

ПЕРЕХРЕСНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНІВ У НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМАХ

Т.В. ШВЕЦЬ

Одеська державна академія холоду

(Вул. Дворянська, 1/3, Одеса 270117; e-mail: tarval@breezein.net)

УДК 539.2; 537.311.3
© 2010

На основі варіаційного принципу отримано вираз для коефіцієнта електричного опору простих неупорядкованих металів і повністю іонізованої плазми, вірний у довільному порядку теорії збурень за електрон-іонною взаємодією. При цьому іонна підсистема вважається статичною. Параметри розчеплення функцій Гріна старших порядків, що виникають при отриманні квантового кінетичного рівняння, вибрані з умови збігу рівняння Больцмана і квантового кінетичного рівняння у нижчому порядку теорії збурень. У другому і третьому порядках теорії збурень відтворені вже відомі раніше результати. Вперше враховано ефект четвертого порядку, пов'язаний з одночасним розсіюванням електронів провідності зовнішнім електричним полем і полем іонів. Цей ефект у четвертому порядку теорії збурень виявився відмінним від нуля для повністю іонізованої плазми і рівним нулю у межі низьких температур для неупорядкованих металів.

1. Вступ

Прості метали і більшість перехідних належать до систем з малим параметром. У багатьох випадках і повністю іонізовану плазму можна розглядати як систему з малим параметром. Цим параметром є відношення формфактора електрон-іонної взаємодії в околі рівня Фермі до кінетичної енергії електрона провідності на цьому рівні $w(q)/\varepsilon_F$. Зауважимо, що електрон-електронна взаємодія, як правило, не є слабкою. У результаті всі характеристики таких систем можуть бути подані рядами теорії збурень за цим параметром. У кожному окремому випадку виникає свій ряд теорії збурень. Її побудова є складною задачею, що не розв'язана остаточно і досі. Для електричного опору у простих рідких металах перший член, квадратичний за електрон-іонною взаємодією, отримано ще в роботі [1]. Це так звана формула Займана. У подальші десятиліття ця формула стала основою для серії праць, пов'язаних з уточненням і розширенням умов її застосування (див. [2, 3]). Так, у праці [4] – у другому порядку теорії збурень було враховано динаміку іонної підсистеми, у [5] – явно врахована електрон-електронна взаємодія, у [6] – одночасно обидва фа-

ктори. Але найбільш важливим фактором, що впливає на числові значення кінетичних коефіцієнтів, є члени старших порядків теорії збурень. Велику кількість спроб побудувати теорію збурень за електрон-іонною взаємодією здійснено у наближенні часу релаксації [7–15]. Тобто теорію збурень будували не для відповідного кінетичного коефіцієнта, а для оберненого часу релаксації, що характеризує даний процес перенесення. Водночас саме наближення часу релаксації, як буде показано в даній роботі, вірне лише в межах теорії збурень, що враховує члени не вищі третього порядку. Чи вірне це наближення у четвертому порядку залишалось під знаком запитання. Але навіть в третьому порядку теорії збурень цитовані вище праці не були успішними, і інтерес до цієї проблеми значно знизився. Суттєвий прогрес відносно побудови теорії збурень був досягнутий у пізніших працях [16–21]. Тут у наближенні часу релаксації було отримано член третього порядку теорії збурень і числово порахований практично для всіх простих. Після цього виникло питання: а що ж далі. Вихід за межі наближення часу релаксації вимагає акуратного врахування ефектів четвертого порядку. Зазначимо, що ефекти четвертого порядку навіть для простих металів можуть бути немалими. Вони мають порядок величини $\hbar/\varepsilon_F\tau$, де ε_F – енергія Фермі, а τ – час релаксації. Цей безрозмірний параметр для багатьох простих металів становить декілька десятків. Тобто відповідний внесок у кінетичний коефіцієнт може бути порядку десятків відсотків. Якщо ці ефекти четвертого порядку суттєві, то закон Відемана–Франца і ефект Холла для простих неупорядкованих металів виконано вже лише наближено. Поправки до сталої Лоренца і сталої Холла були б саме порядку зазначеного безрозмірного параметра, тобто другого порядку за псевдопотенціалом. Зазначимо, що у наближенні часу релаксації такі поправки відсутні. Особливо актуальним зазначене питання стає у випадку необхідності підсумовування всього ряду теорії збурень. Така необхідність виникає, наприклад, при обчисленні електричного опору металевого во-

дню поблизу точки переходу метал–діелектрик [22–24].

Абсолютно недослідженим ефектом четвертого порядку є ефект, зумовлений перехресним розсіюванням електронів провідності зовнішнім електричним полем і полем іонів. Його дослідженню і присвячено дану роботу. Причому, розглядатимуть не лише квантовий випадок, характерний для неупорядкованих металів, але і класичний, характерний для повністю іонізованої плазми. Нами також буде показано, що при урахуванні членів четвертого і більш високих порядків структура коефіцієнта електричного опору стає більш складною. Час релаксації перестає бути єдиною структурно залежною величиною, що визначає цей коефіцієнт. Другою структурно залежною величиною стає щільність станів електронів провідності, третьою – внесок, зумовлений перехресним розсіюванням. Буде також показано, що, починаючи з членів четвертого порядку, введення часу релаксації дійсно стає наближенням. Зазначимо, що запропонований нами алгоритм обчислення коефіцієнта електричного опору не вимагає введення цього наближення. Використання цього терміна у нас не більше, ніж можливість інтерпретації отриманої формули у традиційних термінах.

2. Коефіцієнт електричного опору

Гамільтоніан електронної підсистеми простого металу або повністю іонізованої плазми візьмемо відповідно до дифракційної моделі металу, де електрон-електронну взаємодію враховуємо екрануванням електрон-іонної взаємодії [3]:

$$H(t) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}(t) + V^{-1} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} w(\mathbf{q}) \rho(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t). \quad (1)$$

Дифракційна модель металу є цілком задовільною для простих металів і лише у разі перехідних або рідкоземельних металів за наявності декількох електронних підсистем потребує суттєвого уточнення. Але навіть в останньому випадку електрон-електронна взаємодія є суттєвою лише у кристалічному стані і лише при низьких температурах, коли можна виділити її характерний внесок в електричний опір, пропорційний квадрату температури. Тут $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, $a_{\mathbf{k}}$ – оператори народження і знищення електронів у стані з хвильовим вектором \mathbf{k} , $\varepsilon_{\mathbf{k}} =$

$\hbar^2 k^2 / 2m$ – енергія вільного електронного газу, $w(\mathbf{q})$ – формфактор локального модельного псевдопотенціалу електрон-іонної взаємодії, $\rho(\mathbf{q})$ – фур'є-образ густини іонів, V – об'єм системи. Іонну підсистему вважатимемо статичною, що цілком прийнятно для неупорядкованих металів і плазми [3].

Відповідно до теорії лінійної реакції Кубо коефіцієнт електропровідності у сталому і однорідному електричному полі для ізотропних металу або плазми має вигляд [3]:

$$\sigma = -\frac{\hbar}{3V k_{\text{B}} T} \text{Im} \langle \langle \mathbf{I}(t) \mathbf{I}(t') \rangle \rangle_0. \quad (2)$$

Тут оператор електричного струму

$$\mathbf{I}(t) = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}(t). \quad (3)$$

Подвійні кутові дужки позначають двочасову загальну функцію Гріна, нижній індекс позначає нульову компоненту Фур'є.

Фур'є-образ функції Гріна, що визначає коефіцієнт електропровідності, шукатимемо методом рівняння руху [25]. Останнє рівняння має вигляд

$$\begin{aligned} \hbar\omega \langle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} &= \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(0) a_{\mathbf{k}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle + \\ &+ V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \{ w(\mathbf{q}) \langle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \rho(-\mathbf{q}, t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} - \\ &- \langle \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger}(t) \rho(\mathbf{q}, t) a_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} \}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для функцій Гріна, що входять у праву частину цього рівняння, у свою чергу, складемо рівняння руху типу

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega) \langle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \rho^i(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} &= \\ = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(0) \rho^i(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle + \\ &+ V^{-1} w(\mathbf{q}) \{ \langle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \rho(-\mathbf{q}) \rho(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} - \\ &- \langle \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger}(t) \rho(\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} \} + V^{-1} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}'} \{ w(\mathbf{q}') \langle \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \rho(-\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_{\omega} - \end{aligned}$$

$$-\langle\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t)\rho(\mathbf{q})\rho(-\mathbf{q}')a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_{\omega}\}. \quad (5)$$

Праві частини таких рівнянь містять два види функцій Гріна. Структура одних із них визначається слабо зв'язаними, других – сильно зв'язаними середніми. Для функцій Гріна другого типу потрібно знову скласти рівняння руху, продовжуючи ланцюжок рівнянь руху до нескінченності. Такий нескінченний ланцюжок рівнянь руху міститиме лише функції Гріна першого типу. Для замикання цього ланцюжка рівнянь відносно шуканої функції Гріна слід виконати у ній розчеплення типу

$$\begin{aligned} &\langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)\rho(-\mathbf{q},t)\rho(\mathbf{q})a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_{\omega} = \\ &= f(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \langle\rho(-\mathbf{q})\rho(\mathbf{q})\rangle \langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_{\omega}. \quad (6) \end{aligned}$$

Функцію $f(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ підбирають з умови виконання якихось важливих властивостей симетрії всього рівняння. Цей вибір конкретизуємо нижче. Об'єднуючи рівняння ланцюжка в одне, отримуємо таке квантове кінетичне рівняння:

$$\begin{aligned} &R(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} T \{ \langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 - \\ &-\langle\langle a_{\mathbf{k}'}^+(t)a_{\mathbf{k}'}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 \} = 0. \quad (7) \end{aligned}$$

Тут вільний член рівняння

$$\begin{aligned} &R(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}}^+(0)a_{\mathbf{k}}(0)\mathbf{I}(0)\rangle + V^{-1} \sum_{\mathbf{k}'} w(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|) \times \\ &\times \left[\frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+(0)\rho(\mathbf{k}' - \mathbf{k})a_{\mathbf{k}'}(0)\mathbf{I}(0)\rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\delta} - \right. \\ &\left. - \frac{\langle a_{\mathbf{k}'}^+(0)\rho(\mathbf{k} - \mathbf{k}')a_{\mathbf{k}}(0)\mathbf{I}(0)\rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} \right] + \dots \quad (8) \end{aligned}$$

описує розсіяння електронів зовнішнім електричним полем, якщо розраховувати його у нульовому порядку за псевдопотенціалом, і перехресне розсіяння зовнішнім полем та полем іонів, якщо враховувати члени більш високих порядків за псевдопотенціалом. За термінологією рівняння Больцмана, ці члени квантового кінетичного рівняння слід назвати польовим і перехресним членами відповідно [26]. Інтегральні члени рівняння

$$T \{ \langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 - \langle\langle a_{\mathbf{k}'}^+(t)a_{\mathbf{k}'}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 \} =$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N}{V} w^2(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|) S(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|) \times \\ &\times \left\{ \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\delta} - \right. \\ &\left. - \frac{f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \langle\langle a_{\mathbf{k}'}^+(t)a_{\mathbf{k}'}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} \right\} + \dots \quad (9) \end{aligned}$$

описують розсіяння електронів провідності тільки полем іонів – зіткнений член в термінах рівняння Больцмана. Три крапки позначають члени тої ж структури, але вищого порядку за псевдопотенціалом. Крім того, введено двочастинковий структурний фактор іонної підсистеми:

$$S(q) = N^{-1} \langle\rho(-\mathbf{q})\rho(\mathbf{q})\rangle, \quad \mathbf{q} \neq 0. \quad (10)$$

Для подальшого розгляду нам потрібне квантове кінетичне рівняння у найменшому порядку теорії збурень. Тоді вільний член рівняння слід узяти в нульовому порядку за псевдопотенціалом. Маємо

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+(0)a_{\mathbf{k}}(0)\mathbf{I}\rangle_0 = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{k}' \langle a_{\mathbf{k}}^+(0)a_{\mathbf{k}}(0)a_{\mathbf{k}'}^+(0)a_{\mathbf{k}'}(0)\rangle_0. \quad (11)$$

Відповідно до теореми Віка–Блоха–Домінісіса для невзаємодіючих електронів [27]:

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 = \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle_0 \langle a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 + \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 \langle a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^+ \rangle_0, \quad (12)$$

де

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 = n_0(k) \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (13)$$

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ \rangle_0 = [1 - n_0(k)] \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (14)$$

Тут $n_0(k)$ – функція розподілу Фермі–Дірака. Отже, у найменшому порядку теорії збурень квантове кінетичне рівняння має вигляд

$$\begin{aligned} &\frac{e\hbar}{m} \mathbf{k} n_0(k) [1 - n_0(k)] = \\ &= i \frac{2\pi N}{V^2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)}{\varepsilon^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)} S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \times \\ &\times \{ f(k, k') \langle\langle a_{\mathbf{k}}^+(t)a_{\mathbf{k}}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 - \\ &- f(k, k') \langle\langle a_{\mathbf{k}'}^+(t)a_{\mathbf{k}'}(t)\mathbf{I}(0)\rangle\rangle_0 \}, \quad (15) \end{aligned}$$

де ми використали формулу Сохоцького

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\delta} = P \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}} - i\pi \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (16)$$

3. Рівняння Больцмана

Кінетичне рівняння Больцмана довело свою високу ефективність для опису електронних явищ перенесення в металах і плазмі в першому незначущому порядку теорії збурень за псевдопотенціалом. Воно отримано на основі чітких фізичних міркувань і не містить неконтрольованих наближень. Отримане нами квантове кінетичне рівняння саме таке наближення і містить. Ним є розчеплення функцій Гріна старшого порядку. Мінімізувати невизначеність, що виникає при розчепленні, можна зіставивши квантове кінетичне рівняння в нижчому порядку теорії збурень і кінетичне рівняння Больцмана. Останнє рівняння у сталому електричному полі і за відсутності градієнта температур та магнітного поля можна записати у вигляді [28]:

$$-\frac{e}{\hbar} \frac{\partial n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}'} [P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - P(\mathbf{k}', \mathbf{k})]. \quad (17)$$

Тут $n(\mathbf{k})$ – функція розподілу електронів провідності при зовнішньому електричному полі і полі іонів, а ймовірність переходу електрона в результаті розсіяння на іонах із стану з хвильовим вектором \mathbf{k} у стан з хвильовим вектором \mathbf{k}'

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = n(\mathbf{k})[1 - n(\mathbf{k}')]L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (18)$$

є добутком ймовірності того, що стан \mathbf{k} зайнятий, $n(\mathbf{k})$, ймовірність того, що стан \mathbf{k}' вільний $1 - n(\mathbf{k}')$, і ймовірність самого переходу $L(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. За відсутності зовнішніх впливів на електрони ймовірності прямих і обернених переходів мають збігатись (принцип детальної рівноваги), тобто

$$P_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = P_0(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (19)$$

або

$$n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k}')]L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = n_0(\mathbf{k}')[1 - n_0(\mathbf{k})]L(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (20)$$

Для того, щоб рівняння Больцмана автоматично задовольняло цю вимогу, його структура має бути такою

$$-\frac{e}{\hbar} \frac{\partial n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}'} \left[\frac{n(\mathbf{k}')[1 - n(\mathbf{k})]}{n_0(\mathbf{k}')[1 - n_0(\mathbf{k})]} - \frac{n(\mathbf{k})[1 - n(\mathbf{k}')] }{n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k}')] } \right] \times$$

$$\times n_0(\mathbf{k}')[1 - n_0(\mathbf{k})]L(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (21)$$

Для металів функція $n(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ мало відрізняється від рівноважної (функції Фермі–Дірака). Кінетичне рівняння тоді лінеаризується за відхиленнями функції $n(\mathbf{r})$ від її рівноважного значення. При цьому зручно використати таке представлення:

$$n(\mathbf{k}) = n_0(k) - \Phi(\mathbf{k}) \frac{dn_0(k)}{d\varepsilon_k}. \quad (22)$$

Тут $\Phi(\mathbf{k})$ – нова невідома функція. Після підстановки останнього виразу у рівняння Больцмана і його лінеаризації воно матиме вигляд

$$\frac{e\hbar}{mk_{\text{B}}T} \mathbf{k} n_0(k) [1 - n_0(k)] \mathbf{E} = \frac{1}{k_{\text{B}}T} \times \sum_{\mathbf{k}}' [\Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}')] n_0(k') [1 - n_0(k)] L(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (23)$$

де ми врахували, що

$$\frac{dn_0(k)}{d\varepsilon_k} = \frac{n_0(k)[1 - n_0(k)]}{k_{\text{B}}T}. \quad (24)$$

Саме у такому вигляді рівняння Больцмана зручне для зіставлення з квантовим кінетичним рівнянням. Для цього необхідно виразити функції Гріна, що входять у квантове кінетичне рівняння, через функцію $\Phi(\mathbf{k})$, що входить у рівняння Больцмана. Найпростіше це зробити, порівнюючи вирази для електричного струму, вираженого через обидві ці функції. Усреднюючи оператор електричного струму за канонічним ансамблем Гіббса з вихідним гамільтоніаном системи, отримуємо

$$I = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} n(\mathbf{k}). \quad (25)$$

Підставляючи сюди вираз для функції розподілу електронів провідності, враховуючи їх взаємодію із зовнішнім полем і полем іонів, маємо

$$I = \frac{e\hbar}{mk_{\text{B}}T} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} n_0(k) [1 - n_0(k)] \Phi(\mathbf{k}). \quad (26)$$

З іншого боку, електричний струм можна виразити через шукану функцію Гріна і вихідну формулу Кубо для коефіцієнта електропровідності:

$$I = \sigma E =$$

$$= -\frac{\hbar}{3} \frac{e\hbar}{mk_B T V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \text{Im} \langle \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_0 E. \quad (27)$$

Отже, шуканий зв'язок буде таким:

$$-i \frac{\hbar}{3V} \langle \langle a_{\mathbf{k}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{I}(0) \rangle \rangle_0 E = n_0(k) [1 - n_0(k)] \Phi(\mathbf{k}). \quad (28)$$

Тепер квантове кінетичне рівняння можна записати у такому ж вигляді, як і рівняння Больцмана:

$$\begin{aligned} \frac{e\hbar}{mk_B T} \mathbf{k} n_0(k) [1 - n_0(k)] E &= \frac{1}{k_B T} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}'} \{ f(k, k') n_0(k) [1 - n_0(k)] \Phi(\mathbf{k}) L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \\ &- f(k', k) n_0(k') [1 - n_0(k')] \Phi(\mathbf{k}') L(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \}. \end{aligned} \quad (29)$$

Тут для ймовірності переходу між станами отримано такий вираз:

$$L(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 3 \frac{2\pi N}{V\hbar} \frac{w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)}{\varepsilon^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)} S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (30)$$

Підгінні функції, що з'явилися при розчепленні функцій Гріна старшого порядку, можна знайти тепер з умови повного збігу квантового кінетичного рівняння і рівняння Больцмана у найнижчому порядку теорії збурень. Очевидно, слід взяти

$$f(k, k') = \frac{n_0(k') [1 - n_0(k)]}{n_0(k) [1 - n_0(k)]}. \quad (31)$$

Ці параметри враховують асиметрію станів, в яких здійснюється провідність, і станів, з яких забираються електрони, що переносять електричний заряд. У випадку пружного розсіювання, коли $k = k'$, $f(k, k') = f(k', k) = 1$. Саме подібність структур кінетичного рівняння Больцмана і квантового кінетичного рівняння дозволяє інтерпретувати кожний член останнього в термінах рівняння Больцмана.

4. Варіаційний принцип

Поряд з квантовим кінетичним рівнянням можна розглянути і функціонал, варіацією якого його отримують, аналогічно рівнянню Больцмана [28]:

$$(\Phi, \hat{L}\Phi) = (\Phi, X), \quad (32)$$

де

$$(\Phi, X) = \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) R(\mathbf{k}) E, \quad (33)$$

$$(\Phi, \hat{L}\Phi) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}')] T [\Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}')]. \quad (34)$$

Якщо обмежитись найнижчим порядком теорії збурень, то це рівняння має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) \mathbf{k} n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})] E &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}')]^2 n_0(\mathbf{k}') [1 - n_0(\mathbf{k}')] L(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (35)$$

Обчислюючи швидкість генерації ентропії в колі з питомим опором ρ , яким тече струм I , за допомогою рівняння Больцмана для коефіцієнта електричного опору у роботі [28] отримано такий вираз:

$$\rho = \frac{k_B T (\Phi, \hat{L}\Phi) E^2}{(\Phi, X)^2}. \quad (36)$$

Оскільки структура квантового кінетичного рівняння тотожна структурі рівняння Больцмана, то ця ж формула буде вірною і при використанні квантового кінетичного у довільному порядку теорії збурень. Цінність такої формули у тому, що функція $\Phi(\mathbf{k})$, що забезпечує мінімум відповідного функціоналу, забезпечує і найточніше значення електричного опору системи.

Розглянемо випадок пружного розсіювання. Тоді розв'язок кінетичного рівняння, записаного у другому порядку теорії збурень, відомий. З точністю до сталого множника він дорівнює

$$\Phi(\mathbf{k}) = \mathbf{k} E. \quad (37)$$

У цьому випадку

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B T} (\Phi, X) &= \frac{e\hbar}{mk_B T} \sum_{\mathbf{k}} k^2 n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})] \mathbf{E} = \\ &= \frac{eV}{\pi^2 \hbar k_F} \int_0^\infty \delta(k - k_F) k^4 dk = \frac{eV k_F^3}{\pi^2 \hbar}. \end{aligned} \quad (38)$$

Відповідно,

$$\frac{1}{k_B T} (\Phi, \hat{L}\Phi) = \frac{1}{2k_B T} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k}\mathbf{k}') n_0(\mathbf{k}') \times$$

$$\times [1 - n_0(\mathbf{k})] L(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{V^2 m k_F}{2(2\pi)^2 \pi^2 \hbar^2} \int_0^\infty dk' k'^2 \times$$

$$\times \int_{-1}^1 [k^2 + k'^2 - 2kk' \cos(\theta)] L(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\cos(\theta). \quad (39)$$

Оскільки

$$L(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 3 \frac{2\pi n}{\hbar} \frac{w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)}{\varepsilon^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)} S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}), \quad (40)$$

то після підстановки виразу для ймовірності переходу

$$(\Phi, \hat{L}\Phi) = \frac{3V^2 m^2 n}{4\pi^3 \hbar^5} \int_0^{2k_F} \frac{w^2(q)}{\varepsilon^2(q)} S(q) q^3 dq =$$

$$= \frac{3V^2 m k_F^3}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{\tau(k_F)}, \quad (41)$$

де обернений час релаксації

$$\frac{1}{\tau(k_F)} = \frac{mn}{4\pi \hbar^3 k_F^3} \int_0^{2k_F} \frac{w^2(q)}{\varepsilon^2(q)} S(q) q^3 dq. \quad (42)$$

Тоді вираз для коефіцієнта питомого опору має вигляд

$$\rho = \frac{m}{e^2 n} \frac{1}{\tau(k_F)}. \quad (43)$$

Таким чином, точний розв'язок квантового кінетичного рівняння у випадку пружного розсіювання мінімізує відповідний функціонал. Використання варіаційного методу і кінетичного рівняння у даному випадку дає той самий результат. Перевага варіаційного методу виявляється при неможливості знаходження точного розв'язку. Наближений же розв'язок легше шукати мінімізацією функціоналу. Якщо використати ту саму пробну функцію для знаходження електроопору у третьому порядку теорії збурень, то отримаємо вже відомий з робіт [3, 16, 17, 22] для внеску третього порядку у обернений час релаксації вираз

$$\frac{1}{\tau_3(k_F)} = \frac{2\pi n \pi^2 \hbar^2}{V^3 m \hbar^3 k_F^3 k_B T} \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} (k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k}\mathbf{k}') n_0(\mathbf{k}') [1 - n_0(\mathbf{k})] \times$$

$$\times \frac{w(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)}{\varepsilon(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)} \frac{w(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}''|)}{\varepsilon(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}''|)} \frac{w(|\mathbf{k}'' - \mathbf{k}|)}{\varepsilon(|\mathbf{k}'' - \mathbf{k}|)} \times$$

$$\times S(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k}'', \mathbf{k}'' - \mathbf{k}) \frac{\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}''}}. \quad (44)$$

При використанні конволюційного наближення для тричастинкового структурного фактора, кратність інтегрування можна суттєво зменшити [3, 16, 17, 22].

5. Перехресний член квантового кінетичного рівняння

При розгляді членів четвертого і вищих порядків теорії збурень недостатньо тільки обчислити обернений час релаксації з точністю до членів четвертого порядку. Необхідно врахувати і цілу низку більш тонких ефектів. Одним із таких недосліджених ефектів четвертого порядку є перехресне розсіювання електронів провідності зовнішнім електричним полем і полем іонів. При цьому в ролі пробної функції візьмемо точний розв'язок кінетичного рівняння у другому порядку теорії збурень. Маємо

$$(\Phi, X) = (\Phi, X_1) + (\Phi, X_2), \quad (45)$$

$$(\Phi, X_1) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle E, \quad (46)$$

$$(\Phi, X_2) = \frac{1}{V} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathbf{k} w(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times$$

$$\times \left[\frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+(0) \rho^i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) a_{\mathbf{k}'}(0) \mathbf{I}(0) \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\delta} - \frac{\langle a_{\mathbf{k}'}^+(0) \rho^i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{\mathbf{k}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} \right]. \quad (47)$$

Використовуючи формулу Сохоцького і змінюючи місцями індекси підсумовування у другому доданку під знаком суми, маємо

$$(\Phi, X_2)_2 = \frac{1}{V} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (\mathbf{k} - \mathbf{k}') w(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times$$

$$\times \frac{\langle a_{\mathbf{k}}^+(0) \rho^i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{\mathbf{k}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}} E. \quad (48)$$

У свою чергу, рівняння руху для термодинамічних середніх має вигляд

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \mathbf{I} \rangle &= \frac{e\hbar}{Vm} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}'} \mathbf{k}' w(q') \times \\
 &\times \left\{ \langle a_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) \rho^i(-\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle - \right. \\
 &- \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) \rho^i(\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle + \\
 &+ \langle a_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) \rho^i(-\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'} \rangle - \\
 &\left. - \langle a_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) \rho^i(\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle \right\}. \quad (49)
 \end{aligned}$$

Термодинамічні середні у правій частині останнього рівняння досить розрахувати у нульовому порядку за електрон-іонною взаємодією. У цьому випадку

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}}^+ \rho^i(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \mathbf{I} \rangle &= \frac{N e\hbar}{V m} w(q) S(q) \times \\
 &\times \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{k}' \left\{ \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle + \right. \\
 &\left. + \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle \right\}. \quad (50)
 \end{aligned}$$

В нульовому порядку за електрон-іонною взаємодією

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle [1 - \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle] \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \\
 &+ \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle. \quad (51)
 \end{aligned}$$

Тут другий доданок у правій частині не дає внеску в суму за \mathbf{k}' через сферичну симетрію задачі. Аналогічно

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle \left[1 - \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \right] \times \\
 &\times \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \rangle. \quad (52)
 \end{aligned}$$

Тут другий доданок у правій частині дорівнює нулю, оскільки в нульовому порядку за електрон-іонною

взаємодією тільки діагональні елементи одночастинкової матриці густини відмінні від нуля. Отже:

$$\begin{aligned}
 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) \rho^i(-\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle &= \\
 &= \frac{N e\hbar}{V m} w(q) S(q) \times \left\{ \mathbf{k} n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})] - (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \times \right. \\
 &\times n_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - n_0(\mathbf{k} + \mathbf{q})] + \mathbf{q} n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \left. \right\}. \quad (53)
 \end{aligned}$$

Тепер

$$\begin{aligned}
 (\Phi, X_2) &= E \frac{N e\hbar}{V^3 m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}' w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\
 &\times \left\{ 2(k^2 - \mathbf{k}\mathbf{k}') \frac{n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})]}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} - \right. \\
 &\left. - (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \frac{n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k}')] }{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} \right\}. \quad (54)
 \end{aligned}$$

Обчислимо тепер у другому порядку за електрон-іонною взаємодією наступний член квантового кінетичного рівняння:

$$\begin{aligned}
 (\Phi, X_1) &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) \mathbf{I}(0) \rangle E = \\
 &= \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathbf{k}\mathbf{k}' \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) a_{\mathbf{k}'}^+(0) a_{\mathbf{k}'}(0) \rangle E. \quad (55)
 \end{aligned}$$

Для цього потрібно термодинамічні середні, що входять у праву частину останнього рівняння, обчислити у другому порядку теорії збурень. А для цього представимо середнє від добутку чотирьох операторів народження і знищення сумою всіх можливих парних добутків

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) a_{\mathbf{k}'}^+(0) a_{\mathbf{k}'}(0) \rangle &= \langle \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) \rangle \rangle \times \\
 &\times \langle \langle a_{\mathbf{k}'}^+(0) a_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \rangle + \langle a_{\mathbf{k}}^+(0) a_{\mathbf{k}}(0) \rangle \langle a_{\mathbf{k}'}^+(0) a_{\mathbf{k}'}(0) \rangle. \quad (56)
 \end{aligned}$$

Тут внутрішнє усереднення виконується лише за координатами електронної підсистеми, а зовнішнє – іонної. Другий доданок не дає внеску у відповідну суму через її симетрію при підсумовуванні за хвильовими

векторами \mathbf{k} та \mathbf{k}' . Кожний множник першого доданка можна представити у першому порядку теорії збурень так:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \rangle &= -\langle a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ \rangle = \\ &= w(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \rho^i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{n_0(k) - n_0(k')}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}. \end{aligned} \quad (57)$$

Тепер у другому порядку теорії збурень

$$\begin{aligned} (\Phi, X_1)_2 &= -\frac{N}{V^2} \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathbf{k} \mathbf{k}' w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\ &\times S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \frac{[n_0(k) - n_0(k')]^2}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})^2} E. \end{aligned} \quad (58)$$

Далі врахуємо, що

$$\begin{aligned} [n_0(k) - n_0(k')]^2 &= n_0(k)[1 - n_0(k')] + n_0(k') \times \\ &\times [1 - n_0(k)] - n_0(k)[1 - n_0(k)] - n_0(k')[1 - n_0(k')]. \end{aligned} \quad (59)$$

Об'єднуючи $(\Phi, X_1)_2$ і $(\Phi, X_2)_2$, отримуємо

$$\begin{aligned} (\Phi, X_1)_2 + (\Phi, X_2)_2 &= \\ &= E \frac{N}{V^3 k_B T} \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\ &\times \left\{ 2k^2 \frac{n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k})]}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} - (k^2 + k'^2) \frac{n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k}')] }{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} \right\}. \end{aligned} \quad (60)$$

У більш симетричному вигляді останній вираз можна записати так:

$$\begin{aligned} (\Phi, X_1)_2 + (\Phi, X_2)_2 &= \\ &= \frac{N}{V^3 k_B T} \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{k^2}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\ &\times \left\{ 2n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k})] - n_0(\mathbf{k})[1 - n_0(\mathbf{k}')] - \right. \\ &\left. - n_0(\mathbf{k}')[1 - n_0(\mathbf{k})] \right\} E. \end{aligned} \quad (61)$$

Останній вираз суттєво спрощується при сильному виродженні чи класичному електронному газі. Перший випадок реалізується для металів, другий – для повністю іонізованої класичної плазми цих металів. Для металів $k_B T \ll \varepsilon_F$. Тоді отриманий вираз можна представити так:

$$\begin{aligned} \frac{(\Phi, X_1)_2}{k_B T} + \frac{(\Phi, X_2)_2}{k_B T} &= \frac{N}{k_B T V^3} \frac{e\hbar}{m} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}' \frac{k^2}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2} w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\ &\times n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})] \left\{ 2 - \frac{1 - n_0(\mathbf{k}')}{1 - n_0(\mathbf{k})} - \frac{n_0(\mathbf{k}')}{n_0(\mathbf{k})} \right\} E. \end{aligned} \quad (62)$$

Враховуючи, що при гранично низьких температурах

$$\frac{n_0(\mathbf{k}) [1 - n_0(\mathbf{k})]}{k_B T} = \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F), \quad (63)$$

отримуємо, що

$$\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \frac{1}{1 - n_0(\mathbf{k})} = \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \frac{1}{n_0(\mathbf{k})} = 2\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \quad (64)$$

і

$$\frac{(\Phi, X_1)_2}{k_B T} + \frac{(\Phi, X_2)_2}{k_B T} = 0. \quad (65)$$

Таким чином, у випадку сильно виродженого електронного газу внесок перехресних процесів розсіювання в електричний опір дорівнює нулю. Природно, що цей внесок буде відмінним від нуля при врахуванні температурних поправок.

Розглянемо тепер класичний електронний газ. Тут можна знехтувати добутками функцій розподілу електронів провідності стосовно їх першого степеня. Тоді

$$\begin{aligned} (\Phi, X_1)_2 + (\Phi, X_2)_2 &= \frac{N}{V^3} \frac{4e\hbar m}{\hbar^3} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}' \frac{n_0(k)}{(k + k')(k - k')} w^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) E. \end{aligned} \quad (66)$$

Надамо інтегралу максимально простого вигляду для спрощення подальших числових розрахунків. Після

переходу від підсумовувань до інтегрувань у сферичній системі координат нам потрібно зінтегрувати лише за двома модулями хвильових векторів і кутом між ними. Тоді маємо

$$(\Phi, X_1)_2 + (\Phi, X_2)_2 = E \frac{N}{V} \frac{2e\hbar m}{\pi^4 \hbar^3} \int_0^\infty dk k n_0(k) \times \int_0^\infty dk' \frac{k'}{(k+k')(k-k')} \int_{|k-k'|}^{k+k'} w^2(q) S(q) q dq. \quad (67)$$

З останнього виразу видно, що інтегранда має в області інтегрування особливу точку – полюс першого порядку. Тобто даний інтеграл існує у сенсі головного значення.

6. Обговорення і висновки

Отримано вираз для коефіцієнта електричного опору простих неупорядкованих металів, вірний у довільному порядку теорії збурень за електрон-іонною взаємодією. Цей вираз ґрунтується на варіаційному принципі. При цьому іонна підсистема вважається статичною.

Параметри розчеплення функцій Гріна старших порядків, що виникають при отриманні квантового кінетичного рівняння, вибрано з умови збігу рівняння Больцмана і квантово-кінетичного рівняння у найнижчому порядку теорії збурень. Це дозволяє надати чіткий фізичний зміст процедури розчеплення і максимально зблизити структури цих двох рівнянь при врахуванні членів вищих порядків теорії збурень у квантовому кінетичному рівнянні.

Вперше враховано перехресний член кінетичного рівняння і його внесок в електричний опір. У межі низьких температур він виявився рівним нулю для простих неупорядкованих металів у четвертому порядку теорії збурень і відмінним від нуля для повністю іонізованої класичної плазми, утвореної самими ж металами. Цей факт не виключає можливості того, що у вищих порядках теорії збурень і для металів перехресні процеси дають ненульовий внесок у кінетичні коефіцієнти. Таким чином, наближення часу релаксації для металів є точнішим, ніж для повністю іонізованої плазми.

Отже, для металів перехресні процеси не дають внеску в сталі Лоренца у випадку закону Відемана–Франца і Холла – у разі ефекту Холла. Натомість у

повністю іонізованій плазмі такий внесок є. Це цілком узгоджується з відомими експериментальними результатами, які свідчать, що для неупорядкованих металів закон Відемана–Франца виконується з високою точністю, а стала Холла є, практично, такою, як і для вільних електронів.

1. J.M.A. Ziman, *Phil. Mag.* **6**, 1013 (1961).
2. В.В. Немошкаленко, А.В. Романова, А.Г. Ильинский и др., *Аморфные металллические сплавы* (Наукова думка, Київ, 1987).
3. В.Т. Швець, *Фізика неупорядкованих металів* (Маяк, Одеса, 2007).
4. G. Baym, *Phys. Rev. A* **135**, 1691 (1964).
5. K. Sturm and E.J. Pajanne, *Phys. F.* **3**, 199 (1973).
6. В.Т. Швець, *ТМФ* **86**, 111 (1991).
7. B. Springer, *Phys. Rev.* **136**, 115 (1964).
8. B. Springer, *Phys. Rev.* **154**, 614 (1967).
9. T. Neal, *Phys. Rev.* **169**, 508 (1968).
10. T. Neal, *Phys. Fluid.* **13**, 249 (1970).
11. N.W. Ashcroft and W. Schaich, *Phys. Rev. B* **1**, 1370 (1970).
12. N.W. Ashcroft, W. Schaich, *Phys. Rev. B* **3**, 1511 (1971).
13. A. Springer and D. Wagner, *Z. Phys.* **241**, 295 (1971).
14. J. Popielawski, *Physica* **78**, 97 (1974).
15. J. Gorecki and J. Popielawski, *J. Phys. F.* **13**, 2107 (1983).
16. V.T. Shvets, *Mat. Sci. Eng. B* **26**, 141 (1994).
17. В.Т. Швець, Э.В. Белов, А.В. Кушчак, *Металлофиз. новейшие технол.* **20**, 3 (1998).
18. В.Т. Швець, Э.В. Белов, *УФЖ* **44**, 1408 (1999).
19. V.T. Shvets and E.V. Belov, *Acta Physica Polonica A* **96**, 403 (1999).
20. В.Т. Швець, *Металлофиз. новейшие технол.* **23**, 745 (2001).
21. V. Shvets, S. Savenko, and S. Datsko, *Cond. Matter Phys.* **5**, 511 (2002).
22. В.Т. Швець, *Физика металлов и металловедение* **103**, 346 (2007).
23. В.Т. Швець, *ЖЭТФ* **131**, 743 (2007).
24. В.Т. Швець, А.Г. Власенко, А.Д. Буханенко, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 625 (2007).
25. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов* **2**, (Физматлит, Москва, 2002).
26. Н.М. Плакида, *ЖЭТФ* **53**, 926 (1967).
27. С.В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма* (Наука, Москва, 1975).

28. Дж. Займан, *Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах* (Иностранная литература, Москва, 1962).

Одержано 06.05.10

ПЕРЕКРЕСТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

T.V. Shvets

Р е з ю м е

Получено выражение для коэффициента электрического сопротивления простых неупорядоченных металлов и полностью ионизированной плазмы, справедливое в произвольном порядке теории возмущений по электрон-ионному взаимодействию. Это выражение основано на вариационном принципе. При этом ионная подсистема считается статической. Параметры расщепления функций Грина старших порядков, возникающие при получении квантового кинетического уравнения, выбраны из условия полного совпадения уравнения Больцмана и квантово-кинетического уравнения, в низшем порядке теории возмущений. Во втором и третьем порядках теории возмущений воспроизведены уже известные ранее результаты. Впервые учтен эффект четвертого порядка, связанный с одновременным рассеянием электронов внешним электрическим полем и полем ионов. Он в четвертом порядке теории возмущений оказался отличным от нуля для полностью ионизированной плазмы и равным

нулю в пределе низких температур для неупорядоченных металлов.

ELECTRON CROSS SCATTERING IN DISORDERED SYSTEMS

T.V. Shvets

Odesa State Academy of Refrigeration
(1/3, Dvoryanskaya Str., Odesa 270117, Ukraine;
e-mail: tarval@breezein.net)

S u m m a r y

Using the variation principle, the expression for the electrical resistivity of simple disordered metals and a fully ionized plasma in any order of perturbation theory in the electron-ion interaction is obtained. We consider the ion subsystem as static and temperature corrections for metals as insignificant. Decoupling parameters of high-order Green's functions, which are solutions of a quantum kinetic equation, are chosen from the condition of the full coincidence of the Boltzmann's equation and the quantum kinetic one in a low order of perturbation theory. In the second and third orders of perturbation theory, the earlier known results are obtained. For the first time, we have calculated the fourth-order effect which is related to the simultaneous scattering of electrons in a fully ionized plasma by an external electric field and the field of ions. But this effect is absent in the disordered metals in the limit of low temperatures.