СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 4485

К.Парлиньски, В.Б.Приезжев

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

1969

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 4485

К.Парлиньски, В.Б.Приезжев

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

В в е д е н и е

В динамической теории кристаллической решетки разработан метод, учитывающий самосогласованным образом ангармонические эффекты высших порядков /1/. В этом методе учёт взаимодействия между фононами сводится к рассмотрению фонона в среднем поле остальных фононов. В таком приближении, называемом обычно псевдогармоническим, не учитывается распад элементарных возбуждений. Часть многофононных процессов может быть учтена без рассмотрения процессов распада в явном виде. Это достигается применением двухвременного расцепления корреляционных функций /2/. Основное преимущество двухвременного расцепления состоит в том, что оно позволяет выделить корреляционные функции, зависящие от времени в самом уравнении для этих функций, что позволяет определить последние самосогласованным образом подобно тому, как в псевдогармоническом приближении определяются одновременные корреляционные функции.

Характерной особенностью такого подхода является то, что получаемые уравнения движения являются дифференциальными уравнениями четвертого порядка. Двухвременное расцепление приводит к тому, что силовые постоянные, перенормированные за счёт многофононных процессов, зависят от времени. В этом случае удобно выделить псевдогармоническую часть силовых постоянных и часть, зависящую от времени, которую можно рассматривать как малое периодическое возмущение, действующее на систему. Влияние такого возмущения на устойчивость решетки предполагается исследовать в отдельной работе. Отметим, что в п.2 мы не ограничиваемся рассмотрением трансляционно-инвариантных систем, подобный подход может быть применен к рассмотрению высокочастотных возбуждений в жидкости, когда смещение атомов из положения равновесия можно считать малым.

Уравнения для корреляционных функций в координатном представлении

Рассмотрим ансамбль большого числа одинаковых частиц, взаимодействие между которыми описывается парным потенциалом. Предположим, что система находится в равновесном состоянии. Гамильтониан этой системы может быть записан в виде

$$H = \sum_{\ell\alpha} \frac{(P_\ell^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{\ell\neq m} \phi(R_\ell - R_m), \qquad (1)$$

где P_ℓ^α - оператор импульса атома, R_ℓ^α - положение ℓ-го атома. Заметим, что рассмотрение лишь одинаковых частиц и парного потенциала не является принципиальным ограничением и вводится только для сокращения записи.

Предположим, что потенциал взаимодействия можно представить в виде преобразования Фурье

$$\phi(\vec{R}) = \int d^3\vec{q}\ \phi(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\vec{R}} . \qquad (2)$$

Операторы импульса и положения имеют следующие коммутационные соотношения

$$[P_\ell^\alpha, P_k^\beta] = 0 ; \ [R_\ell^\alpha, R_k^\beta] = 0 ; \ [R_\ell^\alpha, P_k^\beta] = i\delta_{\ell k}^{\alpha\beta} . \qquad (3)$$

Учитывая (2) и (3), получим

$$[R^{\alpha}_{\ell}, H] = \frac{i}{M} P^{\alpha}_{\ell},$$

$$[P^{\alpha}_{\ell}, H] = \int d^3\vec{q}\, \Phi(\vec{q})\, q^{\alpha} \sum_{n \neq \ell} e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_n)}. \tag{4}$$

Определим коммутаторную корреляционную функцию операторов положений

$$K^{\alpha\beta}_{\ell k}(t - t') = \langle [R^{\alpha}_{\ell}(t), R^{\beta}_{k}(t')] \rangle \tag{5}$$

и ее фурье-преобразование

$$K^{\alpha\beta}_{\ell k}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, K^{\alpha\beta}_{\ell k}(t)\, e^{i\omega t}. \tag{6}$$

Эту функцию легко связать с корреляционной функцией положений

$$F^{\alpha\beta}_{\ell k}(t - t') = \langle R^{\alpha}_{\ell}(t)\, R^{\beta}_{k}(t') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega(t - t')}\, K^{\alpha\beta}_{\ell k}(\omega)}{1 - e^{\frac{\omega}{T}}}\, d\omega. \tag{7}$$

Используя уравнения движения для операторов (4) и коммутационные соотношения (3), находим выражение для корреляционной функции скоростей:

$$\frac{d}{dt\, dt'} \langle R^{\alpha}_{\ell}(t)\, R^{\beta}_{k}(t') \rangle = \langle V^{\alpha}_{\ell}(t)\, V^{\beta}_{k}(t') \rangle,$$

где

$$V_{\ell}^{\alpha}(t) = \frac{1}{M} P_{\ell}^{\alpha}(t) \quad .$$

Из уравнений движения для гайзенберговских операторов следуют уравнения для коммутаторных корреляционных функций. Поскольку в дальнейшем мы применим метод двухвременного расцепления для выделения корреляционных функций, зависящих от времени, уравнения движения получим путем двойного дифференцирования $K_{\ell k}^{\alpha\beta}(t - t')$ по t и t'

$$i^{4} \frac{d^{2} K_{\ell k}^{\alpha\beta}(t)}{dt^{2} \quad dt'^{2}} = -\frac{1}{M^{2}} < [[P_{\ell}^{\alpha}, H], [P_{k}^{\beta} H]] > . \qquad (9)$$

Произведем расцепление коммутаторных корреляционных функций

$$\frac{1}{M^{2}} < [[P_{\ell}^{\alpha} H] [P_{k}^{\beta} H]] > =$$

$$(10)$$

$$= \frac{1}{M^{2}} \int\int d^{3}\vec{q}\, d^{3}\vec{q}\,' \phi(\vec{q}) \phi(\vec{q}\,') q^{\alpha} q'^{\beta} \sum_{\substack{n \neq \ell \\ m \neq k}} <[e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_{n})}, e^{i\vec{q}\,'(\vec{R}_{k} - \vec{R}_{m})}]>.$$

Ограничимся учётом только парных коммутаторных корреляционных функций. Получающиеся в процессе расцепления тройные и высшие к.к.ф. отбрасываем. Получим:

$$<[e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_{n})}, e^{i\vec{q}\,'(\vec{R}_{k} - \vec{R}_{m})}]> =$$

$$= \sum_{s} \sum_{p} \frac{1}{s!} \frac{1}{p!} <[\{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_{n})\}^{s}, \{i\vec{q}\,'(\vec{R}_{k} - \vec{R}_{m})\}^{p}]> = \qquad (11)$$

$$< e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell}(t) - \vec{R}_{n}(t))} e^{i\vec{q}\,'(\vec{R}_{k}(t') - \vec{R}_{m}(t'))} > \times$$

$$\times \sum_{\gamma\delta} q^{\gamma} q'^{\delta} <[\{R_{\ell}^{\gamma}(t) - R_{n}^{\gamma}(t)\}, \{R_{k}^{\delta}(t') - R_{m}^{\delta}(t')\}]>$$

Уравнение для коммутаторной корреляционной функции запишем в виде

$$\frac{d^4 K^{\alpha\beta}_{\ell k}(t-t')}{dt^2\, dt'^2} = \sum_{\substack{nm\\ \gamma\delta}} \chi^{\alpha\beta\delta\gamma}_{\ell knm}(t-t')\{\Delta^{\ell k}_{nm} K^{\delta\gamma}(t-t')\} \tag{12}$$

$$\chi^{\alpha\beta\delta\gamma}_{\ell knm}(t-t') = \frac{1}{M^2}\iint d^3\vec{q}\, d^3\vec{q}\,'\, \phi(\vec{q})\,\phi(\vec{q}\,')\, q^{\alpha} q'^{\beta} q^{\gamma} q'^{\delta}$$

$$\times \langle e^{i\vec{q}(\vec{R}_\ell(t)-\vec{R}_n(t))}\, e^{i\vec{q}\,'\vec{R}_k(t')-\vec{R}_m(t'))} \rangle , \tag{13}$$

где для краткости положим

$$\Delta^{\ell k}_{nm} K^{\delta\gamma} = K^{\delta\gamma}_{\ell k} + K^{\delta\gamma}_{nm} - K^{\delta\gamma}_{\ell m} - K^{\delta\gamma}_{nk}. \tag{14}$$

В уравнении (12) суммирование по n, m можно распространять и на значения $n = \ell$., $m = k$, поскольку в этом случае выражение (14) обращается в нуль. Корреляционная функция, входящая в определение χ, является корреляционной функцией типа плотность-плотность.

Вычисление этой функции можно произвести, используя кумулянтное разложение/3,4/.

Если x и y операторы, тогда

$$\langle e^x\, e^y \rangle = \exp\{ 0_{xy} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n \} , \tag{15}$$

где 0_{xy} - оператор, располагающий все операторы x слева от операторов y

$$M_1 = \langle x \rangle + \langle y \rangle$$
$$M_2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 + \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 + 2\langle xy \rangle . \tag{16}$$

Производя подстановку

$$x = i\vec{q}(\vec{R}_\ell(t) - \vec{R}_n(t))$$
$$y = i\vec{q}'(\vec{R}_k(t') - \vec{R}_m(t')) \tag{17}$$

и опуская члены M_n с $n > 2$, получим

$$\chi^{\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell k n m}(t - t') =$$

$$= \frac{1}{M^2} \iint d^3\vec{q}\, d^3\vec{q}'\, \phi(\vec{q})\, \phi(\vec{q}')\, q^\alpha q'^\beta q^\gamma q'^\delta \times$$

$$\times e^{i\vec{q}(\langle\vec{R}_\ell\rangle - \langle\vec{R}_n\rangle)} e^{i\vec{q}'(\langle\vec{R}_k\rangle - \langle\vec{R}_m\rangle)} \tag{18}$$

$$\times e^{-\frac{1}{2}\{\langle[\vec{q}(\vec{R}_\ell - \vec{R}_n)]^2\rangle - \langle\vec{q}(\vec{R}_\ell - \vec{R}_n)\rangle^2\}}$$

$$\times e^{-\frac{1}{2}\{\langle[\vec{q}'(\vec{R}_k - \vec{R}_m)]^2\rangle - \langle\vec{q}'(\vec{R}_k - \vec{R}_m)\rangle^2\}}$$

$$\times \exp\{-\sum_{\mu\nu} q^\mu q'^\nu [\Delta^{\ell k}_{nm} F^{\mu\nu}(t - t')]\},$$

где символ $\Delta^{\ell k}_{nm}$ имеет такой же смысл, как в формуле (14). Вычисление χ сводится, таким образом, к вычислению парных корреляционных функций. В этом приближении пренебрежение членами высших порядков эквивалентно разложению по малым отклонениям атомов из положений равновесия.

В случае жидкости это допустимо для времен меньших, чем время перемещения атома на одно междуатомное расстояние. Усреднение в этом случае производится по периоду времени, за который атомы мало смещаются из положений равновесия.

Разложим последнюю экспоненту в выражении (18) в ряд, предполагая, что показатель степени мал

$$\exp\{-\sum_{\mu\nu} q^{\mu} q'^{\nu} [\Delta^{\ell k}_{nm} F^{\mu\nu}(t-t')]\} =$$

$$= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \{-\sum_{\mu\nu} q^{\mu} q'^{\nu} [\Delta^{\ell k}_{nm} F^{\mu\nu}(t-t')]\}^{s}.$$

Функцию χ (18) запишем в виде

$$\chi^{\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell knm}(t-t') = \sum_{s} \frac{1}{s!} \overset{(s)}{\chi}{}^{\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell knm}(t-t'), \tag{20}$$

где

$$\overset{(0)}{\chi}{}^{\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell knm} = \frac{1}{M^2} \tilde{\phi}^{\alpha\gamma}_{\ell n} \tilde{\phi}^{\beta\delta}_{km}$$

(21)

$$\overset{(1)}{\chi}{}^{\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell knm}(t-t') = -\frac{1}{M^2} \sum_{\mu\nu} \tilde{\phi}^{\alpha\gamma\mu}_{\ell n} \tilde{\phi}^{\beta\delta\nu}_{km} [\Delta^{\ell k}_{nm} F^{\mu\nu}(t-t')]$$

. . . .

$$
\chi^{(s)\alpha\beta\gamma\delta}_{\ell k n m}(t-t') = \frac{(-1)^s}{M^2}\sum_{\mu_1\ldots\mu_s}\sum_{\nu_1\ldots\nu_s}\tilde{\tilde{\phi}}^{\alpha\gamma\mu_1\ldots\mu_s}_{\ell n}\,\tilde{\tilde{\phi}}^{\beta\delta\nu_1\ldots\nu_s}
$$

$$
\times\,[\Delta^{\ell k}_{nm}F^{\mu_1\nu_1}(t-t')]\ldots[\Delta^{\ell k}_{nm}F^{\mu_s\nu_s}(t-t')]. \tag{22}
$$

Здесь $\tilde{\tilde{\phi}}^{\alpha\beta\mu_1\ldots\mu_s}_{\ell n}$ являются ангармоническими силовыми постоянными s -ой степени для пары атомов ℓ и n

$$
\tilde{\tilde{\phi}}^{\alpha\gamma\mu_1\ldots\mu_s}_{\ell n} = \int d^3\vec{q}\,\phi(\vec{q})\,q^\alpha q^\gamma q^{\mu_1}\ldots q^{\mu_s} e^{i\vec{q}(\langle\vec{R}_\ell\rangle-\langle\vec{R}_n\rangle)}.
$$

$$
\times\, e^{-\frac{1}{2}\{\langle[\vec{q}(\vec{R}_\ell-\vec{R}_n)]^2\rangle-\langle\vec{q}(\vec{R}_\ell-\vec{R}_n)\rangle^2\}}. \tag{23}
$$

Нетрудно показать, что силовые постоянные связываются условием

$$
\sum_\ell \tilde{\tilde{\phi}}^{\mu_1\ldots\mu_p}_{\ell n} = 0\ , \tag{24}
$$

которое вытекает из инвариантности системы относительно ее сдвига в целом.

Окончательно уравнение (12) запишем в виде

$$
\frac{d^4 K^{\alpha\beta}_{\ell k}}{dt^4} - \sum_{\substack{nm\\ \gamma\delta}}\tilde{\tilde{\phi}}^{\alpha\gamma}_{\ell n}\,\tilde{\tilde{\phi}}^{\beta\delta}_{km}\,K^{\gamma\delta}_{nm} =
$$

$$= \sum_{\substack{nm \\ \gamma\delta\mu\nu}} \phi^{\alpha\gamma\mu}_{\ell n} \phi^{\beta\delta\nu}_{km} \Delta^{\ell k}_{nm} F^{\mu\nu} \Delta^{\ell k}_{nm} K^{\gamma\delta}. \tag{25}$$

Это система однородных дифференциальных уравнений 4-го порядка с коэффициентами, зависящими от времени. Временная зависимость этих коэффициентов определяется функциями корреляций $F(t)$, которые, в свою очередь, определяются с помощью к.к.ф., что требует самосогласованного решения системы. Пренебрежение членами в правой части уравнения (25) соответствует псевдогармоническому приближению. Правая часть уравнения (25) описывает вклад колебаний различных частот, что легко видеть, производя преобразование Фурье. В этом случае в правую часть войдет свертка Фурье-образов корреляционных функций, которые в псевдогармоническом приближении имеют вид суммы δ-функций. Поэтому в псевдогармоническом приближении полученная система превращается в систему алгебраических уравнений, для решения которой необходимо произвести диагонализацию не только по индексам узлов, но также по дискретным значениям волнового вектора k.

Уравнения движения для корреляционных функций в импульсном представлении

В дальнейшем ограничимся рассмотрением систем с трансляционной симметрией. В этом случае удобно пользоваться представлением вторичного квантования для операторов $R^{\alpha}_{\ell}(t)$ и $P^{\alpha}_{\ell}(t)$

$$R^{\alpha}_{\ell}(t) = \sum_{\vec{k}} \frac{W^{\alpha}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{\ell}}}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{k}}}} A_{\vec{k}}(t) \tag{26}$$

$$P^{\alpha}_{\ell}(t) = \frac{1}{i} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{M\omega}{2N}}\, W^{\alpha}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{\ell}} B_{\vec{k}}(t) , \tag{27}$$

где $W^{a}_{\vec k}$ и $\omega_{\vec k}$ – векторы и частоты нормальных колебаний, соответствующих волновому вектору $\vec k$.

Операторы $A_{\vec k}$ и $B_{\vec k}$ подчиняются следующим коммутационным соотношениям

$$[B_{\vec k}\ A^{+}_{\vec k'}] = 2\delta_{\vec k \vec k'}\ ,\ [A_{\vec k}, A_{\vec k'}] = 0\ ;\ [B_{\vec k}, B_{\vec k'}] = 0\ ; \tag{28}$$

$$A_{\vec k} = A^{+}_{-\vec k}\ ;\ B_{\vec k} = -B^{+}_{-\vec k}\ . \tag{29}$$

Совершая преобразование (26), (27), получим гамильтониан (1) в виде

$$H = H_0 + H_a \tag{30}$$

$$H_0 = \frac{1}{4}\sum_{\vec k} \omega_{\vec k}(A^{+}_{\vec k} A_{\vec k} + B^{+}_{\vec k} B_{\vec k})$$

$$H_a = \sum_{n=1,3}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\vec k_1 \ldots \vec k_n} V_n(\vec k_1 \ldots \vec k_n) A_{\vec k_1} \ldots A_{\vec k_n} \tag{31}$$

$$V_n(\vec k_1 \ldots \vec k_n) = \sum_{\ell_1 \ldots \ell_n} \phi^{a_1 \ldots a_n}_{\ell_1 \ldots \ell_n} \prod_{j=1}^{n} \frac{W^{a_j}_{\vec k_j}\ e^{i \vec k_j \vec \ell_j}}{\sqrt{2M\,\omega_{\vec k_j}}}, \tag{32}$$

где $\phi^{a_1 \ldots a_n}_{\ell_1 \ldots \ell_n}$ – силовые постоянные. Из закона сохранения квазиимпульса следует, что $V = 0$, если $\vec k_1 + \vec k_2 + \ldots \vec k_n \neq 0$. Заметим, что в представлении вторичного квантования ограничение рассмотрения парным потенциалом не является принципиальным, и можно его не вводить.

Введем коммутаторные корреляционные функции

$$K_{\vec{k}\vec{k}'}(t-t') = \langle [A_{\vec{k}}(t), A_{\vec{k}'}(t')] \rangle , \tag{33}$$

которые связаны с корреляционными функциями

$$F_{\vec{k}\vec{k}'}(t-t') = \langle A_{\vec{k}}(t)\ A_{\vec{k}'}(t') \rangle \tag{34}$$

соотношением

$$F_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega) = \frac{K_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega)}{1-e^{-\frac{\omega}{T}}} . \tag{35}$$

$K_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega)$ и $F_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega)$ определены преобразованием Фурье

$$\begin{aligned} K_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\ K_{\vec{k}\vec{k}'}(t)\, e^{i\omega t} \\ F_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\ F_{\vec{k}\vec{k}'}(t)\, e^{i\omega t} . \end{aligned} \tag{36}$$

Для пространственно однородных систем функции (33) и (34) диагональны по индексам k и k' /5/.

Уравнения движения для гейзенберговский операторов $A_k(t)$ и $B_k(t)$ с гамильтонианом (30) имеют вид

$$i\frac{d}{dt}A_{\vec{k}} = \omega_{\vec{k}} B_{\vec{k}}; \quad i\frac{d}{dt}A^{+}_{\vec{k}} = -\omega_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} \tag{37}$$

$$i\frac{d}{dt}B_{\vec k}=\omega_{\vec k}A_{\vec k}+2\sum_{n=1,3}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\sum_{\vec k_2\ldots\vec k_n}V_n(-\vec k\,\vec k_2\ldots\vec k_n)A_{\vec k_2}\ldots A_{\vec k_n}$$

$$i\frac{d}{dt}B^{+}_{\vec k}=-\omega_{\vec k}A^{+}_{\vec k}-2\sum_{n=1,3}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\sum_{\vec k_2\ldots\vec k_n}V_n(\vec k\,\vec k_2\ldots\vec k_n)A_{\vec k_2}\ldots A_{\vec k_n}. \tag{38}$$

Как и ранее, уравнения движения для функции $K_{\vec k\vec k'}(t-t')$ получим, дифференцируя ее дважды по t и t', воспользовавшись (38) и (37) и соотношениями (29)

$$\frac{d^4K_{\vec k\vec k}(t-t')}{dt^2\,dt'^2}=\omega^4_{\vec k}K_{\vec k\vec k}(t-t')+$$

$$+2\omega^3_{\vec k}\sum^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\sum_{\vec k_2\ldots\vec k_n}\{V_n(\vec k-\vec k_2\ldots-\vec k_n)<[A_{\vec k}(t),A^{+}_{\vec k_2}(t')\ldots A^{+}_{\vec k_n}(t')]>$$

$$+V_n(-\vec k\,\vec k_2\ldots\vec k_n)<[A_{\vec k_2}(t)\ldots A_{\vec k_n}(t),A^{+}_{\vec k}(t')]>\}+ \tag{39}$$

$$+4\omega^2_{\vec k}\sum_{n=3}^{\infty}\sum_{m=3}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\frac{1}{(n-1)!}\sum_{\vec k_2\ldots\vec k_n}\sum_{\vec q_2\ldots\vec q_n}V_n(-\vec k\vec k_2\ldots\vec k_n)V_m(\vec k-\vec q_2\ldots-\vec q_m)\times$$

$$\times<A_{\vec k_2}(t)\ldots A_{\vec k_n}(t),A^{+}_{\vec q_2}(t')\ldots A^{+}_{\vec q_m}(t')]>.$$

Корреляционные коммутаторные функции $\langle [A_{\vec k}(t), A^+_{\vec k_2}(t') \ldots A^+_{\vec k_n}(t')] \rangle$ в этом выражении представим в виде разложения по функциям низшего порядка/1/, пренебрегая двухфононными процессами и пользуясь симметрией функции $V_n(\vec k_1, \vec k_2 \ldots \vec k_n)$ относительно перестановки индексов

$$\sum_{\vec k_2 \ldots \vec k_n} V_n(\vec k - \vec k_2 \ldots - \vec k_n) \langle [A_{\vec k}(t), A_{\vec k_2}(t') \ldots A_{\vec k_n}(t')] \rangle \approx$$

$$\sum_{\vec p} \sum_{\vec k_3 \ldots \vec k_n} V_n(\vec k - \vec p - \vec k_3 \ldots - \vec k_n)(n-1) \langle A^+_{\vec k_3} \ldots A^+_{\vec k_n} \rangle \langle [A_{\vec k}(t), A^+_{\vec p}(t')] \rangle . \qquad (40)$$

При сведении функций $\langle [A_{\vec k_2}(t) \ldots A_{\vec k_n}(t), A^+_{\vec q_2}(t') \ldots A^+_{\vec q_m}(t')] \rangle$ к функциям низшего порядка воспользуемся двухвременным расцеплением/2/

$$\sum_{\vec k_2 \ldots \vec k_n} \sum_{\vec q_2 \ldots \vec q_m} V_n(-\vec k \vec k_2 \ldots \vec k_n) V_m(\vec k - \vec q_2 \ldots \vec q_m) \langle [A_{\vec k_2}(t) \ldots A_{\vec k_n}(t), A^+_{\vec q_2}(t') \ldots A^+_{\vec q_m}(t')] \rangle$$

$$\approx \sum_{\vec p} \sum_{\vec k_3 \ldots \vec k_n} \sum_{\vec q_3 \ldots \vec q_n} V_n(-\vec k \vec p \vec k_3 \ldots \vec k_n) V_m(\vec k - \vec p - \vec q_3 \ldots - \vec q_m)(n-1)(m-1) \times \qquad (41)$$

$$\times \langle A_{\vec k_3}(t) \ldots A_{\vec k_n}(t), A^+_{\vec q_3}(t') \ldots A^+_{\vec q_m}(t') \rangle \langle A_{\vec p}(t), A_{\vec p}(t') \rangle .$$

Уравнение (32) принимает вид:

$$\frac{d^4 K_{\vec k \vec k}(t-t')}{dt^2\, dt'^2} = [\omega^4_{\vec k} + 4\omega^3_{\vec k} P(-\vec k, \vec k)] K_{\vec k \vec k}(t-t') +$$

$$+ 4\omega^2_{\vec k} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \sum_{\vec k_1 \ldots \vec k_n} \sum_{\vec q_1 \ldots \vec q_m} \sum_{\vec p} V_{n+2}(-\vec k, \vec p \vec k_1 \ldots \vec k_n) \times$$

$$V_{m+2}(\vec{k}-\vec{p}-\vec{q}_1\ldots-\vec{q}_m) < A_{\vec{k}_1}(t)\ldots A_{\vec{k}_n}(t)\, A^+_{\vec{q}_1}(t')\ldots A^+_{\vec{q}_m}(t') > \times$$

$$\times <[\, A_{\vec{p}}(t)\ ,\ A^+_{\vec{p}}(\,t'\,)\,]> \ , \tag{42}$$

где

$$P(-\vec{k}\vec{p}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\vec{k}_1\ldots\vec{k}_n} V_{n+2}(-\vec{k}\vec{p}\vec{k}_1\ldots\vec{k}_n) < A_{\vec{k}_1}\ldots A_{\vec{k}_n} > \ . \tag{43}$$

Расцепление функции $<A_{\vec{k}_1}(t)\ldots A_{\vec{k}_n}(t)\, A^+_{\vec{q}_1}(t')\ldots A^+_{\vec{q}_m}(t')>$ производим, сохраняя лишь парные корреляционные функции, зависящие от времени

$$<\prod_{l=1}^{n} A_{\vec{k}_l}(t) \prod_{j=1}^{m} A_{\vec{k}_j}(t') > = <\prod_{l=1}^{n} A_{\vec{k}_l}(t)><\prod_{j=1}^{m} A_{\vec{k}_j}(t')> +$$

$$+ \sum_{s=2}^{n} \sum_{r=2}^{m} < A_{\vec{k}_s}(t) A_{\vec{q}_r}(t') > \delta_{\vec{k}_s \vec{q}_r} <\prod_{l\neq s}^{n} A_{\vec{k}_l}(t) > < \prod_{j\neq r}^{m} A_{\vec{q}_j}(t') > + \ldots \tag{44}$$

Рассматриваемая система является равновесной, поэтому корреляционные коммутаторные функции $K_{\vec{k}\vec{k}}$ и корреляционные функции зависят лишь от разности времен t и t'. Используя (44), получим уравнение

$$\frac{d^4 K_{\vec{k}\vec{k}}(t)}{dt^4} - \Omega^4_{\vec{k}} K_{\vec{k}\vec{k}}(t) = \sum_{\vec{p}} \chi_{\vec{k}\vec{p}}(t)\ K_{\vec{p}\vec{p}}(t), \tag{45}$$

где

$$\Omega^2_{\vec{k}} = \omega^2_{\vec{k}} + 2\omega_k P(-\vec{k}\vec{k}) \tag{46}$$

$$\chi_{\vec{k}\vec{p}}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{s_1 \ldots s_n} | Q_{n+2}(-\vec{k}\vec{p}\vec{s}_1 \ldots \vec{s}_n) |^2 F_{\vec{s}_1\vec{s}_1} F_{\vec{s}_2\vec{s}_2} \ldots F_{\vec{s}_n\vec{s}_n} \tag{47}$$

$$Q_{n+2}(-\vec{k}\vec{p}\vec{s}_1 \ldots \vec{s}_n) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\vec{k}_1 .. \vec{k}_m} V_{m+n+2}(-\vec{k}\vec{p}\vec{s}_1 \ldots \vec{s}_n \vec{k}_1 \ldots \vec{k}_m) \times \tag{48}$$

$$\times \langle A_{\vec{k}_1} \ldots A_{\vec{k}_m} \rangle .$$

Здесь введена псевдогармоническая частота фонона Ω_k в самосогласованном поле остальных фононов. Из определения $Q_n(\vec{p}_1 \ldots \vec{p}_n)$ следует очевидное свойство

$$Q^+_{n+2}(\vec{k} - \vec{p} - \vec{s}_1 \ldots - \vec{s}_n) = Q_{n+2}(-\vec{k}\vec{p}\vec{s}_1 \ldots \vec{s}_n) , \tag{49}$$

которым мы воспользовались при получении уравнения (45). Отметим, что мы опустили член $P(-\vec{k}, \vec{p})$ с $\vec{p} \neq \vec{k}$, воспользовавшись законом сохранения квазиимпульса.

Полученная система уравнений (45) является системой однородных дифференциальных уравнений четвертого порядка с зависящими от времени коэффициентами. Временная зависимость коэффициентов определяется корреляционными функциями (34). Следует обратить внимание на то, что в качестве нулевого приближения мы приняли псевдогармоническое приближение. Правая часть уравнений (45) описывает вклад целого ряда многофононных процессов, не учитываемых в псевдогармоническом приближении.

Из коммутационных соотношений (28) и уравнений движения для операторов в гайзенберговском представлении следуют начальные условия для коммутаторных корреляционных функций и ее производных

$$K_{\vec{k}\vec{k}}(0)=0\ ;\ \dot{K}_{\vec{k}\vec{k}}(0)=-2i\omega_{\vec{k}}\ ;\ \ddot{K}_{\vec{k}\vec{k}}(0)=0\ ;\ \dddot{K}_{\vec{k}\vec{k}}(0)=-2i\omega_{\vec{k}}\Omega_{\vec{k}}\,. \tag{50}$$

Система уравнений четвертого порядка может быть сведена к системе уравнений второго порядка подстановкой

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}(t) &= \Omega^2_{\vec{k}}\, K_{\vec{k}\vec{k}}(t) + \frac{d^2K_{\vec{k}\vec{k}}(t)}{dt^2} \\ v_{\vec{k}}(t) &= \Omega^2_{\vec{k}}\, K_{\vec{k}\vec{k}}(t) - \frac{d^2K_{\vec{k}\vec{k}}(t)}{dt^2}\,. \end{aligned} \tag{51}$$

Уравнения для функции $u_k(t)$ $v_k(t)$ имеют вид

$$\frac{d^2 u_{\vec{k}}(t)}{dt^2} - \Omega^2_{\vec{k}}\, u_{\vec{k}}(t) = \frac{1}{2}\sum_{\vec{p}} \frac{1}{\Omega^2_{\vec{p}}}\, \chi_{\vec{k}\vec{p}}(t)\,\left(u_{\vec{p}}(t)+v_{\vec{p}}(t)\right) \tag{52а}$$

$$\frac{d^2 v_{\vec{k}}(t)}{dt^2} - \Omega^2_{\vec{k}}\, v_{\vec{k}}(t) = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{p}} \frac{1}{\Omega^2_{\vec{p}}}\, \chi_{\vec{k}\vec{p}}(t)\left(u_{\vec{p}}(t)+v_{\vec{p}}(t)\right)\,. \tag{52в}$$

Начальные условия:

$$u_{\vec{k}}(0)=0\ ;\ \dot{u}_{\vec{k}}(0)=0\ ;\ v_{\vec{k}}(0)=0\ ;\ \dot{v}_{\vec{k}}(0)=-4i\,\Omega^2_{\vec{k}}\,\omega_{\vec{k}}. \tag{53}$$

Коммутаторная корреляционная функция выражается через u_k и v_k следующим образом:

$$K_{\vec{k}\vec{k}}(t) = \frac{1}{\Omega^2_{\vec{k}}} \left(u_{\vec{k}}(t) + v_{\vec{k}}(t) \right) . \tag{54}$$

В случае $u_{\vec{k}}(t) = 0$ первое уравнение системы (51) соответствует псевдогармоническому приближению. Функция $v_{\vec{k}}(t)$ в этом приближении с точностью до множителя равна коммутаторной корреляционной функции $K_{\vec{k}\vec{k}}(t)$. Система уравнений (52) является самосогласованной системой, так как корреляционные функции, определяющие коэффициенты этого уравнения, выражаются через его решения с помощью формул (47), (36), (35) и (54).

Решение системы уравнений (52) представляет значительные трудности. Поэтому для иллюстрации свойств решений этой системы примем несколько упрощающих предположений. Ограничим наше рассмотрение случаем низких температур, где ангармонические поправки невелики. Принимаем $u_{\vec{k}}(t) = 0$; это равенство является точным в псевдогармоническом приближении. Пренебрегая недиагональными элементами матрицы $\chi_{\vec{k}\vec{p}}(t)$, произведем дальнейшее упрощение системы. В этом случае ангармонические члены третьего порядка не учитываются ($Q_3(-\vec{k}\vec{k}\vec{s})=0$). Члены выше четвертого порядка отбрасываем. Это приближение описывает поведение фонона в среднем поле взаимодействующих между собой фононов. Временную зависимость функции $\chi_{kk}(t)$ определим с помощью корреляционных функций, вычисленных в псевдогармоническом приближении

$$F_{\vec{s}\vec{s}}(t) = \frac{\omega_{\vec{s}}}{\Omega_{\vec{s}}} \left[\bar{n}_{\vec{s}} \; e^{i\Omega_{\vec{s}} t} + (\bar{n}_{\vec{s}} + 1)\, e^{-i\Omega_{\vec{s}} t} \right] , \tag{55}$$

где

$$\bar{n}_{\vec{s}} = 1 / (e^{\frac{\omega_{\vec{s}}}{\theta}} - 1) .$$

Приближенное решение упрощенной системы имеет вид

$$V_{\vec{k}}(t) = \frac{2\Omega_{\vec{k}}\,\omega_{\vec{k}}}{1 + R_{\vec{k}}} \{ e^{-i\Omega_{\vec{k}}t - (\xi_{\vec{k}}(t) - \xi_{\vec{k}}(0))} - e^{i\Omega_{\vec{k}}t + (\phi_{\vec{k}}(t) - \phi_{\vec{k}}(0))} \} , \qquad (56)$$

где

$$\xi_{\vec{k}}(t) = \sum_{\vec{s}} | Q_4(-\vec{k}\vec{k} - \vec{s}\vec{s}) |^2 \frac{\omega^2_{\vec{s}}}{8\Omega^2_{\vec{k}}\,\Omega^3_{\vec{s}}} [2i\,\bar{n}_{\vec{s}}(\bar{n}_{\vec{s}} + 1) \frac{\Omega_{\vec{s}}}{\Omega_{\vec{k}}} t + $$

$$+ \frac{\bar{n}^2_{\vec{s}}\, e^{2i\Omega_{\vec{s}} t}}{\Omega_{\vec{s}} + \Omega_{\vec{k}}} + \frac{(\bar{n}_{\vec{s}}+1)^2\, e^{-2i\Omega_{\vec{s}} t}}{\Omega_{\vec{s}} - \Omega_{\vec{k}}}] ,$$

$$\phi_{\vec{k}}(t) = \sum_{s} | Q_4(-\vec{k}\vec{k} - \vec{s}\vec{s}) |^2 \frac{\omega^2_{\vec{s}}}{8\Omega^2_{\vec{k}}\,\Omega^3_{\vec{s}}} [2i\,\bar{n}\ (\bar{n} + 1) \frac{\Omega_{\vec{s}}}{\Omega_{\vec{k}}} t + \qquad (57)$$

$$+ \frac{n^2_{\vec{s}}\, e^{2i\Omega_{\vec{s}} t}}{-\Omega_{\vec{s}} + \Omega_{\vec{k}}} + \frac{(\bar{n}_{\vec{s}}+1)^2\, e^{-2i\Omega_{\vec{s}} t}}{-\Omega_{\vec{s}} - \Omega_{\vec{k}}}] ,$$

$$R_{\vec{k}} = \sum_{\vec{s}} | Q_4(-\vec{k}\vec{k} - \vec{s}\vec{s}) |^2 \frac{\omega^2_{\vec{s}}}{4\Omega^2_{\vec{k}}\,\Omega^2_{\vec{s}}} [\frac{\bar{n}_{\vec{s}}(\bar{n}_{\vec{s}} + 1)}{\Omega^2_{\vec{k}}} + \frac{\bar{n}^2_{\vec{s}} + (\bar{n}_{\vec{s}} + 1)^2}{\Omega^2_{\vec{k}} - \Omega^2_{\vec{s}}}].$$

Функция (56) удовлетворяет уравнению (52в) и начальным условиям (53), если отбросим получающиеся в процессе двойного дифференцирования уравнения члены $\dot{\phi}^2_{\vec{k}}$ и $\dot{\xi}^2_{\vec{k}}$, малые относительно $\ddot{\phi}_k$ и $\xi_{\vec{k}}$. Это допустимо, поскольку $|\phi_{\vec{k}}| \ll 1$ и $|\xi_{\vec{k}}| \ll 1$. Полученное решение устойчиво для всех температур. Из полученных соотношений

(56), (57) следует, что частота и амплитуда колебаний в рассматриваемом случае периодически зависят от времени.

С помощью метода усреднения [6] можно показать, что решение устойчиво и в.том случае, если не пренебрегать членами $\phi^2_{\vec{k}}$ и $\xi^2_{\vec{k}}$. Отметим, что здесь не проведено процесса самосогласования решения.

Заключение

Метод двухвременного расцепления корреляционных функций оказывается удобным при изучении ангармонических эффектов в кристалле, позволяя учесть временную зависимость силовых постоянных, обусловленную многофононными процессами. В области высоких энергий вблизи точки плавления этот эффект может оказывать существенное влияние на устойчивость решетки. Приближения, принятые при получении решения (56), (57), являются весьма грубыми и позволяют сделать лишь качественные оценки поведения корреляционных функций . Амплитуда и частота колебаний корреляционных функций при этом зависят от времени периодически. При исследовании устойчивости решетки решение должно быть получено самосогласованным образом.

Авторы благодарны Д.Н.Зубареву и Н.М.Плакиде за ценные советы и многочисленные обсуждения.

Литература

1. *Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Acta Phys. Acad. Scien. Hung. 25 (1), 17 (1968).*
2. *С.И.Кубарев, В.В.Пономарев. ДАН 170, (4) 815 (1966).*
3. *M.G.Kendal, A.Stuart. The Advanced Theory of Statistics, vol. 1, London (1958).*
4. *A.A.Maradudin, A.E.Fein. Phys. Rev. 128, 2589 (1962).*
5. *С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, Наука, Москва, 1965.*

6. *Н.Н.Боголюбов, Ю.А.Митропольский. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. Москва (1958).*

Рукопись поступила в издательский отдел
15 мая 1969 года.