ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 2955

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Н.М. Плакида

Электрон-фононное взаимодействие в неидеальных кристаллах

1966

Р4 - 2955

Н.М. Плакида

Электрон-фононное взаимодействие в неидеальных кристаллах

В работе [1] была вычислена электропроводность металла с немагнитными примесями на основе вариационного решения кинетического уравнения с применением метода корреляционной функции Ван-Хове. Известно, однако, что кинетические коэффициенты, в том числе электропроводность, выражаются через двухчастичные функции Грина, вычисление которых во многих случаях позволяет обобщить результаты решения кинетического уравнения [2]. Поэтому представляет интерес обобщить метод, развитый в работе[2], для учета движения примесей в духе работы[1].

В этой работе сформулируем постановку задачи и получим выражения для одночастичных функций Грина электронов и фононов, определяющих равновесные свойства системы. Вычисление двухчастичной функции Грина и на основе ее электропроводности будет рассмотрено в следующей работе.

1. Гамильтониан электрон-ионной системы

Для простоты будем рассматривать систему свободных электронов, взаимодействующих с ионами решетки, которая имеет достаточно малое число немагнитных примесей, хаотически распределенных в кристалле. Будем предполагать, что примеси образуют раствор замещения и что можно пренебречь изменением силовых постоянных в динамической матрице колебаний (см. [1]). Считаем также решетку кристалла одноатомной и кубической. В этом случае исходный электрон-ионный гамильтониан запишем в виде (см. [3]):

$$H = H_i + H_e + H_{e-i}, \tag{1.1}$$

$$H_i = \sum_n \frac{P_n^2}{2M_n} + \frac{1}{2}\sum_{nm} \Phi^{\alpha\beta}_{nm}\, u^{\alpha}_n\, u^{\beta}_m, \tag{1.2}$$

$$H_e + H_{e-i} = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} - \mu\right) + \sum_{in} v_n(\vec{r}_i - \vec{R}_n), \tag{1.3}$$

где $\vec{P}_n$ и $\vec{u}_n$ – операторы импульса и смещения иона с массой M_n в узле n, $\Phi^{\alpha\beta}_{nm}$ – динамическая матрица взаимодействия ионов сплава; $\vec{p}_i$, $\vec{r}_i$ – операторы электрона, μ – химический потенциал электронов – энергия Ферми. $v_n(\vec{r}-\vec{R}_n)$ – потенциал взаимодействия электрона с ионом в узле n, $\vec{R}_n=\vec{R}^0_n+\vec{u}_n$, R^0_n – равновесное положение иона.

Кулоновское взаимодействие между электронами в явном виде не учитывается, но предполагается, что силовые постоянные $\Phi^{\alpha\beta}_{nm}$ и потенциалы $v_n(\vec{r})$ вычислены с учетом статического экранирования ионов электронами проводимости, т.е. мы предполагаем модель "жесткого иона". Непосредственное же электрон-электронное рассеяние в металле с примесями несущественно /3/.

В случае неидеальных кристаллов переход к нормальным координатам для колебаний ионов малоэффективен, так как при этом необходимо учитывать взаимодействие колебаний друг с другом. Поэтому мы оставим координатное представление для ионов, которое с успехом использовалось в ряде работ по изучению спектров колебаний в неидеальной решетке (см., например, /4/).

В то же время электронную систему значительно удобнее описывать в представлении вторичного квантования, рассматривая рассеяние электронов на примесях и колебаниях решетки как малое возмущение. Переходя к представлению вторичного квантования по плоским волнам

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_p e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}\,a_p, \quad (p=\vec{p},\sigma),$$

электрон-ионный гамильтониан (1.3) запишем в виде

$$H_{e-i}=\sum_p \epsilon_p a^+_p a_p+\sum_{pq}\sum_n A_n(q)\,a^+_p a_{p-q}\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}, \tag{1.4}$$

где

$$\epsilon_p=\frac{p^2}{2m}-\mu,$$

$$A_n(q)=\frac{1}{V}\,v_n(q)\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}^0_n}; \tag{1.5}$$

$$v_n(q)=\int d^3r\,v_n(r)\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

– фурье-компонента потенциала взаимодействия, интегрирование проводится по объему элементарной ячейки $V_0=V/N$.

Во многих случаях смещение ионов u_n можно считать малым и произвести разложение $\exp(-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n)$ в (1.4), сохранив лишь первые члены разложения

$$H^{(1)}_{e-i}=\sum_p \epsilon_p a^+_p a_p+\sum_{qp}\Delta A(q)\,a^+_p a_{p-q}+ \tag{1.6}$$

$$+\sum_{qp}\sum_n A^\alpha_n(q)\,a^+_p a_{p-q}\,u^\alpha_n,$$

где

$$A_n^{\alpha}(q) = -i q^{\alpha} A_n(q)$$

и

$$\Delta A(q) = \Delta v(q) \frac{1}{V} \sum_n c_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n^0} .$$

Мы ввели функцию c_n , которая принимает значения 0 в узлах основной решетки и 1 – в примесных узлах. При этом потенциал рассеяния можно записать в виде

$$v_n(q) = v_0(q) + \Delta v(q) c_n , \quad \Delta v = v_1 - v_0 , \tag{1.7}$$

где индексы 0 и 1 обозначают соответственно величины, относящиеся к ионам основной решетки и примесным ионам (см.[1]). Записывая гамильтониан взаимодействия в виде (1.6), мы опустили рассеяние свободных электронов на идеальной решетке, что, как известно, приводит к появлению зон Бриллуэна[3]. Этот факт можно учесть, если подразумевать под энергией ϵ_p в (1.6) энергию блоховского электрона с квазиимпульсом p . При этом мы будем пренебрегать процессами переброса, учитывая, что в системе всегда существует примесное рассеяние.

Итак, гамильтониан (1.6) описывает упругое рассеяние на примесях (второй член) и однофононные переходы, как на ионах основной решетки, так и на примесных. Чтобы учесть многофононные переходы, которые, например, дают факторы Дебая–Валлера при амплитудах рассеяния, необходимо пользоваться полным гамильтонианом в виде (1.4). Однако в этом случае для последовательного описания системы следует сохранить также и точное выражение для потенциальной энергии взаимодействия ионов, содержащее функцию смещений $\exp[-i\vec{q}\cdot(\vec{u}_n - \vec{u}_m)]$, а не заменять его гармоническим приближением (1.2). Поскольку решение такой точной задачи не представляется возможным, решим ее сначала в гармоническом приближении (1.2), (1.6), а затем обсудим возможность решения для гамильтониана (1.4).

2. Фононная система

Рассмотрим уравнение для фононной функции Грина, определяющей спектр колебаний неидеальной решетки. Вводим запаздывающую функцию Грина[5]:

$$\begin{aligned} D_{nn'}^{\alpha\beta}(t-t') &\equiv \langle\langle u_n^{\alpha}(t) ; u_{n'}^{\beta}(t') \rangle\rangle = \\ &= -i\theta(t-t') \langle [u_n^{\alpha}(t), u_{n'}^{\beta}(t')]_{-} \rangle , \end{aligned} \tag{2.1}$$

где среднее <...> берется по состоянию системы с гамильтонианом (1.2), (1.6) .

На основе уравнений движения для операторов в гайзенберговском представлении, полученных для гамильтониана (1.2), (1.6):

$$i\frac{d}{dt}a_p(t)=[a_p,H]=\epsilon_p a_p+\sum_q \Delta A(q)a_{p-q}+\sum_{qn}A_n^{\alpha}(q)a_{p-q}u_n^{\alpha}, \tag{2.2}$$

$$i\frac{d}{dt}u_n^{\alpha}(t)=[u_n^{\alpha},H]=i\frac{P_n^{\alpha}}{M_n},$$

$$(i\frac{d}{dt})^2 u_n^{\alpha}(t)=i\frac{d}{dt}\frac{iP_n^{\alpha}}{M_n}=\frac{i}{M_n}[P_n^{\alpha},H]=$$

$$=\frac{1}{M_n}\sum_m \Phi_{nm}^{\alpha\beta}u_m^{\beta}+\frac{1}{M_n}\sum_{qn}A_n^{\alpha}(q)a_p^{+}a_{p-q}. \tag{2.3}$$

дифференцируя функцию (2.1) по времени t, находим для нее уравнение:

$$(i\frac{d}{dt})^2 M_n D_{nn'}^{\alpha\beta}(t-t')=\delta(t-t')\delta_{nn'}^{\alpha\beta}+\sum_m \Phi_{nm}^{\alpha\gamma}D_{mn'}^{\gamma\beta}(t-t')+$$

$$+\sum_{qp}A_n^{\alpha}(q)\langle\langle a_p^{+}a_{p-q};\ u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle, \tag{2.4}$$

$$(i\frac{d}{dt}+\epsilon_p-\epsilon_{p-q})\langle\langle a_p^{+}a_{p-q};\ u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle=$$

$$=\sum_{q'm}\Delta A_m(q')\langle\langle(a_p^{+}a_{p-q-q'}-a_{p+q'}^{+}a_{p-q});\ u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'm}A_m^{\gamma}(q')\langle\langle(a_p^{+}a_{p-q-q'}-a_{p+q'}^{+}a_{p-q})u_m^{\gamma};\ u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle. \tag{2.5}$$

Будем предполагать, что взаимодействие электронов с решеткой является слабым (порядка малости A), и ограничимся низшим приближением для поляризационного оператора фононной функции Грина. Тогда функции Грина смешанного типа в правой части (2.5) можно заменить нулевыми функциями Грина, усредненными с гамильтонианом $H_0=H_e+H_i$. Другими словами, можно провести следующее расцепление

$$\langle\langle a_p a_{p-q-q'}u_m^{\gamma};\ u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle=\delta_{-q,q'}n_p D_{mn'}^{\gamma\beta}(t-t')+O(A),$$

$$\langle\langle a_p^{+}a_{p-q-q'};u_{n'}^{\beta}(t')\rangle\rangle=O(A), \tag{2.6}$$

где $n_p=\langle a_p^{+}a_p\rangle$. Это приближение позволяет замкнуть систему уравнений (2.4), (2.5).

Переходя к фурье-компонентам функции Грина

$$D(t-t')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} D(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega, \tag{2.7}$$

получим после подстановки (2.6) и (2.5) в (2.4):

$$\omega^2 M_n D^{\alpha\beta}_{nn'}(\omega)=\delta^{\alpha\beta}_{nn'}+\sum_m \Phi^{\alpha\gamma}_{nm} D^{\gamma\beta}_{mn'}(\omega)+\sum_m \Pi^{\alpha\gamma}_{nm}(\omega) D^{\gamma\beta}_{mn'}(\omega), \tag{2.8}$$

где поляризационный оператор имеет вид

$$\Pi^{\alpha\gamma}_{nm}(\omega)=\sum_q A^{\alpha}_n(q) A^{\alpha}_m(-q)\sum_p \frac{n_p-n_{p-q}}{\omega+\epsilon_p-\epsilon_{p-q}}=$$

$$=\frac{1}{V}\sum_q q^{\alpha} q^{\gamma} v_n(q) v_m(-q)\, e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}^0_n-\vec{R}^0_m)}\cdot\frac{1-\epsilon_0(q,\omega)}{4\pi e^2/q^2}, \tag{2.9}$$

$\epsilon_0(q,\omega)$ – диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа. Если бы в уравнении (2.5) мы сохранили бы члены более высокого порядка малости по A, например, совершив расцепление в последующих уравнениях, то вместо $\epsilon_0(q,\omega)$ в (2.9) вошла бы проницаемость электронного газа с учетом рассеяния электронов на решетке.

Уравнение (2.8) можно записать в виде уравнения Дайсона, если ввести свободную функцию Грина фононов $D^{(0)\alpha\beta}_{nn'}(\omega)$, уравнение для которой имеет вид:

$$\omega^2 M D^{(0)\alpha\beta}_{nn'}(\omega)=\delta^{\alpha\beta}_{nn'}+\sum_m \Phi^{\alpha\gamma}_{nm} D^{(0)\gamma\beta}_{mn'}(\omega). \tag{2.10}$$

Умножая (2.8) слева на $D^{(0)}(\omega)$, получим

$$D^{\alpha\beta}_{nn'}(\omega)=D^{(0)\alpha\beta}_{nn'}(\omega)+\lambda\sum_m D^{(0)\alpha\gamma}_{nm}(\omega)\, c_m D^{\gamma\beta}_{mn'}(\omega)+$$

$$+\sum_m D^{(0)\alpha\gamma}_{nm}(\omega)\,\Pi^{\gamma\delta}_{m\ell}(\omega)\, D^{\delta\beta}_{\ell n'}(\omega), \tag{2.11}$$

где $\lambda=M\omega^2(1-M_1/M)$, M_1 – масса примеси.

Обычно фононные частоты $\omega\ll\omega_0$ – плазменной частоты электронного газа, и поэтому приближенно можно положить

$$\Pi^{\alpha\beta}_{nm}(\omega)\approx\Pi^{\alpha\beta}_{nm}(0)=-N(0)\frac{1}{V}\sum_q q^{\alpha} q^{\beta} v_n(q) v_m(-q)\, e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}^0_n-\vec{R}^0_m)}, \tag{2.12}$$

где $N(0) = mp_0/\pi^2$ – плотность электронных уровней на поверхности Ферми p_0. В этом случае удобно ввести

$$\tilde{\Phi}^{\alpha\beta}_{nm} = \Phi^{\alpha\beta}_{nm} + \Pi^{\alpha\beta}_{nm}(0), \tag{2.13}$$

т.е. электрон-ионное взаимодействие приводит к некоторой перенормировке силовых постоянных $\Phi^{\alpha\beta}_{nm}$, в результате чего происходит перенормировка частот колебаний решетки.

Мнимая часть поляризационного оператора определяет затухание колебаний за счет взаимодействия ионов с электронами. Она равна

$$\mathrm{Im}\,\Pi^{\alpha\beta}_{nm}(\omega + i\epsilon) = -\frac{\pi\omega}{2v_0} N(0)\frac{1}{V}\sum_q \frac{q^\alpha q^\beta}{q} v_n(q)\, v_m(-q)\, e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}^0_n - \vec{R}^0_m)}.$$

По порядку величины затухание составляет $s/v_0 \approx (m/M)^{1/2} \ll 1$ и обычно много меньше примесного затухания, определяемого вторым членом в правой части (2.11).

Таким образом, электрон-ионное взаимодействие в неидеальной решетке приводит лишь к небольшому изменению силовых постоянных согласно (2.13), т.е. сдвигу частот колебаний решетки, так что в дальнейшем мы можем его явно не учитывать, записывая уравнение (2.8) в виде

$$\omega^2 M_n D^{\alpha\beta}_{nn'}(\omega) = \delta^{\alpha\beta}_{nn'} + \sum_m \tilde{\Phi}^{\alpha\gamma}_{nm} D^{\gamma\beta}_{mn'}(\omega). \tag{2.8a}$$

Решения такого типа уравнений были подробно рассмотрены в работах /1,4/, поэтому на их обсуждении мы здесь не останавливаемся.

3. Электронная система

При исследовании поведения электронов проводимости в неидеальном кристалле необходимо рассмотреть функцию Грина электронов

$$_p(t-t') = \langle\langle a_p(t);\, a^+_p(t')\rangle\rangle. \tag{3.1}$$

На основе уравнений движения для операторов (2.2), (2.3) получаем следующую цепочку уравнений для функции (3.1):

$$\left(i\frac{d}{dt} - \epsilon_p\right) G_p(t-t') = \delta(t-t') + \sum_q \Delta A(q) \langle\langle a_{p-q};\, a^+_p(t')\rangle\rangle + \sum_{qn} A^\alpha_n(q) \langle\langle a_{p-q} u^\alpha_n;\, a^+_p(t')\rangle\rangle, \tag{3.2}$$

$$\left(i\frac{d}{dt}-\epsilon_{p-q}\right)\langle\langle a_{p-q};a_p^+(t')\rangle\rangle=\sum_{q'}\Delta A(q')\langle\langle a_{p-q-q'};a_p^+(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'm}A_m^{\beta}(q')\langle\langle a_{p-q-q'}u_m^{\beta};a_p^+(t')\rangle\rangle, \tag{3.3}$$

$$\left(i\frac{d}{dt}-\epsilon_{p-q}\right)\langle\langle a_{p-q}u_n^{\alpha};a_p^+(t')\rangle\rangle=\langle\langle a_{p-q}\frac{iP_n^{\alpha}}{M_n};a_p^+(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'}\Delta A(q')\langle\langle a_{p-q-q'}u_n^{\alpha};a_p^+(t')\rangle\rangle+ \tag{3.4}$$

$$+\sum_{q'm}A_m^{\beta}(q')\langle\langle a_{p-q-q'}u_m^{\beta}u_n^{\alpha};a_p^+(t')\rangle\rangle,$$

$$\left(i\frac{d}{dt}-\epsilon_{p-q}\right)\langle\langle a_{p-q}\frac{iP_n^{\alpha}}{M_n};a_p^+(t')\rangle\rangle=\frac{1}{M_n}\sum_m\Phi_{nm}^{\alpha\beta}\langle\langle a_{p-q}u_m^{\beta};a_p^+(t')\rangle\rangle+$$

$$+\frac{1}{M_n}\sum_{q'p'}A_n^{\alpha}(q')\langle\langle a_{p-q}a_{p'+q'}^+a_{p'};a_p^+(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'}\Delta A(q')\langle\langle a_{p-q-q'}\frac{iP_n^{\alpha}}{M_n};a_p^+(t')\rangle\rangle+ \tag{3.5}$$

$$+\sum_{q'm}A_m^{\beta}(q')\langle\langle a_{p-q-q'}u_m^{\beta}\frac{iP_n^{\alpha}}{M_n};a_p^+(t')\rangle\rangle.$$

Предполагая, что взаимодействие электронов с решеткой является слабым, вычислим массовый оператор функции Грина (3.1) в низшем порядке по этому взаимодействию ($\sim A^2$) . Для этого произведем следующее расцепление функций Грина в правых частях (3.3) - (3.5):

$$\langle\langle a_{p-q-q'};a_p^+(t')\rangle\rangle=\delta_{-q,q'}G_p(t-t')+O(A),$$

$$\langle\langle a_{p-q-q'}u_m^{\beta};a_p^+(t')\rangle\rangle=O(A),$$

$$\langle\langle a_{p-q-q'}u_m^{\beta}u_n^{\alpha};a_p^+(t')\rangle\rangle=\langle u_m^{\beta}u_n^{\alpha}\rangle\delta_{-q,q'}G_p(t-t')+O(A), \tag{3.6}$$

$$\langle\langle a_{p-q} a^{+}_{p'+q'} a_{p'}; a^{+}_{p}(t')\rangle\rangle = (1-n_{p-q})\delta_{-q,q'}\delta_{p,p'}G_p(t-t') + O(\Lambda),$$

$$\langle\langle a_{p-q-q'} u^{\beta}_{m} \frac{i p^{\alpha}_{n}}{M_n}; a^{+}_{p}(t')\rangle\rangle = \langle u^{\beta}_{m} i\dot{u}^{\alpha}_{n}\rangle \delta_{-q,q'} G_p(t-t') + O(\Lambda).$$

Подставляя эти разложения в уравнения и переходя к фурье-компонентам согласно (2.7), получим:

$$(\omega-\epsilon_p)\,G_p(\omega) = 1 + \sum_{q}\Lambda A(q)\langle\langle a_{p-q}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} +$$

$$+\sum_{n\alpha} A^{\alpha}_{n}(q)\langle\langle a_{p-q}u^{\alpha}_{n}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega}, \tag{3.2a}$$

$$(\omega-\epsilon_{p-q})\langle\langle a_{p-q}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} = \Lambda A(-q)\,G_p(\omega) \tag{3.3a}$$

$$M_n(\omega-\epsilon_{p-q})^2\langle\langle a_{p-q}u^{\alpha}_{n}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} = \sum_{m}\Phi^{\alpha\beta}_{nm}\langle\langle a_{p-q}u^{\beta}_{m}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} +$$

$$+\,G_p(\omega)\,B^{\alpha}_{np}(q,\omega), \tag{3.7}$$

где мы решили совместно уравнения (3.4) и (3.5) и ввели функцию

$$B^{\alpha}_{np}(q,\omega) = A^{\alpha}_{n}(-q)(1-n_{p-q}) + \sum \Lambda^{\beta}_{m}(-q)M_n[\langle u^{\beta}_{m}u^{\alpha}_{n}\rangle(\omega-\epsilon_{p-q}) + \langle u^{\beta}_{m}i\dot{u}^{\alpha}_{n}\rangle]. \tag{3.8}$$

Уравнение (3.3а) описывает упругое рассеяние на примеси, а (3.7) – однофононные переходы.

Чтобы решить неоднородное интегральное уравнение (3.7), воспользуемся уравнением (2.8) для фононной функции Грина. Умножая (3.7) слева на $D^{\beta\alpha}_{n'n}(\omega-\epsilon_{p-q})$ и суммируя по n, α получаем

$$\langle\langle a_{p-q}u^{\beta}_{n'}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} = G_p(\omega)\sum_{n\alpha} D^{\beta\alpha}_{n'n}(\omega-\epsilon_{p-q})B^{\alpha}_{np}(q,\omega) -$$

$$-\sum_{nm}\langle\langle a_{p-q}u^{\alpha}_{n}|a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega}\Pi^{\alpha\gamma}_{nm}(\omega-\epsilon_{p-q})\,D^{\gamma\beta}_{mn'}(\omega-\epsilon_{p-q}).$$

Последний член здесь более высокого порядка малости по Λ и его следует опустить, чтобы не превысить точности расцепления (3.6). В результате получаем для однофононных процессов

$$\langle\langle a_{p-q} u^{\alpha}_{n} \mid a^{+}_{p} \rangle\rangle_{\omega} = G_{p}(\omega) \sum D^{\alpha\beta}_{nm}(\omega - \epsilon_{p-q}) A^{\beta}_{m}(-q)(1 - n_{p-q}) +$$

$$+ G_{p}(\omega) \sum_{mn'} D^{\alpha\gamma}_{nn'}(\omega - \epsilon_{p-q}) A^{\beta}_{m}(-q) M_{n'} [\langle u^{\beta}_{m} u^{\gamma}_{n'} \rangle (\omega - \epsilon_{p-q}) + \langle u^{\beta}_{m} i \dot{u}^{\gamma}_{n'} \rangle] . \tag{3.9}$$

Второй член здесь можно значительно упростить, выполняя суммирование по n'. Для этого введем спектральную плотность корреляционной функции согласно /5/:

$$\langle u^{\beta}_{m} u^{\gamma}_{n'}(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega + i\epsilon) - D^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega - i\epsilon)}{e^{\omega/T} - 1} e^{-i\omega t} d\omega . \tag{3.10}$$

Из уравнения для фононной функции Грина в виде (2.8а) легко получить следующее тождество

$$\sum_{n'} D^{\alpha\gamma}_{nn'}(E) M_{n'} D^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega) = \frac{D^{\alpha\beta}_{nm}(\omega) - D^{\alpha\beta}_{nm}(E)}{E^{2} - \omega^{2}} . \tag{3.11}$$

Подставляя (3.10) во вторую сумму (3.9) и пользуясь (3.11), получаем:

$$\sum_{n'} D^{\alpha\gamma}_{nn'}(E) M_{n'} [\langle u^{\beta}_{m} u^{\gamma}_{n'} \rangle E + \langle u^{\beta}_{m} i \dot{u}^{\gamma}_{n'} \rangle] =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{E + \omega}{e^{\omega/T} - 1} \sum_{n'} D^{\alpha\gamma}_{nn'}(E) M_{n'} [D^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega + i\epsilon) - D^{\gamma\beta}_{n'm}(\omega - i\epsilon)] =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{E - \omega} \frac{1}{e^{\omega/T} - 1} [D^{\alpha\beta}_{nm}(\omega + i\epsilon) - D^{\alpha\beta}_{nm}(\omega - i\epsilon)] =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{E - \omega} J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega) . \tag{3.12}$$

Следовательно, функцию Грина (3.9) можно записать в виде

$$\langle\langle a_{p-q} u^{\alpha}_{n} \mid a^{+}_{p} \rangle\rangle_{\omega} = G_{p}(\omega) \sum_{m} A^{\beta}_{m}(-q) \{ (1 - n_{p-q}) D^{\alpha\beta}_{nm}(\omega - \epsilon_{p-q}) +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \epsilon_{p-q} - \omega'} J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega') \} , \tag{3.13}$$

или, пользуясь спектральным представлением для функции Грина /5/:

$$D^{\alpha\beta}_{nm}(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\omega/T}-1}{E-\omega}\, J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega)\,d\omega,$$

объединяем оба члена в (3.13) и получаем

$$\langle\langle a_{p-q}u^{\alpha}_{n} \mid a^{+}_{p}\rangle\rangle_{\omega} = G_{p}(\omega)\sum_{m} A^{\beta}_{m}(-q)\times$$

$$\times\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\epsilon_{p-q}-\omega'}\, J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega')\,\frac{e^{\omega'/T}-e^{-\epsilon_{p-q}/T}}{e^{-\epsilon_{p-q}/T}+1}\ . \qquad (3.13a)$$

Полученные выражения для функций Грина упругого (3.3а) и неупругого (3.13) рассеяния позволяют представить уравнение для одноэлектронной функции Грина (3.2а) в виде

$$G_{p}(\omega) = [\,\omega-\epsilon_{p}-M_{p}(\omega)\,]^{-1}, \qquad (3.14)$$

где массовый оператор

$$M_{p}(\omega) = \sum_{q}|\Delta A(q)|^{2}\,\frac{1}{\omega-\epsilon_{p-q}} +$$

$$\sum_{q}\sum_{nm} A^{\alpha}_{n}(q)A^{\beta}_{m}(-q)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\epsilon_{p-q}-\omega'}\, J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega')\,\frac{e^{\omega'/T}+e^{-\epsilon_{p-q}/T}}{e^{-\epsilon_{p-q}/T}+1}\,. \qquad (3.15)$$

Как обычно (см. /5/), полюс функции Грина (3.14) определяет энергию элементарного возбуждения электрона $\tilde{\epsilon}_p$:

$$\tilde{\epsilon}_{p} = \epsilon_{p} + \mathrm{Re}\,M_{p}(\tilde{\epsilon}_{p}),$$

причем мнимая часть массового оператора – его конечное затухание за счет взаимодействия с решеткой

$$\gamma_{p}(\tilde{\epsilon}_{p}) = -\mathrm{Im}\,M_{p}(\tilde{\epsilon}_{p}+i\epsilon).$$

Подставляя сюда выражение (3.15) и учитывая определения (1.5), получаем:

$$\gamma_{p} = \frac{\pi}{V}\sum_{q}\frac{1-n_{p-q}}{1-n_{p}}\,\frac{1}{V}\sum_{nm} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}^{0}_{n}-\vec{R}^{0}_{m})}\times$$

$$\times\{\,\Lambda v(q)\,c_{n}c_{m}\delta(\omega)+v_{n}(q)\,v_{m}(-q)\,\frac{1}{2\pi}\langle(\vec{q}\cdot\vec{u}_{n})\mid(\vec{q}\cdot\vec{u}_{m})\rangle_{\omega}\,\}, \qquad (3.16)$$

где

$$\omega = \epsilon_{p}-\epsilon_{p-q},$$

$$\frac{1-n_{p'}}{1-n_{p}} = \frac{e^{-\epsilon_{p}/T}+1}{e^{-\epsilon_{p'}/T}+1} = e^{-(\epsilon_{p}-\epsilon_{p'})/T}\,\frac{n_{p'}}{n_{p}}$$

и $$<(\vec{q}\cdot\vec{u}_n)\,|\,(\vec{q}\cdot\vec{u}_m)>_\omega = e^{\omega/T} q^\alpha q^\beta J^{\alpha\beta}_{nm}(\omega)\,.$$

Как видно, затухание (3.16) может быть записано через корреляционную функцию Ван-Хова $S(\vec{q},\omega)$, если опустить в ней факторы Дебая-Валлера:

$$\gamma_p = \frac{(2\pi)^3}{m^2}\,\frac{1}{V_0}\,\frac{1}{V}\sum_{p'}\frac{1-n_{p'}}{1-n_p}\,S(\vec{p}-\vec{p}',\epsilon_p-\epsilon_{p'}),$$

$$S(\vec{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{nm} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}^0_n-\vec{R}^0_m)}a_n(q)\,a_m(-q)\,\times$$

$$\times\{\delta(\omega)+\frac{1}{2\pi}<(\vec{q}\cdot\vec{u}_n)\,|\,(\vec{q}\cdot\vec{u}_m)>_\omega\}, \qquad (3.17)$$

где мы ввели амплитуды рассеяния $a_n(q)$:

$$v_n(q) = \frac{2\pi}{m}\,a_n(q)$$

и добавили в (3.17) член $\delta(\omega)\delta_{q,0}$ – рассеяние на идеальной решетке.

Чтобы установить соответствие полученного результата с работой [1], заметим, что кинетические свойства системы определяет затухание двухчастичной функции Грина (см.[2]), усредненное по энергиям вблизи фермиевской. Производя такое же усреднение затухания (3.17), найдем среднее время жизни одноэлектронного возбужде - ния τ :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{V}\sum_p \gamma_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial\epsilon_p}T\right) = \frac{1}{V}\sum_p \gamma_p n_p(1-n_p) =$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{pp'} n_p(1-n_{p'})\,\frac{(2\pi)^3}{m^2 V_0}\,S(\vec{p}-\vec{p}',\epsilon_p-\epsilon_{p'}). \qquad (3.18)$$

Как видно, мы получили такое же выражение, что и в работе [1], но без факторов Дебая-Валлера в функции $S(q,\omega)$ (3.17). Этого и следовало ожидать, так как мы пользовались линейными приближением по смещениям u_n для гамильтониана электрон-ионного взаимодействия (1.6). В следующем разделе мы рассмотрим уравнения для функции Грина на основе полного гамильтониана (1.4) и покажем, каким образом можно получить факторы Дебая-Валлера при амплитудах рассеяния в (3.17).

4. Многофононные процессы

Рассмотрим уравнение для одноэлектронной функции Грина (3.1) на основе гамильтониана (1.2), (1.4):

$$H = H_l + \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p + \sum_{qn} A_n(q) a_p^+ a_{p-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n} . \qquad (4.1)$$

В этом случае уравнения движения для операторов примут вид

$$i\frac{d}{dt} a_p(t) = \epsilon_p a_p + \sum_{qn} A_n(q) a_{p-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n} , \qquad (4.2)$$

$$\left(i\frac{d}{dt}\right)^2 u_n^{\alpha}(t) = \frac{i}{M_n} i\frac{d}{dt} P_n^{\alpha}(t) = \qquad (4.3)$$

$$= \frac{1}{M_n}\sum_m \Phi_{nm}^{\alpha\beta} u_m^{\beta} - \frac{i}{M_n}\sum_q A_n(q) q^{\alpha} a_p^+ a_{p-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n} ,$$

$$i\frac{d}{dt} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)} = \left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n} . \qquad (4.4)$$

На основе этих уравнений легко получаем цепочку уравнений для функции Грина (3.1):

$$\left(i\frac{d}{dt} - \epsilon_p\right) \ll a_p(t); a_p^+(t') \gg = \delta(t-t') + \qquad (4.5)$$

$$+ \sum_{qn} A_n(q) \ll a_{p-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg ,$$

$$\left(i\frac{d}{dt} - \epsilon_{p-q}\right) \ll a_{p-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg =$$

$$= \ll a_{p-q}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg +$$

$$+ \sum_{q'm} A_m(q') \ll a_{p-q-q'} e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_m} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg , \qquad (4.6)$$

$$\left(i\frac{d}{dt} - \epsilon_{p-q}\right) \ll a_{p-q}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg =$$

$$= \ll a_{p-q}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right)^2 e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg +$$

$$+ \frac{(-iq^{\alpha})}{M_n}\sum_m \Phi_{nm}^{\alpha\beta} \ll a_{p-q} u_m^{\beta} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg +$$

$$+ \sum_{q'm} A_m(q') \ll a_{p-q-q'} e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_m}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg -$$

$$- \sum_{q'p'} A_n(q') \frac{(\vec{q}\cdot\vec{q}')}{M_n} \ll a_{p-q} a_{p'+q'}^+ a_{p'} e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_n} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}; a_p^+(t') \gg . \qquad (4.7)$$

В полученных двух уравнениях для смешанных функций Грина мы можем произвести расщепления в тех функциях, которые входят с множителем $A(q')$, при условии малости электрон-ионного рассеяния:

$$\ll a_{p-q-q'}\, e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_m}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n};\, a_p^+(t')\gg =$$

$$= \delta_{-q,q'} \langle e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{u}_m-\vec{u}_n)}\rangle\, G_p(t-t') + O(A),$$

$$\ll a_{p-q-q'}\, e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_m}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n};\, a_p^+(t')\gg =$$

$$= \delta_{-q,q'} \langle e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_m}\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n}\rangle G_p(t-t') + O(A),$$

$$\ll a_{p-q}\, a^+_{p'+q'}\, a_{p'}\, e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{u}_n}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n};\, a_p^+(t)\gg =$$

$$= \delta_{-q,q'}\,\delta_{pp'}(1-n_{p-q})\, G_p(t-t') + O(A). \tag{4.8}$$

Подставляя функции (4.8) в уравнения (4.5) – (4.7), мы не получим в отличие от однофонного приближения (3.2) – (3.6) замкнутую систему уравнений, так как теперь у нас появились многофононные функции Грина. Учитывая лишь однофононные процессы рассеяния, мы можем произвести разложение средних в (4.8) и функций Грина по смещениям $\vec{u}_n$. Выполняя разложение в самих уравнениях, а не в исходном гамильтониане, как в пункте 3, мы можем учесть ту совокупность многофононных процессов, которая определяет фактор Дебая-Валлера. Этот результат вполне очевиден, так как расщепление (4.8) соответствует независимому усреднению по состояниям решетки и электронной системы, причем первое как раз и означает усреднение по положению ионов, т.е. введение в амплитуду рассеяния фактора Дебая-Валлера, учитывающего тепловое "дрожание" ионов. Заметим при этом, что такое усреднение не дает фактора Дебая-Валлера в последнем члене (4.8), где с принятой точностью выполняется закон сохранения импульса при рассеянии: $\vec{q}' = -\vec{q}$, в результате чего смещение $\vec{u}_n$ умножается на нулевой импульс. Этот результат легко понять, если заметить, что соответствующая функция Грина в уравнении (4.7) описывает рассеяние электронов на электронах за счет обмена через фонон, т.е. эффективное взаимодействие между парой электронов, которое осуществляется через один и тот же ион, и поэтому усреднение по состоянию решетки не может "размазать" положение этого иона. Можно сказать, что рассеиваемый электрон взаимодействует с другими электронами, деформируя вокруг себя решетку. Очевидно, что при этом не происходит "усреднения" этой деформации.

Итак, произведем разложение по смещениям в функциях Грина (4.5) - (4.7) и в средних (4.8):

$$\ll a_{p-q}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n};\, a_p^+ \gg \approx \ll a_{p-q};\, a_p^+ \gg + (-iq^\alpha) \ll a_{p-q} u_n^\alpha;\, a_p^+ \gg ,$$

$$\ll a_{p-q}\Big(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\Big) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n};\, a_p^+ \gg \approx -iq^\alpha \ll a_{p-q} \frac{iP_n^\alpha}{M_n};\, a_p^+ \gg ,$$

$$< e^{i\vec{q}(\vec{u}_m - \vec{u}_n)} > \approx e^{-\frac{W_m}{2}} e^{-\frac{W_n}{2}} (1 + < (\vec{q}\cdot\vec{u}_m)(\vec{q}\cdot\vec{u}_n) >),$$

$$< e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_m} \Big(\frac{\vec{q}\cdot\vec{P}_n}{M_n} + \frac{q^2}{2M_n}\Big) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n} > = \Big\{ i\frac{d}{dt} < e^{i\vec{q}\cdot\vec{u}_m}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}_n(t)} > \Big\}_{t=0} \approx$$

$$\approx e^{-\frac{W_m}{2}} e^{-\frac{W_n}{2}} < (\vec{q}\cdot\vec{u}_m)(i\vec{q}\cdot\dot{\vec{u}}_n) > , \tag{4.9}$$

где $W_n(q) = <(q\cdot u_n)^2>$ — фактор Дебая-Валлера. Подставляя (4.8) и разложение (4.9) в уравнения (4.5) - (4.7) после перехода к фурье-компонентам получим следующую систему уравнений:

$$(\omega - \epsilon_p) G_p(\omega) = 1 + \sum_{qn} A_n(q) \ll a_{p-q} | a_p^+ \gg_\omega +$$
$$+ \sum_{qn} A_n^\alpha(q) \ll a_{p-q} u_n^\alpha | a_p^+ \gg_\omega , \tag{4.5a}$$

$$(\omega - \epsilon_{p-q}) \ll a_{p-q} | a_p^+ \gg_\omega = \sum_m A_m(-q)\, e^{-\frac{W_m}{2}} e^{-\frac{W_n}{2}} G_p(\omega), \tag{4.6a}$$

$$(\omega - \epsilon_{p-q})^2 M_n \ll a_{p-q} u_n^\alpha | a_p^+ \gg_\omega = \sum_m \Phi_{nm}^{\alpha\beta} \ll a_{p-q} u_m^\beta | a_p^+ \gg_\omega + G_p(\omega) \tilde{B}_{np}^\alpha(q,\omega), \tag{4.7a}$$

где теперь

$$\tilde{F}_{1p}^\alpha(q,\omega) = A_n^\alpha(-q)(1 - n_{p-q}) +$$
$$+ \sum_m A_m^\beta(-q)\, e^{-\frac{W_m}{2}} e^{-\frac{W_n}{2}} M_n [< u_m^\beta u_n^\alpha > (\omega - \epsilon_{p-q}) + < u_m^\beta i\dot{u}_n^\alpha >].$$

В уравнении (4.6) мы отделили упругое рассеяние от неупругого и подставили туда (4.7). Как видно, эти уравнения отличаются от полученных в линейном приближении уравнений (3.2а), (3.3а), (3.17) только множителями Дебая-Валлера в тех членах, где проводится суммирование по узлам решетки. Решая интегральное уравнение (4.7а) тем же способом, что и (3.7), получим для функции Грина однофононного перехода

$$\langle\langle a_{p-q} u_n^{\alpha} \mid a_p^{+} \rangle\rangle = G_p(\omega) \sum_{nm} D_{nm}^{\alpha\beta}(\omega - \epsilon_{p-q}) A_m^{\beta}(-q)(1 - n_{p-q}) +$$

$$+ G_p(\omega) \sum_{mn'} D_{nn'}^{\alpha\gamma}(\omega - \epsilon_{p-q}) A_m^{\beta}(-q) M_{n'} e^{-\frac{W_m}{2}} e^{-\frac{W_{n'}}{2}} \times$$

$$\times [\langle u_m^{\beta} u_{n'}^{\gamma} \rangle (\omega - \epsilon_{p-q}) + \langle u_m^{\beta} i\dot{u}_{n'}^{\gamma} \rangle] . \qquad (4.10)$$

Произвести свертку по n' во втором члене (4.10) тем же способом, что и в (3.9) теперь не удается, так как под знак суммы входит $\exp(-W_{n'}/2)$. В случае идеальной решетки, когда все узлы эквивалентны, мы можем положить $W_{n'} = W_n(q)$ и снова применить формулу (3.12). Совершим эту замену и в общем случае, предполагая, что совершаемая при этом ошибка несущественна ввиду малой концентрации примесей, а также учитывая, что сами факторы Дебая-Валлера в металлах малы и основная температурная зависимость однофононных переходов определяется корреляционными функциями.

Таким образом, как и в (3.13), получаем

$$\langle\langle a_{p-q} u_n^{\alpha} \mid a_p \rangle\rangle_{\omega} = G_p(\omega) \sum_m A_m^{\beta}(-q) \{ (1 - n_{p-q}) D_{nm}^{\alpha\beta}(\omega - \epsilon_{p-q}) +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \epsilon_{p-q} - \omega'} J_{nm}^{\alpha\beta}(\omega') e^{-\frac{W_n}{2}} e^{-\frac{W_m}{2}} \} . \qquad (4.11)$$

Подставляя (4.11) и (4.6а) в (4.5а), получаем для функции Грина выражение (3.14) с массовым оператором

$$M_p(\omega) = \sum_q \frac{1}{V^2} \sum_{nm} v_n(q) v_m(-q) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_m^0)} \times$$

$$\times \{ e^{-\frac{W_n}{2}} e^{-\frac{W_m}{2}} [\frac{1}{\omega - \epsilon_{p-q}} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \epsilon_{p-q} - \omega'} q^{\alpha} q^{\beta} J_{nm}^{\alpha\beta}(\omega') +$$

$$+ (1 - n_{p-q}) q^{\alpha} q^{\beta} D_{nm}^{\alpha\beta}(\omega - \epsilon_{p-q}) \} . \qquad (4.12)$$

Затухание функции Грина определяется мнимой частью массового оператора и равно

$$\gamma_p(\epsilon_p) = \frac{\pi}{V}\sum_q \frac{1}{V}\sum_{nm} v_n(q)\, v_m(-q)\, e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_m^0)} \times$$

$$\times \{ e^{-\frac{W_n}{2}} e^{-\frac{W_m}{2}} [\,\delta(\omega) + \frac{1}{2\pi} < (\vec{q}\cdot\vec{u}_m) | (\vec{q}\cdot\vec{u}_n) >_\omega] -$$

$$-(1-n_{p-q})(e^{\omega/T}-1)\frac{1}{2\pi} < (\vec{q}\cdot\vec{u}_m) | (\vec{q}\cdot\vec{u}_n) >_\omega \}, \tag{4.13}$$

где $\omega = \epsilon_p - \epsilon_{p-q}$.

Полученное выражение имеет простой физический смысл. Первые два члена, содержащие факторы Дебая-Валлера, соответствуют рассеянию электронов на колеблющихся ионах решетки (первый член – упругое рассеяние, второй – однофононное), и могут быть представлены через корреляционную функцию Ван-Хова $S(\vec{q},\omega)$. Последний член дает рассеяние электронов на электронах за счет обмена через фононы. Как отмечалось выше, в этом случае не происходит усреднения по положению ионов, и поэтому отсутствуют факторы Дебая-Валлера.

При рассмотрении рассеяния нейтронов или рентгеновских лучей на решетке последний член не возникает, так как в самой системе (кристалле) нет рассеиваемых частиц и невозможен их обмен. В случае же рассеивания электронов в металле, где плотность электронов достаточно высока, этот член не мал. Однако, как было показано в п. 3, эти процессы эффективно учитываются благодаря принципу Паули – функция $S(\vec{q},\omega)$ умножается на величину $n_p(1-n_{p'})$ (см. (3.18)).

Если же учесть многофононные переходы предложенным здесь методом, то подобного простого соответствия с методом корреляционной функции Ван-Хова, найденного в п. 3, здесь установить не удается, так как в последнем члене в (4.13) отсутствуют факторы Дебая-Валлера. Однако связанные с этим изменения не существенны , так как некоторое изменение амплитуд неупругого рассеяния не повлияет на окончательные результаты работы /1/.

Таким образом, нам удалось описать поведение электронов в неидеальной решетке с помощью гамильтониана (1.1). Полученные выражения для одночастичных функций Грина позволяют исследовать изменение спектра элементарных возбуждений и определить их времена жизни. Показано, что при учете многофононных процессов на основе гамильтониана (1.4) удается получить факторы Дебая-Валлера при амплитудах рассеяния, хотя в этом случае не существует полного соответствия с методом корреляционной функции Ван-Хова. Более подробные вычисления и сравнение с результатами работы [1] мы проведем непосредственно при определении проводимости системы методом двухчастичной функции Грина.

В заключение мне хотелось бы поблагодарить С.В. Тябликова за обсуждения.

Литература

1. Ю. Каган, А.П. Жернов. ЖЭТФ. 50, 1107 (1966).
2. Н.М. Плакида. ФТТ, 6, 3444 (1964).
3. Д. Займан. Электроны и фононы, ИЛ, 1962.
4. R. J. Elliot, D. W. Taylor. Proc. Phys. Soc., 83, 189 (1964).
5. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).

Рукопись поступила в издательский отдел
29 сентября 1966 г.