

ЛЕКЦИЯ V

ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ ($T \ll \Theta$)

С о д е р ж а н и е

| | |
|--|-----|
| § 1. Уравнение для функции распределения | 90 |
| Задача № 1. Остаточное сопротивление | 95 |
| Задача № 2. Электронная теплопроводность | 96 |
| Задача № 3. Термоэлектрический эффект | 98 |
| Задача № 4. Закон возрастания энтропии | 99 |
| § 2. Эффект Кондо | 100 |
| § 2.1. Теория возмущений | 100 |
| § 2.2. Вычисление температурной поправки | 108 |
| § 2.3. Сведение проблемы к одномерной задаче | 110 |
| § 3. Нестационарные явления | 112 |
| § 3.1. Продольные поля | 112 |
| § 3.2. Поперечные поля | 116 |
| Список литературы | 119 |

Изучаются кинетические явления, происходящие в металле в области предельно низких температур и обусловленные рассеянием на неподвижных примесных центрах. Если дополнительно предположить, что поверхность Ферми имеет сферическую форму, тогда кинетическое уравнение допускает точное решение. Удаётся определить все кинетические коэффициенты, а также рассмотреть различные нестационарные явления, происходящие в слабом продольном и поперечном электрическом поле.

В лекции изучается так называемый эффект Кондо [1], который проявляется, когда электроны в металле рассеиваются на примесях со спином. При этом оказывается, что рассеяние на антиферромагнитных примесях приводит к возникновению конечного температурного интервала, где удельное сопротивление имеет достаточно широкий температурный минимум.

§ 1. Уравнение для функции распределения

Существенное отличие металла от плазмы состоит в том, что в металле электроны движутся во внешнем поле решётки неподвижных ионов. В соответствии с этим при столкновениях с решёткой средний импульс не сохраняется.

В этой лекции мы рассмотрим рассеяние электронов в случайном поле неподвижных примесных центров.

Вероятность рассеяния электрона в поле примесных центров в борновском приближении равна

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{p}'} |U_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')), \quad (1)$$

где $U_{\vec{p}', \vec{p}}$ – матричный элемент энергии взаимодействия электронов со всеми примесными центрами, занимающими положения $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots$; $U(\vec{r}) = \sum_k w(\vec{r} - \vec{R}_k)$.

Матричный элемент вычисляется по волновым функциям свободных электронов, нормированным на полный объём V :

$\psi_{\vec{p}} = \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)/\sqrt{V}$:

$$U_{\vec{p}', \vec{p}} = \frac{1}{V} \sum_k \int w(\vec{r} - \vec{R}_k) \exp(-i\vec{p}'\vec{r}/\hbar) \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar) d\vec{r}. \quad (2)$$

Поскольку фактически интегрирование ведётся в бесконечных пределах, то удобно произвести замену $\vec{r} - \vec{R}_k \rightarrow \vec{r}$, после чего матричный элемент преобразуется к сумме амплитуд рассеяния на отдельных центрах:

$$U_{\vec{p}', \vec{p}} = \frac{1}{V} \sum_k v_{\vec{p}', \vec{p}} \exp\left\{-i(\vec{p}' - \vec{p}) \vec{R}_k/\hbar\right\}, \quad (3)$$

где $v_{\vec{p}', \vec{p}} = \int w(\vec{r}) \exp\{-i(\vec{p}' - \vec{p})\vec{r}/\hbar\} d\vec{r}$ – компонента Фурье потенциала взаимодействия электрона с отдельным примесным центром, зависящая от передаваемого импульса $\vec{q} = (\vec{p}' - \vec{p})/\hbar$.

Таким образом, вероятность рассеяния (1) представляется в виде произведения вероятностей рассеяния на отдельных центрах:

$$W = \frac{2\pi}{V^2} \sum_{\vec{p}'} |v_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')) \sum_{k,j} \exp \left\{ -i\vec{q} \left(\vec{R}_k - \vec{R}_j \right) \right\}. \quad (4)$$

Если концентрация примесей мала, то они расположены случайно, и среднее расстояние между ними много больше междуатомных расстояний. При этих условиях можно усреднить вероятность рассеяния по случайному расположению атомов примеси:

$$\begin{aligned} & \overline{\sum_{k,j} \exp \left\{ -i\vec{q} \left(\vec{R}_k - \vec{R}_j \right) \right\}} = \\ & = \overline{\sum_{k=j} \exp \left\{ -i\vec{q} \left(\vec{R}_k - \vec{R}_j \right) \right\}} + \overline{\sum_{k \neq j} \exp \left\{ -i\vec{q} \left(\vec{R}_k - \vec{R}_j \right) \right\}}. \end{aligned}$$

Здесь первая сумма равна $N_{\text{пр}}$ — полному числу примесных центров; вторая сумма содержит быстро осциллирующие функции и поэтому обращается в нуль. В соответствии с этим вероятность рассеяния оказывается пропорциональной концентрации примесей $n_{\text{пр}} = N_{\text{пр}}/V$:

$$W = n_{\text{пр}} \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_{\vec{p}'} |v_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')). \quad (5)$$

Выражение (5) относится к рассеянию одного электрона.

Для того чтобы получить ту часть интеграла столкновений, которая соответствует "уходам" из заданного элемента фазового пространства в окрестности \vec{p} и переходам в окрестность вектора \vec{p}' , необходимо умножить полученную вероятность на произведение вероятности нахождения электрона в окрестности импульса \vec{p} (т.е. на функцию распределения $f(\vec{p})$) и на вероятность того, что состояние с импульсом \vec{p}' незаполнено (т.е. на $1 - f(\vec{p}')$).

В результате находим отрицательную часть интеграла столкновений:

$$\begin{aligned} & \left\{ \hat{S}t(f) \right\}_{\text{уходы}} = \\ & = -\frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 [f(\vec{p}) [1 - f(\vec{p}')]] \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')) \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (6a) \end{aligned}$$

Здесь n_i – число примесных центров в единице объёма.

Для того чтобы учесть положительную часть интеграла столкновений, которая соответствует "приходам" в заданный элемент фазового пространства в окрестности \vec{p} "уходам" из окрестности вектора \vec{p}' , необходимо умножить полученную вероятность на произведение вероятности нахождения электрона в окрестности импульса \vec{p}' (т.е. на функцию распределения $f(\vec{p}')$) и на вероятность того, что состояние с импульсом \vec{p} незаполнено (т.е. на $1 - f(\vec{p})$).

Таким образом мы находим "приходную" часть интеграла столкновений:

$$\begin{aligned} & \left\{ \hat{S}t(f) \right\}_{\text{приходы}} = \\ & = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 [f(\vec{p}') [1 - f(\vec{p})]] \delta(\epsilon(\vec{p}') - \epsilon(\vec{p})) \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (6b) \end{aligned}$$

После сложения (6a) и (6b) происходит сокращение нелинейных слагаемых, так что в результате интеграл столкновений приобретает больцмановский вид, но с бесконечной массой рассеивающего центра:

$$\hat{S}t(f) = -\frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\vec{p}', \vec{p}}|^2 [f(\vec{p}) - f(\vec{p}')] \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')) \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (7)$$

где n_i – число примесных центров в единице объёма.

Проинтегрируем по длине \vec{p}' , после чего получаем линейное интегральное уравнение относительно интегрирования по направлению вектора \vec{p}' :

$$\hat{S}t(f(\vec{p})) = - \int W(\theta) [f(\vec{p}) - f(\vec{p}')] \frac{d\Omega'}{4\pi}, \quad (8)$$

где

$$W(\theta) = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \int |v_{\vec{p}, \vec{p}'}|^2 \delta(\epsilon(\vec{p}) - \epsilon(\vec{p}')) \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Здесь предполагается, что поверхность Ферми является сферой, так что при заданной длине импульса $|\vec{p}| = |\vec{p}'| = p_F$ вероятность перехода $W(\theta)$ зависит только от θ — угла между направлением вектора \vec{p} и вектора \vec{p}' . Записанный в виде (8), интеграл столкновений является диагональным по отношению к полному набору сферических функций $Y_l^m(\alpha, \varphi)$, где (α, φ) — сферические координаты, относящиеся к импульсу \vec{p} .

Для того чтобы это доказать, подставим в интеграл столкновения функцию распределения в виде разложения по различным m , но с заданным l :

$$f(\alpha', \varphi') = \sum_l \left\{ f_{l,0} P_l(\cos\alpha') + \sum_{m=-l, m \neq 0}^l f_{l,m} Y_{lm}^*(\alpha', \varphi') \right\}.$$

Разложим далее вероятность перехода $W(\theta)$ по полиномам Лежандра $P_l(\cos(\theta))$, к каждому из которых применим теорему сложения:

$$\begin{aligned} \cos(\theta) &= \cos(\alpha') \cos(\alpha) + \sin(\alpha') \sin(\alpha) \cos(\varphi') \cos(\varphi) + \\ &+ \sin(\alpha') \sin(\alpha) \sin(\varphi') \sin(\varphi); \end{aligned} \quad (9)$$

$$P_l(\cos(\theta)) = P_l(\cos\alpha) P_l(\cos\alpha') + \sum_{m=-l, m \neq 0}^{m=l} Y_{lm}^*(\alpha, \varphi) Y_{lm}(\alpha', \varphi').$$

В результате получим

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4\pi} \int P_l(\cos\theta) \left\{ f_{l,0} P_l(\cos\alpha') + \right. \\ &+ \left. \sum_{m=-l, m \neq 0}^l f_{l,m} Y_{lm}(\alpha', \varphi') \right\} \sin\alpha' d\alpha' d\varphi' = \frac{1}{2l+1} f_l(\alpha, \varphi) = \\ &= \frac{1}{2l+1} \left\{ f_{l,0} P_l(\cos\alpha) + \sum_{m=-l, m \neq 0}^l f_{l,m} Y_{lm}(\alpha, \varphi) \right\}; \end{aligned} \quad (10a)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \int P_l(\cos\theta) \{f_{l,0}P_l(\cos\alpha) + \\
& + \sum_{m=-l, m \neq 0}^l f_{l,m} Y_{lm}(\alpha, \varphi)\} \sin\alpha' d\alpha' d\varphi' = \delta_{l,0} f_l(\alpha, \varphi) = \\
& = \delta_{l,0} \left\{ f_{l,0} P_l(\cos\alpha) + \sum_{m=-l, m \neq 0}^l f_{l,m} Y_{lm}(\alpha, \varphi) \right\}. \quad (10b)
\end{aligned}$$

Отсюда можно заключить, что результат действия оператора упругих столкновений для s -волны обращается в нуль.

Для всех остальных гармоник мы получим отличные от нуля собственные значения, зависящие только от l .

В частности, если в качестве функции распределения выбрать линейную функцию вектора \vec{p} (например, $\vec{A}\vec{p}$), тогда мы выделяем гармонику с $l = 1$:

$$\begin{aligned}
W_1 \cos(\theta) = W_1 \left[\cos(\alpha') \cos(\alpha) + \sin(\alpha') \sin(\alpha) \cos(\varphi') \cos(\varphi) + \right. \\
\left. + \sin(\alpha') \sin(\alpha) \sin(\varphi') \sin(\varphi) \right],
\end{aligned}$$

а затем умножаем её последовательно на

$$\cos(\alpha'), \quad \cos(\alpha') \cos(\varphi'), \quad \cos(\alpha') \sin(\varphi').$$

В результате усреднения по углам снова получим

$$\cos(\alpha), \quad \cos(\alpha) \cos(\varphi), \quad \cos(\alpha) \sin(\varphi).$$

Отсюда можно заключить, что при действии оператора столкновений на функцию $(\vec{A}\vec{p})$ мы снова получим функцию $(\vec{A}\vec{p})$:

$$\hat{S}t \{(\vec{A}\vec{p})\} = -(\vec{A}\vec{p}) \int W(\theta) [1 - \cos\theta] \frac{d\Omega'}{4\pi}. \quad (11)$$

Введём удобное обозначение:

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \int W(\theta) [1 - \cos\theta] \frac{d\Omega'}{4\pi}. \quad (12)$$

Величина τ_{tr} имеет размерность времени и называется транспортным временем релаксации по импульсу.

Учитывая наличие δ -функции от энергии в определении оператора столкновений, а также его самосопряжённость, можно получить следующие соотношения:

$$\int \hat{S}t(f)d\vec{p} = 0, \quad \int \epsilon(p)\hat{S}t(f)d\vec{p} = 0, \quad (13)$$

$$\int \vec{p}\hat{S}t(f) \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{1}{\tau_{tr}} \langle \vec{p} \rangle, \quad \text{где} \quad \langle \vec{p} \rangle = \int \vec{p}f(\vec{p}) \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Два первых соотношения обозначают сохранение числа частиц и сохранение энергии при столкновениях. Третье соотношение определяет релаксацию среднего импульса, связанного с изменением импульса в каждом акте рассеяния с неподвижными примесями.

З а д а ч а № 1. Остаточное сопротивление

Определить удельное сопротивление электронного газа, обусловленного рассеянием на примесях (так называемое остаточное сопротивление) [2].

Р е ш е н и е.

Разложим решение кинетического уравнения по степеням приложенного электрического поля \vec{E} , которое считается однородным и не зависящим от времени: $f = f_0 + f_1$. Используя линейность оператора столкновений (8), а также то обстоятельство, что термодинамически равновесная функция Ферми $f_0 = n_F(\epsilon(p))$ зануляет интеграл столкновений, получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial n_F(\epsilon(p))}{\partial \vec{p}} e\vec{E} = \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} e \frac{(\vec{E}\vec{p})}{m} = -St(f_1). \quad (14)$$

Поскольку оператор столкновений пропорционален δ -функции от модуля импульса p и p' , а левая часть уравнения (14) есть

произведение функции от модуля на линейную функцию импульса \vec{p} , то в силу свойства оператора столкновений (12) решение имеет тот же вид, что и левая часть:

$$f_1 = -\tau_{tr} \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} e \frac{(\vec{E}\vec{p})}{m}, \quad \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} = -\delta \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right). \quad (15)$$

Далее запишем выражение для плотности электрического тока:

$$\vec{j} = \frac{e}{m} \int \vec{p} f^{(1)}(\vec{p}) \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{e^2 \vec{E}}{3} \tau_{tr} \int \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} p^2 \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (16)$$

Отсюда находим известную формулу остаточной проводимости:

$$\sigma = \tau_{tr} \frac{e^2}{3} \int \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} p^2 \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{ne^2 \tau_{tr}}{m}, \quad (17)$$

где $n = p_0^3 / 3\pi^2 \hbar^3$ – электронная плотность.

З а д а ч а № 2. Электронная теплопроводность

Определить низкотемпературный вклад в теплопроводность электронного газа, обусловленного рассеянием на примесях [2].

Р е ш е н и е.

В этой задаче в качестве нулевого приближения следует выбрать распределение Ферми с заданной зависимостью температуры от координат. Поскольку такая функция зануляет интеграл столкновений, то в линейном приближении по градиенту температуры получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial n_F(\epsilon(p))}{\partial \vec{r}} \vec{v} = n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu) \frac{\vec{p}\nabla T}{mT^2} = -St(f_1). \quad (18)$$

Левая часть этого уравнения есть линейная функция \vec{p} , так что сразу находим решение:

$$f_1 = -\tau_{tr} n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu) \frac{\vec{p}\nabla T}{mT^2}. \quad (19)$$

Плотность потока энергии может быть разложена на два слагаемых:

$$\vec{Q} = \langle \epsilon(p)\vec{v} \rangle = \mu \langle \vec{v} \rangle + \langle (\epsilon(p) - \mu)\vec{v} \rangle, \quad (20)$$

где угловые скобки обозначают умножение на функцию распределения и интегрирование по всем импульсам с множителем $2/(2\pi\hbar)^3$.

Первое слагаемое пропорционально электрическому, который заведомо отсутствует при заданном градиенте температуры. Таким образом, искомый тепловой поток находим с помощью подстановки формулы (19) во второе слагаемое (20):

$$\vec{Q} = -\tau_{tr} \int n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu)^2 \frac{\vec{p}}{m} \frac{(\vec{p}\nabla T)}{mT^2} \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (21)$$

С учётом кубической симметрии это выражение представляется в следующем виде:

$$\vec{Q} = -\frac{\nabla T}{3m^2T^2} \tau_{tr} \int n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu)^2 p^2 \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (22)$$

Откуда сразу находим коэффициент теплопроводности:

$$\kappa = \frac{\tau_{tr}}{3m^2T^2} \tau_{tr} \int n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu)^2 p^2 \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \quad (23)$$

$$= \frac{p_0^3}{3\pi^2\hbar^3} \frac{4T}{m} \int_0^{infy} \frac{x^2 dx}{\text{ch}^2 x} = \frac{nT\pi^2}{3m}. \quad (24)$$

Сравнение (17) и (24) позволяет установить закон Видемана-Франца:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{T\pi^2}{3e^2}. \quad (25)$$

З а д а ч а № 3. Термоэлектрический эффект

Определить величину электрического тока при заданном градиенте температуры [2].

Р е ш е н и е.

Первая поправка к функции распределения (19), обусловленная градиентом температуры, может быть использована для вычисления электрического тока:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{e}{m} \int \vec{p} f^{(1)}(\vec{p}) \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= -\frac{e\nabla T}{3T^2} \int \tau_{tr} p^2 n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu) \frac{2d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned} \quad (26)$$

Отсюда находим термоэлектрический коэффициент α , исходя из соотношения $\vec{j} = \alpha \sigma \nabla T$. В нашем случае

$$\alpha \sigma = -\frac{e}{3T^2} \int \tau_{tr} p^3 n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon))(\epsilon - \mu) \frac{md\xi}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (27)$$

Поскольку произведение $n_F(\epsilon)(1 - n_F(\epsilon)) = [2\text{ch}(\xi/2T)]^{-2}$ есть быстро спадающая функция энергетического параметра $\xi = \epsilon - \mu$, необходимо произвести разложение медленно меняющихся функций энергии $\tau_{tr} p^3$ по степеням отклонения от уровня Ферми:

$$J = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \tau_{tr} p^3 \Big|_{p=\sqrt{2m\epsilon}} \approx \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \tau_{tr} p^3 \Big|_{p=p_0} + \xi \frac{\partial J}{\partial \epsilon} \Big|_{p=p_0}.$$

Подставляя это выражение в (27) и производя интегрирование по ξ в бесконечных пределах, получим

$$\alpha = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial J}{\partial \epsilon} \Big|_{p=p_0} \frac{eT\pi^2}{9} = -\frac{\pi^2 T}{3e} \frac{\partial \ln J}{\partial \epsilon} \Big|_{p=p_0}. \quad (28)$$

По порядку величины $|\alpha| \sim T/\epsilon_F$.

З а д а ч а № 4. Закон возрастания энтропии

Доказать H -теорему Больцмана для ферми-частиц, рассеивающихся на неподвижных центрах.

Р е ш е н и е.

Продифференцируем по времени общее выражение для энтропии ферми-газа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_e}{\partial t} &= \sum_{\vec{p}} \frac{\partial}{\partial t} \{-f_p \ln f_p - (1 - f_p) \ln(1 - f_p)\} = \\ &= \sum_{\vec{p}} \sum_p \left\{ \ln \left[\frac{(1 - f_p)}{f_p} \right] \right\} \frac{\partial f_p}{\partial t}. \end{aligned} \quad (29)$$

Временную производную от функции распределения выразим через разность числа "приходов" и "уходов" (6b) и (6a): $St(f) =$

$$= \sum_{\vec{p}'} W(\vec{p}', \vec{p}) [f(\vec{p}') (1 - f(\vec{p}')) - f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}))]. \quad (30)$$

В результате находим столкновительную часть изменения энтропии:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S_e}{\partial t} \right]_{\text{ст}} &= \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} W(\vec{p}', \vec{p}) [f(\vec{p}') (1 - f(\vec{p})) - \\ &- f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}'))] \left\{ \ln \left[\frac{(1 - f_p)}{f_p} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Учитывая симметрию вероятностной функции $W(\vec{p}, \vec{p}')$, запишем выражение (31) в симметричной форме:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial S_e}{\partial t} \right]_{\text{ст}} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} W(\vec{p}', \vec{p}) [f(\vec{p}') (1 - f(\vec{p})) - \\ &- f(\vec{p}) (1 - f(\vec{p}'))] \left\{ \ln \left[\frac{(1 - f_p)}{f_p} \right] - \ln \left[\frac{(1 - f'_p)}{f'_p} \right] \right\} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} W(\vec{p}', \vec{p}) f(\vec{p}) f(\vec{p}') \left\{ \left[\frac{(1 - f_p)}{f_p} \right] - \left[\frac{(1 - f'_p)}{f'_p} \right] \right\} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ \ln \left[\frac{(1-f_p)}{f_p} \right] - \ln \left[\frac{(1-f'_p)}{f'_p} \right] \right\} = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} W(\vec{p}', \vec{p}) f(\vec{p}) f(\vec{p}') \{ (x-y) [\ln x - \ln y] \}, \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$x = \frac{(1-f_p)}{f_p}, \quad y = \frac{(1-f'_p)}{f'_p}.$$

Все множители, стоящие под интегралом, имеют положительный знак, что приводит к обоснованию второго начала термодинамики для электронов в металле при $T = 0$.

Следует заметить, в силу δ -образного условия сохранения энергии, условию термодинамического равновесия $\partial S / \partial t = 0$ удовлетворяет произвольная неотрицательная функция от энергии.

§ 2. Эффект Кондо

§ 2.1. Теория возмущений

При вычислении статической проводимости мы до сих пор не учитывали спиновой переменной. В случае бесспиновых примесных центров это выглядит естественно.

В случае парамагнитных центров с заданным спином S простейшая форма гамильтониана имеет δ -образный характер:

$$\hat{H} = J \sum_k \int \hat{\psi}_\alpha^+(\vec{r}) \hat{\psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\sigma}_{\alpha,\beta} \hat{\mathbf{S}}_k \delta(\vec{r} - \vec{R}_k) d\vec{r}. \quad (33)$$

Для того чтобы получить амплитуду рассеяния, необходимо в выражение (33) подставить разложение ψ -операторов по операторам рождения и уничтожения электронов с заданным импульсом и спином:

$$\hat{\psi}_\alpha^+(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}, \sigma_1} \hat{a}_{\vec{p}, \sigma_1}^+ \delta_{\alpha, \sigma_1} \exp(-i\vec{p}\vec{r}),$$

$$\hat{\psi}_\beta(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}, \sigma_2} \delta_{\beta, \sigma_2} \exp(i\vec{p}\vec{r}). \quad (34)$$

В результате подстановки получаем произведения операторов рождения и уничтожения с различными импульсами:

$$\hat{H} = \frac{J}{V} \sum_{k, \vec{p}_1, \vec{p}_2} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2} \hat{\mathbf{S}}_k \exp\left(i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\vec{R}_k\right). \quad (35)$$

Таким образом, если при рассеянии на заданном примесном центре происходит переход электрона из состояния с заданным импульсом \vec{p}_2 и заданной проекцией спина σ_2 в состояние с заданным импульсом \vec{p}_1 и проекцией спина σ_1 , то этому процессу отвечает амплитуда:

$$\frac{J}{V} \hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{\mathbf{S}}_k \exp\left(i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\vec{R}_k\right). \quad (36)$$

Поскольку в конечном счёте нас интересует рассеяние с заданным изменением импульса, а не спина, то вероятность рассеяния необходимо усреднить по начальным ориентациям электронных спинов и просуммировать по их конечным ориентациям. Предположив, что рассеивающий центр расположен в начале координат, получаем вероятность:

$$\frac{J^2}{2V^2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \left(\hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{\mathbf{S}}\right) \left(\hat{\sigma}_{\sigma_2, \sigma_1} \hat{\mathbf{S}}\right) = \frac{J^2}{2V^2} S(1 + S). \quad (37)$$

Множитель $1/2$ происходит от усреднения по двум начальным проекциям спинов.

Полную вероятность получим, умножая (37) на полное число примесных центров.

Поскольку обменный интеграл J пропорционален произведению магнетонов Бора, – электронного и примесного, – то полученный результат (37) является малой постоянной поправкой к нерелятивистской части примесной амплитуды рассеяния.

Однако борновская амплитуда рассеяния (36) не отражает возможности возникновения резонансных эффектов, связанных

с переворотами спина парамагнитной примеси, для чего не требуется никакой энергии. Кондо обнаружил, что этот эффект проявляется уже во втором порядке теории возмущений для амплитуды рассеяния.

Для того чтобы правильно учесть принцип Паули и числа заполнения для виртуальных переходов, необходимо использовать нестационарную теорию возмущений для S -матрицы.

S -матрица возникает при переходе от представления Гейзенберга с полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ к представлению взаимодействия с нулевым гамильтонианом \hat{H}_0 и гамильтонианом взаимодействия \hat{V} :

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) &= \exp\left(\frac{-i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \hat{S}(t), \\ \hat{S}(t) &= \exp\left(\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (38)$$

Дифференцируя S -матрицу по времени, получим

$$\begin{aligned} i\dot{\hat{S}}(t) &= V(t)S(t, 0); \quad V(t) = e^{i\hat{H}_0t} (\hat{H} - \hat{H}_0) e^{-i\hat{H}_0t} = \\ &= e^{+i\hat{H}_0t} (\hat{V}) e^{-i\hat{H}_0t} = \hat{V}(t). \end{aligned} \quad (39)$$

В качестве начального условия следует написать $\hat{S}(0) = 1$, что следует из определения (38). При решении уравнения (39) с помощью итераций в качестве нулевого приближения используем $\hat{S}^{(0)}(t) = 1$. Поэтому, с учётом общего начального условия при $t = 0$, все остальные поправки следует вычислять при нулевых начальных условиях: $\hat{S}^{(k>0)}(0) = 0$.

Далее мы находим выражения для S -матрицы в первом и втором порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} S^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}(t_1) dt_1; \quad S^{(2)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}(t_2) \hat{S}^{(1)}(t_2) dt_2 = \\ &= \frac{(-i)^2}{(\hbar)^2} \int_0^t \hat{V}(t_2) \left\{ \int_0^{t_2} \hat{V}(t_1) dt_1 \right\} dt_2. \end{aligned} \quad (40)$$

Таким образом, уже, начиная со второго порядка теории возмущений, становится ясно, что во всех порядках теории возмущений операторы располагаются в хронологическом порядке. Именно, операторы с меньшим временным аргументом находятся правее операторов с большим значением временного аргумента. Что же касается самих операторов гамильтониана, то расположение операторов внутри каждого гамильтониана в представлении взаимодействия остаётся тем же, что и в представлении Шрёдингера.

Используя гамильтониан обменного взаимодействия с примесями (3), сразу можно записать гамильтониан в представлении взаимодействия:

$$\hat{V}(t) = \frac{J}{V} \sum_{k, \vec{p}_1, \vec{p}_2} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^+(t) \hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}(t) \hat{S}_k(t) \exp\left(i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \vec{R}_k\right). \quad (41)$$

Здесь операторы рождения и уничтожения в представлении взаимодействия только множителем отличаются от соответствующих операторов в представлении Шрёдингера:

$$\hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^+(t) = \hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^+ \exp\left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t}{\hbar}\right), \quad \hat{a}_{\vec{p}, \sigma}(t) = \hat{a}_{\vec{p}, \sigma} \exp\left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t}{\hbar}\right). \quad (42)$$

Что же касается операторов спина примеси, то они начинают зависеть от времени только при включённом магнитном поле $\vec{H} = (0, 0, H)$:

$$\hat{S}^x(t) = \frac{1}{2} \left(\hat{S}^+(t) + \hat{S}^-(t) \right), \quad \hat{S}^y(t) = \frac{1}{2i} \left(\hat{S}^+(t) - \hat{S}^-(t) \right),$$

где

$$\hat{S}^\pm(t) = \hat{S}^\pm \exp\left(\mp i \frac{\mu_B H}{\hbar} t\right). \quad (43)$$

При этом z -составляющая спиновых операторов не зависит от времени и совпадает со своим шрёдингеровским представлением.

Для нахождения амплитуды рассеяния необходимо вычислить матричный элемент от S -матрицы:

$$\langle \tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\sigma} | \hat{S} | \mathbf{p}, \sigma \rangle = \langle | \hat{a}_{\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\sigma}} \hat{S} \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^+ | \rangle. \quad (44)$$

Здесь $(\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\sigma})$ – импульс и проекция спина начального состояния, а (\mathbf{p}, σ) – импульс и спин конечного состояния рассеивающихся частиц. Угловые скобки обозначают усреднение по состоянию с заданной температурой, объёмом и химическим потенциалом.

Для того чтобы определить амплитуду рассеяния в борновском приближении, достаточно гамильтониан взаимодействия слева умножить на оператор уничтожения рассеивающейся частицы $\hat{a}_{\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\sigma}}$, а справа умножить на оператор рождения рассеянной частицы $\hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^+$. Далее передвинем оператор уничтожения $\hat{a}_{\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\sigma}}$ на крайнее правое место, а оператор рождения $\hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^+$ передвинем на крайнее левое место. Используя условие $\vec{p}_1 \neq \tilde{\mathbf{p}}$, мы сразу находим слагаемое, соответствующее борновской амплитуде:

$$\int_{\tilde{t}}^t \hat{A}^{(1)}(t_1) dt_1 = \int_{\tilde{t}}^t \left\{ -i \frac{J}{V} \sum_k \exp\left(\frac{i\xi_{\tilde{\mathbf{p}}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\tilde{\sigma}, \sigma} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_1}{\hbar}\right) \times \right. \\ \left. \times \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp\left(i(-\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{p}}) \vec{R}_k\right) \right\} dt_1. \quad (45)$$

Производя такие же операции над произведением двух упорядоченных по времени операторов взаимодействия, получаем четыре слагаемых. Однако при $\tilde{\mathbf{p}} \neq \mathbf{p}$ только два из них имеют отношение ко второй борновской амплитуде (см. рис. 1).

Рассмотрим сначала подынтегральное выражение, относящееся к рассеянию на одном примесном центре, находящемся в начале координат:

$$- \left(\frac{J}{V}\right)^2 \sum_{\tilde{p}_2, \tilde{p}_3} \left\{ \exp\left(\frac{i\xi_{\tilde{\mathbf{p}}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\tilde{\sigma}, \beta}^{(k)} \hat{a}_{\tilde{p}_2, \beta}(t_1) \times \right. \\ \left. \times \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{a}_{\tilde{p}_3, \nu}^+(t_2) \hat{\sigma}_{\nu, \sigma}^{(s)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_2}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\} + \\ + \left(\frac{J}{V}\right)^2 \sum_{\tilde{p}_1, \tilde{p}_4} \left\{ \hat{a}_{\tilde{p}_1, \alpha}^+(t_1) \hat{\sigma}_{\alpha, \sigma}^{(k)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \times \right. \\ \left. \times \exp\left(\frac{i\xi_{\tilde{\mathbf{p}}} t_2}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\tilde{\sigma}, \gamma}^{(s)} \hat{a}_{\tilde{p}_4, \gamma}(t_2) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\}. \quad (46)$$

Полученные выражения необходимо усреднить по состояниям с заданной температурой, объёмом и химическим потенциалом.

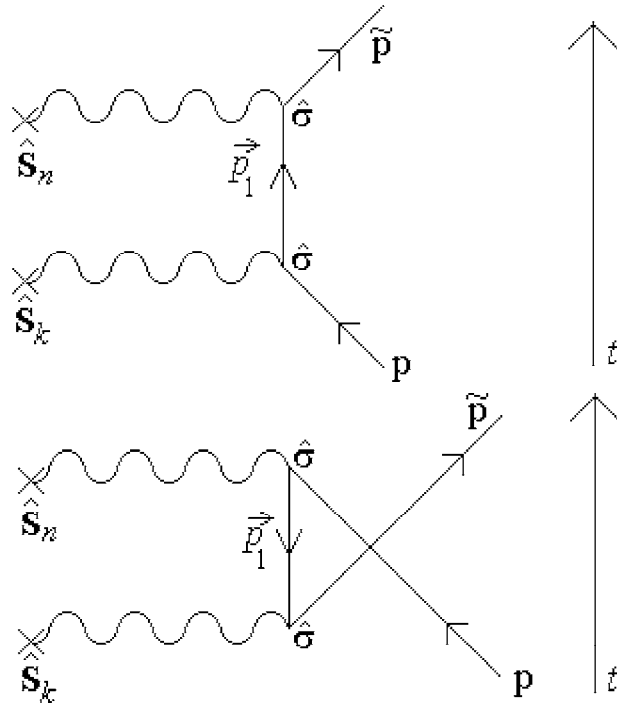


Рис. 1. Рассеяние во втором порядке нестационарной теории возмущений

Поскольку операторы рождения и уничтожения в представлении взаимодействия только множителем отличаются от тех же операторов в представлении Шрёдингера, то усреднение выражений (46) производится элементарно:

$$\begin{aligned}
 & - \left(\frac{J}{V} \right)^2 \sum_{\vec{p}_2, \vec{p}_3} \left\{ \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \beta}^{(k)} \times \right. \\
 & \times \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_2} t_1}{\hbar} \right) (1 - n_F(\xi_{\vec{p}_2})) \times \\
 & \left. \times \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}_3} t_2}{\hbar} \right) \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_3} \delta_{\beta, \nu} \hat{\sigma}_{\nu, \sigma}^{(s)} \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t_2}{\hbar} \right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\} =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \left(\frac{J}{V} \right)^2 \sum_{\vec{p}_2} \left\{ \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \beta}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_2} t_1}{\hbar} \right) n_F(\xi_{\vec{p}_2}) \times \right. \\
&\quad \left. \times \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}_2} t_2}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\beta, \sigma}^{(s)} \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t_2}{\hbar} \right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\}. \quad (47a)
\end{aligned}$$

Точно так же усреднение второго слагаемого (46) выражается через функцию Ферми $n_F(\xi)$: $(J/V)^2 \times$

$$\begin{aligned}
&\times \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_4} \left\{ \delta_{\vec{p}_1, \vec{p}_4} \delta_{\alpha, \gamma} n_F(\xi_{\vec{p}_1}) \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}_1} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\alpha, \sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \times \right. \\
&\quad \left. \times \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_2}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \gamma}^{(s)} \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_4} t_2}{\hbar} \right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\} = \\
&= \left(\frac{J}{V} \right)^2 \sum_{\vec{p}_1} \left\{ n_F(\xi_{\vec{p}_1}) \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}_1} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\alpha, \sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \times \right. \\
&\quad \left. \times \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_2}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \alpha}^{(s)} \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_1} t_2}{\hbar} \right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\}. \quad (47b)
\end{aligned}$$

Проинтегрируем полученные выражения по переменной t_2 в области $t^* < t_2 < t_1$, а затем перейдём к пределу $t^* \rightarrow -\infty$. При этом условимся считать, что на нижнем пределе полученное выражение обращается в нуль, что соответствует предположению о выключении взаимодействия в отдалённом прошлом. Несмотря на кажущуюся непротиворечивость этого предположения, на последующих лекциях мы вернёмся к его обсуждению.

В результате интегрирования снова получаем два слагаемых:

$$\begin{aligned}
&-i \left(\frac{J}{V} \right)^2 \sum_{\vec{p}_2} \left\{ \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \beta}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_2} t_1}{\hbar} \right) n_F(\xi_{\vec{p}_2}) \times \right. \\
&\quad \left. \times \frac{1}{\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}_2} + i\delta} \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}_2} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\beta, \sigma}^{(s)} \exp \left(\frac{-i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\} = \\
&= -i \left(\frac{J}{V} \right)^2 \sum_{\vec{p}_2} \left\{ \exp \left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar} \right) \hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \beta}^{(k)} n_F(\xi_{\vec{p}_2}) \frac{1}{\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}_2} + i\delta} \times \right.
\end{aligned}$$

$$\times \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{\sigma}_{\beta,\sigma}^{(s)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \Big\}. \quad (48a)$$

После аналогичных преобразований:

$$\begin{aligned} & i \left(\frac{J}{V}\right)^2 \sum_{\vec{p}_1} \left\{ n_F(\xi_{\vec{p}_1}) \exp\left(\frac{i\xi_{\vec{p}_1} t_1}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\alpha,\sigma}^{(k)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \times \right. \\ & \times \left. \frac{1}{\xi_{\vec{p}_1} + i\delta - \xi_{\vec{p}}} \exp\left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\alpha}^{(s)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\vec{p}_1} t_1}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\} = \\ & = i \left(\frac{J}{V}\right)^2 \sum_{\vec{p}_1} \left\{ n_F(\xi_{\vec{p}_1}) \hat{\sigma}_{\alpha,\sigma}^{(k)} \exp\left(\frac{-i\xi_{\mathbf{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \times \right. \\ & \times \left. \frac{1}{\xi_{\vec{p}_1} + i\delta - \xi_{\vec{p}}} \exp\left(\frac{i\xi_{\vec{p}} t_1}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\alpha}^{(s)} \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) \right\}. \quad (48b) \end{aligned}$$

Здесь и ниже выражение δ обозначает бесконечно малую положительную добавку, связанную с необходимостью "занулить" вклад от бесконечно удалённого "в прошлом" предела при $t_2 \rightarrow -\infty$.

Выражения (48a) и (48b) содержат произведения матриц Паули и операторов спина примесей. Если пренебречь временной зависимостью операторов спина примесей, тогда результат перемножения матриц представляется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\beta}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{\sigma}_{\beta,\sigma}^{(s)} \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) &= \{\delta_{k,s} \delta_{\bar{\sigma},\sigma} + i e_{ksm} \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}\} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) = \\ &= S(1 + S) \delta_{\bar{\sigma},\sigma} - \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k. \quad (49a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \hat{\sigma}_{\alpha,\sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\alpha}^{(s)} \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) &= \{\delta_{k,s} \delta_{\bar{\sigma},\sigma} - i e_{ksm} \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}\} \hat{\mathbf{S}}_k(t_1) \hat{\mathbf{S}}_s(t_2) = \\ &= S(1 + S) \delta_{\bar{\sigma},\sigma} + \hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k. \quad (49b) \end{aligned}$$

Сравнение с борновской поправкой (36) показывает, что мы получили поправочные выражения второго порядка, содержащие те же временные множители, соответствующие рассеивающейся и рассеянной частице. По этой причине после интегрирования

по времени t_1 и перехода к пределу $t^* \rightarrow -\infty$ и $t \rightarrow +\infty$ мы получаем множитель $\delta(\xi_{\bar{p}} - \xi_p)$, что соответствует "упругости" процесса.

Отсюда следует, что во всех множителях, которые не зависят от времени, можно положить $\xi_{\bar{p}} = \xi_p$, после чего находим формулу для действительной части амплитуды рассеяния, вычисленной до второго порядка по обменному взаимодействию: $A(\xi_p) =$

$$= J\hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)}\hat{\mathbf{S}}_k + J^2 \int \left\{ \frac{S(1+S)}{\xi_p - \xi_{p_1}} + \frac{2n_F(\xi_{p_1}) - 1}{\xi_p - \xi_{p_1}} \left[\hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)}\hat{\mathbf{S}}_k \right] \right\} \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (50)$$

Интегрирование по переменной ξ_{p_1} в правой части соотношения (50) следует понимать в смысле главного значения.

§ 2.2. Вычисление температурной поправки

Первое слагаемое, стоящее под интегралом, не зависит от спиновых переменных и фактически является малой поправкой в изотропной части амплитуды рассеяния, не зависящей от спина, так что этим слагаемым будем пренебрегать.

Второе слагаемое имеет ту же зависимость от спиновых переменных, что и первое слагаемое, соответствующее чисто обменному взаимодействию. Подынтегральная функция содержит множитель

$$2n_F(\xi_{p_1}) - 1 = -\text{th} \left(\frac{\xi_1}{2T} \right),$$

который является антисимметричным по переменной ξ_1 .

Переходя к интегрированию по переменной ξ_1 и производя симметризацию всего подынтегрального выражения, вычисляем интеграл с логарифмической точностью:

$$A(\xi_p) = J\hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)}\hat{\mathbf{S}}_k + J^2\nu_0 \int_0^\mu \left\{ [2n_F(\xi_{p_1}) - 1] \frac{2\xi_1 d\xi_1}{\xi^2 - \xi_1^2} \left[\hat{\sigma}_{\bar{\sigma},\sigma}^{(k)}\hat{\mathbf{S}}_k \right] \right\} \approx$$

$$\approx J \hat{\sigma}_{\sigma, \sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_k \left\{ 1 + 4J\nu_0 \ln \left[\frac{\mu}{\max(|\xi|, T)} \right] \right\}, \quad (51)$$

где $\nu_0 = mp_0/(2\pi^2\hbar^3)$.

В сопротивление входит квадрат амплитуды рассеяния, проинтегрированный вблизи поверхности Ферми.

В соответствии с этим необходимо возвести (51) в квадрат, а затем усреднить полученное выражение по начальным электронным состояниям и просуммировать по конечным состояниям электронного спина. Кроме этого, с логарифмической точностью следует положить $|\xi| \rightarrow T$.

В результате получаем температурную поправку к сопротивлению:

$$\Delta\rho \sim J^2 \left\{ 1 + 8J\nu_0 \ln \left[\frac{\mu}{T} \right] \right\}. \quad (52)$$

Таким образом, при $J > 0$ с понижением температуры остаточное сопротивление растёт по логарифмическому закону.

Это приводит к появлению минимума в электросопротивлении.

Если рассмотреть низкотемпературный закон уменьшения сопротивления по закону T^5 , тогда при заданной концентрации парамагнитных примесей c_m и при $J > 0$ можно написать

$$\rho(T) = \rho_0 + c_m a \exp \left\{ \frac{\mu}{T} \right\} + bT^5. \quad (53)$$

Дифференцируя по температуре, находим положение минимума:

$$T_m \approx \left[\frac{c_m a}{5b} \right]^{1/5}. \quad (54)$$

Температура минимума пропорциональна $(c_m)^{1/5}$, т.е. слабо зависит от концентрации примесных центров.

С понижением температуры может оказаться, что логарифмический множитель становится настолько большим, что логарифмическая поправка окажется порядка единицы. Для того

чтобы выйти за рамки теории возмущений, можно пытаться собрать асимптотический ряд, т.е. собрать наиболее сильно расходящиеся слагаемые ряда теории возмущений. Такая процедура приводит к тому, что фактически приходится предположить, что два первых члена разложения амплитуды рассеяния есть два первых слагаемых из бесконечного ряда геометрической прогрессии. Т.е. вместо двух слагаемых (51) следует написать

$$A(\xi_p) = J \frac{\hat{\sigma}_{\vec{\sigma}, \sigma}^{(k)} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}}}{\{1 - 4J\nu_0 \ln[\mu / \max(|\xi|, T)]\}}. \quad (55)$$

Таким образом, в случае $J < 0$ с понижением температуры происходит быстрое уменьшение амплитуды обменного рассеяния, так что роль обменного рассеяния существенно ослабевает.

Однако в случае $J > 0$ формула (55) не имеет смысла, поскольку при некоторой температуре, называемой температурой Кондо, амплитуда рассеяния, записанная в виде (23), становится бесконечной, а при дальнейшем повышении температуры и вовсе меняет свой знак.

На эксперименте наблюдается отчётливый температурный минимум сопротивления (см. средний рисунок на обложке).

Теоретическое решение этой задачи было дано П. Вигманом в 1980 г., когда ему удалось свести эту проблему к уже решённой ранее одномерной задаче.

§ 2.3. Сведение проблемы к одномерной задаче

Разложим операторы $\hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^+$ и $\hat{a}_{\vec{p}, \sigma}$ по сферическим функциям:

$$\hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^+ = \sum_l \sum_{-l}^l Y_{lm}(\frac{\vec{p}}{p}) \hat{c}_{plm\sigma}^+. \quad (56)$$

В силу условия ортогональности сферических функций

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta Y_{l'm'}^*(\frac{\vec{p}}{p}) Y_{lm}(\frac{\vec{p}}{p}) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (57)$$

гамильтониан (33) содержит только операторы с $l = 0$, т.е. учитывает s -рассеяние на примеси:

$$\hat{H} = \sum_{plm\sigma} \xi_p \hat{c}_{plm\sigma}^+ \hat{c}_{plm\sigma} + J \sum_{pp'\sigma\sigma'} \hat{c}_{p00\sigma}^+ \sigma_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{p'00\sigma'} \hat{c}_{p00\sigma}^+ \mathbf{S}. \quad (58)$$

Учтём, что вблизи поверхности Ферми электроны имеют линейный закон дисперсии:

$$\xi_p = v_F (p - p_F). \quad (59)$$

Будем отсчитывать энергию от уровня Ферми, а импульс – от импульса Ферми. Тогда, оставляя в гамильтониане свободных электронов только операторы с $l = 0$, $m = 0$ и вводя обозначения

$$\hat{c}_{p00\sigma}^+ = \hat{c}_{p\sigma}^+; \quad \hat{c}_{p00\sigma} = \hat{c}_{p\sigma}; \quad v_F = 1, \quad (60)$$

получаем гамильтониан нашей модели в импульсном представлении:

$$\hat{H} = \sum_{p\sigma} p \hat{c}_{p\sigma}^+ \hat{c}_{p\sigma} + J \sum_{pp'\sigma\sigma'} \hat{c}_{p\sigma}^+ \sigma_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{p'\sigma'} \hat{c}_{p\sigma}^+ \mathbf{S}. \quad (61)$$

Далее этот одномерный гамильтониан необходимо записать в координатном представлении:

$$\hat{H} = \int dx \left[-i \sum_{\sigma} \hat{c}_{\sigma}^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{c}_{\sigma}(x) + J \delta(x) \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\sigma}^+(x) \sigma_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\sigma'}^+(x) \mathbf{S} \right], \quad (62)$$

где

$$\hat{c}_{\sigma}^+(x) = \int \frac{dp}{2\pi} \exp(-ipx) \hat{c}_{\sigma,p}^+, \quad \hat{c}_{\sigma}(x) = \int \frac{dp}{2\pi} \exp(ipx) \hat{c}_{\sigma,p}. \quad (63)$$

§ 3. Нестационарные явления

При вычислении статической проводимости было показано, что линеаризованное кинетическое интегральное уравнение решается в виде разделяющихся переменных.

Такая ситуация имеет место только в статическом пределе и для однородного в пространстве электрического поля. Ниже будет рассмотрен случай слабых полей, когда пространственное распределение и временная зависимость электрического поля определяется заданным значением волнового вектора \vec{q} и заданной частотой ω .

§ 3.1. Продольные поля

В этом случае достаточно считать, что векторный потенциал равен нулю, а компоненты Фурье скалярного потенциала связаны с компонентами Фурье электрического поля с помощью соотношения $\vec{e}_{\vec{q},\omega} = -i\vec{q}\varphi_{\vec{q},\omega}$. Наша задача состоит в том, чтобы определить компоненту Фурье линейной поправки $\delta n_{\vec{q},\omega}(\vec{p})$ к равновесной функции распределения $n_F(\xi_p)$.

В случае изотропной поверхности Ферми соответствующее линеаризованное уравнение имеет следующий вид:

$$(-i\omega + i\vec{q}\vec{v}) \delta n_{\vec{q},\omega}(\vec{p}) - iQ\vec{q}\vec{v} \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} \varphi_{\vec{q},\omega} = \hat{J}_{st}(\delta n_{\vec{q},\omega}(\vec{p})), \quad \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}. \quad (64)$$

В пределе $T = 0$ решение кинетического уравнения естественно искать в виде произведения $\delta(\xi_p)f(\vec{p})$. Поскольку при этом под знаком оператора столкновений имеется множитель $\delta(\xi_{\vec{p}}) - \delta(\xi_{\vec{p}'})$, обозначающий сохранение энергии при упругом столкновении, то кинетическое уравнение (64) преобразуется к следующему виду:

$$(-i\omega + i\vec{q}\vec{v}) f_{\vec{q},\omega}(\vec{p}) + iQ\vec{q}\vec{v} \varphi_{\vec{q},\omega} = -\frac{1}{\tau} \left\{ f_{\vec{q},\omega}(\vec{p}) - \overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} \right\}. \quad (65)$$

Здесь $\vec{v} = \vec{p}/m$, все импульсы \vec{p} расположены на поверхности Ферми.

Если предположить, что "приходный" оператор столкновений содержит только изотропную часть амплитуды рассеяния (s -рассеяние), тогда черта обозначает просто усреднение на поверхности Ферми по всем направлениям импульса \vec{p} . Отсюда можно заключить, что решение уравнения (65) сводится к вычислению интегралов:

$$\overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} = Q\varphi_{\vec{q},\omega} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{-i\vec{q}\vec{v}}{-i\tilde{\omega} + i\vec{q}\vec{v}} + \overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left\{ \frac{1}{-i\tilde{\omega} + i\vec{q}\vec{v}} \right\}. \quad (66)$$

Здесь и ниже Q – заряд электрона, $i\tilde{\omega} = i\omega - 1/\tau$.

Решение этого уравнения выражается через единственный интеграл:

$$\overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} = -\varphi Q \frac{1 + i\tilde{\omega}J_{\omega,q}}{1 - J_{\omega,q}/\tau}, \quad (67)$$

где

$$J_{\omega,q} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left\{ \frac{1}{-i\tilde{\omega} + i\vec{q}\vec{v}} \right\} = \frac{1}{2iqv} \ln \left(\frac{-i\tilde{\omega} + iqv}{-i\tilde{\omega} - iqv} \right), \quad (68)$$

где $v = p_F/m$.

После умножения на заряд Q и интегрирования по импульсам находим неравновесную поправку к плотности заряда:

$$\delta\rho = Q^2\nu\varphi(\vec{q},\omega)\overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} = -Q^2\nu\varphi(\vec{q},\omega) \frac{1 + i\tilde{\omega}J_{\omega,q}}{1 - J_{\omega,q}/\tau}, \quad (69)$$

где $\nu = mp_0/(\hbar^3\pi^2)$.

Неравновесная плотность электрического тока \vec{j} , возникающая под влиянием приложенного продольного электрического поля, имеет чисто продольную составляющую. По этой причине имеет смысл сразу вычислять скалярную величину $i\vec{q}\vec{j}$.

Усредняя кинетическое уравнение (65) по углам, находим

$$\overline{(-i\omega + i\vec{q}\vec{v})f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} + \overline{iQ\vec{q}\vec{v}\varphi_{\vec{q},\omega}} = \overline{-i\omega f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} + \overline{i\vec{q}\vec{v}f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} = 0.$$

В результате имеем

$$i\vec{q}\vec{j} = -Q^2\nu\varphi i\omega \frac{1 + i\tilde{\omega}J_{\omega,q}}{1 - J_{\omega,q}/\tau}. \quad (70)$$

Сравнение полученных результатов приводит к соотношению $i\vec{q}\vec{j} = i\omega\delta\rho$, что соответствует закону сохранения заряда.

Продольная диэлектрическая проницаемость выражается через поправку к плотности заряда с помощью общего соотношения:

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \frac{\partial\delta\rho}{\partial\varphi} = 1 + \frac{4\pi}{q^2} Q^2 \nu \frac{1 + i\tilde{\omega} J_{\omega, q}}{1 - J_{\omega, q}/\tau}.$$

В предельном случае идеального металла мы имеем диэлектрическую проницаемость вырожденной плазмы:

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi}{q^2} Q^2 \nu \left[1 - \frac{\omega}{2qv} \ln \frac{\omega + i\delta + qv}{\omega + i\delta - qv} \right]. \quad (71)$$

Спектр продольных электронных колебаний $\omega(q)$ определяется из уравнения $\epsilon(\vec{q}, \omega) = 0$. В области высоких частот правую часть (71) легко разложить по степеням qv_F/ω , после чего получим высокочастотную ветвь плазменных колебаний (рис. 2):

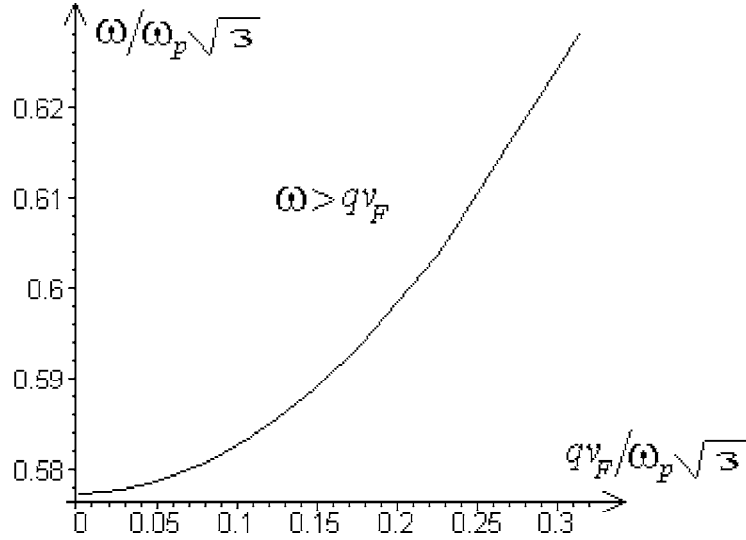


Рис. 2. Плазменные колебания. Зависимость частоты от волнового вектора при $T = 0$

$$\omega(q) = \Omega_e \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{qv_F}{\Omega_e} \right)^2 \right]. \quad (72)$$

Здесь и ниже введено обозначение: $\Omega_e = \sqrt{4\pi ne^2/m}$. Это соотношение было получено А.А. Власовым в 1938 году [3].

Из общего выражения (71) следует, что затухание Ландау возникает только при условии $|\omega| < qv_F$. Однако для плазменных частот оно не возникает, поскольку при $T = 0$ нет частиц со скоростями $v > v_F$, а для плазменных колебаний всегда $\omega(q)/q > v_F$.

В так называемом "грязном" металле, когда существует область частот, значительно меньших обратного времени релаксации, поправка к заряду разлагается по степеням $qv/|\tilde{\omega}|$. В результате получаем диффузионный полюс:

$$\delta\rho = Q^2\nu\varphi(\vec{q}, \omega) \frac{Dq^2}{i\omega - Dq^2}, \quad (73)$$

где $D = v^2\tau/3$ – коэффициент диффузии. В общем случае поправку к электронной плотности естественно разбить на две части – статическую и динамическую:

$$\delta\rho = Q^2\nu [\tilde{\varphi}(\vec{q}, \omega) - \varphi(\vec{q}, \omega)], \quad (i\omega - Dq^2) \tilde{\varphi}(\vec{q}, \omega) = i\omega\varphi(\vec{q}, \omega).$$

Переходя от фурье-компонент к пространственным переменным, получаем уравнение, которое обобщает уравнение Пуассона на случай медленно меняющихся продольных потенциалов:

$$\operatorname{div}\vec{e} = 4\pi\rho = 4\pi Q^2\nu (\tilde{\varphi} - \varphi), \quad \vec{e} = -\nabla\varphi; \quad \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial t} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + D\Delta\tilde{\varphi}.$$

В общем случае произвольных $|\omega|$ и q вспомогательный потенциал $\tilde{\varphi}$ пропорционален электрическому потенциалу:

$$\left(1 - \frac{J_{\vec{q}, \omega}}{\tau} \right) \tilde{\varphi}(\vec{q}, \omega) = -i\omega\varphi(\vec{q}, \omega) J_{\vec{q}, \omega}.$$

В развёрнутом виде:

$$\begin{aligned} & \left\{ 1 - \frac{1}{2iqv\tau} \ln \left(\frac{-i\tilde{\omega} + iqv}{-i\tilde{\omega} - iqv} \right) \right\} \tilde{\varphi}(\vec{q}, \omega) = \\ & = \left\{ -\frac{\omega}{2qv} \ln \left(\frac{-i\tilde{\omega} + iqv}{-i\tilde{\omega} - iqv} \right) \right\} \varphi(\vec{q}, \omega). \end{aligned} \quad (74)$$

§ 3.2. Поперечные поля

В случае поперечного электрического поля кинетическое уравнение можно записать без привлечения какого-либо потенциала:

$$(-i\omega + i\vec{q}\vec{v}) f_{\vec{q},\omega}(\vec{p}) - Q\vec{v}\vec{e}_{\vec{q},\omega} = -\frac{1}{\tau} \left\{ f_{\vec{q},\omega}(\vec{p}) - \overline{f_{\vec{q},\omega}(\vec{p})} \right\}. \quad (75)$$

Можно заметить, что в данном случае неоднородная часть интегрального уравнения содержит множитель (\vec{v}, \vec{e}) , который имеет компоненты, перпендикулярные к вектору \vec{q} .

Отсюда заключаем, что решение уравнения (11) ортогонально к "приходной" части. Иными словами, для поперечного электрического поля решение уравнения (11) определяется только через приведённую частоту $i\tilde{\omega} = i\omega + 1/\tau$ [3]. В результате находим поперечную часть плотности тока:

$$\vec{j} = \sigma_t \vec{e}, \quad \sigma_t = Q^2 \nu \frac{v_F^2}{4} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{1-t^2}{-i\tilde{\omega} + iqv t} \right\} dt. \quad (76)$$

Это выражение можно записать через амплитуду приложенного электрического поля, поскольку в компонентах Фурье

$$\vec{E}_\Omega(\vec{q}) = (i\Omega/c) \vec{A}_\Omega(\vec{q}), \quad \vec{h} = \text{rot} \vec{A}, \quad \text{rot} \vec{h} = \frac{4\pi}{c} \vec{j},$$

$$\vec{j}(\vec{q}, \omega) =$$

$$= \vec{E}_\Omega(\vec{q}) \frac{e^2 p_0^2 \nu_0}{m^2} \left\{ i \frac{\tilde{\Omega}}{2(qv_F)^2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\Omega}}{qv_F} - \frac{qv_F}{\tilde{\Omega}} \right) \ln \frac{\tilde{\Omega} + qv_F}{\tilde{\Omega} - qv_F} \right] \right\}, \quad (77)$$

где $\tilde{\Omega} = \omega + i/\tau$.

Если пренебречь зависимостью от частоты по сравнению с величиной $1/\tau$, тогда для "грязных" металлов вместо (77) получим: $\vec{j}(\vec{q}, \omega) = \vec{E}(\vec{q}, \omega) \times$

$$\times \frac{e^2 p_0^2 \nu_0}{m^2} \left\{ \frac{1}{2\tau(qv_F)^2} \left[-1 + \left(\frac{1}{\tau qv_F} + \tau qv_F \right) \operatorname{arctg}(\tau qv_F) \right] \right\}. \quad (78)$$

В длинноволновом пределе $qv_F\tau \ll 1$ получаем закон Ома с поправкой на пространственную дисперсию:

$$\vec{j}(\vec{q}, \omega) \approx \sigma \vec{E}(\vec{q}, \omega) \left(1 - \frac{(\tau qv_F)^2}{5} \right), \quad (79)$$

где проводимость $\sigma = ne^2\tau/m$.

В обратном пределе $qv_F\tau \gg 1$ получаем существенную зависимость от волнового вектора, так называемый аномальный скин-эффект [4]:

$$\vec{j}(\vec{q}, \omega) \approx \pi \vec{E}(\vec{q}, \omega) \frac{e^2 p_0^2 \nu_0}{4m^2} \frac{1}{qv_F} \left[1 - \frac{4}{\pi\tau qv_F} \right]. \quad (80)$$

Рассмотрим условия существования нормального скин-эффекта:

$$\delta_n \approx \frac{c}{\sqrt{8\pi\omega\sigma}}.$$

Для этого необходимо, чтобы выполнялись два условия: условие a : $\omega\tau \ll 1$ и условие b :

$$\delta = \sqrt{\frac{c^2}{8\pi\sigma\omega}} \gg l, \quad \text{или} \quad \omega\tau \ll \frac{\hbar c}{e^2} \frac{c}{v_F} \left(\frac{\hbar}{lp_F} \right)^2. \quad (81)$$

Из второго условия можно определить критическую длину пробега, ниже которой при заданной частоте в системе можно наблюдать нормальный скин-эффект:

$$l_c = \frac{\hbar}{p_F} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{e^2 v_F}}. \quad (82)$$

С помощью этой длины металлы сразу можно разделить на две категории: чистые ($l > l_c$) и грязные ($l < l_c$). Можно видеть, что в "грязном" металле условия существования нормального скин-эффекта выполняется во всей области частот, для которых $\omega\tau \ll 1$, т.е. отсутствует временная дисперсия. Область a находится внутри области b :

$$\omega\tau \ll \frac{\hbar c}{e^2 v_F} \left(\frac{\hbar}{lp_F} \right)^2. \quad (83)$$

В случае чистых металлов, для которых $l \gg l_c$, с повышением частоты сначала глубина проникновения становится порядка длины пробега, а затем уж начинается временная дисперсия. Для этих металлов нормальный скин-эффект наблюдается только в диапазоне частот:

$$\omega\tau \ll \frac{\hbar c}{e^2 v_F} \left(\frac{\hbar}{lp_F} \right)^2, \quad (84)$$

для которых условие $\omega\tau \ll 1$ выполняется автоматически.

Рассмотрим теперь условия существования аномального скин-эффекта.

С повышением частоты в чистом металле происходит нарушение условия (20), так что в области частот

$$\frac{\hbar c}{e^2 v_F} \left(\frac{\hbar}{lp_F} \right)^2 \ll \omega\tau \ll 1 \quad (85)$$

длина пробега оказывается больше "глубины скин-слоя", которая вычисляется по формулам нормального скин-эффекта.

На самом деле, для частот внутри этой области (инфракрасный диапазон частот) необходимо использовать формулу глубины проникновения для аномального скин-эффекта:

$$\delta_a \approx \left(\frac{c^2 p_F}{4\pi\omega n e^2} \right)^{1/3} \frac{2}{\sqrt{3}}. \quad (86)$$

Важно заметить, что на минимальной частоте эта глубина по порядку величины равна длине пробега, однако при дальнейшем повышении частоты её значения вообще от длины пробега

не зависят. Это связано с тем, что причиной возникновения поглощения в этой области частот является затухание Ландау, которое существует при бесконечно большой длине пробега.

При этом как функция частоты глубина проникновения аномального скин-эффекта уменьшается по более медленному закону:

$$\delta_a \sim 1/\omega^{1/3}; \quad \delta_n \sim 1/\omega^{1/2}. \quad (87)$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kondo J.*// Progr. Theor. Phys. 1964. **32**, 37.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Физическая кинетика. – М.: Физматлит, 2001. – 535 с.
3. *Власов А.А.*// ЖЭТФ. 1938. **8**, 291.
4. *Reuter G.E., Sondheimer E.H.*// Proc. Roy. Soc. A. 1948. **195**, 336.