V. F. Los', On the theory of the conductivity of crystals, *TMF*, 1984, Volume 60, Number 1, 107–119

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 60, № 1
июль, 1984

К ТЕОРИИ ПРОВОДИМОСТИ КРИСТАЛЛОВ

Лось В. Ф.

Исходя из формулы Кубо методом гриновских супероператоров проведено вычисление электропроводности кристаллов в рамках теории возмущений. Предлагаемый метод не приводит к необходимости суммирования бесконечных рядов (при $\omega\to 0$). Рассмотрена подвижность фрёлиховского полярона в случае слабой связи и полярона в модели Фейнмана при низких температурах.

1. ВВЕДЕНИЕ

Электропроводность кристаллов в случае, когда различные акты рассеяния электронов хорошо разделены во времени, может быть рассмотрена с помощью уравнения Больцмана (УБ). В случае упругого рассеяния электронов хаотически расположенными примесями это было обосновано в работах [1, 2]. В работах [3, 4] получено точное кинетическое уравнение, описывающее эволюцию подсистемы, взаимодействующей с бозонным полем. При слабом взаимодействии электронов с фононами из этого уравнения следует УБ. Для фейнмановской модели полярона [5] УБ было получено в работе [6] в случае низких температур. УБ для функции распределения электронов следует также из точного замкнутого кинетического уравнения для матрицы плотности подсистемы, взаимодействующей с фононами, полученного в работе [7].

В случае интерференции различных актов рассеяния электронов УБ, очевидно, неприменимо [1]. Другой подход к изучению электропроводности, основанный на точных формулах теории линейного отклика [8], свободен от каких-либо ограничений на процессы рассеяния электронов. Эквивалентность двух указанных методов в случае слабого рассеяния, когда $\tau_{\rm rel}^{-1}\ll\varepsilon_F/\hbar$ ($\tau_{\rm rel}^{-1}$ — частота релаксации электрона, ε_F — энергия Ферми), доказана в ряде работ (см., например, [9]).

Однако вычисление электропроводности $\sigma(\omega)$ непосредственно с помощью формул Кубо наталкивается на существенные математические трудности, обусловленные расходимостью членов разложения $\sigma(\omega)$ по взаимодействию электрона с рассеивателями при частоте $\omega\to 0$. Даже в случае слабого взаимодействия для получения правильного результата (при $\omega\to 0$) необходимо просуммировать бесконечный ряд расходящихся членов [10]. Поэтому в конкретных расчетах используются различные приближения (см., например, [11]), приводящие к нестрогим результатам. В работе [12] установлено, что в случае слабой связи приближенные вычисления подвижности электронов, проведенные в [11] по формулам

Кубо, вычисления в приближении «сдвинутого максвелловского распределения» (см., например, [13]), а также вычисления с помощью интегралов по траекториям [14, 15] являются эквивалентными (см. также [4]). Низкотемпературная подвижность фрелиховского полярона, полученная в рамках указанных приближений, не согласуется с подвижностью, полученной другими методами, в частности методом УБ (см., например, [16, 17]). В недавно опубликованной работе [18] эта несогласованность анализируется с точки зрения неперестановочности пределов $\omega \to 0$ и $\alpha \to 0$ (α — константа связи для полярона).

Поскольку при решении УБ также используются различные приближения (см., например, [19, 20]), проблема корректного вычисления подвижности электронов требует дальнейшего исследования.

В данной работе методом, развитым в [21], проведено строгое вычисление тензора электропроводности $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ по формуле Кубо в рамках теории возмущений. Рассматриваются процессы неупругого рассеяния электронов на фононах. Предлагаемый метод рассмотрения корреляционных функций для компонент оператора электрического тока (импульса электрона) не приводит к необходимости суммирования бесконечных рядов. Во втором приближении теории возмущений получены уравнения, описывающие эволюцию во времени указанных корреляционных функций при слабом электрон-фононном взаимодействии, а также при сильном взаимодействии в модели Фейнмана для полярона.

Показано, что при низких температурах $k_B T \ll \hbar\omega_0$ (ω_0 — частота оптической моды колебаний кристалла) $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ описывается формулой Друде с частотой релаксации электрона, которая отличается от частоты релаксации, обычно получаемой в таких задачах [16, 17], и совпадает с более естественной величиной, введенной феноменологически Фрелихом и Моттом в 1939 г. [22]. Таким образом, строгое рассмотрение низкотемпературной подвижности фрелиховского полярона в случае слабой связи и для модели Фейнмана приводит к результатам, в три раза превышающим соответствующие результаты, полученные с помощью УБ [16, 17].

2. СЛУЧАЙ СЛАБОЙ СВЯЗИ

Согласно теории линейной реакции Кубо выражение для диссипативной части тензора электропроводности имеет вид [8]

$$\operatorname{Re}\sigma_{\mu\nu}(\omega)=\frac{1}{E_\beta(\omega)}\int_0^\infty \psi_{\mu\nu}(t)\cos\omega t\,dt, \tag{1}$$

$$E_\beta(\omega)=\frac{\omega}{2}\operatorname{cth}\frac{\beta\omega}{2},$$

$$\psi_{\mu\nu}(t)=\frac{1}{2}\langle j_\nu(0)j_\mu(t)+j_\mu(t)j_\nu(0)\rangle,$$

здесь $j_\mu(t)=e^{iHt}j_\mu e^{-iHt}$, j_μ—μ-компонента оператора электрического тока, H — гамильтониан системы в отсутствие электрического поля, $\langle\ldots\rangle = \operatorname{Sp}(e^{-\beta H}\ldots)(\operatorname{Sp} e^{-\beta H})^{-1}$ — квантовостатистическое усреднение, $\beta=1/k_B T$, $\hbar=1$.

Рассмотрим подсистему (электрон), взаимодействующую с фононным полем. Гамильтониан такой системы возьмем в виде

$$(2)\qquad H=H_S+H_T+H_i,\quad H_S=T(\mathbf{p}),$$
$$H_T=\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}},\quad H_i=\sum_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}b_{\mathbf{k}}+\text{э. с.},$$

где $T(\mathbf{p})$ — кинетическая энергия электрона с импульсом $\mathbf{p}$; ω_k — частота фонона с волновым вектором $\mathbf{k}$; $b_{\mathbf{k}}^+$, $b_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения фононов; $V_{\mathbf{k}}$ — константа электрон-фононного взаимодействия; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор электрона.

Тензор электропроводности (1) определяется корреляционными функциями для компонент оператора скорости электрона $\mathbf{v}$. При выполнении условия $\tau_{\text{rel}}\gg\beta$ (τ_{rel} — величина порядка времени релаксации электрона, обусловленная взаимодействием H_i) эти корреляционные функции можно представить в следующем виде (с точностью до членов $\sim\beta/\tau_{\text{rel}}\ll1$):

$$(3)\qquad \langle v_\nu(0)v_\mu(t)\rangle\approx\langle v_\nu(0)g_\mu^+(t)\rangle_S,$$
$$\langle v_\mu(t)v_\nu(0)\rangle\approx\langle v_\mu(0)g_\nu^-(t)\rangle_S\quad (k_BT\gg\tau_{\text{rel}}^{-1}),$$
$$g_\mu^+(t)=Pe^{iLt}Pv_\mu(0),\quad g_\nu^-(t)=Pe^{-iLt}Pv_\nu(0),$$
$$v_\nu(t)=\exp(iHt)v_\nu(0)\exp(-iHt).$$

Здесь $\langle\ldots\rangle_S=(\mathrm{Sp}_S e^{-\beta H_S})^{-1}\mathrm{Sp}_S(e^{-\beta H_S}\ldots)$ — усреднение по состояниям подсистемы (Sp_S — шпур по состояниям электрона), $P=(\mathrm{Sp}_T e^{-\beta H_T})^{-1}\times$ $\times\mathrm{Sp}_T(e^{-\beta H_T}\ldots)$ — оператор усреднения по состояниям термостата (фононов), L — лиувиллевский супероператор, действующий на произвольный оператор A по правилу $LA=HA-AH$ ($L=L_S+L_T+L_i$ — соответственно членам гамильтониана (2)). Приближенные выражения (3) для корреляционных функций получены путем пренебрежения H_i (при условии $k_BT\gg\tau_{\text{rel}}^{-1}$) в равновесной матрице плотности системы. При этом операторы $\exp(\pm iHt)$, определяющие эволюцию во времени корреляционных функций, остаются без изменения [1)].

Рассмотрим для определенности величину $g_\mu^+(t)$. Как показано в работе [21], эта величина, определяющая эволюцию корреляционной функции, удовлетворяет уравнению

$$(4)\qquad i\frac{\partial}{\partial t}g_\mu^+(t)=-PL_SPg_\mu^+(t)+\frac{1}{i}\int_0^t e^{-\varepsilon t_1}(PL_ie^{iQLt_1}L_iP)g_\mu^+(t-t_1)\,dt_1,$$
$$Q=1-P,$$
$$t>0,\quad g_\mu^+(0)=v_\mu(0),$$

где $\varepsilon\to+0$ в конце вычислений и учтено, что для гамильтониана (2) $PL_iP=0$. Величина $g_\nu^-(t)$ удовлетворяет такому же уравнению с заменой L на $-L$.

[1)] Разложение $\exp(\pm iHt)$ по H_i приводит к ряду с членами порядка $(\tau_{\text{rel}}^{-1}t)^n$ ($n=0,1,\ldots$), которые не являются малыми в рассматриваемом ниже случае больших времен $t\sim\tau_{\text{rel}}$.

Учтем, что в рассматриваемом случае слабого взаимодействия имеется иерархия времен

$$\tau_{rel} \gg t_0, \tag{5}$$

где $t_0 = \max(t_S, t_T)$ (t_S — характерное время столкновений для электрона, например порядка $1/k_B T$; t_T — характерное время корреляции флуктуаций в термостате, которое определяется характерной частотой фононного спектра). Рассматривая достаточно большие времена $t \gg t_0$ и учитывая, что корреляционная функция, входящая под интегралом в (4), затухает с характерным временем порядка t_0, легко видеть, что верхний предел интегрирования в (4) можно устремить к бесконечности (после чего $\varepsilon \to +0$).

Будем искать решение уравнения (4) (при $t \gg t_0$) в виде

$$g_\mu^+(t) = \exp(-iP\Gamma Pt)\, g_\mu^+(0), \tag{4a}$$

где $P\Gamma P$ — не зависящий от времени супероператор, действующий только на операторы подсистемы (электрона). Тогда

$$i\frac{\partial}{\partial t} g_\mu^+(t) = P\Gamma P g_\mu^+(t),$$

т. е. если супероператор $P\Gamma P$ существует, то имеем марковское уравнение для $g_\mu^+(t)$.

Подставляя (4a) в уравнение (4), получим следующее нелинейное интегральное уравнение для $P\Gamma P$:

$$P\Gamma P = -PL_S P + \frac{1}{i}\int_0^\infty e^{\varepsilon t_1} (PL_i e^{iQLt_1} L_i P)\, e^{iP\Gamma P t_1}\, dt_1.$$

Будем решать уравнение для $P\Gamma P$ с помощью итераций. В качестве приближения нулевого порядка положим $P\Gamma^{(0)}P = -PL_S P$. Тогда в первом приближении получим

$$P\Gamma^{(1)}P = -PL_S P + \frac{1}{i}\int_0 e^{-\varepsilon t_1} (PL_i e^{iQLt_1} L_i P)\, e^{-iPL_S P t_1}\, dt_1.$$

Ограничимся вторым приближением теории возмущений по H_i. Раскладывая $\exp(iQLt_1)$ в ряд по QL_i, нетрудно видеть, что такое приближение соответствует замене $e^{iQLt_1} \to e^{i(L_S + L_T)t_1}$ в выражении для $P\Gamma^{(1)}P$. Принимая во внимание вышесказанное, получим следующее марковское уравнение для $g_\mu^+(t)$ во втором приближении теории возмущений по H_i:

$$i\frac{\partial}{\partial t} g_\mu^+(t) = -PL_S P g_\mu^+(t) + \frac{1}{i}\int_0^\infty e^{-\varepsilon t_1} (PL_i \times$$
$$\times \exp\{i(L_S + L_T)t_1\} L_i P) \exp\{-iPL_S P t_1\}\, dt_1\, g_\mu^+(t) \qquad (t \gg t_0). \tag{6}$$

Шпур по состояниям H_S в формуле (3) удобно вычислять на собственных функциях H_S, каковыми являются собственные функции оператора импульса электрона $|\mathbf{p}\rangle$. Тогда ясно, что для нахождения корреляционных функций (3) нужно найти диагональные матричные элементы операторов $g_\mu^+(t)$, $g_\nu^-(t)$ (оператор скорости электрона диагонален в импульсном представлении для рассматриваемого случая одной зоны). Подставляя в уравнение (6) гамильтонианы (2) и учитывая, что $e^{\pm iLt}A=e^{\pm iHt}Ae^{\mp iHt}$, а также то, что для гамильтониана H_T (2)

$$(7)\qquad \begin{aligned} &e^{iH_Tt}b_{\mathbf{k}}e^{-iH_Tt}=e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}b_{\mathbf{k}},\\ &e^{iH_Tt}b_{\mathbf{k}}^{+}e^{-iH_Tt}=e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}b_{\mathbf{k}}^{+},\\ &P(b_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}_1})=0,\quad P(b_{\mathbf{k}}^{+}b_{\mathbf{k}_1}^{+})=0,\quad P(b_{\mathbf{k}}^{+}b_{\mathbf{k}_1})=N_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1},\\ &P(b_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}_1}^{+})=(1+N_{\mathbf{k}})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1},\quad N_{\mathbf{k}}=[\exp(\beta\omega_{\mathbf{k}})-1]^{-1}, \end{aligned}$$

получим следующее кинетическое уравнение для диагональных матричных элементов $\langle\mathbf{p}|g_\mu^{+}(t)|\mathbf{p}\rangle\equiv\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p})$:

$$(8)\qquad \begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p})=-2\pi\sum_{\mathbf{k}}|V_{\mathbf{k}}|^2\{(1+N_{\mathbf{k}})\delta[T(\mathbf{p}-\mathbf{k})-T(\mathbf{p})+\omega_{\mathbf{k}}]\times\\ &\times[\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p})-\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p}-\mathbf{k})]+N_{\mathbf{k}}\delta[T(\mathbf{p}+\mathbf{k})-T(\mathbf{p})-\omega_{\mathbf{k}}][\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p})-\\ &-\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p}+\mathbf{k})]\},\quad \varphi_\mu^{+}(0,\mathbf{p})=v_\mu(\mathbf{p})=\partial T(\mathbf{p})/\partial p_\mu. \end{aligned}$$

При выводе (8) принималось во внимание, что

$$\langle\mathbf{p}_1|e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}|\mathbf{p}_2\rangle=\delta(\mathbf{p}_2\pm\mathbf{k}-\mathbf{p}_1),\quad \frac{1}{x\pm i\varepsilon}=\left(\frac{1}{x}\right)_{\mathrm{pr}}\mp i\pi\delta(x),$$

где $(\ldots)_{\mathrm{pr}}$ обозначает главное значение интеграла. Легко видеть, что функция $\varphi_\nu^{-}(t,\mathbf{p})\equiv\langle\mathbf{p}|g_\nu^{-}(t)|\mathbf{p}\rangle$ удовлетворяет точно такому же уравнению, как (8).

Уравнение (8) позволяет в принципе найти зависимость от времени корреляционных функций (3) и, следовательно, решить задачу нахождения тензора электропроводности по фомуле Кубо (1).

Из уравнения (8) нетрудно получить уравнения непосредственно для корреляционных функций импульса (3). Умножая обе части равенства (8) на $Z_S^{-1}v_\nu(\mathbf{p})e^{-\beta T(\mathbf{p})}$ ($Z_S=\mathrm{Sp}_S\,e^{-\beta H_S}=\int d\mathbf{p}e^{-\beta T(\mathbf{p})}$ для гамильтониана (2)) и беря от них $\int d\mathbf{p}\ldots$, находим

$$(9)\qquad \begin{aligned} &\frac{1}{Z_S}\int d\mathbf{p}\,e^{-\beta T(\mathbf{p})}v_\nu(\mathbf{p})\frac{\partial}{\partial t}\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p})=\frac{\partial}{\partial t}\langle v_\nu(0)v_\mu(t)\rangle=\\ &=-\frac{1}{Z_S}\int d\mathbf{p}\,e^{-\beta T(\mathbf{p})}v_\nu(\mathbf{p})\Gamma_\nu(\mathbf{p})\varphi_\mu^{+}(t,\mathbf{p}),\\ &\Gamma_\nu(\mathbf{p})=2\pi\sum_{\mathbf{k}}|V_{\mathbf{k}}|^2\frac{[v_\nu(\mathbf{p})-v_\nu(\mathbf{p}-\mathbf{k})]}{v_\nu(\mathbf{p})}\{(1+N_{\mathbf{k}})\delta[T(\mathbf{p})-\\ &-T(\mathbf{p}-\mathbf{k})-\omega_{\mathbf{k}}]+N_{\mathbf{k}}\delta[T(\mathbf{p})-T(\mathbf{p}-\mathbf{k})+\omega_{\mathbf{k}}]\}, \end{aligned}$$

здесь учтено, что $\omega_{\mathbf{k}}=\omega_{-\mathbf{k}}$, $V_{\mathbf{k}}=V_{-\mathbf{k}}$.

Аналогичным образом получаем уравнение для другой корреляционной функции:

$$(10)\qquad \frac{\partial}{\partial t}\langle v_\mu(t)v_\nu(0)\rangle=-\frac{1}{Z_S}\int d\mathbf{p}e^{-\beta T(\mathbf{p})}v_\mu(\mathbf{p})\Gamma_\mu(\mathbf{p})\varphi_\nu^{-}(t,\mathbf{p}),$$

где $\Gamma_\mu(\mathbf{p})$ определяется выражением (9) с заменой $\nu\to\mu$.

Ограничимся для простоты в дальнейшем изотропным случаем, когда $\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=\sigma_{zz}=\sigma$ (недиагональные компоненты равны нулю) и $T(\mathbf{p})=$

$=\mathbf{p}^2/2m^*$, где m^* — эффективная масса электрона в периодическом поле решетки.

Рассмотрим фрелиховский полярон. В системе единиц, в которой $\hbar=m^*=\omega_0=1$ (ω_0 — частота оптической моды колебаний кристалла), для такой модели имеем

$$(11)\qquad H_S=\mathbf{p}^2/2,\quad H_T=\sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}},\quad H_i=\sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}} + \text{э. с.},$$

$$V_{\mathbf{k}}=2^{3/4}\pi^{1/2}\alpha^{1/2}/V^{1/2}k,$$

где α — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, V — объем системы. Тогда из выражения (9) для $\Gamma_\nu(\mathbf{p})$ получим

$$(12)\qquad \Gamma_z(\mathbf{p})=\frac{\alpha}{\sqrt{2}\pi}\int d\Omega\int dk\,\frac{k\cos\theta}{p_z}\Big[(1+N_0)\times$$
$$\times\delta\left(pk\cos\theta_1-\frac{k^2}{2}-1\right)+N_0\delta\left(pk\cos\theta_1-\frac{k^2}{2}+1\right)\Big].$$

Здесь $N_0=(e^\beta-1)^{-1}$, $d\Omega=d\varphi\sin\theta\, d\theta$, углы φ и θ задают направление волнового вектора $\mathbf{k}$ относительно осей координат, θ_1 — угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$, связанный с углами φ и θ соотношением

$$(13)\qquad p\cos\theta_1=\sin\theta\cos\varphi\; p_x+\sin\theta\sin\varphi\; p_y+\cos\theta\; p_z.$$

Интегрирование в (12) по k приводит к выражению

$$(14)\qquad \Gamma_z(\mathbf{p})=\frac{\alpha}{\sqrt{2}\pi p_z}\Big[(1+N_0)\int\limits_{(p\cos\theta_1\geqslant\sqrt{2})} d\Omega\cos\theta\,\frac{2p\cos\theta_1}{\sqrt{p^2\cos^2\theta_1-2}}+$$
$$+N_0\int d\Omega\cos\theta\,\frac{p\cos\theta_1}{\sqrt{p^2\cos^2\theta_1+2}}\Big],$$

где область интегрирования в первом интеграле определяется условием положительности подкоренного выражения.

Рассмотрим случай низких температур $\beta\gg1$ ($k_BT\ll\omega_0$). Тогда уравнения (9), (10) для корреляционных функций определяются областью импульсов $p^2\ll2$. Следовательно, в этом случае можно ограничиться рассмотрением выражения $\Gamma_z(\mathbf{p})$ (14) в области малых значений импульсов $p\ll\sqrt{2}$. Из (12), (14) следует, что при таких значениях импульсов первый член в $\Gamma_z(\mathbf{p})$, соответствующий испусканию фонона электроном, равен нулю из-за невозможности в этом случае удовлетворить законам сохранения энергии и импульса. Во втором члене выражения (14) можно опустить $p^2\cos^2\theta_1$ рядом с двойкой. Этот член, описывающий процесс поглощения фонона электроном, теперь легко интегрируется (с учетом (13)). В результате получим

$$(15)\qquad \Gamma_z(\mathbf{p})\equiv\Gamma^0={}^2/_3\alpha N_0\qquad (p^2\ll2).$$

Таким образом, в области малых импульсов $\Gamma_z(\mathbf{p})$ не зависит от $\mathbf{p}$. Следовательно, в рассматриваемом случае низких температур ($\beta\gg1$) уравнения (9), (10) для корреляционных функций принимают вид

$$(16)\qquad \frac{\partial}{\partial t}\langle v_z(0)\,v_z(t)\rangle=-\Gamma^0\langle v_z(0)\,v_z(t)\rangle,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle v_z(t)\,v_z(0)\rangle=-\Gamma^0\langle v_z(t)\,v_z(0)\rangle\quad(\beta\gg1),$$

т. е. корреляционная функция для операторов скорости затухает экспоненциально с характерным временем релаксации $(\Gamma^0)^{-1}$.

Теперь нетрудно получить выражения для электропроводности и подвижности в случае фрелиховского полярона при низких температурах. Подставляя решение уравнений (16) в (1) и учитывая, что $\langle v_z^2\rangle=\beta^{-1}$ (в принятой системе единиц), получим

$$(17)\qquad \mathrm{Re}\,\sigma(\omega)=ne^2\frac{\Gamma^0}{\omega^2+(\Gamma^0)^2}\quad(\omega\ll\beta^{-1}\ll1),$$

где n — концентрация носителей, e — заряд электрона.

Таким образом, в рассмотренной области параметров имеем формулу Друде для электропроводности. Для низкотемпературной подвижности фрелиховского полярона $\mu=\sigma(0)/ne$ получим из формул (15), (17)

$$(18)\qquad \mu=\frac{3e}{2\alpha}e^{\beta}\quad(\beta\gg1).$$

Полученный результат (18) дает правильную температурную зависимость подвижности полярона, однако превышает подобное выражение, полученное рядом авторов (см., например, [16, 17, 23]), в три раза. Это объясняется тем, что в упомянутых работах использовалось для частоты релаксации электрона выражение, отличающееся от (9) отсутствием множителя $[v_\nu(\mathbf{p})-v_\nu(\mathbf{p-k})]/v_\nu(\mathbf{p})$, который описывает изменение скорости электрона во всех разрешенных законами сохранения энергии и импульса процессах рассеяния электрона на фононах. Выражение (9) для $\Gamma_\nu(\mathbf{p})$ возникает здесь из строгого микроскопического рассмотрения и является естественной величиной. Интересно отметить, что такое время релаксации было введено феноменологически в 1939 г. в работе [22], однако в последующих работах получалось выражение без множителя, описывающего изменение скорости.

Вернемся теперь к уравнению (8) и будем искать его решение в виде

$$(19)\qquad \varphi_\mu^{+}(t,\,\mathbf{p})=v_\mu(\mathbf{p})\,e^{-\Gamma_\mu(\mathbf{p})t}.$$

Тогда функция $\Gamma_\mu(\mathbf{p})$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$(20)\qquad \Gamma_\mu(\mathbf{p})\,v_\mu(\mathbf{p})\exp[-\Gamma_\mu(\mathbf{p})t]=2\pi\sum_{\mathbf{k}}|V_{\mathbf{k}}|^2\{(1+N_{\mathbf{k}})\times$$

$$\times\delta[T(\mathbf{p-k})-T(\mathbf{p})+\omega_{\mathbf{k}}]+N_{\mathbf{k}}\delta(T(\mathbf{p-k})-T(\mathbf{p})-\omega_{\mathbf{k}}]\}\times$$

$$\times\{v_\mu(\mathbf{p})\exp[-\Gamma_\mu(\mathbf{p})t]-v_\mu(\mathbf{p-k})\exp[-\Gamma_\mu(\mathbf{p-k})t]\}.$$

Нетрудно видеть, что в рассмотренном выше случае фрелиховского полярона при низких температурах (малые импульсы), когда $\Gamma_\mu(\mathbf{p})$ не зависит от импульса, из уравнения (20) следует выражение (9) для $\Gamma'_\mu(\mathbf{p}) \equiv \Gamma^0$.

Уравнение (20) имеет решение также в случае малых времен $\Gamma_\mu(\mathbf{p})t \ll 1$. Заменяя экспоненты единицами, получим из (20) $\Gamma_\mu(\mathbf{p})$ вида (9) для произвольного импульса. В этом случае из выражений (1), (3) и (19) получаем

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{ne^2\beta}{Z_S}\int d\mathbf{p}\, e^{-\beta p^2/2m^*}\left(\frac{p_z}{m^*}\right)^2 \frac{\Gamma_z(\mathbf{p})}{\omega^2},$$

$$\beta^{-1} \gg \omega \gg \Gamma_z(\mathbf{p}).$$

3. МОДЕЛЬ ФЕЙНМАНА

В этой модели [5], как известно, движение электрона и связанного с ним «облака» фононов аппроксимируется траекторией электрона, связанного с фиктивной частицей массы m_f посредством гармонической связи с константой g. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_S{}^F = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + \frac{\mathbf{p}_f{}^2}{2m_f} + \frac{1}{2}g(\mathbf{r}-\mathbf{r}_f)^2, \tag{21}$$

где $\mathbf{p}_f$, $\mathbf{r}_f$ — оператор импульса и радиус-вектор фиктивной частицы. Посредством введения новых канонических переменных гамильтониан (21) диагонализируется и может быть представлен в виде

$$H_S^F = \frac{\mathcal{P}^2}{2(m_f + m^*)} + \frac{m_f + m^*}{2m_f m^*}\mathbf{P}_{os}^2 + \frac{g}{2}\mathbf{r}_{os}^2. \tag{22}$$

Здесь $\mathcal{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_f$ — оператор полного импульса, канонически сопряженный радиус-вектору центра масс $\mathbf{R} = (m^*\mathbf{r} + m_f\mathbf{r}_f)/(m_f + m^*)$, $\mathbf{r}_{os} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_f$ — относительная координата, $\mathbf{P}_{os} = (m_f\mathbf{p} - m^*\mathbf{p}_f)/(m_f + m^*)$ — соответствующий импульс.

Таким образом, гамильтониан (22) описывает «молекулу», центр масс которой движется свободно, а составляющие ее частицы образуют гармонический осциллятор с приведенной массой $m_f m^*/(m_f + m^*)$ и частотой $\nu = \sqrt{g(m_f + m^*)/m_f m^*}$. Собственные значения гамильтониана (22) определяются выражением

$$E_{\mathcal{P},\mathbf{n}} = \frac{\mathcal{P}^2}{2(m_f + m^*)} + \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\nu, \tag{23}$$

$$n_x,\ n_y,\ n_z = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots,$$

и соответствуют собственным функциям $|\mathcal{P}\rangle|\mathbf{n}\rangle$ ($|\mathcal{P}\rangle$ — собственные функции оператора $\mathcal{P}$, $|\mathbf{n}\rangle$ — собственные функции осцилляторной части гамильтониана (22)).

Гамильтониан (21) достаточно хорошо описывает полярон и в случае сильной связи, если корректно выбрать вариационные параметры g и m_f. Отметим, что величина $m_f + m^*$ представляет собой в данной аппроксимации эффективную массу полярона. В случае слабой связи $m_f \to 0$ и $g \to 0$, а в случае сильной связи $m_f \gg m^*$, $\nu \gg \omega_0$. Поскольку гамильтониан (22), (21) хорошо описывает полярон в нулевом приближении, электрон-фононное взаимодействие (2) можно рассматривать как малое возмущение, причем нетрудно видеть, что координата электрона $\mathbf{r}$ связана с новыми каноническими переменными соотношением

$$\mathbf{r}=\mathbf{R}+\gamma\mathbf{r}_{os},\qquad \gamma=m_f/(m_f+m^*). \tag{24}$$

Таким образом, рассмотрим систему, описываемую гамильтонианом

$$H_F=H_S{}^F+H_T+H_i, \tag{25}$$

где $H_S{}^F$ определяется выражением (22), а H_T, H_i — выражениями (2).

Будем считать, что ток в формуле (1) обусловлен движением центра масс электрона и фиктивной частицы, поскольку они связаны вместе. Поэтому для расчета электропроводности в данном изотропном случае рассмотрим, например, корреляционную функцию

$$\begin{gathered}\langle\mathscr{P}_z(t)\mathscr{P}_z(0)\rangle_F\approx\langle\mathscr{P}_z(0)g_z{}^F(t)\rangle_S{}^F,\\ g_z{}^F(t)=Pe^{-iL_Ft}P\mathscr{P}_z(0)\qquad(\tau_{\text{rel}}\gg\beta).\end{gathered} \tag{26}$$

Здесь $\langle\ldots\rangle_F$ обозначает квантовостатистическое усреднение с гамильтонианом H_F, $\langle\ldots\rangle_S{}^F$ — усреднение с гамильтонианом $H_S{}^F$, а $L_FA=$ $=H_FA-AH_F$ (A — произвольный оператор).

При усреднении по состояниям $H_S{}^F$ в формуле (26) удобно воспользоваться собственными функциями этого гамильтониана $|\mathscr{P}\rangle|\mathbf{n}\rangle$. Будем, как и ранее, предполагать, что выполняется соотношение (5) для рассматриваемого случая, описываемого гамильтонианом (25). Уравнение для диагонального матричного элемента $[g_z{}^F(t)]_{\mathscr{P},\mathbf{n}}^{\mathscr{P},\mathbf{n}}\equiv\langle\mathscr{P}|\langle\mathbf{n}|g_z{}^F(t)|\mathbf{n}\rangle|\mathscr{P}\rangle$, определяющего корреляционную функцию (26), может быть получено с помощью уравнения (6), в котором нужно заменить L на $-L_F$. Учитывая (7), (24), а также то, что

$$(e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{R}})_{\mathscr{P}_1}^{\mathscr{P}_2}=\delta(\mathscr{P}_2\pm\mathbf{k}-\mathscr{P}_1),$$

получим из этого уравнения

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}[g_z{}^F(t)]_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}^{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}={}&\frac{1}{i}\int\limits_0^\infty e^{-\varepsilon t_1}\,dt_1\sum_{\mathbf{k}\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2}|V_\mathbf{k}|^2\{(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_\mathbf{n}^{\mathbf{n}_1}\times\\ &\times(e^{i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_{\mathbf{n}_1}^{\mathbf{n}_2}\exp\{-i(E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}-E_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}_2})t_1\}[e^{i\omega_\mathbf{k}t_1}N_\mathbf{k}+\\ &+e^{-i\omega_\mathbf{k}t_1}(1+N_\mathbf{k})][g_z{}^F(t)]_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}_2}^{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}-(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_\mathbf{n}^{\mathbf{n}_1}(e^{i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_{\mathbf{n}_2}^{\mathbf{n}}\times\\ &\times[\exp\{-i(E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_2}-E_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}})t_1\}[e^{i\omega_\mathbf{k}t_1}N_\mathbf{k}+e^{-i\omega_\mathbf{k}t_1}(1+N_\mathbf{k})]+\\ &+\exp\{-i(E_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1})t_1\}[e^{-i\omega_\mathbf{k}t_1}N_\mathbf{k}+e^{i\omega_\mathbf{k}t_1}(1+N_\mathbf{k})]]\times\\ &\times[g_z{}^F(t)]_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}^{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_2}+(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_{\mathbf{n}_1}^{\mathbf{n}_2}(e^{i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_{\mathbf{n}_2}^{\mathbf{n}}\exp\{-i(E_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_2})t_1\}\times\\ &\times[e^{-i\omega_\mathbf{k}t_1}N_\mathbf{k}+e^{i\omega_\mathbf{k}t_1}(1+N_\mathbf{k})][g_z{}^F(t)]_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}^{\mathscr{P},\,\mathbf{n}_1}\},\qquad[g_z{}^F(0)]_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}^{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}=\\ &=\langle\mathscr{P}|\mathscr{P}_z(0)|\mathscr{P}\rangle=\mathscr{P}_z. \end{aligned} \tag{27}$$

Уравнение (27), в отличие от уравнения (8), не есть уравнение больцмановского типа, поскольку содержит в правой части недиагональные (по $\mathbf{n}$) матричные элементы оператора $g_z{}^F(t)$. Оно значительно сложнее, чем уравнение (8). Учтем, однако, следующее обстоятельство. Из уравнения (4) (с заменой L на $-L_F$) видно, что в нулевом приближении по взаимодействию матричный элемент $[g_z^F(t)]^{\mathscr{P}_1,\,\mathbf{n}_2}_{\mathscr{P}_1,\,\mathbf{n}_1}$ осциллирует как

$$\exp\,[i(E_{\mathscr{P}_1,\mathbf{n}_1}-E_{\mathscr{P}_1,\mathbf{n}_2})t]=\exp\,[i(\omega_{\mathbf{n}_1}-\omega_{\mathbf{n}_2})t],$$

где $\omega_{\mathbf{n}_1}=(n_{1x}+n_{1y}+n_{1z}+{}^3/_2)\nu$. При рассмотрении достаточно больших времен

(28) $\qquad t\gg 1/|\omega_{\mathbf{n}_1}-\omega_{\mathbf{n}_2}|$

матричные элементы для состояний с $\omega_{\mathbf{n}_1}\neq\omega_{\mathbf{n}_2}$ будут «высредняться». Таким образом, при выполнении условия (28), что будет предполагаться в дальнейшем, в уравнении (27) можно оставить суммирование только по тем состояниям, для которых частоты $\omega_{\mathbf{n}_i}$ совпадают. Поскольку, как видно из (23), уровни энергии $\omega_{\mathbf{n}}$ являются вырожденными (кроме уровня $\omega_{\mathbf{n}=0}$, соответствующего основному состоянию осциллятора), уравнение (27) и при таком ограничении на учитываемые состояния содержит недиагональные матричные элементы.

Запишем уравнение (27) для состояния с $\mathbf{n}=0$. Учитывая вышесказанное и интегрируя по времени, получим

$$(29)\qquad \frac{\partial}{\partial t}[g_z^F(t)]^{\mathscr{P},\,0}_{\mathscr{P},\,0}=-2\pi\sum_{\mathbf{k}\mathbf{n}_1}|V_{\mathbf{k}}|^2\{|(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})^{\mathbf{n}_1}_0|^2\times$$
$$\times[(1+N_{\mathbf{k}})\,\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}-\omega_{\mathbf{k}})+N_{\mathbf{k}}\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}+$$
$$+\omega_{\mathbf{k}})]\,[g_z^F(t)]^{\mathscr{P},\,0}_{\mathscr{P},\,0}-\sum_{\tilde{\mathbf{n}}_2}(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})^{\mathbf{n}_1}_0\,(e^{i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})^0_{\tilde{\mathbf{n}}_2}\times$$
$$\times[(1+N_{\mathbf{k}})\,\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}-\omega_{\mathbf{k}})+N_{\mathbf{k}}\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-$$
$$-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}+\omega_{\mathbf{k}})]\,[g_z^F(t)]^{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\tilde{\mathbf{n}}_2}_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,\mathbf{n}_1}\},$$

здесь $\tilde{\mathbf{n}}_2$ нумерует состояния с $\omega_{\tilde{\mathbf{n}}_2}=\omega_{\mathbf{n}_1}$.

Рассмотрим случай относительно низких температур, когда

(30) $\qquad k_BT\ll\nu.$

В этом случае в корреляционную функцию (26) главный вклад дают состояния с $E_{\mathscr{P},\,\mathbf{n}}\sim k_BT\ll\nu$, т. е. состояния с энергией $E_{\mathscr{P},0}$, соответствующие полярону в основном состоянии. Будем считать также, что $\omega_{\mathbf{k}}^{\max}\ll\nu$ (например, частота оптической моды $\omega_0\ll\nu$). Тогда в рассматриваемом случае, когда существенны импульсы $\mathscr{P}^2\ll 2(m_f+m^*)\nu$, законы сохранения, выражаемые дельта-функциями в уравнении (29), могут удовлетворяться только при $\mathbf{n}_1=0$ и уравнение (29) приобретает вид

$$(31)\qquad \frac{\partial}{\partial t}[g_z^F(t)]^{\mathscr{P},\,0}_{\mathscr{P},\,0}=-2\pi\sum_{\mathbf{k}}|V_{\mathbf{k}}|^2\,|(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})^0_0|^2\,[(1+N_{\mathbf{k}})\times$$
$$\times\,\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,0}-\omega_{\mathbf{k}})+N_{\mathbf{k}}\delta\,(E_{\mathscr{P},\,0}-E_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,0}+\omega_{\mathbf{k}})]\times$$
$$\times\,\{[g_z^F(t)]^{\mathscr{P},\,0}_{\mathscr{P},\,0}-[g_z^F(t)]^{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,0}_{\mathscr{P}+\mathbf{k},\,0}\}\qquad(\mathscr{P}^2\ll 2\,(m_f+m^*)\,\nu).$$

Это уже уравнение больцмановского типа (ср. с (8)). Экспоненциальный фактор, появляющийся в этом уравнении, обрезает вероятность рассеяния с большим изменением импульса $\mathscr{P}$ (большими $\mathbf{k}$) (см. [17]), т. к.

$$(32)\qquad |(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_0{}^0|^2=\exp\left[-\frac{m_f}{m^*}\frac{k^2}{2(m_f+m^*)\nu}\right].$$

Естественно, такие же уравнения, как (27), (29), (31), получим и для матричных элементов $g_x^F(t)$, $g_y^F(t)$. В результате наличия обрезающего фактора (32) передаваемый при рассеянии импульс $k \sim \sqrt{2(m_f+m^*)\nu m^*/m_f}$. Учитывая, что $\mathcal{P} \sim \sqrt{2\beta^{-1}(m_f+m^*)}$, получим $\frac{k}{\mathcal{P}} \sim \sqrt{\beta \frac{m^*}{m_f}\nu}$. Если $k_B T \gg \frac{m^*}{m_f}\nu$, то относительная передача импульса мала и уравнение (31) в случае сильной связи ($m_f \gg m^*$) может быть записано в форме дифференциального уравнения типа Фоккера — Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi^F(t, \mathcal{P}) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 \left\{\exp\left[-\frac{m_f}{m^*}\frac{k^2}{2(m_f+m^*)\nu}\right]\right\} \times$$
$$\times [(1+N_{\mathbf{k}})\delta(E_{\mathcal{P},0} - E_{\mathcal{P}+\mathbf{k},0} - \omega_{\mathbf{k}}) + N_{\mathbf{k}}\delta(E_{\mathcal{P},0} - E_{\mathcal{P}+\mathbf{k},0} + \omega_{\mathbf{k}})] \times$$
$$\times \left[\frac{\partial \varphi^F(t, \mathcal{P})}{\partial \mathcal{P}_i} k_i + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \varphi^F(t, \mathcal{P})}{\partial \mathcal{P}_i \partial \mathcal{P}_j} k_i k_j\right],$$
$$\nu \gg \beta^{-1} \gg \frac{m^*}{m_f}\nu, \quad \varphi^F(t, \mathcal{P}) = [g_z^F(t)]_{\mathcal{P},0}^{\mathcal{P},0}.$$

Здесь по повторяющимся индексам производится суммирование.

Из выражения (26) и уравнения (31) получаем следующее уравнение для корреляционной функции импульса полярона в случае температур, удовлетворяющих условию (30):

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathcal{P}_z(t)\mathcal{P}_z(0)\rangle = \frac{1}{Z_S^F}\int d\mathcal{P} \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta E_{\mathcal{P},\mathbf{n}}}\mathcal{P}_z \frac{\partial}{\partial t}[g_z^F(t)]_{\mathcal{P},\mathbf{n}}^{\mathcal{P},\mathbf{n}} = \tag{33}$$
$$= -\frac{1}{Z_S^{0F}}\int d\mathcal{P} e^{-\beta E_{\mathcal{P},0}}\mathcal{P}_z \Gamma_z^F(\mathcal{P})[g_z^F(t)]_{\mathcal{P},0}^{\mathcal{P},0}, \quad \beta^{-1} \ll \nu,$$
$$\Gamma_z^F(\mathcal{P}) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 |(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_0^0|^2 \frac{k_z}{\mathcal{P}_z}[(1+N_{\mathbf{k}})\delta(E_{\mathcal{P}-\mathbf{k},0} -$$
$$- E_{\mathcal{P},0} + \omega_{\mathbf{k}}) + N_{\mathbf{k}}\delta(E_{\mathcal{P}-\mathbf{k},0} - E_{\mathcal{P},0} - \omega_{\mathbf{k}})],$$
$$Z_S^F = \int d\mathcal{P} \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta E_{\mathcal{P},\mathbf{n}}}, \quad Z_S^{0F} = \int d\mathcal{P} e^{-\beta E_{\mathcal{P},0}}.$$

Снова получающееся выражение для частоты релаксации полярона $\Gamma_z^F(\mathcal{P})$ отличается от ранее получаемого выражения (см. [17]) добавочным множителем $k_z/\mathcal{P}_z$, описывающим изменение импульса полярона при рассеянии на фононах.

Если искать решение уравнения (31) в виде

$$[g_z^F(t)]_{\mathcal{P},0}^{\mathcal{P},0} = \mathcal{P}_z e^{-\Gamma_z^F(\mathcal{P})t},$$

то для $\Gamma_z^F(\mathcal{P})$ получим следующее уравнение:

$$\Gamma_z^F(\mathcal{P})\mathcal{P}_z e^{-\Gamma_z^F(\mathcal{P})t} = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 |(e^{-i\gamma\mathbf{k}\mathbf{r}_{os}})_0^0|^2 \times \tag{34}$$
$$\times [(1+N_{\mathbf{k}})\delta(E_{\mathcal{P},0} - E_{\mathcal{P}+\mathbf{k},0} - \omega_{\mathbf{k}}) + N_{\mathbf{k}}\delta(E_{\mathcal{P},0} -$$
$$- E_{\mathcal{P}+\mathbf{k},0} + \omega_{\mathbf{k}})][\mathcal{P}_z e^{-\Gamma_z^F(\mathcal{P})t} - (\mathcal{P}_z + k_z)e^{-\Gamma_z^F(\mathcal{P}+\mathbf{k})t}].$$

Нетрудно видеть, что уравнение (34) имеет решение для $\Gamma_z^F(\mathscr{P})$ вида (33), если $\Gamma_z^F(\mathscr{P})=\Gamma_0^F$, т. е. не зависит от $\mathscr{P}$. Покажем, что это имеет место для низких температур $\beta^{-1}\ll\omega_0$, если в спектре фононных частот ω_k учесть только бездисперсную оптическую моду с частотой $\omega_0\ll\nu$. Воспользуемся снова системой единиц, в которой $\hbar=m^*=\omega_0=1$, а для V_k возьмем фрелиховскую константу (11). В области $\beta^{-1}\ll1$ главный вклад в корреляционную функцию (33) дают импульсы $\mathscr{P}^2\ll2(m_f+1)$. При таких импульсах первый член в выражении (33) для $\Gamma_z^F(\mathscr{P})$, соответствующий испусканию фонона, обращается в нуль из-за δ-функции, выражающей закон сохранения энергии и импульса. Вычисление второго члена, соответствующего поглощению фонона поляроном, проводится так же, как и в ранее рассмотренном случае слабой связи. Учитывая, что в указанной области малых импульсов фактор (32) равен $e^{-m_f/\nu}$, из выражения (33) получим

$$\Gamma_z^F(\mathscr{P})=\Gamma_0^F={}^2/_3\alpha N_0(m_f+1)^{1/2}e^{-m_f/\nu},\qquad \mathscr{P}^2\ll2(m_f+1). \tag{35}$$

Выражение (35) переходит в (15) при $m_f\to0$, т. е. в пределе слабой связи.

Таким образом, в случае низких температур ($\beta^{-1}\ll1$) из уравнения (33) имеем

$$\langle\mathscr{P}_z(t)\mathscr{P}_z(0)\rangle=\langle\mathscr{P}_z^2\rangle_S^F e^{-\Gamma_0^F t}\qquad(\beta^{-1}\ll1).$$

Учитывая, что $\langle\mathscr{P}_z^2\rangle_S^F=\beta^{-1}(m_f+1)$, получаем из формулы (1)

$$\operatorname{Re}\sigma^F(\omega)=\frac{ne^2}{m_f+1}\frac{\Gamma_0^F}{\omega^2+(\Gamma_0^F)^2}\qquad(\omega\ll\beta^{-1}\ll1).$$

Соответственно для подвижности имеем

$$\mu^F=\frac{3e}{2\alpha}e^{\beta}\frac{e^{m_f/\nu}}{(m_f+1)^{3/2}}\qquad(\beta\gg1). \tag{36}$$

Выражение (36) в три раза превосходит выражение, полученное в работе [17].

Легко видеть, что уравнение (34) имеет также решение вида (33) при $\Gamma_z^F(\mathscr{P})t\ll1$. Выражение для электропроводности в этом случае имеет вид (в обычных единицах)

$$\operatorname{Re}\sigma^F(\omega)=\frac{ne^2\beta}{Z_S^{0F}}\int d\mathscr{P}e^{-\beta E_{\mathscr{P},0}}\frac{\mathscr{P}_z^2}{(m_f+m^*)^2}\frac{\Gamma_z^F(\mathscr{P})}{\omega^2},$$

$$\Gamma_z^F(\mathscr{P})\ll\omega\ll\beta^{-1}\ll\nu.$$

Аналогичным образом можно рассмотреть тензор электропроводности в случае статистики Ферми и получить, например, формулу Блоха — Грюнайзена для электросопротивления.

Развитый метод вычисления тензора электропроводности позволяет получить и высшие приближения по взаимодействию для этой величины.

Литература

[1] *Kohn W., Luttinger J. M.*— Phys. Rev., 1957, *108*, № 3, 590–612.
[2] *Luttinger J. M., Kohn W.*— Phys. Rev., 1958, *109*, № 6, 1892–1909.
[3] *Bogolubov N. N.* Kinetic Equations for Electron-Phonon Systems. Preprint E17-11822, Dubna: JINR, 1978.
[4] *Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н.* (мл.) – ЭЧАЯ, 1980, *11*, № 2, 245–300.
[5] *Feynman R. P.*— Phys. Rev., 1955, *97*, 660–665.
[6] *Kadanoff L. P., Revzen M.*— Nuovo Cim., 1964, *33*, 397–412.
[7] *Лось В. Ф., Мартыненко А. Г.*— ТМФ, 1983, *55*, № 2, 313–320.
[8] *Kubo R.*— J. Phys. Soc. Japan, 1957, *12*, № 6, 570–585.
[9] *Greenwood D. A.*— Proc. Phys. Soc., 1958, *71*, 585–596.
[10] *Chester G. V., Thellung A.*— Proc. Phys. Soc., 1959, *73*, № 473, 745–766.
[11] *Kenkre W. M., Dresden M.*— Phys. Rev., 1972, *A6*, № 2, 769–775.
[12] *Van Royen J., Beleznay F., Devreese J. T.*— Phys. Stat. Sol. (b), 1981, *107*, № 1, 335–345.
[13] *Fröhlich H., Paranjape B. V.*— Proc. Phys. Soc., 1956, *69*, 21–32.
[14] *Feynman R. P., Hellwarth R. W., Iddings C. K., Platzman P. M.*— Phys. Rev., 1962, *127*, № 4, 1004–1017.
[15] *Thornber K. K., Feynman R. P.*— Phys. Rev., 1970, *B1*, № 10, 4099–4114.
[16] *Fröhlich H.*— Adv. Phys., 1954, *3*, 325–351.
[17] *Kadanoff L. P.*— Phys. Rev., 1963, *130*, № 4, 1364–1369.
[18] *Peeters F. M., Devreese J. T.*— Phys. Stat. Sol. (b), 1983, *115*, № 2, 539–543.
[19] *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966, 416 с.
[20] *Займан Дж.* Электроны и фононы. М.: Мир, 1962, 488 с.
[21] *Лось В. Ф.*— ТМФ, 1979, *39*, № 3, 393–402.
[22] *Fröhlich H., Mott N. F.*— Proc. Roy. Soc., 1939, *A171*, 496–512.
[23] *Langreth D. C., Kadanoff L. P.*— Phys. Rev., 1964, *A133*, 1070–1075.

Институт металлофизики
Академии наук УССР

Поступила в редакцию
8.VIII.1983 г.

ON THE THEORY OF CRYSTAL CONDUCTIVITY

Los' V. F.

Basing on the Kubo formula, the crystal conductivity is calculated by means of the Green superoperator method in the framework of the perturbation theory. There is no necessity to sum up the infinite series (at $\omega\to 0$). The mobility of Fröhlich polaron at small coupling as well as Feynman polaron are obtained (both at low temperatures).