объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-828

В.К.Федянин, Г.М.Гавриленко, Д.Михалаке

О ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ ПОЛЯРОНА

Направлено в "Letter in physica status solidi(b)"

1980

В этой работе мы рассмотрим проблемы вычисления скорости электрона, движущегося в полярном кристалле во внешнем переменном электрическом поле. Начнем с гамильтониана динамической системы (S,Σ), где (S) обозначает электрон, (Σ) - фононное поле, который был предложен в [1,3]:

$$H_L = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{m^*\omega^2 r^2}{2} + \theta(t)\vec{E}(t)\cdot\vec{r} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \\ + i\frac{\theta(t)}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} (2\omega_{\vec{k}})^{-1/2} F(\vec{k})(\vec{k}\cdot\vec{r})(b_{\vec{k}} + b^+_{-\vec{k}}). \qquad /1/$$

Здесь $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{i\Omega t}$ - внешнее электрическое поле и $\theta(t)$ - ступенчатая θ-функция, $b^+_{\vec{k}}$, $b_{\vec{k}}$ - фононные бозе-амплитуды. В [1,3] изучался стационарный предел скорости электрона при $t\to\infty$.
В дальнейшем мы остановимся на кинетике этого явления в случае одной пространственной размерности $\vec{r} = x$ и используем для матрицы плотности электрона представление когерентных состояний.

Итак,

$$H = H_S + H_\Sigma + H_{S\Sigma}, \qquad /2/$$

$$H_S = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{m^*\omega^2 x^2}{2} + \theta(t)E_0 e^{i\Omega t},$$

$$H_\Sigma = \sum_k \omega_k b^+_k b_k, \quad H_{S\Sigma} = \frac{i}{\sqrt{L}}\theta(t)\sum_k (2\omega_k)^{-1/2} kxF(k)(b_k + b^+_{-k}). \qquad /3/$$

Матрица плотности для (S,Σ) -системы вводится согласно равенству

$$\rho_{S\Sigma}(t) = e^{-iHt}\rho_{S\Sigma}(0)e^{iHt}, \qquad /4/$$

где $\rho_{S\Sigma}(0) = \rho_S(0)\rho_\Sigma$, $\rho_\Sigma = (\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_\Sigma})^{-1} e^{-\beta H_\Sigma}$ - гиббсовское распределение для кристалла, β - обратная температура кристалла.

Определим редуцированную матрицу плотности для электрона как

$$\rho_S(t) = \mathrm{Tr}_\Sigma \rho_{S\Sigma}(t). \qquad /5/$$

Во втором порядке по взаимодействию получим следующее уравнение на $\rho_S(t)$ [4,5]:

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = -i[H_S, \rho_S(t)] +$$

$$+ Tr_\Sigma [H_{S\Sigma}\, \rho_\Sigma \int_0^t dt' \rho_S(t') H_{S\Sigma}(t-t')] -$$

$$- Tr_\Sigma [\rho_\Sigma \int_0^t dt' \rho_S(t') H_{S\Sigma}(t-t') H_{S\Sigma}] + \qquad /6/$$

$$+ Tr_\Sigma [\int_0^t dt' H_{S\Sigma}(t-t') \rho_\Sigma \rho_S(t') H_{S\Sigma}] -$$

$$- Tr_\Sigma [H_{S\Sigma} \int_0^t dt' H_{S\Sigma}(t-t') \rho_\Sigma \rho_S(t')] .$$

Обозначим через τ_Σ характерные времена релаксации в большой Σ-системе, τ_S - времена релаксации в S-системе /электрон/. В пределе $t \sim \tau_S \gg \tau_\Sigma$ мы можем пренебречь эффектами запаздывания и памятью системы в уравнении для $\rho_S(t)$. Таким образом, мы в /6/ перейдем к марковскому пределу для $\rho_S(t)$:

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = -i[H_S, \rho_S(t)] \qquad /7/$$

$$-\frac{1}{L}\sum_k (2\omega_k)^{-1} k^2 F^2(k) \int_0^\infty d\tau [f_k(\tau) x(0) \rho_S(t) x(\tau) + f_k^*(\tau) x(\tau) \rho_S(t)\, x(0)]$$

$$+\frac{1}{L}\sum_k (2\omega_k)^{-1} k^2 F^2(k) \int_0^\infty d\tau [f_k^*(\tau)\, x(0)\, x(\tau) \rho_S(t) + f_k(\tau) \rho_S(t)\, x(\tau)\, x(0)],$$

где $f_k(\tau) = N_k e^{i\omega_k \tau} + (1+N_k) e^{-i\omega_k \tau}$, $N = (e^{\beta\omega_k} - 1)^{-1}$. Перепишем /7/ в представлении вторичного квантования:

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = -i[\omega a^+ a + E_0 e^{i\Omega t} (2m^*\omega)^{-1/2} (a+a^+), \rho_S(t)]$$

$$-\frac{1}{L}\sum_k (2\omega_k)^{-1} (2m^*\omega)^{-1} k^2 F^2(k) \int_0^\infty d\tau [f_k(\tau) (a+a^+) \rho_S(t) (a(\tau)+a^+(\tau)) + \qquad /8/$$

$$+ f_k^*(\tau) (a(\tau)+a^+(\tau)) \rho_S(t) (a+a^+)]$$

$$+\frac{1}{L}\sum_k (2\omega_k)^{-1} (2m^*\omega)^{-1} k^2 F^2(k) \int_0^\infty d\tau [f_k^*(\tau) (a+a^+)(a(\tau)+a^+(\tau)) \rho_S(t) +$$

$$+ f_k(\tau) \rho_S(t) (a(\tau)+a^+(\tau))(a+a^+)],$$

где $[a, a^+]=1$ и $a(\tau)=e^{-i\omega\tau}a$. Определим g и h как

$$g=4\pi\,\frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega}-1}\cdot\frac{1}{L}\sum_k (2\omega_k)^{-1}(2m^*\omega)^{-1}\,k^2 F^2(k)\,\delta(\omega-\omega_k)=(n_0+1)\,\gamma,$$

$$h=g e^{-\beta\omega}=n_0\gamma\ , \qquad /9/$$

где $n_0=(e^{\beta\omega}-1)^{-1}$. Опустим в них чисто мнимые части, так как в /8/ они приведут к простому переопределению уровней /энергетическому сдвигу/. Тогда для редуцированной матрицы плотности имеем:

$$\frac{\partial\rho_S(t)}{\partial t}=-i\omega(a^+a\rho_S-\rho_S a^+a)-(2m^*\omega)^{-1/2}E_0e^{i\Omega t}[a+a^+,\rho_S(t)]$$

$$+g a\rho_S a^+ + h a^+\rho_S a+\frac{1}{2}g(a^+\rho_S a^+ + a\rho_S a)$$

$$+\frac{h}{2}(a^+\rho_S a^+ + a\rho_S a)-\frac{1}{2}(h a a^+\rho_S + g a^+ a\rho_S + h\rho_S a a^+ + g\rho_S a^+ a) \qquad /10/$$

$$-\frac{g}{2}(aa\rho_S+\rho_S a^+a^+)-\frac{h}{2}(a^+a^+\rho_S+\rho_S aa).$$

Введем глауберовское диагональное представление для $\rho_S(t)$:[8]

$$\rho_S(t)=\frac{1}{\pi}\int d^2z\,P(z,z^*,t)\,|z\rangle\langle z|\ . \qquad /11/$$

В результате чего для $P(z,z^*,t)$ имеем уравнение:

$$\frac{\partial P}{\partial t}=i\omega\Big[\frac{\partial}{\partial z}(zP)-\frac{\partial}{\partial z^*}(z^*P)\Big]+i(2m^*\omega)^{-1/2}E_0e^{i\Omega t}\Big(\frac{\partial P}{\partial z}-\frac{\partial P}{\partial z^*}\Big)$$

$$+\frac{\gamma}{2}\Big[\frac{\partial}{\partial z}(zP)+\frac{\partial}{\partial z^*}(z^*P)\Big]-\frac{\gamma}{2}\Big(z\frac{\partial P}{\partial z^*}+z^*\frac{\partial P}{\partial z}\Big) \qquad /12/$$

$$+n_0\gamma\frac{\partial^2 P}{\partial z\partial z^*}-\frac{n_0\gamma}{2}\Big(\frac{\partial^2P}{\partial z^2}+\frac{\partial^2 P}{\partial z^{*2}}\Big),$$

откуда, вводя $z=x+iy$, имеем

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\gamma P+(\omega x+\gamma y+\tilde{E}_0e^{i\Omega t})\frac{\partial P}{\partial y}-\omega y\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{n_0\gamma}{2}\frac{\partial^2P}{\partial y^2} \qquad /13/$$

и $\tilde{E}_0=(2m^*\omega)^{-1/2}E_0$. Уравнение /13/ можно точно решить, используя стандартные методы, развитые в [7,8].

Введем новые переменные:

$$\xi(t) = [\frac{x}{\omega}\lambda_1 - y - \frac{\lambda_1}{\omega^2}(B+\lambda_1 A)\, e^{i\Omega t}\,]\, e^{-\lambda_2 t}\,,$$
$$\eta(t) = [\frac{x}{\omega}\lambda_2 - y - \frac{\lambda_2}{\omega^2}(B+\lambda_2 A)\, e^{i\Omega t}\,]\, e^{-\lambda_1 t}\,, \qquad /14/$$

где

$$A = \frac{i\Omega \tilde{E}_0}{\Omega^2 - i\gamma\Omega - \omega^2}\,, \quad B = \frac{(\omega^2 + i\gamma\Omega)\tilde{E}_0}{\Omega^2 - i\gamma\Omega - \omega^2}\,, \quad \lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(-\gamma \pm i\sqrt{4\omega^2 - \gamma^2})\,.$$

Решение /13/ при условии $P(\xi,\eta,t) \xrightarrow{t\to 0} \delta(\xi-\xi_0)\delta(\eta-\eta_0)$ есть

$$P(\xi,\eta,t) = \frac{\pi\sqrt{4\omega^2-\gamma^2}}{\omega}\, e^{\gamma t}\, \phi(\xi,\eta,t)\,,$$

$$\phi(\xi,\eta,t) = \frac{1}{2\pi\Delta^{1/2}} \exp\{-\frac{1}{2\Delta}[\,u(\xi-\xi_0)^2 + 2v(\xi-\xi_0)(\eta-\eta_0) + w(\eta-\eta_0)^2]\}, \qquad /15/$$

$$u = \frac{q}{\lambda_1}[1-\exp(-2\lambda_1 t)],\quad v = -\frac{2q}{(\lambda_1+\lambda_2)}\{1-\exp[-(\lambda_1+\lambda_2)t]\}\,,$$

$$w = \frac{q}{\lambda_2}[1-\exp(-2\lambda_2 t)],\quad \Lambda = uw - v^2,\quad q = \frac{n_0\gamma}{2}\,.$$

Решение /15/ следует отнормировать на единицу, т.е.

$$\frac{1}{\pi}\iint_{-\infty}^{\infty} dx\,dy\,P(x,y,t) = 1\,.$$

Далее, используя /15/, рассчитаем

$$\langle v(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\omega}{m^*}}\,\frac{1}{\pi}\iint_{-\infty}^{\infty} y\,P(x,y,t)\,dx\,dy =$$

$$= \frac{E_0}{m^*}\, e^{-\frac{\gamma}{2}t}\,[\,\frac{(2\omega^2+i\gamma\Omega)}{\Omega^2 - i\gamma\Omega - \omega^2}\,\frac{1}{\sqrt{4\omega^2-\gamma^2}}\,\sin\frac{\sqrt{4\omega^2-\gamma^2}\;t}{2} \qquad /16/$$

$$-\frac{i\Omega}{\Omega^2 - i\gamma\Omega - \omega^2}\cos\frac{\sqrt{4\omega^2-\gamma^2}\,t}{2}\,] + \frac{E_0}{m^*}\,\frac{i\Omega}{\Omega^2 - i\gamma\Omega - \omega^2}\, e^{i\Omega t}\,.$$

Это есть полуклассическое представление для функции отклика на внешнее электрическое поле. В случае $E_0 = 0$ уравнение /13/ превращается в

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \gamma P + (\omega x + \gamma y)\frac{\partial P}{\partial y} - \omega y \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{n_0 \gamma}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} . \qquad /17/$$

Оно было получено Чандрасекаром в работе /7/. Его стационарное состояние есть

$$P_s(x,y) = \lim_{t\to\infty} P(x,y,t) = \frac{1}{n_0}\exp[-\frac{1}{n_0}(x^2+y^2)] . \qquad /18/$$

Уравнения такого типа обычно появляются в теориях линейного отклика /см., например, обзоры /5,8/ /. В /5/ Хааке *было* получено следующее фоккер-планковское уравнение для P:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 2kP + \omega(x\frac{\partial P}{\partial y} - y\frac{\partial P}{\partial x}) + k(x\frac{\partial P}{\partial x} + y\frac{\partial P}{\partial y})$$
$$+ \frac{kn_0}{2}(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}) . \qquad /19/$$

Интересно заметить, что /17/ и /19/ имеют одно и то же стационарное решение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bogolubov N.N. JINR, E17-11822, Dubna, 1978.
2. Боголюбов Н.Н. /мл./. ТМФ, 1979, т.40, №1, с.77-94.
3. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. /мл./. ЭЧАЯ, 1980, т.11, №2, с.245-300.
4. Bogolubov N.N. JINR, E17-10514, Dubna, 1977.
5. Haake F. Statistical Treatment of Open System by Generalized Master Equations. Springer Tracts in Modern Physics, 1973, v.66, p.98-168.
6. Glauber R.J. Phys.Rev., 1963, v.131, No.6, p.2766-2788.
7. Chandrasekhar S. Rev.Mod.Phys., 1943, v.15, No.1, p.1-89.
8. Haken H. Rev.Mod.Phys., 1975, v.47, No.1, p.67-121.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 декабря 1980 года.