Письма в ЖЭТФ, том 88, вып. 11, с. 849 – 854 © 2008 г. 10 декабря

Кинетические коэффициенты в модели Хаббарда

Р. О. Зайцев[1)]

Российский научный центр "Курчатовский Институт", 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 июня 2008 г.

После переработки 21 октября 2008 г.

Изучаются свойства электронной системы с предельно сильным электрон-электронным взаимодействием. Получено кинетическое уравнение в представлении Келдыша–Миллса. В интеграле столкновений обнаружено новое слагаемое, обусловленное релаксацией концевых множителей, которое обращается в нуль в низкотемпературном пределе по закону $T^2/|t|$, где $|t|$ – величина порядка интеграла перескока к ближайшим соседям, T – температура. Вычислена скорость звука и произведена оценка температурной зависимости кинетических коэффициентов.

PACS: 71.10.Ay, 71.10.Fd, 71.10.Hf

Основные постулаты, на которых основаны кинетические уравнения Ландау-Силина [1, 2], фактически сводятся к предположению о существовании слабозатухающих и слабовзаимодействующих квазичастиц, подчиняющихся статистике Ферми. При этом основные ферми-жидкостные эффекты были рассчитаны на основе дополнительного предположения о существовании взаимно-однозначной связи между частичными и квазичастичными состояниями. В модели Хаббарда это соответствие заведомо отсутствует, поскольку уже в нулевом приближении возникают перестановочные соотношения, отличающиеся от известных антикоммутационных соотношений, относящихся к идеальному газу квазичастиц.

Последовательное изучение модели Хаббарда показывает, что в области достаточно низких температур удается получить полюсную функцию Грина $G_\omega(\mathbf{p})$, найти спектр возбуждений, а также обнаружить остаточное (кинематическое) взаимодействие, приводящее к слабому затуханию соответствующих возбуждений. Перестановочные соотношения, соответствующие X-операторам Хаббарда, приводят к возникновению новых физических величин $f^\sigma_{1,2}$, определяющих средние числа заполнения, связанные с наличием нефермижидкостных перестановочных соотношений. Используя эти соображения, удается рассмотреть все явления, связанные с наличием взаимодействия в модели Хаббарда, и сравнить их с классическими результатами теории Ландау.

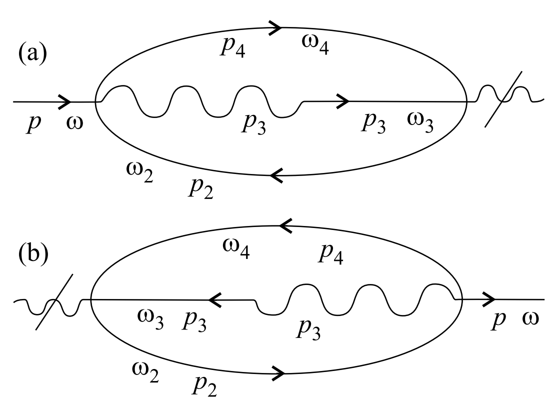
Предположим, что энергия Хаббарда является наибольшим энергетическим параметром, а среднее число частиц n, приходящееся на одну ячейку, не превышает единицу. При этом достаточно рассмотреть переходы внутри нижней подзоны Хаббарда, а гамильтониан системы имеет следующий вид:

$$\hat{H}=\sum_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\sigma}\hat{a}^+_{\mathbf{r}_1,\sigma}\hat{a}_{\mathbf{r}_2,\sigma}t(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)=\sum_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\sigma}\hat{X}^{\sigma,0}_{\mathbf{r}_1}\hat{X}^{0,\sigma}_{\mathbf{r}_2}t(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2), \tag{1}$$

где X-операторы Хаббарда, относящиеся к разным ячейкам, антикоммутируют, а в совпадающих ячейках подчиняются неканоническим перестановочным соотношениям:

$$\left\{\hat{X}^{\sigma_1,0},\hat{X}^{0,\sigma_2}\right\}=\hat{X}^{\sigma_1,\sigma_2}+\hat{X}^{0,0}\delta_{\sigma_1,\sigma_2},$$
$$\left\{\hat{X}^{\sigma_1,0},\hat{X}^{\sigma_2,0}\right\}=\left\{\hat{X}^{0,\sigma_1},\hat{X}^{0,\sigma_2}\right\}=0. \tag{2}$$

Однопетлевыые поправки, происходящие от собственно-энергетической части, сводятся к сдвигу химического потенциала, а также к переопределению интеграла перескока $t_\mathbf{p}=\sum\limits_\mathbf{r} t(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{pr})$. По этой причине рассмотрим сразу двухпетлевые поправки к концевым множителям, изображенные на рисунке.



Прямая и обращенная концевые диаграммы, относящиеся к функции Грина

[1)]e-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

Для оценки времени релаксации концевых множителей запишем двухпетлевую поправку $\hat{D} = \hat{G}\hat{K}^{(2)}$ в двухкомпонентном представлении Келдыша [3]:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G_\omega^{--}(p) = \dfrac{1-n_p}{\omega - \xi_p + i\delta} + \dfrac{n_p}{\omega - \xi_p - i\delta}, \\ G_\omega^{-+}(p) = 2\pi i n_p \delta(\omega - \xi_p), \\ G_\omega^{+-}(p) = -2\pi i(1-n_p)\delta(\omega - \xi_p), \\ G_\omega^{++}(p) = -\dfrac{n_p}{\omega - \xi_p + i\delta} - \dfrac{1-n_p}{\omega - \xi_p - i\delta} \end{pmatrix}. \tag{3}$$

$$K_\omega^{(\alpha,\beta)}(\mathbf{p}) = f \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} \int t^\alpha(\mathbf{p}_3) G_{\omega_3}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}_3) \times$$
$$\times G_{\omega_3-\omega+\omega_4}^{\beta,\alpha}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p} + \mathbf{p}_4) G_{\omega_4}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}_4) \frac{d\omega_3 d\omega_4}{(2\pi)^2}. \tag{4}$$

Здесь $t^-(\mathbf{p}) = -t^+(\mathbf{p}) = t_\mathbf{p}$, $\delta \to 0+$, а греческие индексы α и β могут принимать два значения: $-$ или $+$.

Производя интегрирование по внутренним частотам ω_3 и ω_4, находим четыре компоненты концевых множителей [4]:

$$K_\omega^{--}(p) = f \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta} + \right.$$
$$\left. + \frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta}\right],$$
$$K_\omega^{-+}(p) =$$
$$= f 2\pi i \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) \delta(\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4}),$$
$$K_\omega^{+-}(p) =$$
$$= f 2\pi i \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) \delta(\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4}),$$
$$K_\omega^{++}(p) = f \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta} + \right.$$
$$\left. + \frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\omega + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta}\right], \tag{5}$$

$A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) = n_{\mathbf{p}_2}(1-n_{\mathbf{p}_3})(1-n_{\mathbf{p}_4})$ и $B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) = (1-n_{\mathbf{p}_2})n_{\mathbf{p}_3}n_{\mathbf{p}_4}$, $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 - \mathbf{p}$. Можно заметить, что между различными компонентами имеется соотношение $K_\omega^{--}(p) - K_\omega^{++}(p) = K_\omega^{-+}(p) - K_\omega^{+-}(p)$.

Далее вычислим поправки к недиагональным гриновским функциям:

$$D_\omega^{-+}(p) = \sum_{\beta=\pm} G_\omega^{-\beta}(p) K_\omega^{\beta+}(p)$$

и

$$D_\omega^{+-}(p) = \sum_{\beta=\pm} G_\omega^{+\beta}(p) K_\omega^{\beta-}(p).$$

Непосредственные вычисления с помощью (4) и (5) дают:

$$\int G_\omega^{+-}(\mathbf{p}) K_\omega^{--}(\mathbf{p}) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= -if(1-n_p) \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta} + \right.$$
$$\left. + \frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta}\right];$$
$$\int G_\omega^{++}(\mathbf{p}) K_\omega^{+-}(\mathbf{p}) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= ifn_p \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta}\right] +$$
$$+ if(1-n_p) \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta}\right],$$
$$\mathbf{p}_2 = -\mathbf{p} + \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4;$$

$$\int G_\omega^{-+}(\mathbf{p}) K_\omega^{++}(\mathbf{p}) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= ifn_p \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta} + \right.$$
$$\left. + \frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta}\right];$$
$$\int G_\omega^{--}(\mathbf{p}) K_\omega^{-+}(\mathbf{p}) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= -ifn_p \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} + i\delta}\right] -$$
$$- if(1-n_p) \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \left[\frac{B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta}\right],$$
$$\mathbf{p}_2 = -\mathbf{p} + \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4. \tag{6}$$

Отсюда следует, что

$$\int D_\omega^{-+}(p) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= \int \left[G_\omega^{-+}(p) K_\omega^{++}(p) + G_\omega^{--}(p) K_\omega^{-+}(p)\right] \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= if \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \{n_p A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) -$$
$$- (1-n_p) B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)\} \left[\frac{1}{\xi_\mathbf{p} + \xi_{\mathbf{p}_2} - \xi_{\mathbf{p}_3} - \xi_{\mathbf{p}_4} - i\delta}\right];$$
$$\int D_\omega^{+-}(p) \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= \int \left[G_\omega^{+-}(p) K_\omega^{-+}(p) + G_\omega^{++}(p) K_\omega^{+-}(p)\right] \frac{d\omega}{2\pi} =$$
$$= if \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4} t(\mathbf{p}_3) \{n_p A(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4) -$$

$$-(1-n_p)B(\mathbf{p},\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4)\}\left[\frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}+\xi_{\mathbf{p}_2}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4}-i\delta}\right]. \tag{7}$$

Таким образом, $\int D_{\omega}^{-+}(p)d\omega = \int D_{\omega}^{+-}(p)d\omega$, а действительная часть (7) имеет вид интеграла столкновений, который обращается в нуль при подстановке $n_{\mathbf{k}} \to n_F(\xi_k)$:

$$\hat{\mathrm{St}}_1 = \pi f \sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4}\{t(\mathbf{p}_3)\times$$
$$\times\delta(\xi_{\mathbf{p}}+\xi_{\mathbf{p}_2}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4})\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\times$$
$$\times[-n_p n_{\mathbf{p}_2}(1-n_{\mathbf{p}_3})(1-n_{\mathbf{p}_4})+(1-n_p)(1-n_{\mathbf{p}_2})n_{\mathbf{p}_3}n_{\mathbf{p}_4}]\}. \tag{8}$$

Скорость релаксации фактически определяется первым слагаемым правой части, куда следует подставить равновесную функцию распределения Ферми $n_F(\xi_{\mathbf{p}})$:

$$\hat{\mathrm{St}}_{11} = \pi f n_F(\xi_p)\sum_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_4}\left\{\delta(\omega+\xi_{\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4-\mathbf{p}}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4})\times\right.$$
$$\times t_{\mathbf{p}_3} n_F(\xi_{\mathbf{p}_3})n_F(\xi_{\mathbf{p}_4})\exp\left(-\frac{\omega}{T}\right)\times$$
$$\left.\times\, n_F(\xi_{\mathbf{p}_3}+\xi_{\mathbf{p}_4}-\omega)\exp\left(\frac{\xi_{\mathbf{p}_3}+\xi_{\mathbf{p}_4}}{T}\right)\right\}. \tag{9}$$

При низкой температуре мы можем проинтегрировать по быстро меняющимся величинам $\exp(\xi_{\mathbf{p}_3}/T)$ и $\exp(\xi_{\mathbf{p}_4}/T)$. Введем переменные $s = \xi_{\mathbf{p}_3}+\xi_{\mathbf{p}_4}$, $r = \xi_{\mathbf{p}_4}-\xi_{\mathbf{p}_3}$ и сначала проинтегрируем по r:

$$\int n_F(\xi_{\mathbf{p}_3})n_F(\xi_{\mathbf{p}_4})dr = \frac{2s}{\exp(s/T)-1}. \tag{10}$$

Далее предположим, что интегрирование δ-функции не вносит существенных ограничений при интегрировании по переменной s, после чего интегрируем по s. Замечая, что амплитуда рассеяния $t_{\mathbf{p}_3}+t_{\mathbf{p}_4} = (s+2\mu)/f$, получим:

$$\hat{\mathrm{St}}_{11}(\mathbf{p}) = \frac{\pi}{3}\nu_0^2 n_F(\xi_{\mathbf{p}})\left(1-n_F(\xi_{\mathbf{p}})\right)\times$$
$$\times(3\mu+\omega)\left(\omega^2+(\pi T)^2\right)\overline{\delta(\omega+\xi_{\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4-\mathbf{p}}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4})}, \tag{11}$$

где $\nu_0 = \sum_{\mathbf{p}}\delta(\xi_{\mathbf{p}})$ – плотность состояний на уровне Ферми, а черта обозначает усреднение по углам между векторами $\mathbf{p}_{3,4}$ и $\mathbf{p}$.

Написание кинетического уравнения начнем с помощью вычисления двухкомпонентной гриновской функции $\hat{D}$, относящейся к верхней и нижней частям контура Келдыша, которая есть произведение обычной функции Грина $\hat{G}$ на матрицу концевых множителей $\hat{K}$. Учитывая, что обыкновенная функция Грина удовлетворяет уравнению Дайсона, выразим исходную функцию Грина через собственноэнергетическую функцию $\hat{\Sigma}$:

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} D^{--} & D^{-+} \\ D^{+-} & D^{++}\end{pmatrix} = \hat{G}\hat{K} =$$
$$= \hat{G}_0\hat{K}+\hat{G}_0\hat{\Sigma}\hat{G}\hat{K} = \hat{G}_0\hat{K}+\hat{G}_0\hat{\Sigma}\hat{D}. \tag{12}$$

Далее запишем также сопряженную систему уравнений:

$$\hat{D} = \tilde{K}\hat{G} = \tilde{K}\hat{G}_0+\tilde{K}\hat{G}\hat{\Sigma}\hat{G}_0 = \tilde{K}\hat{G}_0+\hat{D}\hat{\Sigma}\hat{G}_0, \tag{13}$$

где $\tilde{K}$ – матрица левых концевых множителей, которая возникает при вычислении полной функции Грина, взятой справа налево (см. рисунок (b)). При этом ее матричные элементы выражаются через матричные элементы (5) с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned}&\tilde{K}_{\omega}^{--}(p) = K_{\omega}^{--}(p), \quad \tilde{K}_{\omega}^{-+}(p) = -K_{\omega}^{-+}(p),\\ &\tilde{K}_{\omega}^{+-}(p) = -K_{\omega}^{+-}(p), \quad \tilde{K}_{\omega}^{++}(p) = K_{\omega}^{++}(p).\end{aligned} \tag{13a}$$

Уравнение (12) переписываем с помощью обратной гриновской функции нулевого приближения $(G_{01})^{-1}$, для которой $(G_{01})^{-1}\hat{G}_0(1,2) = \tau^z\delta(x_1-x_2)$:

$$(G_{01})^{-1}\hat{D} = \left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{H}_0(-i\hbar\nabla_1,\mathbf{r}_1)\right\}\hat{D} =$$
$$= \tau^z\hat{K}+\tau_z\hat{\Sigma}\hat{D}. \tag{14}$$

Аналогичным образом преобразуем уравнение (13) с помощью обратной гриновской функции $(G_{02}^*)^{-1}$, для которой $(G_{02}^*)^{-1}\,\hat{G}_0(1,2) = \tau^z\delta(x_1-x_2)$:

$$(G_{02}^*)^{-1}\,\hat{D} = \left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2}-\hat{H}_0(i\hbar\nabla_2,\mathbf{r}_2)\right\}\hat{D} =$$
$$= \tilde{K}\tau_z+\hat{D}\hat{\Sigma}\tau_z. \tag{15}$$

Кинетическое уравнение получим после вычитания (15) из (14):

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2}-\hat{H}_0(-i\hbar\nabla_1,\mathbf{r}_1)+\hat{H}_0(i\hbar\nabla_2,\mathbf{r}_2)\right\}\hat{D} =$$
$$= \tau^z\hat{K}-\tilde{K}\tau_z+\tau_z\hat{\Sigma}\hat{D}-\hat{D}\hat{\Sigma}\tau_z. \tag{16}$$

С учетом соотношений (13) можно обнаружить, что $\tau^z\hat{K}-\tilde{K}\tau_z = 0$ и, таким образом, в нашем двухпетлевом приближении концевые множители явным образом не входят в кинетическое уравнение (16).

Учитывая свойства матрицы Паули $\hat{\tau}^z$, а также соотношения

$$D^{++}+D^{--} = D^{-+}+D^{+-}, \ \Sigma^{++}+\Sigma^{--} = -\Sigma^{-+}-\Sigma^{+-}, \tag{17}$$

получим уравнения для недиагональных компонент:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(\mathbf{r}_1, t_1) + \hat{H}^*(\mathbf{r}_2, t_2)\right) D^{-+} = \\ = \Sigma^{-+}D^{+-} - \Sigma^{+-}D^{-+}, \tag{18a}$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}(\mathbf{r}_1, t_1) + \hat{H}^*(\mathbf{r}_2, t_2)\right) D^{+-} = \\ = \Sigma^{-+}D^{+-} - \Sigma^{+-}D^{-+}. \tag{18b}$$

В результате подстановки $D^{-+} = in_{\mathbf{p}}f\delta(\omega - \xi_p)$, $D^{+-} = -i(1-n_{\mathbf{p}})f\delta(\omega - \xi_p)$ и дальнейшего интегрирования по ω, левая часть преобразуется к оператору Луивилля $\hat{L}$, в то время как правая часть – к оператору столкновений $\hat{\mathrm{St}}_2$:

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right\}(fn_{\mathbf{p}}) = f\hat{\mathrm{St}}_2, \tag{19a}$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right\}(f(1-n_{\mathbf{p}})) = -f\hat{\mathrm{St}}_2, \tag{19b}$$

где

$$\hat{\mathrm{St}}_2 = \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}', \mathbf{p}_1'} \Big\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1|\mathbf{p}', \mathbf{p}_1')\times \\ \left[-n_{\mathbf{p}}n_{\mathbf{p}_1}(1-n_{\mathbf{p}'})(1-n_{\mathbf{p}_1'}) + (1-n_{\mathbf{p}})(1-n_{\mathbf{p}_1})n_{\mathbf{p}'}n_{\mathbf{p}_1'}\right]\times \\ \times\delta(\xi_p + \xi_{p_1} - \xi_{p'} - \xi_{p_1'})\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_1')\Big\},$$

$$w(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1|\mathbf{p}', \mathbf{p}_1') = \left[t(\mathbf{p}') + t(\mathbf{p}_1')\right]^2, \\ t(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{r}} t(\mathbf{r})\exp\left[-i(\mathbf{rp})\right]. \tag{20}$$

Таким образом, первое из уравнений (19) соответствует обычному кинетическому уравнению для функции $\psi = fn_{\mathbf{p}}$, а их сумма дает бесстолкновительное уравнение для функции f:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \tag{21}$$

Уравнения (19)–(21) определяют систему кинетических уравнений, записанных в двухпетлевом приближении. Они обобщают классическую теорию Энскога [5], относящуюся к вандерваальсовой системе.

В области низких температур, когда можно пренебречь вкладом интегралов столкновений ($\hat{\mathrm{St}}_{1,2}$), поскольку они малы по параметру $(T/|t|)^2$, вместо того, чтобы решать уравнение (21), будем использовать уравнение состояния. При этом концевой множитель f выражается через плотность n, которая, в свою очередь, связана с химическим потенциалом μ через уравнение состояния:

$$n = 2f\sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad f = 1 - \frac{n}{2}, \tag{22}$$

Вычисление кинетических коэффициентов производим с помощью кинетических уравнений, где в качестве нулевого приближения используется локально-равновесная функция распределения, равная произведению концевого множителя на функцию распределения Ферми $n_F(\xi)$:

$$\psi = f(\mathbf{r}, t)n_F(f(\mathbf{r}, t)t_{\mathbf{p}} - \mu(\mathbf{r}, t) + \mathbf{p}\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)), \tag{23}$$

где $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$– средняя скорость, которую после вычисления всех пространственных и временных производных будем считать равной нулю.

С учетом последнего замечания вычисляем производные, входящие в кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}n_F(\xi) + f\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}t_{\mathbf{p}} - \\ -f\frac{\partial \mu}{\partial t}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}f\left(p_\beta\frac{\partial V_\beta}{\partial t}\right); \tag{24a}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial r_\alpha} = \frac{\partial f}{\partial r_\alpha}n_F(\xi) + f\frac{\partial f}{\partial r_\alpha}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}t_{\mathbf{p}} - \\ -f\frac{\partial \mu}{\partial r_\alpha}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}f\left(p_\beta\frac{\partial V_\beta}{\partial r_\alpha}\right); \tag{24b}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial p_\alpha} = f^2\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha}, \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\alpha} = f\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial r_\alpha} = t_{\mathbf{p}}\frac{\partial f}{\partial r_\alpha}. \tag{24c}$$

Подставляя эти выражения в левую сторону кинетического уравнения (19a), получим:

$$\frac{\partial f}{\partial t}n_F(\xi) + f\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}t_{\mathbf{p}} - \\ -f\frac{\partial \mu}{\partial t}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}f\left(p_\beta\frac{\partial V_\beta}{\partial t}\right) + \\ + \left[\frac{\partial f}{\partial r_\alpha}n_F(\xi) - f\frac{\partial \mu}{\partial r_\alpha}\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi}f\left(p_\beta\frac{\partial V_\beta}{\partial r_\alpha}\right)\right]\times \\ \times f\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha} = \hat{\mathrm{St}}(\psi). \tag{25}$$

Произведем суммирование этого уравнения по всем $\mathbf{p}$, относящимся к первой зоне Бриллюэна:

$$\frac{\partial f}{\partial t}\sum_{\mathbf{p}}\left[n_F(\xi) + ft_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)\right] - f\frac{\partial \mu}{\partial t}\sum_{\mathbf{p}} n_F'(\xi) +$$

$$+f^2\frac{\partial V_\beta}{\partial r_\alpha}\sum_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)p_\beta\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha}=0. \qquad (25a)$$

Следующее уравнение получим после умножения уравнения (19a) на импульс $\mathbf{p}$. Если при этом не учитывать явлений, связанных в процессами переброса, то интегрирование правой части кинетического уравнения дает нуль, и мы получим

$$f\frac{\partial f}{\partial r_\beta}\sum_{\mathbf{p}}n_F(\xi)p_\alpha\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\beta}-f^2\frac{\partial \mu}{\partial r_\beta}\sum_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)p_\alpha\frac{\partial t_{\mathbf{p}}}{\partial p_\beta}+$$

$$+f\frac{\partial V_\beta}{\partial t}\sum_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)p_\alpha p_\beta=0 \qquad (25b)$$

Третье соотношение получим с помощью вариации уравнения состояния (22), которое связывает плотность n, химический потенциал μ и концевой множитель f. С помощью формулы $f=1-n/2$ исключим из этих уравнений вариацию δn и, переходя к пределу $\mathbf{V}\to 0$, получим соотношение, с помощью которого удается исключить из уравнений производные концевых множителей δf:

$$\delta f\left\{1+\sum_{\mathbf{p}}\left[n_F(\xi)+ft_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)\right]\right\}-f\delta\mu\sum_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)=0. \qquad (26)$$

После перехода к фурье-представлению

$$\delta\mu(\mathbf{r},t)=e^{-i\omega t+i(\mathbf{qr})}\mu_{\omega,\mathbf{q}},\quad \mathbf{V}(\mathbf{r},t)=e^{-i\omega t+i(\mathbf{qr})}\mathbf{V}_{\omega,\mathbf{q}}, \qquad (27)$$

получим уравнение для нахождения скорости звука (c_s):

$$c_s^2=\frac{\omega^2}{q^2}=\frac{K}{LR_0}\left[K(1+K+fR_1)+BR_0\right], \qquad (28)$$

где введены следующие обозначения: $K=\sum_{\mathbf{p}}n_F(\xi_{\mathbf{p}})$, $\xi_{\mathbf{p}}=ft_{\mathbf{p}}-\mu$,

$$R_k=\sum_{\mathbf{p}}t_{\mathbf{p}}^k n_F'(\xi_{\mathbf{p}}),$$
$$B=T\sum_{\mathbf{p}}\ln\left[1+\exp(-\xi_{\mathbf{p}}/T)\right], \qquad (29)$$
$$L=\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{p}}n_F'(\xi_{\mathbf{p}})(\mathbf{p})^2.$$

Таким образом, мы получили концентрационную зависимость гидродинамической скорости звука в пределе достаточно низких температур. В предельном случае идеального ферми-газа $c_0^2=K^2/LR_0$, где следует положить $f=1$. С повышением электронной концентрации скорость звука сначала возрастает, однако этот рост замедляется за счет изменения знака величины $R_1(\mu/f)$, что в конечном счете дает отрицательный вклад за счет произведения $KR_1(\mu/f)$. Это влияние оказывается особенно сильным, когда плотность состояний имеет максимальное значение при больших положительных значениях энергии Ферми. При этом скорость звука сильно уменьшается и может обратиться в нуль при некотором конечном значении концентрации электронов. Так, в случае ГЦК решетки, для которой плотность состояний можно смоделировать в виде $\sqrt{6+\epsilon}/\left(4\pi\sqrt{2-\epsilon}\right)$, скорость звука обращается в нуль при $n=n_c=0.87$. Здесь же обращается в нуль производная давления по концентрации, что соответствует возникновению неоднородных состояний [6].

Для нахождения коэффициентов первой и второй вязкости запишем уравнение непрерывности (25a) и уравнение состояния (26) при нулевых пространственных производных от концевого множителя и химического потенциала:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial f}{\partial t}\left[K+fR_1\right]-\frac{\partial \mu}{\partial t}fR_0=\frac{\partial V_\alpha}{\partial r_\alpha}fK,\\&\frac{\partial f}{\partial t}\left[1+K+fR_1\right]-\frac{\partial \mu}{\partial t}fR_0=0.\end{aligned} \qquad (30)$$

Отсюда находим:

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-fK\mathrm{div}\mathbf{V},\quad \frac{\partial \mu}{\partial t}=-\frac{K}{R_0}\left[1+K+fR_1\right]\mathrm{div}\mathbf{V}. \qquad (31)$$

Эти выражения следует подставить в левую часть кинетического уравнения (25) в котором пространственные производные от μ и f положены равными нулю:

$$f\left[\frac{\partial V_\beta}{\partial r_\alpha}-\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{3}\mathrm{div}\mathbf{V}\right]n_F'(\xi)p_\beta\frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha}+$$
$$+f\left[\frac{1}{3}n_F'(\xi)p_\beta\frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_\beta}+\frac{K}{R_0}n_F'(\xi)\right]\mathrm{div}\mathbf{V}-$$
$$-f\frac{K}{R_0}\left\{\left[R_0n_F(\xi)-Kn_F'(\xi)\right]+\right.$$
$$\left.+f\left[R_0t_{\mathbf{p}}n_F'(\xi)-R_1n_F'(\xi)\right]\right\}\mathrm{div}\mathbf{V}. \qquad (32)$$

Перепишем два первых слагаемых через полную производную:

$$\begin{aligned}&n_F'(\xi)\frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_\beta}=\frac{\partial n_F(\xi_{\mathbf{p}})}{\partial p_\beta},\\&\int p_\beta n_F'(\xi)\frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_\alpha}d\mathbf{p}=-\delta_{\alpha,\beta}\int n_F(\xi_{\mathbf{p}})d\mathbf{p}.\end{aligned} \qquad (33)$$

В результате выражение (32) представляется в следующем виде:

$$f\left[\frac{\partial V_\beta}{\partial r_\alpha}-\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{3}\mathrm{div}\mathbf{V}\right]\frac{\partial n_F(\xi_\mathbf{p})}{\partial p_\alpha}p_\beta+$$
$$+f\left[\frac{1}{3}\frac{\partial n_F(\xi_\mathbf{p})}{\partial p_\beta}p_\beta+\frac{K}{R_0}n_F^{'}(\xi)\right]\mathrm{div}\mathbf{V}-$$
$$-f\frac{K}{R_0}\{[R_0 n_F(\xi)-K n_F^{'}(\xi)]+n_F^{'}(\xi)[R_0 t_\mathbf{p}-R_1]\}\mathrm{div}\mathbf{V}. \tag{34}$$

Поскольку оператор столкновений выделяет область интегрирования, близкую к поверхности Ферми, можно утверждать, что коэффициент второй вязкости в модели Хаббарда отличен от нуля и имеет тот же порядок величины и ту же температурную зависимость $\sim 1/T^2$, что и коэффициент первой, поперечной вязкости.

При заданном градиенте температуры необходимо считать, что ничто не зависит от времени, нет средней скорости, однако все остальные величины, температура, химический потенциал (μ) и концевой множитель (f), зависят от координат.

В качестве нулевого приближения имеем $f(\mathbf{r})n_F[(f(\mathbf{r})t_\mathbf{p}-\mu(\mathbf{r}))/T(\mathbf{r})]$, после чего в качестве окончательного результата получим известный результат:

$$\kappa=\frac{2}{3}\sum_\mathbf{p}\xi_\mathbf{p}\frac{\partial\epsilon_\mathbf{p}}{\partial p_\beta}\hat{\tau}\left(\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial\xi}\frac{\xi}{T}\frac{\partial\epsilon_\mathbf{p}}{\partial p_\beta}\right). \tag{35}$$

Поскольку $\tau\sim 1/T^2$, окончательно имеем оценку $\kappa\sim 1/T$.

Таким образом, основное отличие уравнений (19) от кинетического ферми-жидкостного уравнения состоит в наличии флуктуаций, связанных с концевыми множителями, происходящими от неканонических перестановочных соотношений X-операторов Хаббарда. В результате возникает дополнительный интеграл столкновений (11), приводящий к релаксации концевых множителей $\sim T^2$.

Зависимость скорости звука от плотности определяется, в основном, кинематическим взаимодействием частиц, которое возрастает и изменяет знак, начиная с некоторой концентрации. В соответствии с этим рост скорости звука замедляется, а при определенных условиях может обратиться в нуль.

Температурная зависимость кинетических коэффициентов не отличается от той, которую дает теория ферми-жидкости, однако численные значения коэффициентов первой и второй вязкостей имеют одинаковый порядок величины.

Работа была поддержана Министерством образования РФ. Грант РНП # 2.1.1.9451

1. В. П. Силин, ЖЭТФ **23** 641 (1952).
2. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **30**, 1058 (1956); **32**, 59 (1957); **35**, 97 (1958).
3. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964).
4. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
5. С. Чепмен, Т. Каулинг, *Математическая теория неоднородных газов*, М.: ИИЛ, 1960.
6. Р. О. Зайцев, Письма в ЖЭТФ **86**, 54 (2007).