СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 12009

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

УРАВНЕНИЕ ТИПА ФОККЕРА-ПЛАНКА ДЛЯ МАЛОЙ ПОДСИСТЕМЫ В КРИСТАЛЛЕ

1978

P17 - 12009

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

УРАВНЕНИЕ ТИПА ФОККЕРА-ПЛАНКА ДЛЯ МАЛОЙ ПОДСИСТЕМЫ В КРИСТАЛЛЕ

Гавриленко Г.М., Федянин В.К.

P17 - 12009

Уравнение типа Фоккера-Планка для малой подсистемы в кристалле

Рассматривается эволюция одночастичной подсистемы, слабо взаимодействующей с кристаллом. Получено уравнение для одночастичной функции распределения. Уравнение типично фоккер-планковского типа с внешним полем, но не марковское. Уравнение легко решается методом преобразования Лапласа по t и фурье-преобразования по $\vec{R}$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K.

P17 - 12009

Fokker-Plank Type Equation for a Small Subsystem in a Crystal

The evolution of one-particle subsystem weakly interacting with a crystal is considered. As a result, an equation for one-particle distribution function is obtained. The equation is a typical Fok'ker-Plank type with an external field, but not Markovian. It can easily be solved using Fourier transformation for $\vec{R}$ and Laplace transformation for t.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

На базе некоторой модификации подхода Боголюбова [1] в нашей работе [2] было получено эволюционное уравнение для малой подсистемы, слабо взаимодействующей с термостатом, которое в обозначениях работы [2] выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x,t) = -\vec{v}\frac{\vec{\partial}}{\partial R} f(x,t) + \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma f(x,t) + \beta \langle (\langle U \rangle_\Sigma - U)\Lambda_{int} \rangle_\Sigma f(x,t) + \int_0^t dz \Big\{ \langle \Lambda_{int}\, e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma - \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma e^{T\Lambda_0} \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma \Big\} f(x,z) + \beta \int_0^t dz \Big\{ \langle \Lambda_{int}\, e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, \langle U \rangle_\Sigma - U) \rangle_\Sigma + \langle \Lambda_{int}\, e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}_i} U \rangle_\Sigma \Big\} f(x,z); \quad T = t - z. \tag{I}$$

В данной работе рассмотрим конкретизацию (I) в приложениях для случая, когда в качестве термостата берется кристалл. Для этого надо рассчитать корреляционные функции, входящие в уравнение (I), которые можно выразить через корреляционные функции вида: $\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma$; $\langle \sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} \sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j(-\tau)} \rangle_\Sigma$. Эти функции вычислим в приближении гармонического кристалла[x)]. Имеем для различных слагаемых *(I)*:

$$\langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma = \frac{1}{V} \sum_k i\vec{k}\, \nu(k)\, e^{i\vec{k}\vec{R}} \langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma \frac{1}{M_0} \frac{\vec{\partial}}{\partial v}; \tag{2a}$$

$$\langle U \rangle_\Sigma = \frac{1}{V} \sum_k \nu(k)\, e^{i\vec{k}\vec{R}} \langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma ; \tag{2б}$$

---

x) Напомним, что выражение $(\hat{A}, \ldots)$ означает, что оператор $\hat{A}$ действует только на выражение, стоящее в скобке. Здесь мы пренебрежем нелокализованной в узлах решетки электронной подсистемой кристалла, которую можно учесть, включив соответствующие аддитивные взаимодействия.

$$\langle \Lambda_{int} U \rangle_\Sigma = \frac{1}{V^2}\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)\, e^{i\vec{k}\vec{R}}\,\nu(k')\, e^{i\vec{k}'\vec{R}} \times \left\langle \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j} \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma \frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}; \tag{2в}$$

$$\left\langle \Lambda_{int} e^{t(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)}\Lambda_{int}\right\rangle_\Sigma = \frac{1}{V^2}\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\times e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{t\Lambda_0} e^{i\vec{k}'\vec{R}} i\vec{k}'\nu(k')\left\langle \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j(-t)}\right\rangle_\Sigma \times \frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}} + \frac{1}{V^2}\beta\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial \vec{v}} e^{i\vec{k}\vec{R}}e^{t\Lambda_0}e^{i\vec{k}'\vec{R}}\times i\vec{k}'\nu(k')\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j} e^{t\Lambda_\Sigma}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\vec{v}_j\right\rangle_\Sigma; \tag{2г}$$

$$\left\langle\Lambda_{int}e^{t(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)}(\Lambda_0,\langle U\rangle_\Sigma)\right\rangle_\Sigma = -\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\,\frac{1}{V^2}\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)\nu(k')e^{i\vec{k}\vec{R}}e^{t\Lambda_0}e^{i\vec{k}'\vec{R}}\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma \left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle i\vec{k}'\vec{v}; \tag{2д}$$

$$\left\langle\Lambda_{int}e^{t(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)}(\Lambda_0,U)\right\rangle_\Sigma = -\frac{1}{V^2}\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\times e^{i\vec{k}\vec{R}}e^{t\Lambda_0}e^{i\vec{k}'\vec{R}}\nu(k')\,i(\vec{k}'\vec{v})\times\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}e^{t\Lambda_\Sigma}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma; \tag{2е}$$

$$\left\langle\Lambda_{int}e^{t(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)}\sum_{j=1}^N \vec{v}_j\frac{\partial}{\partial\vec{z}_j}U\right\rangle_\Sigma = \frac{1}{V^2}\sum_{kk'} i\vec{k}\,\nu(k)e^{i\vec{k}\vec{R}}\cdot\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}e^{t\Lambda_0}e^{i\vec{k}'\vec{R}}\nu(k')\,i\vec{k}'\times\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}e^{t\Lambda_\Sigma}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\vec{v}_j\right\rangle_\Sigma. \tag{2ж}$$

В формулах (2) V - объем кристалла. $\nu(k)$–фурье-образ потенциала взаимодействия малой подсистемы (частицы) с ионом, локализованным в узле кристалла. (Через эту функцию можно учитывать взаимодействие с "внутренними" электронами иона).

Второй член в формуле (2г) взаимно компенсируется с выражением, даваемым формулой (2ж). Остальные слагаемые можно сгруппировать таким образом, что уравнение (I) примет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = -\vec{v}\frac{\partial}{\partial\vec{R}}f(x,t) + \frac{i}{V}\sum_k \vec{k}\,\nu(k)e^{i\vec{k}\vec{R}}\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma\times\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}f(x,t) + \frac{i\beta}{V^2}\sum_{kk'}\vec{k}\,\nu(k)\nu(k')e^{i\vec{k}\vec{R}+i\vec{k}'\vec{R}}\times\left[\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma - \left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{R}}\right\rangle_\Sigma\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma\right]\times\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}f(x,t) - \beta\frac{1}{M_0}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\left[\frac{1}{V^2}\int_0^t\sum_{kk'}\vec{k}\,\nu(k)\nu(k')\times e^{i\vec{k}\vec{R}}e^{\tau\Lambda_0}e^{i\vec{k}'\vec{R}}\vec{k}'\left[\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j(-\tau)}\right\rangle_\Sigma - \left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma\left\langle\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j}\right\rangle_\Sigma\right]\times\left[\vec{v}+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\right]f(x,\tau)\,d\tau\right]. \tag{3}$$

Введем обозначения:

$$B_{kk'}(t) \equiv \left\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_j(-t)} \right\rangle_\Sigma ;$$

$$B_{k0} \equiv N_1 \left\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \right\rangle_\Sigma \qquad (4)$$

$$B_{kk'}(0) \equiv \left\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_j} \right\rangle_\Sigma .$$

Ясно, что необходимо рассчитать только функцию $B_{kk'}(t)$. Для этого удобно воспользоваться методом вторичного квантования, используя разложение по нормальным колебаниям решетки, и получить затем классическое выражение формальным предельным переходом $\hbar \to 0$ /3/. Разложение по нормальным колебаниям имеет обычный вид:

$$\vec{r}_\nu(t) = \vec{n} + \vec{j} + \vec{z}_{nj}(t) .$$

где $\vec{n}$ - радиус вектор n-ого узла кристалла, j - положение j-ого иона в n-той кристаллической ячейке. $\nu=(n,j)$ - равновесное положение j-ого иона в n-том кристаллическом узле, $\vec{z}_\nu(t)$ - отклонение от равновесного положения в момент времени t. Как обычно, разложим $\vec{z}_\nu(t)$ по векторам поляризации и операторам рождения и уничтожения фононов решетки:

$$\vec{z}_\nu(t) = \sum_\lambda \vec{u}_\nu^\lambda(t) ;$$

$$\vec{u}_\nu^\lambda(t) = \vec{S}_\nu^\lambda \hat{a}\, e^{-i\omega_\lambda t} + \vec{S}_\nu^{\lambda *} \hat{a}^+ e^{i\omega_\lambda t}$$

$$\vec{S}_\nu^\lambda = i\hbar^{1/2} (2M_j N_1 \omega_\lambda)^{\frac{1}{2}} \vec{e}_\lambda^{\,\nu} \exp i\vec{n}\vec{q} \qquad (5)$$

$$[\hat{a}^+, \hat{a}]_- = 1.$$

где: $*$ - операция комплексного сопряжения, $\hbar$ -постоянная Планка, N_1 - число узлов в кристалле, ω_λ - частота колебания λ, $\lambda=(q,s)$, q -значение волнового вектора колебания. s - номер ветви элементарного возбуждения в кристалле. $\vec{e}_j^{\,s}$ -вектор поляризации. M_j - масса иона, находящегося на j-месте в кристаллической ячейке. Трансляционная симметрия решетки кристалла приводит к следующим правилам отбора для средних по решетке:

$$\left\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_j(-t)} \right\rangle_\Sigma = \Delta_{\vec{k}+\vec{k}'-q_0^\alpha m_\alpha} \times$$

$$\times \left\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_j(-t)} \right\rangle_\Sigma ; \qquad (6)$$

Δ_x - символ Кронеккера: $\Delta_x = \begin{cases} 1, & x=0; \\ 0, & x\neq 0, \end{cases}$

$\vec{m}$ - вектор, координатами которого являются любые 3 целых числа m_x, m_y, m_z, $m_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$; $\alpha = x, y, z$

$q_0 = \left\{ \frac{2\pi}{a_x} ; \frac{2\pi}{a_y} ; \frac{2\pi}{a_z} \right\}$; a_x, a_y, a_z - значения векторов трансляций решетки вдоль главных осей симметрии кристаллической ячейки. По α суммирование x, y, z. С учетом (5), $B_{kk'}(t)$ имеет вид /3/:

$$B_{kk'}(t) = \sum_{nn'jj'} e^{-i\vec{k}\vec{n} - i\vec{k}'\vec{n}'} e^{-i\vec{k}\vec{j} - i\vec{k}'\vec{j}'} \prod_\lambda^{3N} X_{\nu\nu'}^\lambda(t) ;$$

$$X_{\nu\nu'}^\lambda(t) = \left\langle e^{-i\vec{k}\vec{u}_\nu^\lambda} e^{-i\vec{k}'\vec{u}_\nu^\lambda(-t)} \right\rangle_\Sigma = \qquad (7)$$

$$= \sum_z \omega_\lambda^z \langle z |\, \exp -i\vec{k}\vec{u}_\nu^\lambda \, \exp -i\vec{k}' u_{\nu'}^\lambda(-t) \,| z \rangle ;$$

$$\omega_\lambda^z = \exp -\frac{\hbar\omega_\lambda z}{\theta} \cdot \left(1 - \exp -\frac{\hbar\omega_\lambda z}{\theta}\right)^{-1} ; \quad \theta = \frac{1}{\beta} ;$$

z – обозначает квантовые состояния гармонического осциллятора $0, 1, 2, \ldots$; $\{|z\rangle\}$ – полный набор функций его квантовых состояний. В гармоническом приближении выражение для $X^{\lambda}_{vv'}(t)$ имеет вид:

$$X^{\lambda}_{vv'}(t) = \exp\frac{1}{2}\left[(\vec{k}\vec{A}^{\lambda}_{v})^{*}(\vec{k}'A^{\lambda}_{v'}(-t)) - (\vec{k}\vec{A}^{\lambda}_{v})(\vec{k}'A^{\lambda}_{v'}(-t))^{*}\right] \times \exp\frac{1}{2}\,\frac{1+z_\lambda}{1-z_\lambda}\,|M^{\lambda}_{vv'}|^{2}, \qquad (8)$$

где:

$$\vec{A}^{\lambda}_{v} = \vec{S}^{\lambda}_{v}; \quad \vec{A}^{\lambda}_{v}(-t) = \vec{S}^{\lambda}_{v}e^{i\omega_\lambda t}; \quad z_\lambda = \exp -\frac{\hbar\omega_\lambda}{\theta};$$

$$M^{\lambda}_{vv'} = -i\vec{k}\vec{A}^{\lambda}_{v} - i\vec{k}'\vec{A}^{\lambda}_{v'}(-t).$$

Сделаем в этом выражении переход к классике, т.е. $\hbar \to 0$.

$$X^{\lambda}_{vv'}(t) = \exp -\frac{\theta}{M_j N_1 \omega_\lambda^2}|\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j}|^2 \exp -\frac{\theta}{M_{j'} N_1 \omega_\lambda^2} \times |\vec{k}'\vec{e}^{\,s}_{j'}|^2 \cdot \exp -\left\{\frac{\theta}{N_1\omega_\lambda^2\sqrt{M_j M_{j'}}}(\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j})(\vec{k}'\vec{e}^{\,s}_{j'})^{*} \exp\{-i\vec{q}(\vec{n}'-\vec{n}) - i\omega_\lambda t\} + \text{компл. сопр.}\right\}.$$

N_1 – число узлов решетки. Обозначим через Ω объем элементарной ячейки кристалла. Перейдем в приведенных выше формулах от суммирования по $\vec{q}$ к интегрированию. Окончательно для $R_{kk'}(t)$ имеем

$$R_{kk'}(t) = \Delta_{\vec{k}+\vec{k}'-q_0^{\alpha}\vec{m}_\alpha} \cdot \sum_{n n'}^{N_1}\sum_{j j'}^{z} e^{-i\vec{k}\vec{n} - i\vec{k}'\vec{n}'} e^{-i\vec{k}\vec{j} - i\vec{k}'\vec{j}'} \exp\left[-W_j(\theta,k) - W_{j'}(\theta,k')\right] \times \qquad (9)$$

$$\times \exp\left\{-\frac{\theta\Omega}{(2\pi)^3\sqrt{M_j M_{j'}}} \times \sum_{s=1}^{z}(\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j})(\vec{k}'\vec{e}^{\,s}_{j'})^{*} \times \int_0^{q_0} d\vec{q}\, e^{-i\omega_\lambda t - i\vec{q}(\vec{n}'-\vec{n})}\frac{1}{\omega_s^2(q)} + \text{к. с.}\right\},$$

где:

$$W_j(\theta,k) = \frac{\theta}{N_1}\sum_{\lambda}\frac{1}{M_j\omega_\lambda^2}(\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j})^2 = \frac{\theta\Omega}{(2\pi)^3 M_j}\sum_{s=1}^{z}(\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j})^2\int_0^{q_0} d\vec{q}\,\frac{1}{\omega_s^2(q)},$$

Z – число ветвей элементарных фононных возбуждений в кристалле. Ограничимся приближением малых колебаний около положения равновесия. Величина

$$L = -\frac{\theta\Omega}{(2\pi)^3\sqrt{M_j M_{j'}}}\left[\sum_{s=1}^{z}(\vec{k}\vec{e}^{\,s}_{j})(\vec{k}'\vec{e}^{\,s}_{j'})^{*}\int_0^{q_0} d\vec{q}\, e^{-i\vec{q}(\vec{n}'-\vec{n}) - i\omega_s(q)t}\frac{1}{\omega_s^2(q)} + \text{к.с.}\right] \qquad (10)$$

пропорциональна амплитуде этих колебаний, поэтому воспользуемся разложением

$$\exp L = 1 + L + O(L^2). \qquad (11)$$

При больших $\vec{k}$ "приближение" (11) является плохим, однако надо учесть, что перед e^{L} в выражении для $R_{kk'}(t)$ стоят члены, пропорциональные $\exp -\vec{k}^2 C$, так что на самом узле мы совершаем экспоненциально малую ошибку. В дальнейшем нам понадобятся следующие соотношения

$$\frac{1}{N_1}\sum_{n n'} e^{i\vec{k}\vec{n}' - i\vec{k}\vec{n}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}\delta(\vec{k} - q_0^{\alpha}\vec{m}'_\alpha);$$

$$\frac{1}{N_1}\sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\vec{n}' - i\vec{k}\vec{n} - i\vec{q}\vec{n}' + i\vec{q}\vec{n}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}\delta(\vec{k} - \vec{q} - q_0^{\alpha}\vec{m}'_\alpha). \qquad (12)$$

Отметим, что переход от суммирования по $\vec{k}$ к интегрированию и наоборот, связан в (I2) со следующей заменой

$$V\Delta_{\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha} = (2\pi)^3\delta(\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha): \qquad (I3)$$

δ – дельта функция Дирака.

Введем далее функцию от векторного аргумента $\theta(\vec{k}) = \theta(\vec{k}_x)\theta(\vec{k}_y)\theta(\vec{k}_z)$, где

$$\theta_k = \begin{cases}1, & k \ge 0;\\ 0, & k < 0\end{cases}$$

Запишем:

$$\int_0^{q_0} d\vec{q}\, e^{-iw_s(q)t}\frac{1}{w_s^2(q)}\delta(\vec{k}-\vec{q}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha) = \frac{1}{w_s^2(k)}\exp -iw_s(k)t\, \theta(\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha)\theta((\vec{m}'+1)_\alpha q_0^\alpha-\vec{k}) \qquad (I4)$$

$$\int_0^{q_0} d\vec{q}\, e^{+iw_s(q)t}\frac{1}{w_s^2(q)}\delta(\vec{k}+\vec{q}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha) = \frac{1}{w_s^2(k)}\exp iw_s(k)t\, \theta(q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha-\vec{k})\theta(\vec{k}-q_0^\alpha(\vec{m}'-1)_\alpha).$$

Здесь было использовано равенство:

$$w_s(\vec{q}+\vec{m}_\alpha q_0^\alpha) = w_s(\vec{q}). \qquad (I5)$$

Собирая (I2)-(I5), получим в приближении (II) для $R_{kk'}(t)$:

$$R_{kk'}(t) = N_1^2\sum_{mm'}\Delta_{\vec{k}+\vec{k}'-q_0^\alpha\vec{m}_\alpha}\times\sum_{jj'}e^{-i\vec{k}\vec{j}-i\vec{k}'\vec{j}'}\, e^{-w_j(\theta k)-w_{j'}(\theta k')}\,\Delta_{\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha} -$$

$$- N_1\sum_{mm'}\Delta_{\vec{k}+\vec{k}'-q_0^\alpha\vec{m}_\alpha}\cdot\sum_{jj'}e^{-i\vec{k}\vec{j}-i\vec{k}'\vec{j}'}\times$$

$$e^{-w_j(\theta k)-w_{j'}(\theta k')}\frac{\theta}{\sqrt{M_jM_{j'}}}\sum_{s=1}^{2}\Big[(\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})(\vec{k}'\vec{e}_{j'}^{\,s})^*\times\frac{1}{w_s^2(k)}\times$$

$$e^{-iw_s(k)t}\theta(\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha)\theta(-\vec{k}+(\vec{m}'+1)_\alpha q_0^\alpha) + \frac{1}{w_s^2(k)} \qquad (I6)$$

$$(\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})^*(\vec{k}'\vec{e}_{j'}^{\,s})\,e^{iw_s(k)t}\theta(q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha-\vec{k})\theta(\vec{k}-(\vec{m}'-1)_\alpha q_0^\alpha)\Big],$$

R_{k0} можем получить равным

$$R_{k0} = R_{k0}(0) = N_1^2\sum_m\Delta_{\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}_\alpha}\sum_j e^{-i\vec{k}\vec{j}-w_j(\theta k)}.$$

Выражение для $R_{kk'}(0)$ следует из $R_{kk'}(t)$, если в (I6) вместо $e^{\pm iw(k)t}$ поставить единицу. Рассмотрим первую сумму в выражении для $R_{kk'}(t)$:

$$\sum_{mm'}N_1^2\sum_{jj'}\Delta_{\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}_\alpha}\, e^{-i\vec{k}\vec{j}-i\vec{k}'\vec{j}'}\, e^{-w_j(\theta k)-w_{j'}(\theta,k')}\times$$

$$\times\Delta(\vec{k}-q_0^\alpha\vec{m}'_\alpha) = N_1^2\sum_{mm'jj'}e^{-iq_0^\alpha\vec{m}'_\alpha\vec{j}-w_j(\theta,q_0^\alpha m'_\alpha)}\times$$

$$\times e^{-iq_0^\alpha(\vec{m}-\vec{m}')_\alpha\vec{j}'}\,e^{-w_{j'}(\theta,q_0^\alpha(m-m')_\alpha)} = \left\{\begin{matrix}m'=m'\\ m-m'=m\end{matrix}\right\} =$$

$$= \Big[N_1\sum_{mj}e^{-iq_0^\alpha\vec{m}_\alpha\vec{j}-w_j(\theta,q_0^\alpha m_\alpha)}\Big]^2 = (R_{k0})^2.$$

Отсюда видно, что если учесть, что $\Omega = \frac{V}{N_1}$, то члены в $R_{kk'}(t)$, $R_{kk'}(0)$, "пропорциональные" двум Δ-функциям, не дадут вклада в корреляционные выражения уравнения (3), так как везде стоят комбинации типа: $R_{kk'}(t) - \frac{1}{N_1^2} R_{k0} R_{k'0}$.

Итак, для $\langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma$ имеем

$$\langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma = \frac{1}{\Omega} \sum_n q_0^\alpha \vec{n}_\alpha V(q_0^\alpha n_\alpha)\, e^{i q_0^\alpha \vec{R} \vec{n}_\alpha} \times$$

$$\times \sum_{j=1}^{z} e^{-i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{j}}\, e^{-W_j(\theta, q_0^\alpha n_\alpha)} \frac{1}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}};$$

и

$$\frac{1}{V^2} \sum_{k,k'} \vec{k} V(k) V(k')\, e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{t\Lambda_0} e^{i\vec{k}'\vec{R}} \beta \vec{k}' \Big[\langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{z}_j} \times$$

$$\sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j(-t)} \rangle_\Sigma - \langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{z}_j} \rangle_\Sigma \langle \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}'\vec{z}_j} \rangle_\Sigma \Big] \left(\vec{v} + \frac{\theta}{M_0}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right)$$

$$= -\frac{1}{\Omega V} \sum_{k,k',m,m'} \Delta_{\vec{k}+\vec{k}'-q_0^\alpha \vec{m}_\alpha} \vec{k} V(k) V(k')\, e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{t\Lambda_0} e^{i\vec{k}'\vec{R}} \times$$

$$\times \beta \vec{k}' \sum_{jj'} e^{-i\vec{k}\vec{j} - i\vec{k}'\vec{j}'} e^{-W_j(\theta,k) - W_{j'}(\theta,k')} \times$$

$$\times \frac{\theta}{\sqrt{M_j M_{j'}}} \sum_s \Big[(\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})(\vec{k}'\vec{e}_{j'}^{\,s})^* \frac{1}{\omega_s^2(k)} e^{-i\omega_s(k)t} \Theta(\vec{k} - q_0^\alpha \vec{m}'_\alpha) \times \qquad \text{(I7)}$$

$$\times \Theta(q_0^\alpha (\vec{m}'+1)_\alpha - \vec{k}) + \frac{1}{\omega_s^2(k)} e^{i\omega_s(k)t} \cdot \Theta(\vec{k} - q_0^\alpha \vec{m}'_\alpha) \times (\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})^* (\vec{k}\vec{e}_j^{\,s}) \times$$

$$\times \Theta(q_0^\alpha (\vec{m}'+1)_\alpha - k) \Big] \left(\vec{v} + \frac{\theta}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right).$$

Заметим, что справедливо равенство:

$$e^{t\Lambda_0} e^{i\vec{k}\vec{R}} = e^{i\vec{k}\vec{R} - i\vec{k}\vec{V}t} e^{t\Lambda_0}. \qquad \text{(I8)}$$

Переходя в (I7) от суммирования по $\vec{k}$ к интегрированию, можно переписать уравнение (9) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x,t) = -\vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{R}} f(x,t) + \frac{i}{\Omega} \sum_n q_0^\alpha \vec{n}_\alpha V(q_0^\alpha n_\alpha)\, e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R}}$$

$$\times \sum_{j=1}^{z} e^{-i \vec{n}^\alpha \vec{j} q_0^\alpha - W_j(\theta, q_0^\alpha n_\alpha)} \frac{1}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f(x,t) -$$

$$-\frac{i}{(2\pi)^3 \Omega} \sum_n \int d\vec{k}\, \vec{k} V(k) V(q_0^\alpha n_\alpha - k)\, e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R}} \sum_{jj'} e^{-i\vec{k}(\vec{j}-\vec{j}')} \times$$

$$\times e^{-i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{j}} \exp\left(-W_j(\theta,k) - W_{j'}(\theta, n^\alpha q_0^\alpha - k)\right) \frac{\theta}{\sqrt{M_j M_{j'}}} \times$$

$$\sum_{jj'} \left\{ (\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})(-\vec{k} + \vec{n}^\alpha q_0^\alpha)^* \frac{1}{\omega_s(k)} + \text{к.с.} \right\} \frac{1}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f(x,t)$$

$$+ \frac{\theta}{(2\pi)^3 \Omega} \sum_n \frac{1}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \int_0^t dz \int d\vec{k}\, \vec{k} V(k) V(n_\alpha q_0^\alpha - k) \times$$

$$\times e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R} - i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{V} T} \times \sum_{jj'} e^{-i\vec{k}(\vec{j}-\vec{j}')} \times \qquad \text{(I9)}$$

$$e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{j}'} e^{-W_j(\theta,k)} e^{-W_{j'}(\theta, q_0^\alpha n_\alpha - k)} \times$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j'}}} e^{\Lambda_0 T} \Big[\sum_{s=1}^{z} (\vec{k}\vec{e}_j^{\,s})(n_\alpha \vec{q}_0^{\,\alpha} - \vec{k}, \vec{e}_{j'}^{\,s})^* \frac{1}{\omega_s^2(k)} \times$$

$$e^{-i\omega_s(k)T} + \text{к.с.} \Big] (q_0^\alpha \vec{n}_\alpha - \vec{k}) \left(\vec{v} + \frac{\theta}{M_0} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right) f(x z);$$

$$T = t - z.$$

Дальнейшие упрощения уравнения (I9) будем производить для случая простой решетки Браве кубической симметрии. В этом случае

$$W_j(\theta,k) = W(\theta,k) = W(\theta,-k); \quad \vec{j} \equiv 0; \quad M_j = M_{j'} = M.$$

Вектор поляризации $\vec{e}^{\,s}_j$ становится действительным, $N_1 = N$. ω_s носит чисто акустический характер, $s=1,2,3$, т.е. $z = 3$. При такой простой симметрии кристалла можно легко усреднить по поляризации фононных возбуждений и $\overline{e^s_i e^s_j} = \frac{1}{3}\delta_{ij}$, так что справедливы выражения типа $(\vec{e}^{\,s}\vec{\kappa})(\vec{e}^{\,s}\vec{\kappa}') = \frac{1}{3}(\vec{\kappa},\vec{\kappa}')$, откуда для $W(\theta,\kappa)$ будет выполняться следующее свойство $W(\theta,\kappa) = \theta\cdot\vec{\kappa}^2\cdot B$, B – константа, определяемая характеристиками кристалла.

Итак, в этом случае

$$\langle \Lambda_{int}\rangle_\Sigma = \frac{i}{\Omega}\sum_n \vec{n}^\alpha q_0^\alpha v(q_0^\alpha n_\alpha)\, e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R}} \exp -n^2 W(\theta,q_0)\frac{1}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}. \tag{20}$$

Напомним, что n – мультииндекс $n=\{n_x,n_y,n_z\}$ и $n^2 = n_x^2+n_y^2+n_z^2$. Рассмотрим третье слагаемое уравнения (I9). Пусть $v(\kappa) = v(-\kappa)$, т.е. потенциал взаимодействия сферически симметричен. Тогда получаем, что оно равно

$$\frac{i}{\Omega(2\pi)^3}{\sum_n}'\int d\vec{\kappa}\,\vec{\kappa}\, v(\kappa)\, v(q_0^\alpha n_\alpha-\kappa)\, e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R}}\, e^{-W(\theta,q_0^\alpha n_\alpha-\kappa)-W(\theta,\kappa)}\frac{2}{3M}\sum_{s=1}^{3}\frac{(\vec{\kappa},q_0^\alpha\vec{n}_\alpha-\vec{\kappa})}{\omega_s^2(\kappa)}\frac{1}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v} \tag{2I}$$

где знак штрих у суммы означает, что надо в суммировании по мультииндексу n опустить слагаемое $n \equiv 0$, т.е. $n_x=n_y=n_z=0$. Это вытекает из того, что при $n=0$, под интегралом стоит антисимметричная по $\vec{\kappa}$ функция, которая интегрируется в симметричных пределах. Члены вида (20), (2I) уравнения (I9) можно интерпретировать как выражения, связанные с описанием действия некоего внешнего(кристаллического) поля на малую подсистему. Остальные операторные структуры, стоящие справа в (I9), интерпретируются как "интеграл столкновений". Видно, что он линеен по $f(x,t)$ и немарковского типа. Используя совершенно аналогичные соображения, "интеграл столкновений" удобно привести к виду:

$$J(\dots) = -\frac{1}{(2\pi)^3\Omega}\frac{2}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\int_0^t d\tau\int d\vec{\kappa}\,\vec{\kappa}\, v^2(\kappa)\, e^{-2W(\theta,\kappa)}\frac{1}{3M}\sum_{s=1}^{3}\frac{(\vec{\kappa})^2}{\omega_s^2(\kappa)}$$

$$\cos\omega_s(\kappa)\tau\cdot\cos\vec{\kappa}\vec{v}\tau\; e^{\tau\Lambda_0}\vec{\kappa}\left(\vec{v}+\frac{\theta}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\right) +$$

$$\frac{2}{3(2\pi)^3\Omega M_0 M}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}{\sum_n}'\int_0^t d\tau\int d\vec{\kappa}\,\vec{\kappa}\, v(\kappa)\, v(q_0^\alpha n_\alpha-\kappa)\;\times$$

$$e^{i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha\vec{R}-i q_0^\alpha\vec{n}_\alpha\vec{v}\tau}\, e^{-W(\theta,\kappa)-W(\theta,n^\alpha q_0^\alpha-\kappa)}\, e^{i\vec{\kappa}\vec{v}\tau} \tag{22}$$

$$(\vec{\kappa},q_0^\alpha\vec{n}_\alpha-\vec{\kappa})\sum_{s=1}^{3}\frac{\cos\omega(\kappa)\tau}{\omega_s^2(\kappa)}\, e^{\tau\Lambda_0}(\vec{n}^\alpha q_0^\alpha-\vec{\kappa})\left(\vec{v}+\frac{\theta}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\right).$$

В (22) была использована симметрия подынтегральной функции по $\vec{\kappa}$ в первом слагаемом. Видно, что если в интервале столкновений учитывать члены $\sim O(L^2)$, то они окажутся $\sim\theta$, но, так как в него входят конструкции типа $\exp -\theta B$, ошибки при больших θ будут экспоненциально малы. Приведем эволюционное уравнение для $f(x,t)$ в случае решетки Бравэ, полученное в обсужденном приближении:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = -\vec{v}\frac{\vec{\partial}}{\partial R}f(x,t) + \frac{i}{\Omega}\sum_n q_0^\alpha\vec{n}_\alpha v(n_\alpha q_0^\alpha)\, e^{i q_0^\alpha\vec{n}_\alpha\vec{R}}\,\cdot$$

$$e^{-n^2W(\theta,\kappa)}\frac{1}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}f(x,t) - \frac{i}{(2\pi)^3\Omega}{\sum_n}'\int d\vec{\kappa}\,\vec{\kappa}\, v(\kappa)\, v(n^\alpha q_0^\alpha-\kappa)$$

$$e^{i q_0^\alpha\vec{n}_\alpha\vec{R}}\exp\{-W(\theta,\kappa)-W(\theta,n^\alpha q_0^\alpha-\kappa)\}\frac{2}{3M}\sum_{s=1}^{3}\frac{(\vec{\kappa},q_0^\alpha\vec{n}_\alpha-\vec{\kappa})}{\omega_s^2(\kappa)}$$

$$\frac{1}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}f(x,t) - \frac{2}{3(2\pi)^3 M M_0\Omega}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\int_0^t d\tau\int d\vec{\kappa}\,\vec{\kappa}\, v^2(\kappa)\,\cdot$$

$$e^{-2W(\theta,\kappa)}\cos\vec{\kappa}\vec{v}\tau\sum_{s=1}^{3}\frac{\vec{\kappa}^2}{\omega_s^2(\kappa)}\cos\omega_s(\kappa)\tau\; e^{\tau\Lambda_0}\vec{\kappa}.$$

$$\left[\vec{v}+\frac{\theta}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\right] f(x z) + \frac{2}{3(2\pi)^3 M M_0 \Omega}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\sum_n{}' \cdot$$

$$\int_0^t dz \int d\vec{k}\, \vec{k}\, \mathcal{V}(k)\, \mathcal{V}(q_0^\alpha n_\alpha - k)\, e^{i\vec{k}\vec{v}T + i q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{R} - q_0^\alpha \vec{n}_\alpha \vec{v} T}$$

$$e^{-W(\theta,k)}\, e^{-W(\theta, q_0^\alpha n_\alpha - k)} (\vec{k}, q_0^\alpha \vec{n}_\alpha - \vec{k}) \sum_{s=1}^{3} \cdot$$

$$\frac{\cos \omega_s(k) T}{\omega_s^2(k)}\, e^{\eta_0 T} (\vec{n}_\alpha \vec{q}_0^\alpha - \vec{k})\left(\vec{v} + \frac{\theta}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\right) f(x z); \qquad (23)$$

$$W(\theta,k) = \frac{\theta \vec{k}^2}{3M}\sum_{s=1}^{3}\int_0^{q_0}\frac{d\vec{k}}{\omega_s^2(k)}; \qquad T = t - z.$$

Заметим, что в полученном уравнении в силу классического подхода не учитываются эффекты, связанные с нулевыми колебаниями решетки кристалла. Эти эффекты пропорциональны $\hbar$. Заметим, что функции вида $\exp - W(k,\theta) \cdot \exp - W(k - q_0^\alpha n, \theta)$ быстро убывают с ростом n , экспоненциально быстро, поэтому в (23) можно с хорошей степенью точности ограничиться несколькими первыми членами "разложения" по мультииндексу n . При θ больших эти же факторы тоже убывают экспоненциально, и учет членов $\sim O(L^2)$ ведет также к экспоненциально малым оценкам. Представляется резонным, что уже следующее уравнение будет хорошо описывать физическую ситуацию при высоких температурах (но таких, что имеет смысл говорить о гармоническом приближении)

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x t) = -\vec{v}\frac{\vec{\partial}}{\partial R} f(x,t) - 2 q_0 \frac{1}{\Omega M_0} \mathcal{V}(q_0)\, e^{-W(\theta, q_0)} \cdot$$

$$\left[\sin q_0 z \frac{\partial}{\partial v_z} + \sin q_0 x \frac{\partial}{\partial v_x} + \sin q_0 y \frac{\partial}{\partial v_y}\right] f(x,t) -$$

$$-\frac{2}{3(2\pi)^3 \Omega M M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\int_0^t dz \int d\vec{k}\, \vec{k}\, \mathcal{V}^2(k)\, e^{-2W(\theta,k)} \cos \vec{k}\vec{v}T$$

$$\times \sum_{s=1}^{3}\frac{\cos \omega_s(k) T}{\omega_s^2(k)}\, e^{T\eta_0}\, \vec{k}\left(\vec{v} + \frac{\theta}{M_0}\frac{\vec{\partial}}{\partial v}\right) f(x z) \qquad (24)$$

Из уравнения (24) видно, что эволюция $f(x t)$ определяется некоторым эффективным полем решетки (для трансляционно-инвариантной системы этот член обратится в нуль) и "интегралом столкновений" типично фоккер-планковского вида. На максвелловской функции распределения он обращается в нуль. Так что удобно при решении (24) развивать теорию возмущений по малым отклонениям от некоторого локального максвелловского распределения. Нетрудно видеть, что (24) хорошо решается при помощи использования преобразования Лапласа по t и преобразования Фурье по $\vec{R}$ переменным.

Литература

I. N.N. Bogolubov. Preprint EI7-I05I4,Dubna,I977.
2. Г.М. Гавриленко, В.К. Федянин. ОИЯИ, PI7-II948, Дубна, I978.
3. И.И. Гуревич, Л.В. Тарасов. Физика нейтронов низких энергий. М., Наука, I965.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 ноября I978 года.