$\rho_{\vec{k}} = \sum_k \rho(\vec{r})e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{k'} a_{k'}^+ a_{k'+k}.$$

Средний ток, возникающий в системе под действием внешнего возмущения, согласно формуле (26) равен

$$< j_\alpha(\vec{k},\omega) = e << j_k^\alpha | H_\omega^1 >>_\omega^r = \frac{e^2}{V} << j_k^\alpha | \rho_{-k} >>_\omega^r \phi(\vec{k},\omega),$$

где Фурье-компонента оператора тока электронов:

$$e j_k^\alpha = \frac{e}{m}\sum_p \left(\vec{p}+\frac{\vec{k}}{2}\right)_\alpha a_p^+ a_{p+k}. \qquad (38)$$

Согласно определению, продольная проводимость системы равна

$$\sigma(k,\omega) = \frac{\vec{k} < \vec{j}_k(k,\omega) >}{\vec{k}\vec{E}(k,\omega)} = \frac{i}{k^2}\frac{\vec{k}\vec{j}_k(k,\omega)}{\varphi(k,\omega)} =$$

$$= \frac{ie^2}{k^2}\frac{1}{V} << (\vec{k}\vec{j}_k)|\rho_{-k} >>_\omega^r .$$

Таким образом, для вычисления проводимости необходимо также получить выражение для двухчастичной ФГ:

$$\sigma(k,\omega) = \frac{ie^2}{mk^2}\frac{1}{V}\sum_p \left(\vec{p} + \frac{\vec{k}}{2}\right)\vec{k} << a_p^+ a_{p-k}|\rho_{-k} >>_\omega . \tag{39}$$

3.2 Приближение времени релаксации

Ограничимся в дальнейшем вычислением функций Грина в случае достаточно низких частот $\omega << \omega_0$ и больших длин волн внешнего поля $k << k_F$ (длинноволновое приближение), что соответствует обычной проводимости металлов. Здесь ω_0 и k_F -частота и волновой вектор для уровня Ферми.

Рассмотрим уравнение для функций Грина с гамильтонианом (35)

$$\frac{\partial}{\partial t} << a_p^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >>= \delta(t-t')(n_p - n_{p+k}) +$$
$$+(\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_p) << a_p^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$
$$+ << [a_p^+ a_{p+k}, H_{el-ph} + H_{imp}]; \rho_{-k}(t') >>, \tag{40}$$

где $n_p =< a_p^+ a_p >= 1/(e^{\varepsilon_p/k_BT} + 1)$.

В правой части уравнения (40) появились более сложные, нежели исходные функции Грина. Их мы можем представить как исходную функцию Грина, умноженную на массовый оператор. Переходя в (40) к Фурье-образам, получаем

$$(\omega - \omega_{pk})G_p(k,\omega) = (n_p - n_{p+k}) + M_p(k,\omega)G_p(k,\omega),$$

или

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega - \omega_{pk} - M_p(k,\omega)},$$

где $\omega_{pk} = \varepsilon_{p+k} - \varepsilon_p$.

Поскольку нас интересует лишь эффект затухания функций Грина, мы можем оставить в массовом операторе лишь мнимую часть. Учитывая, что $\omega << \omega_0$ и $k << k_F$, получаем

$$ImM_p(k, \omega + i\varepsilon) \approx -i\gamma_p(k, \omega)) \approx -i\gamma_p.$$

Пользуясь также разложением

$$n_p - n_{p+k} = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{p}}{m}; \quad \omega_{\vec{p}\vec{k}} \approx \frac{\vec{k}\vec{p}}{m} << \frac{p^2}{m},$$

получим

$$G_p(k, \omega) \approx -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{p}}{m}\frac{1}{\omega + i\gamma_p}.$$

В этом приближении проводимость системы имеет вид

$$\sigma(k, \omega) = \frac{ie^2}{mk^2}\frac{1}{V}\sum_p \frac{\vec{p}\vec{k}}{m}\left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right)\frac{1}{\omega + i\gamma_p} \approx$$

$$\approx \frac{ie^2}{m^2}\frac{1}{3}p_F^2\frac{1}{\omega + i\bar{\gamma}}\frac{1}{V}\sum_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right).$$

Учитывая соотношение

$$\frac{1}{V}\sum_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right) = \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{1}{V}\sum_p n_p = \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{N_e}{V} = \frac{mp_F}{\pi^2},$$

где $p_F^3 = 3\pi^2 n_e$; $\mu = \frac{p_F^2}{2m}$; $n_e = \frac{N_e}{V}$ - плотность электронов, получим

$$\sigma(\omega) = \sigma(k, \omega)|_{k\to 0} = Re\frac{ie^2}{m}\frac{n_e}{\omega + \bar{\gamma}} = \frac{n_e e^2}{m}\frac{\gamma}{\omega^2 + \bar{\gamma}^2}.$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении мы получаем обычную формулу для проводимости, где $\bar{\gamma} = 1/\tau$ - обратное время свободного пробега электронов.

Перейдем теперь к более детальному расчету проводимости металла. Для упрощения вычислений рассмотрим отдельно примесное и фононное рассеяния электронов.

3.3 Примесное рассеяние

Введем запаздывающую функцию Грина

$$G_p(k, t-t') = << a_p(t) a_{p+k}(t); \rho_{-k} >> .$$

Запишем для нее уравнение движения

$$i\frac{dG_p(k,t-t')}{dt} = \delta(t-t')\{n_p - n_{p+k}\} + \varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t') -$$

$$-\varepsilon_p G_p(k,t-t') + \sum_{q\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q})S(\vec{q})\{<< a_p^+(t)a_{p+k-q}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$

$$- << a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >>\}. \qquad (41)$$

Для функций Грина, стоящих в правой части уравнения (41), мы также можем записать уравнения движения в виде

$$i\frac{d}{dt} << a_p^+(t)a_{p+k-q}(t); \rho_{-k}(t') >>= \delta(t-t')\{n_p\delta_{q.0} - n_{p+k}\delta_{q.0}\} +$$

$$+(\varepsilon_{p+k-q} - \varepsilon_p) << a_p^+(t)a_{p+k-q}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$

$$+ \sum_{q'\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{<< a_p^+(t)a_{p+k-q-q'}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$

$$- << a_{p+q'}^+(t)a_{p+k-q}(t'); \rho_{-k}(t') >>\}. \qquad (42)$$

$$i\frac{d}{dt} << a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >>= \delta(t-t')\{n_p\delta_{q.0} - n_{p+k}\delta_{q.0}\} +$$

$$+(\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_{p+q}) << a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$

$$+ \sum_{q'\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{<< a_{p+q}^+(t)a_{p+k-q'}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$

$$- << a_{p+q+q'}^+(t)a_{p+k}(t'); \rho_{-k}(t') >>\}. \qquad (43)$$

Переходя к Фурье-образам, получаем цепочку зацепляющихся уравнений

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_p)G_p(k,\omega) = \{n_p - n_{p+k}\} + \varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t') - \varepsilon_p G_p(k,t-t') +$$

$$+ \sum_{q\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q})S(\vec{q})\{<< a_p^+ a_{p+k-q}|\rho_{-k} >>_\omega - << a_{p+q}^+ a_{p+k}|\rho_{-k} >>_\omega\}. \qquad (44)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p) << a_p^+ a_{p+k-q}|\rho_{-k} >>_\omega = \{n_p\delta_{q.0} - n_{p+k}\delta_{q.0}\} +$$

$$+\sum_{q'\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{<< a_p^+ a_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}>>_\omega - << a_{p+q'}^+ a_{p+k-q}|\rho_{-k}>>_\omega\}. \tag{45}$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q}) << a_{p+q}^+ a_{p+k}|\rho_{-k}>>_\omega = \{n_p\delta_{q,0} - n_{p+k}\delta_{q,0}\} +$$

$$+\sum_{q'\neq 0} \mathrm{V}_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{<< a_{p+q}^+ a_{p+k-q'}|\rho_{-k}>>_\omega - << a_{p+q+q'}^+ a_{p+k}|\rho_{-k}>>_\omega\}. \tag{46}$$

Как следует из (45) и (46), функции Грина $<< a_p^+ a_{p+k-q}|\rho_{-k}>>_\omega$ и $<< a_{p+q}^+ a_{p+k}(t)|\rho_{-k}>>_\omega\}$ пропорциональны примесному рассеянию $\mathrm{V}_i(\vec{q})S(\vec{q})$, то есть имеют высший порядок малости по рассеянию по сравнению с функцией $G_p(k,\omega)$. Поэтому для вычисления затухания функций Грина во втором порядке по рассеянию достаточно сохранить в правых частях уравнений (45) и (46) только слагаемые с $q' = -q$

$$\begin{gathered} << a_p^+ a_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}>>_\omega \approx \delta_{-q',q} G_p(k,\omega), \\ << a_{p+q'}^+ a_{p+k-q}(t)|\rho_{-k}>>_\omega\} \approx \delta_{-q',q} G_{p-q}(k,\omega), \\ << a_{p+q}^+ a_{p+k-q'}|\rho_{-k}>>_\omega \approx \delta_{-q',q} G_{p+k}(k,\omega), \\ << a_{p+q+q'}^+ a_{p+k}(t)|\rho_{-k}>>_\omega\} \approx \delta_{-q',q} G_p(k,\omega). \end{gathered} \tag{47}$$

С учетом расцеплений (47) уравнения (45) и (46) при $q \neq 0$ примут вид

$$\begin{gathered} (\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p) << a_p^+ a_{p+k-q}|\rho_{-k}>>_\omega = \\ = \mathrm{V}_i(-\vec{q})S(-\vec{q})\{G_p(k,\omega) - G_{p-q}(k,\omega)\}. \end{gathered} \tag{48}$$

$$\begin{gathered} (\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q}) << a_{p+q}^+ a_{p+k}|\rho_{-k}>>_\omega = \\ = \mathrm{V}_i(-\vec{q})S(-\vec{q})\{\{G_{p+q}(k,\omega) - G_p(k,\omega)\}. \end{gathered} \tag{49}$$

В результате цепочка кинетических уравнений замыкается, и для функции Грина $G_p(k,\omega)$ в длинноволновом приближении ($k \to 0$) получаем

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} +$$

$$+\sum_{\vec{q}\neq 0} |\mathrm{V}_i(\vec{q})|^2 |S(\vec{q})|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \varepsilon_{p-q} + \varepsilon_p} G_p(k,\omega) + \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q}} G_p(k,\omega) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\omega - \varepsilon_{p-q} + \varepsilon_p} G_{p-q}(k,\omega) - \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q}} G_{p+q}(k,\omega) \right\}. \tag{50}$$

Так как в сумме по $\vec{q}$ каждому слагаемому $\vec{q}$ соответствует слагаемое $-\vec{q}$, то в первом и четвертом слагаемом в правой части уравнения (50) мы можем сделать замену $p-q \to p+q$. Тогда окончательно уравнение (50) можно записать в виде

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} + \sum_q \{W_{p,p+q}G_p(k,\omega) - W_{p+q,p}G_{p+q}(k,\omega)\}, \quad (51)$$

где

$$W_{p,p+q}(\omega) = |V_i(\vec{q})|^2 S(\vec{q})|^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} + \omega} + \frac{1}{\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p + \omega}\right), \quad (52)$$

или

$$\omega G_p(k,\omega) = \frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} + \sum_{p'} \{W_{p,p'}G_p(k,\omega) - W_{p',p}G_{p'}(k,\omega)\}.$$

Решение уравнения (51) можно представить в виде

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega - M_p(k,\omega)},$$

где $M_p(k,\omega)$ - массовый оператор, который в нашем случае представляет собой комбинацию коэффициентов W.

Поскольку как и в предыдущем случае нас интересует лишь эффект затухания функций Грина и случай $k << k_F$, $\omega << \omega_0$, мы можем оставить в массовом операторе как и прежде лишь мнимую часть

$$M_p(k,\omega + i\varepsilon) \approx -i\gamma_p(k,\omega) \approx -i\gamma_p$$

и для функции Грина

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega + \gamma_p} = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon}\frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega + i\gamma_p}. \quad (53)$$

Тогда для вычисления мнимой части массового оператора в выражении (52) мы можем положить $\omega = i\varepsilon$. Усредняя также по распределению примесей

$$< |S(\vec{q})|^2 >_i = \frac{1}{N^2}\sum_{ll'} e^{-i\vec{q}(\vec{l}-\vec{l'})} < C_l C_{l'} > \approx \frac{1}{N}\sum_{ll'} C_l \delta_{ll'} = \frac{N_i}{N^2} = \frac{C}{N},$$

получим

$$ImW_{p,p+q}(i\varepsilon) = -2\pi|V_i(\vec{q})|^2\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}).$$

Тогда уравнение (51) для функции Грина G_p примет вид

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{p}}{m} -$$

$$-2\pi\frac{C}{N}\sum_q |V_i(q)|^2\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q})\{G_p(k,\omega) - G_{p+k}(k,\omega)\}. \quad (54)$$

Ищем решение уравнения (54) в виде (53). Тогда с учетом условия $\omega << \omega_0$ получаем

$$\gamma_p = 2\pi\frac{C}{N}\sum_q |V_i(q)|^2\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q})\left(1 - \frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\right), \quad (55)$$

где θ' - угол между векторами $\vec{k}$ и $\vec{p}'$, а θ - угол между векторами $\vec{k}$ и $\vec{p}$ ($\vec{p}\,' = \vec{p} + \vec{q}$). Перейдем в (55) от суммирования к интегрированию по $\vec{q}$. Удобно выбрать систему координат в q - пространстве так, чтобы ось z была направлена по вектору $\vec{p}$, а вектор $\vec{k}$ лежал в плоскости xoz. Тогда, используя известную формулу стереометрии, получаем

$$\cos\theta' = \cos\theta\cos\theta_1 + \sin\theta\sin\theta_1\cos\phi,$$

где θ_1 - угол между векторами $\vec{p}$ и $\vec{p}\,'$. При интегрировании по $\vec{q}$ интеграл от $\cos\phi$ по переменной ϕ будет равен нулю, тогда

$$\gamma_p = 2\pi\frac{C}{N}\sum_q |V_i(q)|^2\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q})\left(1 - \cos\theta_{p,p+q}\right).$$

Учитывая, что электронный газ в металлах является вырожденным, можно заметить, что $\left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right)$ ведет себя как $\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_F)$. Тогда мы можем усреднить затухание по поверхности Ферми (по всем электронам проводимости)

$$\bar{\gamma}_{imp} = -\int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon_p\left(\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right)\gamma_p = 2\pi\frac{C}{N}\sum_q |V_i(q)|^2\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q})\left(1 - \frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\right). \quad (56)$$

Затухание (56) не зависит от температуры и остается конечным при $T = 0$. Рассеяние на примесях приводит к остаточному сопротивлению металлов.

Соответственно одночастичную функцию Грина G_p с усредненным по поверхности Ферми затуханием (56) можно представить в виде

$$G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega + i\bar{\gamma}_{imp}}. \tag{57}$$

3.4 Рассеяние на фононах

Рассмотрим теперь сопротивление металла, обусловленное наличием электрон-фононного рассеяния.

Запишем для функции $G_p(k, t-t')$ уравнение движения, учитывая лишь рассеяние электронов на фононах:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_p(k,t-t')}{dt} &= \delta(t-t')\{n_p - n_{p+k}\} + \varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t') - -\varepsilon_p G_p(k,t-t')+ \\
&+\sum_q \mathrm{F}_q\{<< b_q(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t') >> + \\
&+ << b_{-q}^+(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t') > - \\
&- << b_q(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t') >> - \\
&- << b_{-q}^+(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t') >>\}.
\end{aligned} \tag{58}$$

Для упрощения записей введем обозначения:

$$\begin{aligned}
G_1p(k,q,t-t') &= << b_q(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t') >>, \\
G_2p(k,q,t-t') &= << b_{-q}^+(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t') >>, \\
G_3p(k,q,t-t') &= << b_q(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t') >>, \\
G_4p(k,q,t-t') &= << b_{-q}^+(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t') >> .
\end{aligned} \tag{59}$$

Запишем для функций Грина (59) уравнения движения:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_{1p}(k,q,t-t')}{dt} &= (\varepsilon_{p+k-q} - \varepsilon_p)G_{1p}(k,q,t-t') + \omega_q G_{1p}(k,q,t-t')+ \\
&+\sum_{p'} \mathrm{F}_{-q} << a_p^+(t)a_{p+k-q}(t)a_{p'}^+(t)a_{p'+q}(t);\rho_{-k}(t') >> + \\
+\sum_{q'} \mathrm{F}_{q'} \{&<< (b_{-q'}^+(t)b_q(t) + b_{q'}(t)b_q(t))a_p^+(t)a_{p+k-q-q'}(t);\rho_{-k}(t') >> - \\
&- << (b_{-q'}^+(t)b_q(t) + b_{q'}(t)b_q(t))a_{p+q'}^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t') >\}.
\end{aligned} \tag{60}$$

$$i\frac{dG_{2p}(k,q,t-t')}{dt} = (\varepsilon_{p+k-q} - \varepsilon_p)G_{2p}(k,q,t-t') - \omega_q G_{2p}(k,q,t-t') -$$
$$-\sum_{p'} \mathrm{F}_{-q} << a_p^+(t)a_{p+k-q}(t)a_{p'}^+(t)a_{p'+q}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$
$$+\sum_{q'} \mathrm{F}_{q'} \{<< (b_{q'}(t)b_{-q}^+(t) + b_{-q'}^+(t)b_{-q}^+(t))a_p^+(t)a_{p+k-q-q'}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$
$$- << (b_{q'}(t)b_{-q}^+(t) + b_{-q'}^+(t)b_{-q}^+(t))a_{p+q'}^+(t)a_{p+k-q}(t); \rho_{-k}(t') >\}. \qquad (61)$$

$$i\frac{dG_{3p}(k,q,t-t')}{dt} = (\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_{p+q})G_{3p}(k,q,t-t') + \omega_q G_{3p}(k,q,t-t') +$$
$$+\sum_{p'} \mathrm{F}_{-q} << a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t)a_{p'}^+(t)a_{p'+q}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$
$$+\sum_{q'} \mathrm{F}_{q'} \{<< (b_{-q'}^+(t)b_q(t) + b_{q'}(t)b_q(t))a_{p+q}^+(t)a_{p+k-q'}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$
$$- << (b_{-q'}^+(t)b_q(t) + b_{q'}(t)b_q(t))a_{p+q+q'}^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >\}. \qquad (62)$$

$$i\frac{dG_{4p}(k,q,t-t')}{dt} = (\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_{p+q})G_{4p}(k,q,t-t') - \omega_q G_{4p}(k,q,t-t') -$$
$$-\sum_{p'} \mathrm{F}_{-q} << a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t)a_{p'}^+(t)a_{p'+q}(t); \rho_{-k}(t') >> +$$
$$+\sum_{q'} \mathrm{F}_{q'} \{<< (b_{q'}(t)b_{-q}^+(t) + b_{-q'}^+(t)b_{-q}^+(t))a_{p+q}^+(t)a_{p+k-q'}(t); \rho_{-k}(t') >> -$$
$$- << (b_{q'}(t)b_{-q}^+(t) + b_{-q'}^+(t)b_{-q}^+(t))a_{p+q+q'}^+(t)a_{p+k}(t); \rho_{-k}(t') >\}. \qquad (63)$$

Переходя к Фурье-образам и используя расцепления для функций Грина вида

$$<< a_p^+ a_{p+k-q} a_{p'}^+ a_{p'+q} | \rho_{-k} >>_\omega \approx (1 - n_{p+k-q})\delta_{p',p+k-q} G_p - n_p \delta_{p,p'+q} G_{p-k},$$
$$<< a_{p+q}^+ a_{p+k} a_{p'}^+ a_{p'+q} | \rho_{-k} >>_\omega \approx (1 - n_{p+k})\delta_{p',p+k} G_{p+q} - n_{p+q} \delta_{p+q,p'+q} G_p,$$
$$<< b_{-q'}^+ b_q a_p^+ a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} N_q G_p,$$
$$<< b_{-q'}^+ b_q a_{p+q'}^+ a_{p+k-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} N_q G_{p-q},$$
$$<< b_{q'} b_{-q}^+ a_p^+ a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} (1 + N_q) G_p,$$
$$<< b_{q'} b_{-q}^+ a_{p+q'}^+ a_{p+k-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} (1 + N_q) G_{p-q},$$
$$<< b_{-q'}^+ b_q a_{p+q}^+ a_{p+k-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} N_q G_{p+q},$$
$$<< b_{-q'}^+ b_q a_{p+q+q'}^+ a_{p+k} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'} N_q G_p,$$

$$<< b_{q'} b^+_{-q} a^+_{p+q} a_{p+k-q'} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'}(1+N_q) G_{p+q},$$

$$<< b_{q'} b^+_{-q} a^+_{p+q+q'} a_{p+k} | \rho_{-k} >>_\omega \approx \delta_{q,-q'}(1+N_q) G_p,$$

а также полагая функции Грина типа $<< b_{q'} b_q a^+_p a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} >>_\omega$ и $<< b^+_{-q'} b^+_{-q} a^+_p a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} >>_\omega$ равными нулю, можно получить замкнутую цепочку уравнений вида

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_p) G_p(k,\omega) = n_p - n_{p+k} +$$

$$+ \sum_q \mathrm{F}_q \{ G_{1p}(k,q,\omega) + G_{2p}(k,q,\omega) - G_{3p}(k,q,\omega) - G_{4p}(k,q,\omega) \}, \qquad (64)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p - \omega_q) G_{1p}(k,q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ (1 - n_{p+k-q}) G_p(k,\omega) -$$

$$- n_p G_{p-q}(k,\omega) + N_q G_p(k,\omega) - N_q G_{p-q}(k,\omega) \}, \qquad (65)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p + \omega_q) G_{2p}(k,q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ -(1 - n_{p+k-q}) G_p(k,\omega) +$$

$$+ n_p G_{p-q}(k,\omega) + (1+N_q) G_p(k,\omega) - (1+N_q) G_{p-q}(k,\omega) \}, \qquad (66)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} - \omega_q) G_{3p}(k,q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ (1 - n_{p+k}) G_{p+q}(k,\omega) -$$

$$- n_{p+q} G_p(k,\omega) + N_q G_{p+q}(k,\omega) - N_q G_p(k,\omega) \}, \qquad (67)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} + \omega_q) G_{4p}(k,q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ -(1 - n_{p+k}) G_{p+q}(k,\omega) +$$

$$+ n_{p+q} G_p(k,\omega) + (1+N_q) G_{p+q}(k,\omega) - (1+N_q) G_p(k,\omega) \}. \qquad (68)$$

В длинноволновом приближении $k \to 0$ уравнения (64) - (68) можно записать в виде

$$\omega G_p(\omega) = n_p - n_{p+k} +$$

$$+ \sum_q \mathrm{F}_q \{ G_{1p}(q,\omega) + G_{2p}(q,\omega) - G_{3p}(q,\omega) - G_{4p}(q,\omega) \}. \qquad (69)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p - \omega_q) G_{1p}(q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ (1 - n_{p+q}) G_p(\omega) -$$

$$- n_p G_{p+q}(\omega) + N_q G_p(\omega) - N_q G_{p+q}(\omega) \}, \qquad (70)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p + \omega_q) G_{2p}(q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ -(1 - n_{p+q}) G_p(\omega) +$$

$$+ n_p G_{p+q}(\omega) + (1+N_q) G_p(\omega) - (1+N_q) G_{p-q}(\omega) \}, \qquad (71)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} - \omega_q) G_{3p}(q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ (1 - n_{p+k}) G_{p+q}(\omega) -$$

$$- n_{p+q} G_p(\omega) + N_q G_{p+q}(\omega) - N_q G_p(\omega) \}, \qquad (72)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} + \omega_q) G_{4p}(q,\omega) = \mathrm{F}_{-q} \{ -(1 - n_{p+k}) G_{p+q}(\omega) +$$

$$+n_{p+q}G_p(k,\omega)+(1+N_q)G_{p+q}(\omega)-(1+N_q)G_p(\omega)\} . \qquad (73)$$

При записи уравнений (69)-(73) мы, как и в предыдущем случае, сделали замену переменных $p-q \to p+q$.

Приводя подобные члены, мы можем переписать уравнения (70) - (73) в виде

$$(\omega-\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p-\omega_q)G_{1p}=\mathrm{F}_{-q}\left\{(1-n_{p+q}+N_q)G_p-(n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega-\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p-\omega_q)G_{1p}=\mathrm{F}_{-q}\left\{(1-n_{p+q}+N_q)G_p-(n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega+\varepsilon_{p+q}-\varepsilon_p-\omega_q)G_{1p}=\mathrm{F}_{-q}\left\{-(n_{p+q}+N_q)G_p+(1-n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega+\varepsilon_{p+q}-\varepsilon_p+\omega_q)G_{1p}=\mathrm{F}_{-q}\left\{-(1-n_{p+q}+N_q)G_p+(n_p+N_q)G_{p+q}\right\}.$$

Тогда для исходной функции Грина $G_p(\omega)$ мы получаем окончательно уравнение вида (51) с функцией

$$W_{p,p+q}=|F_q|^2\left[\frac{2\omega(1-n_{p+q}+N_q)}{\omega^2-(\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p-\omega_q)^2}+\frac{2\omega(n_{p+q}+N_q)}{\omega^2-(\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p+\omega_q)^2}\right], \qquad (74)$$

где $N_q=<b_q^+b_q>=\left(e^{\omega_k/k_БT}-1\right)^{-1}, \qquad n_p=<a_p^+a_p>=\left(e^{\varepsilon_p/k_БT}+1\right)^{-1}$. Полагая в (74) $\omega=i\varepsilon\to 0$, запишем решение уравнения (51) в виде (57), где для усредненного по поверхности Ферми фононного затухания имеем

$$\bar{\gamma}_{ph}=\int\limits_{\varepsilon_F}^{\infty}d\varepsilon_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\right)\gamma_p=\int\limits_{\varepsilon_F}^{\infty}d\varepsilon_p\left\{\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}ImW_{p,p+q}(i\varepsilon)-\right.$$

$$\left.-\frac{\vec{p}(\vec{p}+\vec{q})}{p^2}\frac{\partial n_{p+q}}{\partial\varepsilon_{p+q}}ImW_{p+q,p}(i\varepsilon)\right\}=$$

$$=2\pi\sum_q|F_q|^2\frac{\omega_q}{k_БT}(1-\cos\theta)N_q(1+N_q)[\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p+q}-\omega_q)+$$

$$+\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p+q}+\omega_q)], \qquad (75)$$

где

$$\cos\theta=\vec{p}(\vec{p}+\vec{q})/p^2, \qquad p=p_F.$$

Переходя в формуле (75) от суммирования к интегрированию по q и используя приближение дебаевского спектра фононов $\omega_q=cq$ и $|F_q|^2=const q$, где c - скорость звука, получаем для фононного затухания

$$\gamma_{ph}=4\gamma_0\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5\int\limits_0^{\theta_D/T}\frac{x^5dx}{(e^x-1)(1-e^{-x})},$$

где $\gamma_0 \approx \theta_D$ - температура Дебая.

В случае высоких температур $T >> \theta_D$ предел интегрирования $\theta_D/T << 1$, так что можно разложить

$$e^x \approx 1 + x, \qquad e^{-x} \approx 1 - x$$

и получить

$$\gamma_{ph} \approx \gamma_0 \frac{T}{\theta_D}.$$

Соответственно для проводимости и удельного сопротивления имеем

$$\sigma_{ph} \approx n_e e^2 m \frac{1}{\gamma_{ph}} \approx \frac{n_e e^2}{m\gamma_0} \frac{\theta_D}{T}, \qquad \rho_{ph} = \frac{1}{\sigma_{ph}} \sim \frac{T}{\theta_D}.$$

В случае низких температур $T << \theta_D$ предел интегрирования $\theta_D/T \to \infty$ и, вычисляя интеграл

$$\int_0^\infty \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \approx 124,$$

получаем для затухания

$$\gamma_{ph} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5$$

и для проводимости и удельного сопротивления

$$\sigma_{ph} \sim \left(\frac{\theta_D}{T}\right)^5, \qquad \rho_{ph} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5.$$

Таким образом, при низких температурах сопротивление металлов, обусловленное рассеянием электронов на фононах, пропорционально абсолютной температуре T, а при высоких температурах пропорционально пятой степени абсолютной температуры T^5.

Полученные в рамках метода функций Грина результаты для сопротивления металлов в случае примесного и фононного рассеяний в основном согласуются с экспериментом.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. Запаздывающие и опережающие функции Грина в статистической физике//ДАН СССР. 1959. Т.126. С.53.

2. Зубарев Д.Н. Двухвременные температурные функции Грина в статистической физике // УФН. 1960. Т.71. С.71.

3. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 415 с.

4. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 546 с.

5. Бонч-Бруевич В.М., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. М.: Наука, 1961.

6. Плакида Н.М. Некоторые вопросы квантовой теории твердого тела (Метод двухвременных функций Грина). Дубна: ОИЯИ. 1974. 153 с.

7. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.(мл.) Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984. 384 с.

8. Репке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.

9. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 388 с.

10. Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма. Киев: Наукова Думка, 1984, 336 с.

11. Квасников И.А., Озрин В.Д., Олейников В.П. Двухвременной температурный формализм в теории нормальных ферми-систем. Ч.1. Система частиц с кулоновским взаимодействием. Препринт ИТФ-69-62, Киев, ИТФ, 1969, 49 с; Ч.2.Цепочка уравнений для функций Грина. Препринт ИТФ-70-54, Киев, ИТФ, 1969, 40 с; Ч.3. Квазичастичные возбуждения в вырожденной системе. Препринт ИТФ-71-84Р, Киев, ИТФ, 1971, 104 с.

12. Дудкин С.И. Функции Грина в теории поглощения света кристаллами. Киев: Наукова Думка, 1983, 176 с.

13. Задачи по термодинамике и статистической физике / Под. ред. П.Ландсберга. М.: Мир, 1974. 640 с.

14. Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976.

15. Башкиров Е.К. Метод функций Грина: ч.I. Самара, 1997.