Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра проблем теоретической физики (теоргруппа Горькова)

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Транспортные свойства в системах с тяжелыми фермионами

Автор:
Студент 102 группы
Бускина Анжелика Витальевна

Научный руководитель:
Кандидат физ.-мат. наук
Зюзин Владимир Александрович

Москва 2025

Аннотация

Транспортные свойства в системах с тяжёлыми фермионами
Бускина Анжелика Витальевна

В данной работе исследуются транспортные свойства систем с тяжелыми фермионами. Примером такого материала служит гексаборид самария (SmB_6), который демонстрирует необычное поведение при низких температурах, включая плато в сопротивлении и линейную зависимость теплоёмкости от температуры с большим коэффициентом пропорциональности. Основная цель работы — объяснить эти экспериментальные наблюдения с помощью модели, учитывающей гибридизацию лёгких (5d) и тяжёлых (4f) электронов. Автор использует эффективный гамильтониан и примесную диаграммную технику для расчёта проводимости, а также вычисляет теплоёмкость. Результаты показывают, что наличие тяжёлых фермионов на поверхности Ферми может объяснить насыщение сопротивления при низких температурах и линейный вклад в теплоёмкость. Работа предлагает качественное согласие с экспериментальными данными и указывает на необходимость дальнейших исследований, например, учёта температурной зависимости параметра гибридизации.

Содержание

1 Введение **4**

2 Описание модели **6**
2.1 Эффективный гамильтониан 6
2.2 Учет влияния беспорядка 8
2.2.1 Потенциал примесей 8
2.2.2 Усреднение функции Грина по беспорядку 9
2.3 Уравнение самосогласования 10

3 Расчет проводимости **11**
3.1 Проводимость системы в отсутствие гибридизации 12
3.2 Статическая проводимость 14

4 Расчет теплоемкости **18**

5 Заключение **21**

6 Приложение **23**
6.1 Получение приближенного выражения для активационной части проводимости 23
6.2 Получение низкотемпературной асимптотики теплоемкости 24

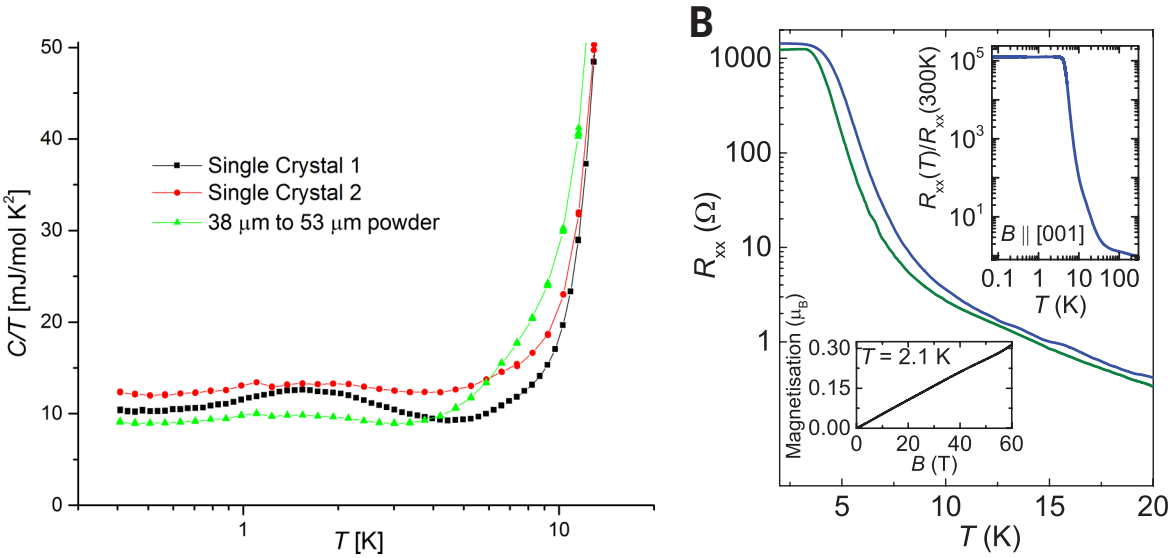
1 Введение

Уже долгое время гексаборид самария (SmB_6) считается изолятором Кондо — материалом, в котором за счёт гибридизации локализованных электронов (в данном случае $4f$) и электронов проводимости ($5d$) при низких температурах возникает узкая (порядка 10 мэВ) щель в энергетическом спектре, и химический потенциал попадает внутрь неё. С учётом этого можно ожидать, что сопротивление SmB_6 будет расти по активационному закону при понижении температуры и стремиться к бесконечности при $T \to 0$. Экспериментальная кривая действительно показывает изоляторное поведение при температуре ниже 40 К, однако выходит на плато при 2-4 К (см., например, [1]). Теоретическое объяснение этому явлению было предложено в работе [2], где было показано, что спектр трёхмерного изолятора Кондо может быть топологически нетривиальным, а значит, в нём возможны краевые состояния, проводящие ток даже при изолирующем объёме. В такой модели проводимость описывается формулой $\sigma = \sigma_{2D} + \sigma_{\text{bulk}}$, где $\sigma_{\text{bulk}} = \sigma_0 \exp(-\Delta/T)$ — активационный вклад от объёма, а σ_{2D} — не зависящий от температуры вклад краевых мод. Экспериментальные группы, изучавшие температурную зависимость проводимости, пытались разделить поверхностную и объёмную части с помощью геометрии образца. Они приходили к разным выводам: одни видели полное согласие с теорией о проводящей поверхности при изолирующем объёме [3], другие придерживались мнения, что плато обусловлено ещё и некоторым объёмным механизмом [4]. Итак, для прояснения природы насыщения сопротивления при нулевой температуре необходимо обращаться к данным по другим физическим свойствам SmB_6.

В экспериментах ARPES [5] действительно видны признаки существования двумерных краевых мод в SmB_6, однако при измерениях оптической проводимости было выявлено [6], что доминирующий вклад в отклик приходит из объёма, а не с поверхности. Там же была отмечена малая вариативность низкотемпературной проводимости между разными образцами, что нетипично для внешних механизмов (примеси, дефекты) появления остаточной проводимости, потому следует искать объяснение в собственных свойствах SmB_6. Кроме того, в [7] было обнаружено, что при увеличении площади поверхности кристалла в несколько раз его теплоёмкость практически не изменяется, а значит, основной вклад в нее вносит тоже объём (Рисунок 1a). Помимо этого, до температуры 10 К теплоёмкость оказалась линейной, что может свидетельствовать о существовании в объёме фермионных носителей. Если эти носители заряжены, они могут объяснить насыщение проводимости. Экспериментальное изучение эффекта де Гаазаван Альфена в SmB_6 показало [8] существование в объёме образца электронов, дающих вклад в осцилляции. Примечателен также гигантский температурный пик в амплитуде осцилляций при $T < 0.5$ К. Если предположить, что формула Лифшица-Косевича [9] для амплитуды осцилляций

$$A(T) \propto \frac{2\pi^2 T/\omega_{\text{B}}}{\sinh(2\pi^2 T/\omega_{\text{B}})},$$

где $\omega_{\text{B}} = \frac{eB}{mc}$, B — магнитное поле, m — эффективная масса электрона, применима для этого образца, то мы найдём, что за гигантский температурный пик ответственны очень тяжёлые частицы с $m > 100m_e$, где m_e — масса свободного электрона. Далее, в той же работе было выявлено (Рисунок 1b) падение электрического сопротивления образца при приложении внешнего магнитного поля величиной 45T, что явно противоречит существованию топологически защищенных поверхностных мод. Действительно, в спектре краевых мод в магнитном поле должна появиться энергетическая щель, а электрическое сопротивление при этом должно вырасти, чего не наблюдается на эксперименте.



(a) Зависимость отношения теплоемкости к температуре от температуры для цельных кристаллов (красные, черные точки) и порошка (зеленые точки) из [7].

(b) Зависимость проводимости от температуры в нулевом магнитном поле (синяя линия) и при 45T (зеленая линия) из [8].

Рис. 1: Экспериментальные данные, демонстрирующие необычные свойства SmB_6.

В работе [10] была предложена модель тяжёлого фермиона, возникающего в результате гибридизации лёгких $5d$-электронов проводимости и $4f$-электронов с много бóльшей, но конечной, эффективной массой, в отличие от случая локализованных состояний. Была рассмотрена ситуация, когда из-за взаимодействия на ферми-поверхности остается только тяжёлая частица, и оказалось, что модель вполне может объяснить амплитуду осцилляций де Гааза-ван Альфена эксперимента [8]. Более того, обобщение на случай p-волновой гибридизации допускает существование у тяжёлого электрона краевых состояний, подобных тем, что обсуждаются в [11]. Таким образом, присутствие тяжёлого электронного состояния на ферми-поверхности не исключает существования краевых состояний.

Отметим, что данная модель может также объяснить насыщение проводимости при понижении температуры. Согласно формуле Друде для остаточной (при $T \to 0$) проводимости идеального электронного газа за счет рассеяния на примесях,

$$\sigma_D = \frac{ne^2\tau}{m},$$

где n — концентрация электронов, τ — время свободного пробега между актами рассеяния, а m — масса электрона, увеличение эффективной массы носителя приводит к уменьшению проводимости. Предположим, что при высокой температуре гибридизации нет, а значит, система является металлом, сопротивление которого определяется в основном $5d$-электронами. При понижении температуры возникает гибридизация, плавно выключающая вклад лёгких частиц, и сопротивление растет. Наконец, на поверхности Ферми остается только тяжёлый гибрид, обеспечивающий конечную проводимость при нулевой температуре. Этот процесс напоминает переход в изолирующее состояние в результате медленного образования энергетической щели у двух типов электронов в точке вырождения их спектров.

Цель данной дипломной работы состоит в изучении свойств системы, описываемой моделью из статьи [10]. Используя примесную диаграммную технику, мы вычислим про-

водимость, а также определим низкотемпературную асимптотику теплоёмкости. Наше главное предположение состоит в том, что такие экспериментальные факты [7], как плато в сопротивлении и линейность зависимости теплоёмкости от температуры с большим коэффициентом пропорциональности, можно качественно объяснить наличием у тяжёлого электрона ферми-поверхности, остающейся даже после открытия щели вследствие гибридизации при понижении температуры.

2 Описание модели

2.1 Эффективный гамильтониан

Следуя работе [10], запишем волновую функцию в виде $\psi = (\psi_d, \psi_f)^T$, где ψ_d и ψ_f описывают d- и f-электроны соответственно. В отсутствие взаимодействия гамильтониан имеет вид:

$$H_0 = \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \bar{\psi} \begin{pmatrix} \xi_{\boldsymbol{p},d} & 0 \\ 0 & \xi_{\boldsymbol{p},f} \end{pmatrix} \psi, \tag{1}$$

$\xi_{\boldsymbol{p},d(f)}$ — дисперсия легких и тяжелых частиц соответственно, $\bar{\psi}$ — сопряженный спинор. Поскольку нас интересуют эффекты, сильно зависящие от состояний около ферми-поверхности, ограничимся в разложении спектра квадратичными по импульсу $\boldsymbol{p}$ членами. Мы сохраняем квадратичный порядок не только для d-электронов проводимости, но и для тяжелых f-электронов, хотя обычно их рассматривают как полностью локализованные: $\xi_{\boldsymbol{p},f} = \epsilon_0 = \text{const}$. Мы ожидаем, что учет дисперсии f-электронов приведет к нетривиальным результатам.

Пусть при нулевой температуре и в отсутствие гибридизации точки пересечения ветвей спектра располагались ровно на уровне Ферми. Теперь сдвинем отсчет энергии на $-\mu < 0$ так, чтобы химический потенциал μ_F стал равным нулю. Здесь введено дополнительное обозначение, чтобы подчеркнуть, что μ является параметром спектра, а не истинным химическим потенциалом. Пренебрежем возможным сдвигом минимумов зон и положим $\xi_{\boldsymbol{p},d} = \xi_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \mu$, тогда у второй параболы останется единственный свободный параметр: $\xi_{\boldsymbol{p},f} = \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} = \alpha\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \mu\right)$. В такой записи α — отношение масс легкого и тяжелого фермионов, m — эффективная масса легкой частицы. По смыслу $0 < \alpha < 1$, но нас будет интересовать случай $\alpha \ll 1$.

Запишем взаимодействие между фермионами в виде

$$H_{\text{int}} = U \int d^3\boldsymbol{r}\bar{\psi}_d(\boldsymbol{r})\psi_d(\boldsymbol{r})\bar{\psi}_f(\boldsymbol{r})\psi_f(\boldsymbol{r}) = -U \int d^3\boldsymbol{r}\bar{\psi}_d(\boldsymbol{r})\psi_f(\boldsymbol{r})\bar{\psi}_f(\boldsymbol{r})\psi_d(\boldsymbol{r}), \tag{2}$$

где константа взаимодействия $U > 0$ отвечает отталкиванию. Сделаем преобразование Хаббарда-Стратоновича:

$$e^{U\bar{\psi}_d\psi_f\bar{\psi}_f\psi_d} = \frac{\int D\theta D\bar{\theta} e^{-U\left[|\theta|^2/U^2 + \left(\bar{\psi}_d\psi_f\theta + \bar{\theta}\bar{\psi}_f\psi_d\right)/U\right]}}{\int D\theta D\bar{\theta} e^{-U\left(\bar{\psi}_d\psi_f + \bar{\theta}/U\right)\left(\bar{\psi}_f\psi_d + \theta/U\right)}}. \tag{3}$$

Будем пока считать θ константой. Тогда интеграл элементарно берется и эффективное взаимодействие представляется в виде

$$H_{\text{int}} = \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \bar{\psi} \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ \bar{\theta} & 0 \end{pmatrix} \psi. \tag{4}$$

Для вычисления проводимости будем пользоваться диаграммной техникой. Собирая полный гамильтониан из формул (1), (4) и принимая во внимание предполагаемый вид $\xi_{\boldsymbol{p},d(f)}$, найдем запаздывающую (опережающую) функцию Грина в частотно-импульсном представлении:

$$G_{d,f}^{\mathrm{R(A)}}(\epsilon,\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(\epsilon \pm i0 - \epsilon_{\boldsymbol{p},+})(\epsilon \pm i0 - \epsilon_{\boldsymbol{p},-})} \begin{pmatrix} \epsilon - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} & \theta \\ \bar{\theta} & \epsilon - \xi_{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$\epsilon_{\boldsymbol{p},\pm} = \frac{1+\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}} \pm \sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}}\right)^2 + \bar{\theta}\theta}, \quad \xi_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \mu, \tag{6}$$

где верхние знаки соответствуют $G_{d,f}^{\mathrm{R}}$, нижние — $G_{d,f}^{\mathrm{A}}$, и введены $\epsilon_{\boldsymbol{p},\pm}$ — ветви спектра системы после гибридизации. Индекс d,f подчеркивает, что матрица записана в базисе исходных фермионов. Заметим, что для $\epsilon_{\boldsymbol{p},\pm}$ выполняется соотношение

$$(\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{p},+})(\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{p},-}) = \left(\epsilon - \frac{1+\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}}\right)^2 - \left(\frac{1-\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}}\right)^2 - \bar{\theta}\theta. \tag{7}$$

Напомним, что при нулевой температуре химический потенциал $\mu_F = 0$. Приравнивая $\epsilon_{\boldsymbol{p},\pm}(\boldsymbol{p}_0)$ нулю, найдем, что

$$\frac{p_0^2}{2m} = \mu \pm \sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}. \tag{8}$$

В соотношении (8) слева стоит неотрицательная величина, а значит, при $\mu < \sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}$ корней у уравнения $\epsilon_{\boldsymbol{p},+}(p_0) = 0$ не будет. Это означает, что при таком соотношении параметров поверхность Ферми при нулевой температуре есть только у одного из гибридных фермионов. Именно такая модель была описана качественно во Введении 1, в таком пределе мы будем работать далее.

Приведем также выражения для мацубаровской функции Грина, необходимой для вычислений при ненулевой температуре:

$$G_{d,f}^{\mathrm{M}}(i\epsilon_m,\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+})(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-})} \begin{pmatrix} i\epsilon_m - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} & \theta \\ \bar{\theta} & i\epsilon_m - \xi_{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Для удобства в дальнейшем будет полезно привести матрицу, стоящую под интегралом в сумме (1) и (4), к диагональному виду:

$$\mathcal{H}_{d,f} = \begin{pmatrix} \xi_{\boldsymbol{p}} & \theta \\ \bar{\theta} & \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_{\pm} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\boldsymbol{p},+} & 0 \\ 0 & \epsilon_{\boldsymbol{p},-} \end{pmatrix} = S^{-1}\mathcal{H}_{d,f}S. \tag{10}$$

$\mathcal{H}_{\pm}$ диагональна в базисе гибридов, а мацубаровская функция Грина будет записана как

$$G_{\pm}^{M}(i\epsilon_m,\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-}} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Далее мы будем опускать нижний индекс и обозначать её как $G_{\pm}^{M} \equiv G_0^{M}$.

Нетрудно проверить, что соотношению (10) удовлетворяет матрица

$$S = \frac{1}{\sqrt{a^2 + \theta\bar{\theta}}} \begin{pmatrix} a & -\theta \\ \bar{\theta} & a \end{pmatrix}, \tag{12}$$

где для краткости был введён параметр

$$a = \epsilon_{\boldsymbol{p},+} - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} = \frac{1-\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}} + \sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi_{\boldsymbol{p}}\right)^2 + \bar{\theta}\theta}. \tag{13}$$

2.2 Учет влияния беспорядка

2.2.1 Потенциал примесей

Поскольку нас интересует низкотемпературная асимптотика проводимости, рассмотрим в качестве основного механизма переноса заряда рассеяние на примесях и дефектах решетки. Электрон-фононным и прочими взаимодействиями, кроме собственно гибридизации, пренебрежем. Будем также считать, что примеси немагнитные и их потенциал диагонален в базисе гибридов:

$$H_{\text{imp}} = \int d^3\boldsymbol{r}\bar{\psi}(\boldsymbol{r}) \begin{pmatrix} V_+(\boldsymbol{r}) & 0 \\ 0 & V_-(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r}) = \int (d^3\boldsymbol{k})\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\psi_{\boldsymbol{k}'}, \tag{14}$$

где мы сделали преобразование Фурье и ввели матрицу

$$\hat{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = \begin{pmatrix} V_+(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') & 0 \\ 0 & V_-(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Пусть взаимодействие со всеми дефектами описывается одинаковой функцией $v_\pm(\boldsymbol{r})$, а их координаты $\boldsymbol{r}_i$ случайны и независимы:

$$V_\pm(\boldsymbol{r}) = \sum_j v_\pm(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j). \tag{16}$$

Так как диаграммы удобнее всего писать в частотно-импульсном представлении, перейдем к

$$V_\pm(\boldsymbol{p}) = \sum_j \int d^3\boldsymbol{r} v_\pm(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j)e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} = \sum_j e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}_j}\int d^3\boldsymbol{r} v_\pm(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}} = \sum_j e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}_j}v_\pm(\boldsymbol{p}). \tag{17}$$

Рассмотрим простейший случай точечных примесях, то есть $v_\pm(\boldsymbol{r}) = v_{0,\pm}\delta(\boldsymbol{r})$ и $v_\pm(\boldsymbol{p}) = v_{0,\pm}$. Усреднение $V_\pm(\boldsymbol{p})$ по положению включений выполняется с помощью

$$\sum_j \left\langle e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}_j}\right\rangle = \frac{1}{V}\sum_j \int d^3\boldsymbol{r}_j e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}_j} = (2\pi)^3 n_0\delta(\boldsymbol{p}), \tag{18}$$

где V — объем системы, $n_0 = N/V$ — концентрация примесей ($N \gg 1$). Из равенства (18) можно получить полезные следствия для $\langle V_\pm(\boldsymbol{p})V_\pm(\boldsymbol{p}')\rangle$. Например, когда электрон рассеивается на разных центрах, усреднение по координатам можно проводить независимо, и мы получим

$$\sum_{j\neq k}\left\langle e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{r}_j}e^{i(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_k}\right\rangle = \sum_j\left\langle e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{r}_j}\right\rangle\sum_k\left\langle e^{i(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_k}\right\rangle \approx (2\pi)^6 n_0^2\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}_1). \tag{19}$$

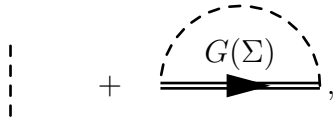
При двукратном рассеянии на одной и той же примеси справедлив тот же результат (18):

$$\sum_j\left\langle e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\boldsymbol{r}_j}e^{i(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_j}\right\rangle = \sum_j\left\langle e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_j}\right\rangle = (2\pi)^3 n_0\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'). \tag{20}$$

Видно, что при малой концентрации дефектов основной вклад вносят процессы с повторным рассеянием на том же центре.

Стоит сделать несколько замечаний о формуле (15). Мы выбрали такую форму потенциала, поскольку она существенно облегчает выкладки. Если бы $\hat{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ была диагональна в базисе исходных фермионов, что можно предположить из анализа симметрий в процессе рассеяния, при вычислении собственно-энергетической части

диагональность была бы нарушена из-за вида функции Грина. Физический смысл возникающих при этом недиагональных членов неясен, а значит, надо решать уравнение самосогласования на собственно-энергетическую часть

Σ = 

, (21)

где жирной линией обозначена функция Грина, уже учитывающая Σ, пунктиром — примесная линия. При использовании борновского приближения, то есть пренебрежении процессами многократного возвращения электрона к данному дефекту, такая диаграмма позволяет учесть все процессы без пересечения примесных линий. В простом случае уравнение (21) решается подстановкой усредненной функции Грина в виде

$$\langle G(\epsilon, \boldsymbol{p})\rangle = \frac{1}{\epsilon - \xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\tau}\mathrm{sgn}\epsilon}, \tag{22}$$

но для полной матрицы G этот анзац не подойдет. Мы предполагаем, что разрешение (21) для случая недиагональной функции Грина приведет к тем же ответам, что будут возникать при работе с матрицей вида (15), однако проверка этой гипотезы оставлена для дальнейшей работы.

2.2.2 Усреднение функции Грина по беспорядку

Запишем уравнение Дайсона для мацубаровских функций Грина:

$$\left(G^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})\right)^{-1} = \left(G_0^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})\right)^{-1} - \left\langle \Sigma^M \right\rangle = \begin{pmatrix} i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+} - \Sigma_{11}^M & 0 \\ 0 & i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-} - \Sigma_{22}^M \end{pmatrix}, \tag{23}$$

где $G_0^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})$ — функция Грина системы до учета потенциала примесей (11), $\left\langle \Sigma^M \right\rangle$ – собственно-энергетическая часть с примесными линиями после усреднения, Σ_{ij}^M – соответствующие элементы этой матрицы. Наконец, получим усредненную по примесям мацубаровскую функцию Грина:

$$G^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+} - \Sigma_{11}^M} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-} - \Sigma_{22}^M} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

В первом порядке собственная энергетическая часть выглядит как одиночная примесная линия (см. (21)). Используя (18) для усреднения по положению дефектов, получим сразу же

$$\left\langle \left(\Sigma^M\right)^{(1)} \right\rangle = \begin{pmatrix} n_{0,+}v_{0,+}^2 & 0 \\ 0 & n_{0,-}v_{0,-}^2 \end{pmatrix}.$$

Эта поправка оказалась действительной, а её физический смысл заключается в сдвиге химического потенциала. Будем считать вклад первого порядка малым по сравнению с соответствующими параметрами задачи.

Во втором порядке доминируют диаграммы вида

$$\int (d^3\boldsymbol{k}_1)\hat{V}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_1)G_0^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{k}_1)\hat{V}(\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}'). \tag{25}$$

Выполняя усреднение по примесям так, как было описано в предыдущем подразделе, получаем сразу же

$$\left\langle \left(\Sigma^M\right)^{(2)} \right\rangle = \int (d^3\boldsymbol{k}_1) \begin{pmatrix} \frac{n_{0,+}v_{0,+}^2}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{k},+}} & 0 \\ 0 & \frac{n_{0,-}v_{0,-}^2}{i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{k},-}} \end{pmatrix}. \tag{26}$$

В случае обычного ферми-газа эта поправка имела вид логарифмически расходящейся действительной части и конечной мнимой, пропорциональной обратному времени рассеяния. Мы ожидаем похожих результатов и в случае изучаемой системы.

Как уже было сказано, диаграммами с тремя и более возвращениями электрона на одну и ту же примесь будем пренебрегать. Известно, что диаграммы с пересекающимися примесными линиями малы по параметру $(p_F l)^{-1} \ll 1$ или, эквивалентно, $E_F \tau \ll 1$, где p_F, E_F — импульс и энергия Ферми электрона соответственно, l, τ — длина и время свободного пробега (то есть от столкновения до столкновения с примесью). Будем пока считать, что это условие выполняется в нашем случае, а соотношение через параметры системы получим во время вычисления проводимости.

2.3 Уравнение самосогласования

Для получения выражения (4) для эффективного взаимодействия между частицами мы положили параметр гибридизации θ константой. Однако для некоторых эффектов может оказаться важной зависимость параметра θ от температуры. Чтобы её найти, запишем действие в мнимом времени:

$$S\left[\bar{\psi},\psi\right] = \int_0^\beta d\tau \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \bar{\psi}(\boldsymbol{p},\tau) \left(\sigma_0 \partial_\tau + \mathcal{H}_0(\boldsymbol{p})\right) \psi(\boldsymbol{p},\tau) + U \int_0^\beta d\tau \int d^3\boldsymbol{r} \bar{\psi}_d \psi_d \bar{\psi}_f \psi_f, \quad (27)$$

где $\tau \in [0, \beta]$, $\beta = 1/T$ — обратная температура, σ_0 — единичная матрица 2×2, а $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{p})$ — матрица из формулы (1), переписанной в виде $H_0 = \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \bar{\psi} \mathcal{H}_0(\boldsymbol{p}) \psi$. После преобразования Хаббарда-Стратоновича (3) получим

$$S\left[\bar{\psi},\psi\right] = \int_0^\beta d\tau \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \bar{\psi}(\boldsymbol{p},\tau) \left(\sigma_0 \partial_\tau + \mathcal{H}_0(\boldsymbol{p}) + \mathcal{H}_{\text{int}}\left[\theta\right](\boldsymbol{p})\right) \psi(\boldsymbol{p},\tau) + \int_0^\beta d\tau \frac{\theta\bar{\theta}}{U}, \quad (28)$$

где

$$\mathcal{H}_{\text{int}}\left[\theta\right](\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ \bar{\theta} & 0 \end{pmatrix}. \quad (29)$$

После интегрирования по фермионным полям и перехода от интеграла по τ к сумме по мацубаровским частотам получим эффективное действие:

$$S_{\text{eff}}\left[\theta\right] = \sum_{\epsilon_m} \left(\frac{\theta\bar{\theta}}{U} + \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \text{Tr} \ln \left(1 - G^M \mathcal{H}_{\text{int}}\left[\theta\right]\right) \right), \quad (30)$$

в котором

$$G^M(i\epsilon_m, \boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i\epsilon_m - \xi_{\boldsymbol{p}}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\epsilon_m - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}}} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Для получения уравнения на седловую точку, определяющую состояние системы, проварьируем эффективное действие по $\bar{\theta}$:

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta\bar{\theta}} = 0 \;\Rightarrow\; \theta = UT \sum_{\epsilon_m} \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \text{Tr}\left(\sigma_- G^M_{[\theta]}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})\right). \quad (32)$$

В этом выражении

$$\sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad G^M_{[\theta]}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p}) = \left(i\epsilon_m - \mathcal{H}_0(\boldsymbol{p}) - \mathcal{H}_{\text{int}}\left[\theta\right](\boldsymbol{p})\right)^{-1}. \quad (33)$$

Функция $G^M_{[\theta]}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})$ оказалась равна уже введенной $G^{\mathrm{M}}_{d,f}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})$ в формуле (9). Необходимый нам след матрицы $\sigma_- G^M_{[\theta]}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})$ находится элементарно:

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_- G^M_{[\theta]}(i\epsilon_m, \boldsymbol{p})\right) = \frac{\theta}{(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+})(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-})}. \tag{34}$$

Сумма по мацубаровским частотам вычисляется с помощью

$$T\sum_{\epsilon_m} \frac{1}{(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},+})(i\epsilon_m - \epsilon_{\boldsymbol{p},-})} = \frac{n_F\left(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}\right) - n_F\left(\epsilon_{\boldsymbol{p},-}\right)}{\epsilon_{\boldsymbol{p},-} - \epsilon_{\boldsymbol{p},+}}, \quad n_F(\epsilon) = \frac{1}{1+\exp\left(\beta\epsilon\right)}. \tag{35}$$

Наконец, мы приходим к такому уравнению самосогласования:

$$\theta = U\theta \int \left(d^3\boldsymbol{p}\right) \frac{n_F\left(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}\right) - n_F\left(\epsilon_{\boldsymbol{p},-}\right)}{\epsilon_{\boldsymbol{p},-} - \epsilon_{\boldsymbol{p},+}}. \tag{36}$$

3 Расчет проводимости

Найдем линейный отклик тока на внешнее электрическое поле, введенное в гамильтониан через векторный потенциал $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$:

$$H = \int \frac{1}{2m}\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\right)^2 \psi(\boldsymbol{r}, t)d^3\boldsymbol{r}. \tag{37}$$

Будем считать внешнее поле и соответствующий отклик малыми. Разложим гамильтониан до первого порядка $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$:

$$H \approx H_0 + \int \frac{i\hbar e}{2mc}\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)\left(\nabla\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\nabla\right)\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3\boldsymbol{r}. \tag{38}$$

Из квантовой механики известен вид оператора тока:

$$\widehat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}, t) = \underbrace{\frac{e\hbar}{2m}(-i\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)\nabla\psi(\boldsymbol{r}, t) + \mathrm{h.c.})}_{\boldsymbol{j}^{(0)}} \underbrace{-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)}_{\boldsymbol{j}^{(1)}}, \tag{39}$$

где h.c. означает эрмитово сопряжение. Первое слагаемое $\boldsymbol{j}^{(0)}$ представляет собой градиентный вклад, не содержащий малого параметра, что выражено верхним индексом. Второй член $\boldsymbol{j}^{(1)}$ диамагнитный, и в нем уже есть малость соответствующего порядка. Производя интегрирование в (38) по частям, перепишем гамильтониан:

$$H = H_0 + H_{\mathrm{int}}, \quad H_{\mathrm{int}} = -\frac{1}{c}\int \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{j}^{(0)}(\boldsymbol{r}, t)d^3\boldsymbol{r}. \tag{40}$$

Если мы хотим считать среднее оператора тока по основному состоянию системы с учетом взаимодействия до первого порядка по $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$, второе слагаемое можно усреднить сразу, без учета H_{int}:

$$\langle\boldsymbol{j}\rangle = \left\langle\boldsymbol{j}^{(0)}\right\rangle_H + \left\langle\boldsymbol{j}^{(1)}\right\rangle_{H_0} = \left\langle\boldsymbol{j}^{(0)}\right\rangle_H - \frac{ne}{mc}\boldsymbol{A}, \tag{41}$$

где введена n — электронная плотность, а в первом придется воспользоваться формулой Кубо

$$\left\langle j^{(0)}_\alpha(i\omega_n, \boldsymbol{r})\right\rangle_H = -\frac{1}{c}\int d^3\boldsymbol{r}' A_\beta(\boldsymbol{r}')\Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'), \tag{42}$$

в которой

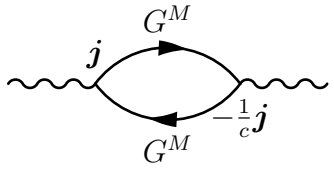
$$\Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = -\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n\tau}\left\langle T_\tau j_\alpha^{(0)}(\boldsymbol{r},\tau) j_\beta^{(0)}(\boldsymbol{r}',0)\right\rangle d\tau. \tag{43}$$

Формула написана сразу в мацубаровском представлении, поэтому найденную таким образом проводимость нужно будет аналитически продолжить на действительную ось. Перепишем (43) через сумму по мацубаровским частотам:

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = e^2T\sum_{\epsilon_m=(2m+1)\pi T} \mathrm{Tr}\left(G_0^M(i\epsilon_m+i\omega_n)\hat{v}_\alpha(\boldsymbol{r})G_0^M(i\epsilon_m)\hat{v}_\beta(\boldsymbol{r}')\right), \tag{44}$$

где G_0^M — мацубаровская функция Грина системы в отсутствие беспорядка, $\widehat{\boldsymbol{v}}$ — оператор скорости частицы. (44) можно представить в форме диаграммы:

$\Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ =



. (45)

Чтобы учесть влияние примесей, усредним левую и правую части (44) по их положению. Так как мы рассматриваем точечные дефекты с потенциалом $v(\boldsymbol{r}) = v_0\delta(\boldsymbol{r})$, примесные линии от $\boldsymbol{p}$ не зависят, то есть по ним может передаваться любой импульс. Если примесная линия соединяет верхнюю и нижнюю функцию Грина в диаграмме (45), интегралы по импульсу правой и левой вершин независимы, и вся диаграмма равна нулю из-за нечетности по $\boldsymbol{p}$. Именно поэтому лестничную поправку к вершине считать не нужно, и усреднение можно перенести на каждый множитель в формуле (44):

$$\left\langle\Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right\rangle = e^2T\sum_{\varepsilon_m=(2m+1)\pi T} \mathrm{Tr}\left(\left\langle G^M(i\epsilon_m+i\omega_n)\right\rangle \hat{v}_\alpha(\boldsymbol{r})\left\langle G^M(i\epsilon_m)\right\rangle \hat{v}_\beta(\boldsymbol{r}')\right). \tag{46}$$

3.1 Проводимость системы в отсутствие гибридизации

Начнем изучение нашей модели со случая $\theta = 0$. Ранее мы получали уравнение (26) для собственно-энергетической части в мацубаровском представлении, которое очевидным образом переписывается для запаздывающей (опережающей) функции Грина. Нетрудно увидеть, что при отсутствии гибридизации легкие и тяжелые фермионы абсолютно независимы. Будем считать, что обе ветви заполнены до уровня Ферми. Возьмем также для простоты $n_{0,\pm} = n_0$, $v_{0,\pm} = v_0$. Выведем формулу Друде для тяжелых электронов методом, описанным в этой главе, внимательно следя за зависимостью от α. Ответ для легкой ветви получится подстановкой $\alpha = 1$.

Первым порядком в собственно-энергетической части можно пренебречь, а во втором порядке будет:

$$\left\langle\left(\Sigma^{R(A)}\right)^{(2)}\right\rangle = n_0v_0^2\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{\epsilon-\alpha\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)\pm i0}. \tag{47}$$

Индекс $R(A)$ подчеркивает, что соответствующая диаграмма вычислялась с запаздывающей (опережающей) функцией Грина. Сделаем стандартное приближение для интегралов такого типа: перейдем к переменной $\xi = \frac{p^2}{2m} - \mu$, используя

$$\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi p^2dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{m\sqrt{2m\left(\xi+\mu\right)}d\xi}{2\pi^2\hbar^3} \approx \frac{m\sqrt{2m\mu}d\xi}{2\pi^2\hbar^3} = \nu_0d\xi, \tag{48}$$

где плотность состояний $\nu(\xi)$ заменена константой, определяемой на поверхности Ферми. Получим:

$$\left\langle \left(\Sigma^{R(A)}\right)^{(2)} \right\rangle = \frac{n_0 v_0^2 \nu_0}{\alpha} \int \frac{d\alpha\xi}{\epsilon - \alpha\xi \pm i0} \approx \mp \frac{i}{2\alpha\tau}. \tag{49}$$

Здесь введено обратное время рассеяния: $\frac{1}{\tau} = 2\pi n_0 v_0^2 \nu_0$. Выражение для $\left\langle (\Sigma)^{(2)} \right\rangle$ имеет такой вид, что на неё прямо переносятся аналитические свойства функции Грина, потому $\left\langle \left(\Sigma^{M}\right)^{(2)} \right\rangle$ можно получить аналитическим продолжением с $\left\langle \left(\Sigma^{R}\right)^{(2)} \right\rangle$ в верхней полуплоскости и с $\left\langle \left(\Sigma^{A}\right)^{(2)} \right\rangle$ в нижней:

$$\left\langle \Sigma^{(2)} \right\rangle = -\frac{i}{2\tau} \mathrm{sgn}\epsilon_m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix}. \tag{50}$$

Запишем выражение для усреднённого коррелятора, учитывая явный вид функции Грина электронного ферми-газа и $\boldsymbol{v} = \alpha \boldsymbol{p}/m$:

$$\left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) \right\rangle = \frac{e^2 T}{m^2} \sum_{\epsilon_k} \int \frac{\alpha^2 p_\alpha p_\beta (d^3\boldsymbol{p})}{\left[i(\epsilon_k + \omega_n) - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\alpha\tau}\mathrm{sgn}(\epsilon_k + \omega_n)\right]\left[i\epsilon_k - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\alpha\tau}\mathrm{sgn}\epsilon_k\right]}. \tag{51}$$

Через него можно выразить соответствующий вклад в проводимость, вспомнив, что электрическое поле пропорционально производной векторного потенциала по времени:

$$\sigma^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) = \frac{\left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) \right\rangle - \left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(0) \right\rangle}{\omega_n}. \tag{52}$$

Мы вычли $\left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(0) \right\rangle$, чтобы правильно учесть диамагнитный член в токе, а также убрать расходимость в (51):

$$\begin{aligned} \left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) \right\rangle - \left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(0) \right\rangle = \frac{e^2\alpha^2 T}{m^2} \sum_{\epsilon_k} \int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3} \frac{p_\alpha p_\beta}{i\epsilon_k - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\tau\alpha}\mathrm{sgn}\,\epsilon_k} \times \\ \times \left[\frac{1}{i(\epsilon_k + \omega_n) - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\tau\alpha}\mathrm{sgn}(\epsilon_k + \omega_n)} - \frac{1}{i\epsilon_k - \alpha\xi_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{2\tau\alpha}\mathrm{sgn}\epsilon_k} \right] \end{aligned} \tag{53}$$

Снова перейдем к интегрированию по отклонению от ферми-поверхности. В изотропном случае также можно сразу усреднить по сфере $\langle p_\alpha p_\beta \rangle_o = \frac{1}{3} p^2 \delta_{\alpha\beta}$ и положить здесь и в плотности состояний $p = p_F = m v_F$:

$$\begin{aligned} \left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) \right\rangle - \left\langle \Pi^f_{\alpha\beta}(0) \right\rangle &\approx \frac{\alpha e^2 v_F^2 \nu_0}{3} \delta_{\alpha\beta} T \sum_{\epsilon_k} \int \frac{d\xi}{i\epsilon_k - \xi + \frac{i}{2\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}\,\epsilon_k} \times \\ &\times \left[\frac{1}{i(\epsilon_k + \omega_n) - \xi + \frac{i}{2\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}(\epsilon_k + \omega_n)} - \frac{1}{i\epsilon_k - \xi + \frac{i}{2\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}\,\epsilon_k} \right] = \\ &= 2\pi T \frac{\alpha n e^2}{m} \delta_{\alpha\beta} \sum_{\epsilon_k = (2k+1)\pi T} \frac{\Theta(\epsilon_k + \omega_n) - \Theta(\epsilon_k)}{\omega_n + \frac{1}{2\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}(\epsilon_k + \omega_n) - \frac{1}{2\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}\,\epsilon_k} = \\ &= \frac{\alpha n e^2}{m} \delta_{\alpha\beta} \frac{|\omega_n|}{\omega_n + \frac{1}{\alpha\tau}\,\mathrm{sgn}\,\omega_n}, \end{aligned} \tag{54}$$

где n — плотность электронного газа. Аналитически продолжим мацубаровское выражение для проводимости на действительную ось:

$$\sigma^f_{\alpha\beta}(i\omega_n) = \frac{\alpha n e^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\frac{\mathrm{sgn}\omega_n}{\omega_n + \frac{1}{\alpha\tau}\mathrm{sgn}\omega_n} = \frac{\alpha n e^2}{m}\frac{\delta_{\alpha\beta}}{|\omega_n| + \frac{1}{\alpha\tau}}, \qquad \sigma^f_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m}\frac{\alpha^2\delta_{\alpha\beta}}{1 - i\alpha\omega\tau}. \quad (55)$$

Полная проводимость тогда равна

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m}\delta_{\alpha\beta}\left(\frac{1}{1-i\omega\tau} + \frac{\alpha^2}{1-i\alpha\omega\tau}\right).$$

Видно, что вклад от тяжелых электронов мал по параметру α^2 по сравнению с легкими. В отсутствие гибридизации основной вклад в сопротивление дает именно эта ветвь, как мы и предполагали.

3.2 Статическая проводимость

Упростим выражение для $\langle \Pi_{\alpha\beta}(i\omega_n, \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\rangle$, пользуясь аналитическими свойствами функции Грина:

$$G^R(z) = -\int \frac{d\epsilon}{\pi}\frac{\Im G^R(\epsilon)}{z - \epsilon + i0}, \qquad G^M(i\epsilon_n) = \int \frac{d\epsilon}{\pi}\frac{\Im G^R(\epsilon)}{\epsilon - i\epsilon_n}, \quad (56)$$

$$\Pi(i\omega_m) = e^2T\sum_{\epsilon_n}\mathrm{Tr}\left[G^M(i\epsilon_n + i\omega_m)\hat{v}G^M(i\epsilon_n)\hat{v}\right] = e^2T\sum_{\epsilon_n}\int\frac{d\epsilon d\epsilon'}{\pi^2}\frac{\mathrm{Tr}\left[\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\Im G^R(\epsilon')\hat{v}\right]}{(\epsilon - i\epsilon_n - i\omega_m)(\epsilon' - i\epsilon_n)} = \\ = \frac{e^2}{\pi^2}\int d\epsilon d\epsilon' \mathrm{Tr}\left[\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\Im G^R(\epsilon')\hat{v}\right]\frac{n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon' - i\omega_m}. \quad (57)$$

В последней строчке $n_F = \frac{1}{2}\left(1 - \tanh\frac{\epsilon}{2T}\right)$ — распределение Ферми. Выполняя аналитическое продолжение на действительную ось, получим:

$$\Pi(\omega) = \frac{e^2}{\pi^2}\int d\epsilon d\epsilon' \mathrm{Tr}\left[\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\Im G^R(\epsilon')\hat{v}\right]\frac{n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon' - \omega - i0}. \quad (58)$$

Для проводимости справедливо:

$$\sigma(\omega) = -\frac{\Pi(\omega) - \Pi(0)}{i\omega} \quad \Rightarrow \quad \Re\sigma(\omega) = -\Im\frac{\Pi(\omega) - \Pi(0)}{\omega}. \quad (59)$$

С помощью формулы Сохоцкого можно упростить:

$$\Re\sigma(\omega) = -\frac{e^2}{\pi\omega}\int d\epsilon \mathrm{Tr}\left[\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\Im G^R(\epsilon - \omega)\hat{v}\right]\left(n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon - \omega)\right). \quad (60)$$

Для проводимости выполняется $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$, откуда следует ее вещественность при $\omega = 0$. Переходя к пределу $\omega \to 0$ в выражении выше, найдем:

$$\sigma(0) = -\frac{e^2}{\pi}\int d\epsilon \mathrm{Tr}\left[\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\Im G^R(\epsilon)\hat{v}\right]\frac{\partial n_F}{\partial\epsilon}. \quad (61)$$

В этом выражении стоят функции Грина, усредненные по беспорядку. В них входит собственно-энергетическая часть, которая дается (26). Положим для простоты $v_{0,+} = 0$, $v_{0,-} = v_0$ и $n_{0,-} = n_0$ и запишем ненулевой член сразу через $\xi = p^2/(2m) - \mu$:

$$\left\langle \left(\Sigma^R\right)^{(2)}\right\rangle = n_0 v_0^2 \nu_0 \int_{-\mu}^{\infty}\frac{d\xi}{\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{p},-} + i0}. \quad (62)$$

Вычислим интеграл, учитывая, что теперь ферми-поверхность располагается в $\xi = \sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}$:

$$\begin{aligned}\int_{-\mu}^{\infty}\frac{d\xi}{\epsilon-\left(\frac{1+\alpha}{2}\xi-\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar\theta\theta}\right)+i0}=\int_{-\mu}^{\infty}\frac{d\xi}{\epsilon-\frac{\alpha\left(\xi-\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)\left(\xi+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)}{\frac{1+\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar\theta\theta}}+i0}=\\ =\int_{-\mu-\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}}^{\infty}\frac{dz}{\epsilon-\frac{\alpha\left(z+2\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)}{\frac{1+\alpha}{2}\left(z+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\left(z+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)^2+\bar\theta\theta}}z+i0}\approx\int_{-\mu-\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}}^{\infty}\frac{dz}{\epsilon-\frac{2\alpha}{1+\alpha}z+i0}=\\ =-\frac{1+\alpha}{2\alpha}\int_{-\mu-\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}}^{\infty}\frac{dz}{z-\frac{1+\alpha}{2\alpha}\epsilon-i0}=-\frac{1+\alpha}{2\alpha}i\pi\end{aligned} \tag{63}$$

Таким образом,

$$\left\langle\left(\Sigma^R\right)^{(2)}\right\rangle=-\frac{i}{\tau},\quad\frac{1}{\tau}=\frac{1+\alpha}{2\alpha}\pi n_0 v_0^2\nu_0. \tag{64}$$

Вспомним выражение для функции Грина в базисе гибридов, чтобы найти ее мнимую часть:

$$G^R_{\pm}(\epsilon,\boldsymbol{p})=\begin{pmatrix}\frac{1}{\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},+}+i0} & 0\\ 0 & \frac{1}{\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-}+\frac{i}{\tau}}\end{pmatrix}\Rightarrow\Im G^R_{\pm}(\epsilon,\boldsymbol{p})=\begin{pmatrix}-\pi\delta(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},+}) & 0\\ 0 & -\frac{1/\tau}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}\end{pmatrix}. \tag{65}$$

В базисе d,f-электронов оператор скорости имел вид:

$$\hat{v_\beta}^{d,f}=\begin{pmatrix}\frac{p_\beta}{m} & 0\\ 0 & \alpha\frac{p_\beta}{m}\end{pmatrix}=\frac{p_\beta}{m}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & \alpha\end{pmatrix}. \tag{66}$$

Перепишем его в базисе гибридов, используя матрицу (12):

$$\hat{v_\beta}^{\pm}=S^{-1}\hat{v_\beta}^{d,f}S=\frac{p_\beta}{m}\cdot\frac{1}{a^2+\theta\bar\theta}\begin{pmatrix}a^2+\alpha\bar\theta\theta & -a\theta(1-\alpha)\\ -\bar\theta a(1-\alpha) & \bar\theta\theta+\alpha a^2\end{pmatrix}. \tag{67}$$

Вычислим одно из произведений в выражении (61):

$$\Im G^R_{\pm}\hat{v_\beta}^{\pm}=\frac{p_\beta}{m}\cdot\frac{1}{a^2+\theta\bar\theta}\begin{pmatrix}-\pi\left(a^2+\alpha\bar\theta\theta\right)\delta(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},+}) & \pi a\theta(1-\alpha)\delta(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},+})\\ \frac{a\bar\theta(1-\alpha)1/\tau}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2} & -\frac{\left(\bar\theta\theta+\alpha a^2\right)1/\tau}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}\end{pmatrix}. \tag{68}$$

Осталось вычислить след от квадрата этой матрицы. Основной вклад дадут два слагаемых различного вида. Их физический смысл будет объяснен далее:

$$\begin{aligned}\sigma(0)=-\frac{e^2}{\pi}\int d\epsilon\frac{\partial n_F}{\partial\epsilon}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{\hat{p}_\beta\hat{p}_\alpha}{m^2}\cdot\frac{1}{\left((\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2+\theta\bar\theta\right)^2}\left[\left(\frac{\left(\bar\theta\theta+\alpha a^2\right)1/\tau}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}\right)^2+\right.\\ \left.+2\pi\delta(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},+})\frac{\bar\theta\theta(1-\alpha)^2(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}1/\tau\right].\end{aligned} \tag{69}$$

Перейдем к интегрированию по ξ:

$$\begin{aligned}\sigma(0)=\ -\frac{e^2}{3\pi}\frac{2\nu_0}{m\sqrt{\mu}}\left[\int d\epsilon\frac{\partial n_F}{\partial\epsilon}\int d\xi\frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{\left((\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2+\theta\bar\theta\right)^2}\left(\frac{\alpha(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2+\bar\theta\theta}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}1/\tau\right)^2+\right.\\ \left.+2\pi\int d\xi\ \frac{\partial n_F}{\partial\epsilon}\Big|_{\epsilon=\epsilon_{\boldsymbol{p},+}}\frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{\left((\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2+\theta\bar\theta\right)^2}\frac{\bar\theta\theta(1-\alpha)^2(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\alpha\xi)^2 1/\tau}{(\epsilon_{\boldsymbol{p},+}-\epsilon_{\boldsymbol{p},-})^2+1/\tau^2}\right]\end{aligned} \tag{70}$$

Подставим $\epsilon_{\boldsymbol{p},\pm}$ и запишем выражение для проводимости в компактной форме:

$$\sigma(0)=\frac{e^2}{3\pi}\frac{2\nu_0}{m\sqrt{\mu}}\left(I_1+2\pi I_2\right), \tag{71}$$

где введены такие обозначения:

$$\begin{cases} I_1 = -\int d\epsilon \frac{\partial n_F}{\partial \epsilon} \int d\xi \frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{\left(\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar{\theta}\theta}\right)^2+\theta\bar{\theta}\right)^2} \left(\frac{\alpha\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar{\theta}\theta}\right)^2+\bar{\theta}\theta}{\left(\epsilon-\frac{1+\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar{\theta}\theta}\right)^2+1/\tau^2} 1/\tau\right)^2 \\ I_2 = -\int d\xi \left.\frac{\partial n_F}{\partial \epsilon}\right|_{\epsilon=\epsilon_{\boldsymbol{p},+}} \frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{4\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+4\bar{\theta}\theta} \cdot \frac{\bar{\theta}\theta(1-\alpha)^2 1/\tau}{4\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+4\bar{\theta}\theta+1/\tau^2} \end{cases} \tag{72}$$

I_1 отвечает за мало зависящий от температуры вклад заполненной ветви, а I_2 — за вклад активационного вида. Так как у I_1 есть ферми-поверхность, его оценка довольно проста: заменяем производную ферми-распределения дельта-функцией, а затем раскладываем оставшееся вблизи $\xi = \sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}$:

$$\begin{aligned} I_1 &\approx \frac{\left(\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}+\mu\right)^{3/2}}{\left(\frac{2\alpha}{1+\alpha}\right)^2\tau^2} \int_{-\mu-\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}}^{\infty} \frac{dz}{\left(z^2+\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\right)^2\right)^2} = \\ &= \frac{\left(\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}+\mu\right)^{3/2}}{2\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\right)^3\left(\frac{2\alpha}{1+\alpha}\right)^2\tau^2} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}\right)}{\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\right)^2+\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}\right)^2} + \arctan\left(\frac{\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}}{\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}}\right)\right) \end{aligned} \tag{73}$$

Подставив τ, убедимся явно, что I_1 действительно пропорционален α^2, как подсказывают вычисления из прошлого подраздела:

$$I_1 \approx \frac{2\alpha^2}{(1+\alpha)^2} \frac{\left(\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}+\mu\right)^{3/2}}{\pi n_0 v_0^2 \nu_0} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}\right)}{\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}\right)^2+\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}\right)^2} + \arctan\left(\frac{\mu+\sqrt{\frac{\bar{\theta}\theta}{\alpha}}}{\frac{1+\alpha}{2\alpha\tau}}\right)\right) \tag{74}$$

Оценка I_2 приведена в Приложении 6.1. Она осложнена тем фактом, что максимум производной функции распределения находится вне отрезка интегрирования, а остальная подынтегральная функция немонотонна, то есть необходимо изучать перекрытие хвостов двух функций. При нулевой температуре распределение превращается в дельта-пик в области отрицательных энергий, потому $I_2 \to 0$ при $T \to 0$. При повышении температуры в область положительных энергий начинает попадать спадающий экспоненциально хвост, потому $I_2 \sim 1/T \exp(-\#/T)$. Физический смысл такого результата прозрачен: это слагаемое описывает межзонные переходы, для осуществления которых нужно затратить некоторую энергию. Именно поэтому мы называем такой вклад активационным.

Рисунок 2 проясняет происхождение и смысл каждого из слагаемых в формуле (71). На нём изображён спектр системы после гибридизации и заполнение состояний при $T = 0$. Ветвь ϵ_- имеет ферми-поверхность, поэтому даёт вклад друдевского типа. Участок спектра около поверхности Ферми до гибридизации принадлежал ветви с тяжёлым фермионом, потому этот вклад будет пропорционален α^2, как мы установили при решении задачи в отсутствие гибридизации. У ветви ϵ_+ ферми-поверхности нет, и её заселенность при низких температурах экспоненциально мала.

Построим графики сопротивления от температуры (Рисунок 3). Заметно сразу несколько особенностей, главная из которых — насыщение при низких температурах. Следующая — сопротивление может возрасти на порядки. Даже если численные оценки

на ширину плато и отношение максимального значения к минимальному не совпадут с экспериментом, хотя бы на качественном уровне получается схожее поведение. Это один из самых важных результатов данной работы.

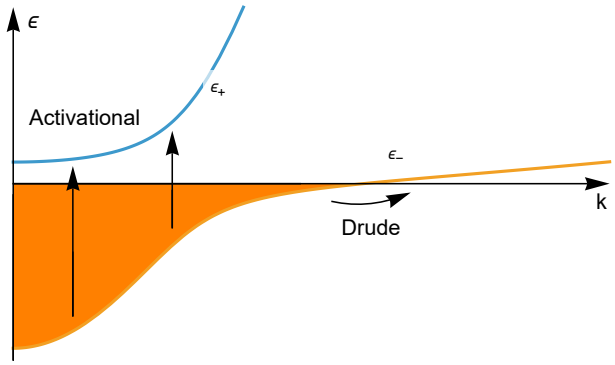
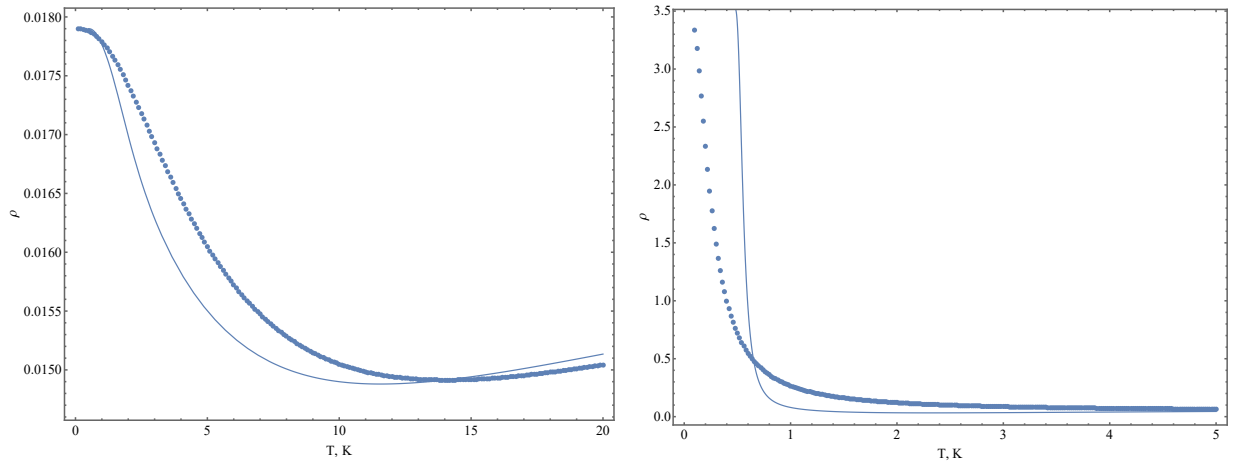
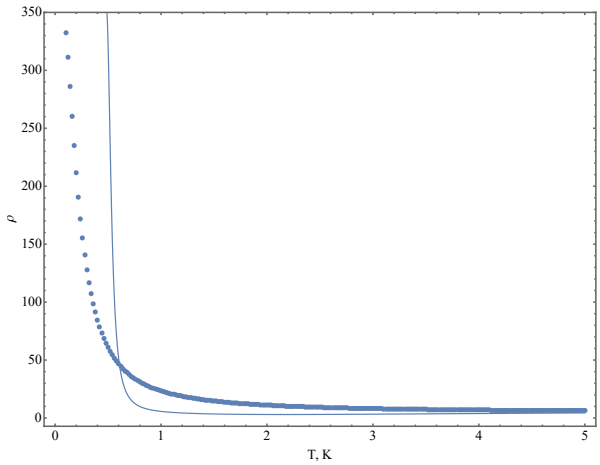


Рис. 2: Спектр системы после гибридизации. Оранжевой заливкой показаны заполненные при $T = 0$ состояния.



(a) $\tau = 0.2$

(b) $\tau = 0.002$



(c) $\tau = 0.00002$

Рис. 3: График зависимости сопротивления от температуры. Точками показан результат численного интегрирования, сплошной линией — его оценка из Приложения 6.1. Значения параметров: $\alpha = 0.005$, $\mu = 330$, $\theta = 25$ из [10].

При вычислении проводимости мы полагали параметр гибридизации θ константой, однако он зависит от температуры. Чтобы найти эту зависимость, нужно решить уравнение самосогласования (36), что может быть нетривиально в нашем случае. Это интересное направление для дальнейшего исследования, поскольку зависимость $\theta(T)$ наверняка скажется на ходе сопротивления от температуры. Например, она может погасить рост, который наблюдается на больших температурах.

4 Расчет теплоемкости

Спектр электронов в нашей системе (см. Главу 2) имеет вид

$$\epsilon_{\pm}(\boldsymbol{p}) = \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)^2 + \bar{\theta}\theta}. \tag{75}$$

Здесь знак минус отвечает заполненной ветви, а плюс — незаполненной.

Запишем выражение для большого термодинамического потенциала Ω такой системы (температура T измеряется в энергетических единицах). Полагая спектр изотропным и используя трехмерную плотность состояний $g(\epsilon) = A\sqrt{\epsilon}$, где $A = V\sqrt{2m^3}/(\pi^2\hbar^3)$ (V – объем системы), перейдем от суммирования по импульсам к интегрированию по энергии $\epsilon = p^2/(2m)$:

$$\Omega = -T\sum_{\boldsymbol{p},\pm}\ln\left[1+e^{-\frac{\epsilon_{\pm}(\boldsymbol{p})}{T}}\right] = -AT\sum_{\pm}\int_0^{\infty} d\epsilon\sqrt{\epsilon}\ln\left[1+e^{-\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}\right]. \tag{76}$$

Теплоемкость c системы даётся выражением

$$c = T\frac{\partial S}{\partial T}, \tag{77}$$

где S – энтропия,

$$S = -\frac{\partial\Omega}{\partial T} = A\sum_{\pm}\int_0^{\infty} d\epsilon\sqrt{\epsilon}\left(\ln\left[1+e^{-\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}\right] + \frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T\left(1+e^{\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}\right)}\right). \tag{78}$$

При повторном взятии производной два члена сократятся, а третий удобно оставить в форме производной от функции вида ферми-распределения:

$$c = A\sum_{\pm}\frac{\partial}{\partial T}\left(\int_0^{\infty} d\epsilon\sqrt{\epsilon}\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{1+e^{\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}}\right) = \sum_{\pm}\frac{\partial E_{\pm}}{\partial T}. \tag{79}$$

Здесь введена энергия

$$E_{\pm} = A\int_0^{\infty} d\epsilon\sqrt{\epsilon}\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{1+e^{\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}} = A\int_0^{\infty} d\epsilon\frac{f_{\pm}(\epsilon)}{1+e^{\frac{\epsilon_{\pm}(\epsilon)}{T}}}, \quad f_{\pm} = \sqrt{\epsilon}\epsilon_{\pm}(\epsilon) \tag{80}$$

При низкой температуре особенно важны точки, где выражение $\epsilon_{\pm}(\epsilon)$ меняет знак. Это происходит при $\epsilon = \mu \pm \sqrt{\bar{\theta}\theta/\alpha}$, а значит, при нулевой температуре распределение превращается в $\Theta(\mu \pm \sqrt{\bar{\theta}\theta/\alpha} - \epsilon)$, где Θ – тэта-функция Хэвисайда. Тогда для интересного нам случая $\mu < \sqrt{\bar{\theta}\theta/\alpha}$, соответствующего заполнению только одной ветви, ненулевой вклад может дать исключительно слагаемое с ϵ_-. Заметим, что такое расположение ферми-поверхностей обеспечит теплоемкости вид

$$c = c_+ + c_-, \tag{81}$$

где $c_+ \sim e^{-\Delta/T}$ — активационный член, $c_- = \gamma T + \mathcal{O}(T)$ — степенной, Δ, γ — положительные константы. Эти вклады можно оценить как (см. Приложение 6.2):

$$c^- \approx A\left(\gamma T + \nu T^3\right), \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right)\sqrt{\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}, \tag{82}$$

$$c^+ = \frac{\partial E_+}{\partial T} = A\frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{-\frac{\epsilon_+(0)}{T}}\left(\frac{T}{\epsilon'_+(0)}\right)^{3/2}\left(\frac{15}{4} + 3\frac{\epsilon_+(0)}{T} + \left(\frac{\epsilon_+(0)}{T}\right)^2\right). \tag{83}$$

Использованное для оценки степенной части разложение Зоммерфельда может быть применено при $T \lesssim T_0$, где $T_0 = \frac{2\alpha}{1+\alpha}(\mu + \sqrt{\overline{\theta}\theta/\alpha})$. Отметим, что из-за малого параметра α в числителе эта температура оказывается сильно ниже эффективной фермиевской энергии $\mu + \sqrt{\overline{\theta}\theta/\alpha}$. Значит, линейная асимптотика, полученная таким способом, корректна только в очень узком диапазоне низких температур. В рамках того же метода можно также оценить, при какой температуре значительную роль начинает играть кубический член νT^3. Это происходит, когда $\gamma \sim \nu T^2$, то есть при $T \sim \sqrt{\gamma/\nu} = T_1$. Используя найденные в Приложении значения параметров, получим

$$T_1 = \frac{T_0}{\sqrt{\frac{7\pi^2}{10}\left|\left[\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^2\left(1 + \frac{\mu}{\sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}\right) - \frac{1}{4}\right]^2 - \frac{5}{16}\right|}}. \tag{84}$$

Если T_1 оказалась больше T_0, кубическим членом можно пренебречь на всей области действия разложения Зоммерфельда. Если же $T_1 < T_0$, что наверняка реализуется в изучаемой нами области параметров ($\alpha \ll 1$, $\mu \sim \sqrt{\overline{\theta}\theta/\alpha}$), область действия линейной асимптотики теплоемкости становится еще меньше.

Стоит отметить, что оценка (84) весьма условна. При её выводе мы пренебрегли зависимостью параметра гибридизации θ от температуры и требованием постоянства числа частиц. Учтем второе введением химического потенциала $\mu_F(T)$, равного нулю при нулевой температуре по построению (см. Главу 2 с описанием модели). Запишем выражение для числа частиц N:

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu_F} = A\sum_{\pm}\int_0^\infty d\epsilon\sqrt{\epsilon}\frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon_\pm(\epsilon,T) - \mu_F(T)}{T}}}. \tag{85}$$

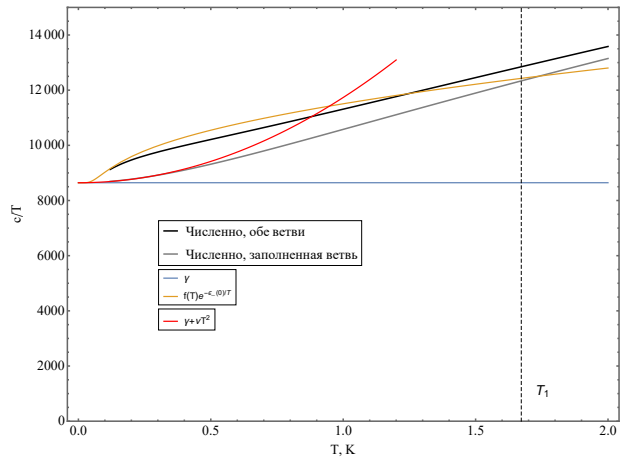
При $T = 0$ заполнена только одна ветвь, $\theta(T=0) = \theta_0$:

$$N = A\int_0^{\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}_0\theta_0}{\alpha}}} d\epsilon\sqrt{\epsilon} = \frac{2}{3}A\left(\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}_0\theta_0}{\alpha}}\right)^{3/2}. \tag{86}$$

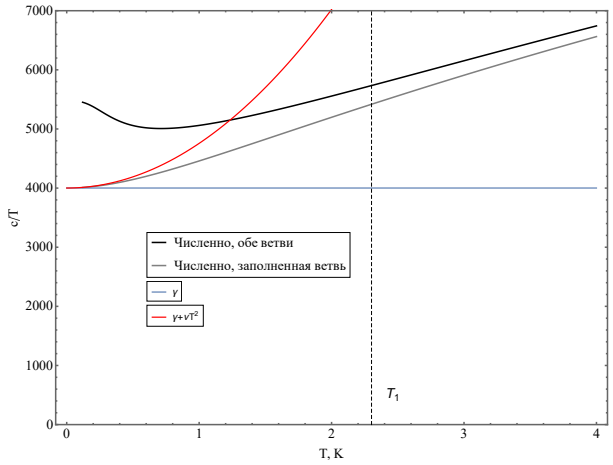
Таким образом, зависимость химического потенциала от температуры определяется из уравнения

$$\frac{2}{3}\left(\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}_0\theta_0}{\alpha}}\right)^{3/2} = \sum_{\pm}\int_0^\infty d\epsilon\sqrt{\epsilon}\frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon_\pm(\epsilon,T) - \mu_F(T)}{T}}}. \tag{87}$$

При низких температурах пренебрежение зависимостью $\mu_F(T)$ и $\theta(T)$ не повлияет на результат в главном порядке, однако для поиска поправок, необходимых для ответа



(a) $\alpha = 0.005$. Линейный участок длится до $\sim 0.2K$



(b) $\alpha = 0.01$. Линейный участок длится до $\sim 0.4K$

Рис. 4: Графики зависимости отношения теплоемкости к температуре при $\mu = 330K$, $\theta = 25K$ без учета зависимости химического потенциала от температуры. Значения взяты из оценок в статье [10].

на вопрос о величине диапазона линейности $c(T)$, нужно совместно решать уравнение самосогласования (36) и (87).

Итак, мы обнаружили, что в системе с двумя видами фермионов с сильно различающимися эффективными массами и гибридизацией между ними при низких температурах наблюдается короткий линейный участок зависимости теплоемкости от температуры. Коэффициент пропорциональности при этом получается довольно большим (см. выражение 82 с малым параметром α в знаменателе). Эти результаты качественно согласуются с данными эксперимента и являются одними из центральных в данной работе. Количественная оценка длины интервала, в котором доминирует линейное поведение, требует более аккуратного и сложного расчета, потому оставлена для дальнейшей работы.

5 Заключение

В данной работе была рассмотрена система, состоящая из двух видов фермионов с сильно различающимися массами. При понижении температуры между этими частицами возникает гибридизация, вследствие которой ферми-поверхность остается только у тяжелого гибрида. Именно он обеспечивает системе сходные с металлами низкотемпературные свойства, например, конечное сопротивление при нулевой температуре или участок линейной зависимости теплоемкости от температуры с большим угловым коэффициентом.

С помощью примесной диаграммной техники нам удалось найти зависимость сопротивления от температуры. Теоретическая кривая демонстрирует те же особенности, что и экспериментальная: рост в несколько раз при понижении температуры с выходом на узкое плато.

Помимо проводимости мы изучали теплоёмкость данной системы. При низких температурах действительно наблюдается короткий линейный участок. Удалось также вычислить угловой коэффициент зависимости, и он содержал большое по предположению отношение масс фермионов. Этот факт также качественно согласуется с экспериментом.

При количественном сравнении теории с экспериментом нужно уметь оценивать, например, длину плато или участка линейности теплоёмкости. Для этих вычислений могут стать важными зависимости параметра гибридизации, химического потенциала или эффективной массы от температуры, чем мы в данной работе пренебрегали. Мы также не задумывались о причинах отсутствия локализации и не рассматривали ферми-жидкостные эффекты. Нашей целью было изучить минимальную модель системы с нетривиальными свойствами, наблюдаемыми на эксперименте, и эта цель была достигнута. Расширение и уточнение модели могут стать предметами последующей работы.

Список литературы

[1] Priscila F. S. Rosa and Zachary Fisk. *Bulk and surface properties of SmB6*, chapter 11 in Rare-earth borides. Jenny Stanford Publishing, Singapore, October 2021.

[2] Maxim Dzero, Kai Sun, Victor Galitski, and Piers Coleman. Topological kondo insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 104:106408, Mar 2010.

[3] Steven Wolgast, Çağlı yan Kurdak, Kai Sun, J. W. Allen, Dae-Jeong Kim, and Zachary Fisk. Low-temperature surface conduction in the kondo insulator smb_6. *Phys. Rev. B*, 88:180405, Nov 2013.

[4] S. Gabáni, G. Pristáš, I. Takáčová, N. Sluchanko, K. Siemensmeyer, N. Shitsevalova, V. Filipov, and K. Flachbart. Surface and bulk components of electrical conductivity in (presumably special topological) kondo insulator smb6 at lowest temperatures. *Solid State Sciences*, 47:17–20, 2015. Special Issue: International Symposium on Boron, Borides and Related Materials, ISBB 2014, Honolulu, Hawaii.

[5] Jialiu Jiang, Shihong Li, Tong Zhang, Zhennian Sun, Z.R. Ye, Min Xu, Q.Q. Ge, S.Y. Tan, X.H. Niu, Mengyao Xia, B. Xie, Y.F. Li, Xixilydia Chen, H.H. Wen, and D.L. Feng. Observation of possible topological in-gap surface states in the kondo insulator smb6 by photoemission. *Nature communications*, 4:3010, 12 2013.

[6] N. J. Laurita, C. M. Morris, S. M. Koohpayeh, P. F. S. Rosa, W. A. Phelan, Z. Fisk, T. M. McQueen, and N. P. Armitage. Anomalous three-dimensional bulk ac conduction within the kondo gap of smb_6 single crystals. *Phys. Rev. B*, 94:165154, Oct 2016.

[7] N. Wakeham, P. F. S. Rosa, Y. Q. Wang, M. Kang, Z. Fisk, F. Ronning, and J. D. Thompson. Low-temperature conducting state in two candidate topological kondo insulators: smb_6 and $ce_3bi_4pt_3$. *Phys. Rev. B*, 94:035127, Jul 2016.

[8] B. S. Tan, Y.-T. Hsu, B. Zeng, M. Ciomaga Hatnean, N. Harrison, Z. Zhu, M. Hartstein, M. Kiourlappou, A. Srivastava, M. D. Johannes, T. P. Murphy, J.-H. Park, L. Balicas, G. G. Lonzarich, G. Balakrishnan, and Suchitra E. Sebastian. Unconventional fermi surface in an insulating state. *Science*, 349(6245):287–290, 2015.

[9] A.M. Kosevich I.M. Lifshitz. Theory of magnetic susceptibility in metals at low temperature. *JETP*, 2:636, Apr 1956.

[10] V. A. Zyuzin. De haas–van alphen effect and a giant temperature peak in the heavy fermion smb6 compound. *JETP Letters*, 120(10):766–771, November 2024.

[11] V. A. Zyuzin, P. G. Silvestrov, and E. G. Mishchenko. Spin hall edge spin polarization in a ballistic 2d electron system. *Phys. Rev. Lett.*, 99:106601, Sep 2007.

6 Приложение

6.1 Получение приближенного выражения для активационной части проводимости

$$I_2 = -\frac{\bar{\theta}\theta(1-\alpha)^2}{16\tau}\int d\xi \frac{1}{4T\cosh^2\left(\frac{\frac{1+\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi^2+\bar{\theta}\theta}}{2T}\right)}\frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi^2+\bar{\theta}\theta}\cdot\frac{1}{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi^2+\bar{\theta}\theta+1/(2\tau)^2} \tag{88}$$

$$I_2 = -\frac{1}{4T}\int d\xi e^{f(\xi)} \approx -\frac{e^{f(\xi_0)}}{4T}\sqrt{\frac{2\pi}{|f''(\xi_0)|}} \tag{89}$$

$$f(\xi) \approx \ln\left(\frac{(\xi+\mu)^{3/2}}{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi^2+\bar{\theta}\theta}\cdot\frac{1}{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi^2+\bar{\theta}\theta+1/(2\tau)^2}\right) - \frac{\frac{1+\alpha}{2}\xi+\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi\right)^2+\bar{\theta}\theta}}{T}+2\ln 2 \tag{90}$$

Предположим, что $1/\tau$ мал:

$$f'(\xi_0) \approx \frac{3}{2(\xi_0+\mu)} - \frac{(1-\alpha)^2\xi_0}{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi_0^2+\bar{\theta}\theta} - \frac{1+\alpha}{2T} - \frac{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi_0}{T\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi_0\right)^2+\bar{\theta}\theta}} = 0 \tag{91}$$

$$\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi_0^4+\xi_0^2\bar{\theta}\theta = \left[\frac{1+\alpha}{2}\xi_0^2+4T\xi_0+\frac{2(1+\alpha)}{(1-\alpha)^2}\bar{\theta}\theta\right]^2$$

$$\xi_0^4+\frac{4(\alpha+1)T}{\alpha}\xi_0^3-\xi_0^2\left(\frac{\bar{\theta}\theta-2\left(\frac{\alpha+1}{1-\alpha}\right)^2\bar{\theta}\theta-16T^2}{\alpha}\right)+\frac{16(\alpha+1)\bar{\theta}\theta T}{\alpha(1-\alpha)^2}\xi_0+\frac{1}{\alpha}\left(2\bar{\theta}\theta\frac{\alpha+1}{(1-\alpha)^2}\right)^2=0 \tag{92}$$

Первым слагаемым точно можно пренебречь из-за малости α. Переобозначим $\xi_0 = \frac{x}{T}$, предполагая, что x уже не зависит от T:

$$x^2+\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{(1-\alpha)^2}x+\frac{1}{4}\left(\bar{\theta}\theta\frac{\alpha+1}{(1-\alpha)^2}\right)^2=0 \tag{93}$$

$$x = -\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{2(1-\alpha)^2} \quad \Rightarrow \quad \xi_0 \approx -\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{2(1-\alpha)^2T} \tag{94}$$

$$f''(\xi_0) \approx -\frac{3}{2\left(\xi_0+\mu\right)^2}+\frac{(1-\alpha)^2}{\left(\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi_0^2+\bar{\theta}\theta\right)^2}\left[\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\xi_0^2-\bar{\theta}\theta-\frac{\bar{\theta}\theta\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\xi_0\right)^2+\bar{\theta}\theta}}{4T}\right] \tag{95}$$

$$f''(\xi_0) \approx -\frac{3}{2\left(\mu-\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2}+\frac{(1-\alpha)^2}{\left(\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2+\bar{\theta}\theta\right)^2}\left[\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2-\bar{\theta}\theta-\frac{\bar{\theta}\theta\sqrt{\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2+\bar{\theta}\theta}}{4T}\right] \tag{96}$$

Итоговое выражение для построения графика:

$$I_2 \approx -\sqrt{\frac{2\pi}{f''(\xi_0)}}\frac{1}{T\left[2+\exp\left(\frac{-\frac{(\alpha+1)^2\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)^2T}+\sqrt{\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2+\bar{\theta}\theta}}{T}\right)\right]}\frac{\left(\mu-\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{2(1-\alpha)^2T}\right)^{3/2}}{\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2+\bar{\theta}\theta^2}\cdot\frac{1}{\left(\frac{(\alpha+1)\bar{\theta}\theta}{4(1-\alpha)T}\right)^2+\bar{\theta}\theta+\left(\frac{1+\alpha}{4\alpha}\pi\nu\right)^2} \tag{97}$$

6.2 Получение низкотемпературной асимптотики теплоемкости

Найдем следующие поправки к степенной части $c^- = A\frac{\partial E_-}{\partial T}$ теплоемкости с помощью разложения Зоммерфельда

$$\int_0^\infty \frac{f(\epsilon)}{e^{\frac{\epsilon-\eta}{T^*}}+1}d\epsilon = \int_0^\eta f(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2 T^{*2}}{6}f'(\eta) + \frac{7\pi^4 T^{*4}}{360}f'''(\eta) + \dots, \tag{98}$$

верного для значений положительного параметра η, много бóльших температуры T^*. Чтобы применить эту формулу, разложим ϵ_- вблизи ферми-поверхности $\mu + \sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}$:

$$\epsilon_- \approx \frac{2\alpha}{1+\alpha}\left(\epsilon - \left[\mu + \sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right]\right). \tag{99}$$

Получается, в нашем случае $T^* = \frac{1+\alpha}{2\alpha}T$, $\eta = \mu + \sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}$, а условие применимости формулы записывается как $T \ll \frac{2\alpha}{1+\alpha}\left(\mu + \sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right) = T_0$. Таким образом,

$$E_- \approx \int_0^\eta f_-(\epsilon)d\epsilon + \left[\frac{\pi^2T^2}{6}\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right)^2\frac{\partial f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon} + \frac{7\pi^4T^4}{360}\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right)^4\frac{\partial^3 f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon^3}\right]_{\epsilon=\eta}. \tag{100}$$

Вычислим все производные, входящие в это выражение:

$$\left.\frac{\partial\epsilon_-}{\partial\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{1+\alpha}{2} - \left.\frac{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2(\epsilon-\mu)}{\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2(\epsilon-\mu)^2+\bar\theta\theta}}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{2\alpha}{1+\alpha} \tag{101}$$

$$\left.\frac{\partial^2\epsilon_-}{\partial\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = -\left.\frac{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\bar\theta\theta}{\left(\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2(\epsilon-\mu)^2+\bar\theta\theta\right)^{3/2}}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{-2\alpha(1-\alpha)^2}{(1+\alpha)^3\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} \tag{102}$$

$$\left.\frac{\partial^3\epsilon_-}{\partial\epsilon^3}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \left.\frac{3\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^4\bar\theta\theta(\epsilon-\mu)}{\left(\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2(\epsilon-\mu)^2+\bar\theta\theta\right)^{5/2}}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{6\alpha(1-\alpha)^4}{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}(1+\alpha)^5} \tag{103}$$

$$\left.\frac{\partial f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{\epsilon_-}{2\sqrt{\epsilon}} + \sqrt{\epsilon}\left.\frac{\partial\epsilon_-}{\partial\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{2\alpha}{1+\alpha}\sqrt{\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} \tag{104}$$

$$\frac{\partial^2 f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon^2} = -\frac{\epsilon_-}{4\epsilon^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\frac{\partial\epsilon_-}{\partial\epsilon} + \sqrt{\epsilon}\frac{\partial^2\epsilon_-}{\partial\epsilon^2} \tag{105}$$

$$\frac{\partial^3 f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon^3} = \frac{3\epsilon_-}{8\epsilon^{5/2}} - \frac{3}{4\epsilon^{3/2}}\frac{\partial\epsilon_-}{\partial\epsilon} + \frac{3}{2\sqrt{\epsilon}}\frac{\partial^2\epsilon_-}{\partial\epsilon^2} + \sqrt{\epsilon}\frac{\partial^3\epsilon_-}{\partial\epsilon^3} \tag{106}$$

$$\left.\frac{\partial^3 f_-(\epsilon)}{\partial\epsilon^3}\right|_{\epsilon=\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} = \frac{6\alpha\sqrt{\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}}}{1+\alpha}\left(\frac{\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^4}{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}} - \frac{\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^2}{2\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}} - \frac{1}{4\left(\mu+\sqrt{\frac{\bar\theta\theta}{\alpha}}\right)^2}\right). \tag{107}$$

Наконец найдем

$$c^- \approx A\left(\gamma T + \nu T^3\right), \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right)\sqrt{\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}, \tag{108}$$

$$\nu = \frac{7\pi^4}{30}\left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right)^3 \sqrt{\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}\left(\frac{\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^4}{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}} - \frac{\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^2}{2\left(\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}\right)\sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}} - \frac{1}{4\left(\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}\right)^2}\right). \tag{109}$$

Кубический член начинает играть существенную роль при

$$T_1 = \frac{\frac{2\alpha}{1+\alpha}\left(\mu + \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}\right)}{\sqrt{\frac{7\pi^2}{10}\left|\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^4\left(1 + \frac{\mu}{\sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)^2\left(1 + \frac{\mu}{\sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}}\right) - \frac{1}{4}\right|}}. \tag{110}$$

Теперь оценим поправку от незаполненной ветви. $\epsilon_+(\epsilon)$ монотонно растет при $\epsilon > 0 > \mu - \sqrt{\frac{\overline{\theta}\theta}{\alpha}}$, а значит, множитель, имеющий вид фермиевской функции, будет экспоненциально убывать. Разложим все функции в окрестности нуля:

$$\epsilon_+(\epsilon) \approx \epsilon_+(0) + \epsilon'_+(0)\epsilon, \tag{111}$$

$$\epsilon_+(0) = -\mu\left(\frac{1+\alpha}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\mu^2 + \overline{\theta}\theta}, \tag{112}$$

$$\epsilon'_+(0) = \frac{1+\alpha}{2} - \frac{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\mu}{\sqrt{\left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2\mu^2 + \overline{\theta}\theta}}. \tag{113}$$

Энергию можно тогда оценить как

$$E_+ \approx Ae^{-\frac{\epsilon_+(0)}{T}}\int_0^\infty d\epsilon\sqrt{\epsilon}\left(\epsilon_+(0) + \epsilon'_+(0)\epsilon\right)e^{-\frac{\epsilon'_+(0)}{T}\epsilon} \tag{114}$$

$$c^+ = \frac{\partial E_+}{\partial T} = A\frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{-\frac{\epsilon_+(0)}{T}}\left(\frac{T}{\epsilon'_+(0)}\right)^{3/2}\left(\frac{15}{4} + 3\frac{\epsilon_+(0)}{T} + \left(\frac{\epsilon_+(0)}{T}\right)^2\right) \tag{115}$$