

СЗ2У.1а

M-602

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

1638/2-72

P4 - 6295



Н.Милински

КОЭФФИЦИЕНТ ТРЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА
ВСЛЕДСТВИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ЕГО С ФОНОНАМИ

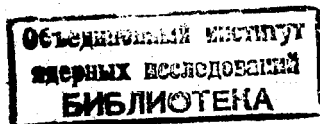
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1972

P4 - 6295

Н.Милински*

КОЭФФИЦИЕНТ ТРЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА
ВСЛЕДСТВИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ЕГО С ФОНОНАМИ



* Университет в Новом Саде и Институт ядерных исследований
им. Бориса Кидрича, Белград, Югославия.

1. Введение

В настоящей работе определяется коэффициент трения ξ для электрона в проводящей зоне полупроводника или изолятора вследствие взаимодействия его с фононами.

Вычисление коэффициента трения в квантово-механическом случае представляет интерес по следующим причинам. В нулевом приближении электрон в неподвижной решетке имеет бесконечно большую подвижность $\mu = \infty$ и нулевой коэффициент трения $\xi = 0$. При учете взаимодействия электрона с колебаниями решетки, которое мы будем характеризовать константой связи λ , подвижность электрона ставится конечной $\mu > \infty$, а коэффициент трения $\xi > 0$ при $\lambda > 0$. Поэтому вычисление коэффициента трения в виде разложения по константе связи λ вблизи $\xi = 0$ представляется более удобным, чем подобное же разложение для подвижности μ , нулевой член которого расходится, $\mu = \infty$. Подвижность μ может быть затем определена с помощью соотношений Эйнштейна-Смолуховского. Хотя для квантового случая это соотношение не всегда справедливо, в настоящей работе оно выполняется /1/.

В §2 выведена микроскопическая формула типа Кубо для коэффициента трения ξ (15), справедливая для рассматриваемого случая электрон-фононной системы. Используя результаты §2, в §3 определим коэффициент трения электрона вследствие взаимодействия его с фононами, укажем способ разложения ξ в ряд по λ и определим низший исчезающий член этого ряда (32)-(33). В качестве примера рассмотрено вычисление коэффициента трения электрона вследствие взаимодействия с оптическими фононами. В §4 обсуждаются результаты.

§ 2. Коэффициент трения броуновского движения квантово-механической частицы

Искомое выражение для коэффициента трения ξ для классического случая было найдено в ряде работ^{/2/}. Здесь выведем формулу для квантового случая, следуя^{/3/}. Пусть систему частиц можно разложить на две части: большую подсистему с гамильтонианом H_2 , представляющую термостат, и подсистему частиц малой плотности с гамильтонианом

$$H_1 = \sum_a \frac{P_a^2}{2M} + \sum_{a,2} U(|R_a - r_2|), \quad (1)$$

где P_a , R_a , M обозначают импульс, координату и массу частиц малой подсистемы, а r_2 - координату частиц термостата. В силу малой плотности, и, следовательно, малого влияния второй подсистемы на термостат будем считать, что гамильтониан H_2 не зависит от переменных малой подсистемы.

На систему будем налагать внешнее поле, вызывающее неравновесное движение малой подсистемы, оставляя частицы термостата в статистическом равновесии. В дальнейшем такое движение частиц малой подсистемы будем называть броуновским движением, а частицы - броуновскими частицами^{/4/}. Гамильтониан такого поля имеет вид^{/1,3/}

$$\Delta H = e^{st} \left(\frac{-e}{cM} A \sum_a P_a \right), \quad (2)$$

где $A = const$ и не зависит от динамических переменных.

Для неравновесной добавки f статистического оператора ρ метод Кубо^{/2,5/} дает

$$f = i \int_{-\infty}^0 e^{st} dt \int d\lambda \rho_0 [\Delta H(-i\lambda + t), H_0], \quad (3)$$

где ρ_0 - равновесный статистический оператор системы, а $H_0 = H_1 + H_2$. Вычисляя коммутатор в (3), получаем

$$[\Delta H(-i\lambda + t), H_0] = \frac{-ie}{cM} \sum_{a,\mu} A_\mu F_{a\mu}, \quad (4)$$

где $\mu = \{x, y, z\}$,

$$F_{a\mu} = \sum_2 \frac{\partial U(|R_a - r_2|)}{\partial R_{a\mu}}. \quad (5)$$

По определению (5) будем называть оператором квантово-механической силы действия гермостата на броуновскую частицу.

На основе (4), (3) принимает вид:

$$f = \frac{e}{cM} \sum_{a,\mu} A_\mu \int_0^\beta d\lambda \int_0^t e^{st} dt \rho_0 F_{a\mu}(-i\lambda + t). \quad (6)$$

Усредняя оператор скорости броуновской частицы

$$V_1 = \frac{1}{M} P_1 - \frac{e}{cM} A \quad (7)$$

с неравновесным оператором $\rho = \rho_0 + f$, с точностью до линейных членов по A получаем дрейфовую скорость u_1 :

$$u_{1\nu} = \frac{-e}{cM} A_\nu + \frac{e}{cM^2} \sum_\mu A_\mu \int_0^\beta d\lambda \int_0^t e^{st} dt \langle F_{1\mu}(-i\lambda + t) P_{1\nu} \rangle, \quad (8)$$

где

$$\langle F_{1\mu}(-i\lambda + t) P_{1\nu} \rangle = \text{Sp}(\rho_0 F_{1\mu}(-i\lambda + t) P_{1\nu}) \quad (9)$$

равновесный квантово-механический коррелятор силы и импульса броуновской частицы. В случае электрон-фононного взаимодействия, которое мы будем рассматривать, этот коррелятор равен нулю, что показано в приложении А. Дальше будем рассматривать лишь случай, в котором коррелятор силы и импульса равен нулю и для дрейфовой скорости можно писать:

$$u_{1\nu} = \frac{-e}{cM} A_\nu e^{st}. \quad (10)$$

Из уравнения

$$\dot{P}_I = -i[P_I, H_0] - i[P_I, \Delta H] e^{st},$$

вычисляя коммутаторы, получаем:

$$\dot{P}_I = F_I, \quad (11)$$

а статистическое усреднение с точностью до линейных членов по A дает

$$\langle \dot{P}_{I\nu} \rangle = \frac{e}{cM} \sum_{\mu} A_{\mu} \xi_{\mu\nu}, \quad (12)$$

где

$$\xi_{\mu\nu} = \int_0^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^0 e^{st} \langle F_{I\mu}(-i\lambda + t) F_{I\nu} \rangle dt. \quad (13)$$

Пользуясь соотношением (10), получаем

$$\langle \dot{P}_{I\nu} \rangle = - \sum_{\mu} u_{I\mu} \xi_{\mu\nu}. \quad (14)$$

Левая часть уравнения (14) представляет среднее ускорение броуновской частицы, а правая часть — среднюю силу, действующую на броуновскую частицу. Видно, что $\xi_{\mu\nu}$ можно понимать как тензор трения броуновской частицы. Имея в виду, что $\xi_{\mu\nu}$ — симметричный тензор в (13), можно получить /6,7/

$$\xi_{\mu\nu} = \frac{\beta}{2} \int_{-\infty}^0 e^{st} \{ \langle F_{I\mu}(t) F_{I\nu} \rangle + \langle F_{I\mu}(-t) F_{I\nu} \rangle \}. \quad (15)$$

Это и есть искомое выражение для коэффициента трения. Добавим, что в $F_{I\mu}$ индекс означает, что сила относится к одной броуновской частице.

§3. Коэффициент трения электрона вследствие взаимодействия с фонами

Взаимодействие электрона с периодическим потенциалом кристаллической решетки, под влиянием которой электрон движется по динамичес-

ким законам, не приводит к диссипативным процессам — последние определяются взаимодействием с тепловыми колебаниями, которые приводят к конечному значению коэффициента трения.

Тепловые колебания решетки будем описывать в терминах фононов, понимая их как частицы термостата, под влиянием которых электрон совершает свое броуновское движение. Поэтому силу, фигурирующую в выражении для коэффициента трения (15), будем определять по формуле (5), выбирая для потенциала взаимодействия электрон-фононный потенциал. Имея в виду, что картина броуновского движения электрона происходит в периодическом потенциале решетки, будем пользоваться для описания движения электрона понятием квазиимпульса, что удобно для применения теории возмущения.

Для электрон-фононного потенциала в изотопном случае с учетом лишь продольной ветви колебания, как главной, будем пользоваться выражением^{/8/}

$$H = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k U_k e^{ikR} (b_k - b_{-k}^+), \quad (16)$$

где U_k — матричные элементы электрон-фононного взаимодействия k , b_k , b_{-k}^+ — волновой вектор, оператор поглощения и рождения фонона, а R — оператор координаты электрона.

Из (16) по (5) для оператора силы получаем:

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k S(k) e^{ikR} (b_k - b_{-k}^+), \quad (17)$$

где

$$S(k) = -iU_k k. \quad (18)$$

В представлении вторичного квантования по электронным переменным оператор e^{ikR} имеет вид:

$$e^{ikR} = \sum_p D(p, k) a_{p+k}^+ a_p, \quad (19)$$

где a_{p+k}^+ и a_p — операторы рождения и уничтожения электрона с соответствующим волновым вектором, а $D(p, k)$ при учете только нормальных процессов рассеяния есть

$$D(p, k) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{p+k}(\rho) u_p(\rho) d^3 \rho, \quad (20)$$

где Ω - объем элементарной ячейки решетки, а $u_{p+k}(\rho)$ и $u_p(\rho)$ - блоховские волновые функции электрона. С помощью этого разложения (17) можно переписать в виде:

$$F = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{p, k} S(k) D(p, k) a_{p+k}^+ a_p (b_k - b_{-k}^+), \quad (21)$$

а коррелятор силы, имеющий лишь диагональные тензорные элементы, в виде:

$$\langle F_{1\mu}(t) F_{1\nu} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\substack{p_1, k_1 \\ p_2, k_2}} S_{\mu}(k_1) S_{\nu}(k_2) D(p_1, k_1) D(p_2, k_2), \quad (22)$$

$$\{ \langle a_{p_1+k_1}^+(t) a_{p_1}(t) (b_{k_1}(t) - b_{-k_1}^+(t)) a_{p_2+k_2}^+ a_{p_2} (b_{k_2} - b_{-k_2}^+) \rangle \}.$$

С учетом перенормировки электрон-фононной системы корреляторы в правой части (22) расщепляются на произведение электронных и фононных корреляторов. В этом случае получаем:

$$\langle F_{1\mu}(t) F_{1\mu} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mu} S_{\mu}(k_1) S_{\mu}(k_2) D(p_1, k_1) D(p_2, k_2) \quad (23)$$

$$\langle a_{p_1+k_1}^+(t) a_{p_1}(t) a_{p_2+k_2}^+ a_{p_2} \rangle [\langle b_{k_1}(t) b_{-k_2} \rangle_0 + \langle b_{-k_1}^+(t) b_{k_2} \rangle_0].$$

Статистический оператор электронов $\rho = \rho(H_{oe} + H_{e\Phi})$ и оператор временной эволюции $\exp(+it(H_{oe} + H_{e\Phi}))$ можно разлагать в ряд по взаимодействию $H_{e\Phi}$ и тем самым получить разложение в ряд для коррелятора

$$K(t) = \langle a_{p_1+k_1}^+(t) a_{p_1}(t) a_{p_2+k_2}^+ a_{p_2} \rangle. \quad (24)$$

Как и всегда при разложении по электрон-фононному взаимодействию ряд будет содержать только парные члены по $H_{e\Phi}$ и соответственно по

коэффициенту электрон-фононной связи λ . Поскольку Λ уже содержится в $S_{\mu}(k)$, то сразу видно, что ряд по λ для ξ начинается с квадратичных членов и потому при $\lambda = 0$ будет $\xi = 0$, как и должно быть; при этом квадратичный член по λ для ξ получается, если в ряду для $K(t)$ учесть только нулевой член, в чем и состоит одно из преимуществ вычисления коэффициента трения, а не подвижности. Покажем, что этот член ξ не равен нулю и остановимся подробнее на его вычислении.

Нулевой член коррелятора $K(t)$ равен

$$K_0(t) = \langle a_{p_1}^+ a_{p_1} \rangle_0 \langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0 \delta(k_1) \delta(k_2) + \\ + \langle a_{p_2}^+(t) a_{p_2} \rangle_0 \langle a_{p_1}^+(t) a_{p_1} \rangle_0 \delta(p_1 + k_1 - p_2) \delta(p_1 - k_2 - p_2). \quad (25)$$

В этом приближении (23) становится

$$\langle F_{1\mu}(t) F_{1\mu} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{p_1, p_2} S_{\mu}(p_2 - p_1) S_{\mu}(p_1 - p_2) D(p_1, p_2 - p_1) D(p_2, p_1 - p_2) \times \\ \times \langle a_{p_2}^+(t) a_{p_2} \rangle_0 \langle a_{p_1}^+(t) a_{p_1} \rangle_0 (\langle b_{p_2 - p_1}^+(t) b_{p_2 - p_1} \rangle_0 + \langle b_{p_1 - p_2}^+(t) b_{p_1 - p_2} \rangle_0) + \\ + \frac{1}{V} \sum_{p_1, p_2} S_{\mu}(0) S_{\mu}(0) D(p_1, 0) D(p_2, 0) \times \\ \times \langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0 \langle a_{p_1}^+ a_{p_1} \rangle_0 (\langle b_0(t) b_0 \rangle_0 + \langle b_0(t) b_0 \rangle_0). \quad (26)$$

Из (18) видно, что $S_{\mu}(0) = 0$ и потому вторая сумма в (26) равняется нулю. В первой сумме на основе (18) $S_{\mu}(p_2 - p_1)$ можно заменять на

$S_{\mu}^{+}(p_1 - p_2)$, а вместо $D(p_1, p_2 - p_1)D(p_2, p_1 - p_2)$ можно ввести обозначение $C(p_1, p_2)$, имеющее значение

$$C(p_1, p_2) = \left| \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{p_1}^{+}(\rho) u_{p_2}(\rho) d^3 \rho \right|^2 \geq 0, \quad (27)$$

что легко проверяется на основе определения (20). Переходя от суммы по квазиимпульсам к интегралу, получим:

$$\langle F_{1\mu}(t) F_{1\mu} \rangle = \frac{V}{(2\pi)^6} \int d^3 p_1 d^3 p_2 |S_{\mu}(p_1 - p_2)|^2 C(p_1, p_2) \times \quad (28)$$

$$\times \langle a_{p_2}^{+}(t) a_{p_2} \rangle_0 \langle a_{p_1}(t) a_{p_1}^{+} \rangle_0 \{ \langle b_{p_2 - p_1}^{+}(t) b_{p_2 - p_1} \rangle_0 + \langle b_{p_1 - p_2}^{+}(t) b_{p_1 - p_2} \rangle_0 \}.$$

Для коэффициента трения на основе (28) из (15) после совершения интегрирования по t получаем:

$$\xi_{\mu\mu} = \frac{\beta \pi V}{(2\pi)^6} \int d^3 p_1 d^3 p_2 |S_{\mu}(p_1 - p_2)|^2 C(p_1, p_2) \langle a_{p_2}^{+} a_{p_2} \rangle_0 \langle a_{p_1} a_{p_1}^{+} \rangle_0 \times$$

$$\times \{ \langle b_{p_1 - p_2} b_{p_1 - p_2} \rangle_0 \delta(\epsilon(p_2) - \epsilon(p_1) + \omega(p_1 - p_2)) + \quad (29)$$

$$+ \langle b_{p_2 - p_1} b_{p_2 - p_1} \rangle_0 \delta(\epsilon(p_2) - \epsilon(p_1) - \omega(p_2 - p_1)) \},$$

где $\epsilon(p)$ и $\omega(k)$ представляют энергии электрона и фонона с соответствующим волновым вектором.

Рассмотрим далее случай малой плотности электронов, полагая

$$\langle a_{p_1}^+ a_{p_1} \rangle_0 = 1 - \langle a_{p_1}^+ a_{p_1} \rangle_0 \approx 1.$$

В результате для коэффициента трения получаем выражение:

$$\xi_{\mu\mu} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 p_2 \xi_{\mu\mu}(p_2) \langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0, \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} \xi_{\mu\mu}(p_2) = & \frac{\beta\pi}{(2\pi)^3} \int d^3 p_1 |S_\mu(p_1 - p_2)|^2 C(p_1, p_2) \times \\ & \times \{ \langle b_{p_1 - p_2}^+ b_{p_1 - p_2} \rangle_0 \delta(\epsilon(p_2) - \epsilon(p_1) + (p_1 - p_2)) + \\ & + \langle b_{p_2 - p_1} b_{p_2 - p_1} \rangle_0 \delta(\epsilon(p_2) - \epsilon(p_1) - \omega(p_1 - p_2)) \}. \end{aligned} \quad (31)$$

Выбирая нормировочное условие на число броуновских частиц в единице объема $V=1$ в виде:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 p_2 \langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0 = 1, \quad (32)$$

выражение (30) будем писать также в виде:

$$\xi_{\mu\mu} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 p_2 \xi_{\mu\mu}(p_2) \langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0. \quad (33)$$

Все величины в (30), (31) положительны, из чего следует, что $\xi_{\mu\mu} > 0$ и, соответственно, подвижность μ , диффузионный коэффициент D , вычисленные с помощью ξ , будут конечны.

Воспользуемся полученными формулами и вычислим коэффициент трения электрона вследствие взаимодействия его с оптической ветвью фононного спектра в полупроводниках и изоляторах с ковалентной и ионной связью, таких как $InSb$ и $NaCl$. Большинство таких кристаллов имеет кубическую симметрию, и электрон в их проводящей зоне хорошо описывается в приближении эффективных масс с одной долиной в центре зоны Бриллюэна^{/9/}. В этом случае имеем:

$$\epsilon(p) = \frac{1}{2M} p^2, \quad (34)$$

где M - эффективная масса электрона;

$$C(p_1, p_2) = 1, \quad (35)$$

$$\omega(k) = \omega_0 = const. \quad (36)$$

$$\langle b_k^+ b_k \rangle_0 = N = (e^{\beta\omega_0} - 1)^{-1},$$

где как обычно, пренебрегаем дисперсией оптических фононов. Учитывая явный вид оператора электрон-фононного взаимодействия с оптической ветвью^{/8/}, получаем:

$$|S_\mu(k)|^2 = (4\pi)^2 \left(\frac{e^2}{2\gamma\omega_0} \right) \frac{k_\mu^2}{k^2}, \quad (37)$$

где e - заряд электрона, а γ - постоянная

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{\omega_0^2}{4\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right).$$

(В данном случае роль безразмерной постоянной связи λ имеет величина, обозначенная в^{/8/} как a , которая здесь для удобства заменена на γ). С учетом соотношений (34)-(37) выражение (31) принимает вид:

$$\xi_{\mu\mu}(p_2) = \frac{\beta e^2}{\gamma \omega_0} \int d^3 p_1 \frac{(p_{1\mu} - p_{2\mu})^2}{|p_1 - p_2|^2}. \quad (38)$$

$$\{ N \delta[\frac{1}{2M}(p_2^2 - p_1^2) + \omega_0] + (N+1) \delta[\frac{1}{2M}(p_2^2 - p_1^2) - \omega_0] \}.$$

Интегрирование в (38) совершается элементарно и дает результат:

$$\xi(E) = \beta \xi_0 \{ N \sqrt{E + \omega_0} [1 - \frac{\omega_0}{2E} + \frac{\omega_0^2}{2\sqrt{E + \omega_0}\sqrt{E^3}} \ln(\sqrt{1 + \frac{E}{\omega_0}} + \sqrt{\frac{E}{\omega_0}})] + \quad (39)$$

$$+ (N+1) \sqrt{E - \omega_0} [1 + \frac{\omega_0}{2E} + \frac{\omega_0^2}{2\sqrt{E - \omega_0}\sqrt{E^3}} \ln(\sqrt{\frac{E}{\omega_0} - 1} + \sqrt{\frac{E}{\omega_0}})] \theta(E - \omega_0) \},$$

где

$$\xi_0 = \frac{2^{3/2} \pi e^2 M^{3/2}}{\gamma \omega_0}, \quad (40)$$

$$E = \frac{1}{2M} p_2^2, \quad (41)$$

$\theta(E - \omega_0)$ - ступенчатая функция. В (39) вместо $\xi_{\mu\mu}(p_2)$ введено обозначение $\xi(E)$ в силу того, что коэффициент трения изотропен и зависит от энергии E .

Равновесное распределение электронов $\langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0$ определено бoльцмановским распределением

$$\langle a_{p_2}^+ a_{p_2} \rangle_0 = \frac{1}{z} e^{-\beta E} \quad (42)$$

Подставляя (39) и (42) в (33) и совершая интегрирование по угловым переменным, получаем

$$\xi = \frac{2}{\pi^{1/2}} \beta^{3/2} \int_0^\infty dE \xi(E) e^{-\beta E} E^{1/2}. \quad (43)$$

Интегрирование по E в (43) не элементарно, однако численным методом оно совершается без труда, что автором сделано для одного значения параметра: $(\omega/k) = 260[\%]$, относящегося по $^{10}/$ к кристаллу $N \cdot Cl$.

Результат представлен на рис. 1.

Наш результат для ξ сопоставим с результатом прежних работ, вычисляя μ с помощью соотношения Эйнштейна-Смолуховского:

$$\mu = \frac{e}{\xi}. \quad (44)$$

Для предела высоких температур $T \gg \frac{\omega_0}{k}$ (39) имеет вид

$$\xi(E) = 2\beta \xi_0 N \sqrt{E}$$

и, пользуясь разложением $\frac{1}{N} \approx \frac{\omega_0}{kT}$, из (43) и (44) получаем асимптотическое выражение:

$$\mu = \frac{\gamma \omega_0^2}{2^{7/2} \pi^{1/2} M^{3/2} e (kT)^{1/2}}, \quad (45)$$

согласующееся с результатами работ $^{11-16}/$.

В пределе низких температур $T \gg \frac{\omega_0}{kT}$ получаем

$$\mu = \frac{3 \gamma \omega_0^{1/2} kT}{2^{5/2} \pi M^{3/2} e} \left(e^{\frac{\omega_0}{kT}} - 1 \right). \quad (46)$$

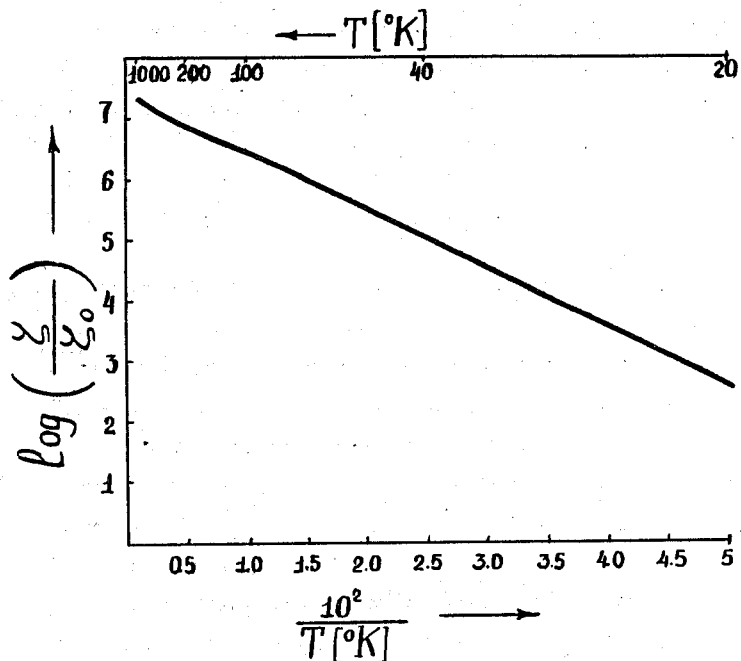


Рис. 1. Коэффициент трения электрона вследствие взаимодействия с фононами.

В работах /11,12/ получен результат, отличающийся от (46) множителем $1/2$. Однако в /11,12/ при учёте членов ряда более высокого порядка для μ получено выражение

$$\mu = \frac{\gamma \omega_0^{3/2}}{2^{5/2} \pi M^{3/2} e} \left(e^{\frac{\omega}{kT}} - 1 \right), \quad (47)$$

которое отличается от (46) предэкспоненциальным множителем. В /13-15/ получен такой же результат, как и (47), а в работе /16/ как (46).

В области промежуточных температур $T \approx \frac{\omega_0}{k}$, где рассеяние существенно неупругое, кинетическое уравнение можно решать только вариационным методом, что сделано в /11,12/. В этой области наш результат согласуется с результатами работ /11,12/.

Анализ, проведенный в /9/, приводит к заключению, что формулу (49) можно привести в согласие с экспериментальными данными в области температур порядка $\frac{\omega_0}{k}$ и выше и поэтому о правильности низкотемпературных разложений (46) и (47) трудно судить.

§ 4. Обсуждение

В настоящей работе мы предполагали, что электрон движется как броуновская частица под влиянием фононов, находящихся в равновесии. Предположение о равновесии фононной системы известно как предположение Блоха /8/, с помощью которого совершается линейаризация столкновительного члена в кинетическом уравнении. Поэтому точность значения для μ и D , косвенно вычисленных в нашем методе с помощью ξ , не должна быть меньше точности значения для μ , полученной с помощью линейаризованных кинетических уравнений. В нашем методе нет разницы между случаями упругого и неупругого рассеяния, в то время как эти случаи в методе кинетических уравнений существенно различаются. В рассматриваемом случае оптической ветви фононного спектра в области промежуточных температур кинетическое уравнение можно решать только вариационным методом, который дает решение для μ в виде разложения в двойной ряд, с коэффициентами, которые надо определять из бесконечномерного детерминанта /11,12/, в то время как наш метод дает решение в более прозрачном виде: сводится к численному интегрированию (43) функции (39).

Выражение (31) для $\xi_{\mu\mu}(P_2)$ можно интерпретировать как коэффициент трения частицы в данном квантовом состоянии P_2 , из которого макроскопическое значение $\xi_{\mu\mu}$ получается как статистическое среднее. В обобщенном уравнении Крамерса-Фоккера-Планка /17/ входит не макроскопическое значение коэффициента трения, а обобщенный коэффициент трения частицы в данном квантовом состоянии. Поэтому кажется, что связь между коэффициентом трения и кинетическими коэффициентами надо искать не на уровне средних значений, как дает соотношение Эйнштейна-Смолуховского, а на уровне коэффициентов для квантовых состояний.

Такое соотношение было бы более точным и выполнялось бы в более общих случаях.

В заключение мне хотелось бы поблагодарить д-ра З. Марич, д-ра Дж. Живанович и д-ра М. Напьяло из Белграда за советы и обсуждения.

Считаю своим особенно приятным долгом выразить благодарность профессору Д.Н. Зубареву и д-ру Н.М. Плакиде из Объединенного института ядерных исследований за советы и обсуждения, приводящие к более четкому пониманию проблематики.

Приложение А.

Для оператора импульса \hat{P} можно написать разложение, аналогичное разложению (19):

$$\hat{P}_{1\nu} = \sum_{p_2, p_3} a_{p_2}^+ a_{p_3} \langle p_2 | \hat{P}_{1\nu} | p_3 \rangle. \quad (A1)$$

Взяв для F_1 выражение (21), получаем

$$\begin{aligned} \langle F_{1\mu}(-i\lambda + t) \hat{P}_{1\nu} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum S_{\mu}(k) D(p, k) \langle p_2 | \hat{P}_{1\nu} | p_3 \rangle \times \\ &\times \langle (b_k(-i\lambda + t) - b_{-k}^+(-i\lambda + t)) a_{p+k}^+ (-i\lambda + t) a_p (-i\lambda + t) a_{p_2}^+ a_{p_3} \rangle. \end{aligned} \quad (A2)$$

Тем же образом, как при переходе от (22) к (23), здесь можно факторизовать корреляторы на фононную и электронную части, из чего в силу

$$\langle b_k(-i\lambda + t) \rangle_0 = 0; \quad \langle b_{-k}^+(-i\lambda + t) \rangle_0 = 0 \quad \text{следует:} \quad (A3)$$

$$\langle F_{1\mu}(-i\lambda + t) \hat{P}_{1\nu} \rangle = 0.$$

Литература

1. I.M.Luttinger. Phys.Rev. 135A, 1505 (1964).
2. Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика; "Наука", Москва, 1971.
3. А.Г. Башкиров. ТМФ, 1, №2, 275 (1969).
4. Р. Балеску. Статистическая механика заряженных частиц. Изд-во "Мир", Москва, 1967.
5. Дж. Честер. Теория необратимых процессов. "Наука", Москва, 1966.
6. А.Г. Самойлович, М.И. Клиnger, Л.Л. Коренблит. ФТТ, 2, 121 (1959).
7. N.Milinski, Zbornik radova masinskog fakulteta, Novi Sad, 6, 105 (1971).
8. Дж. Займан. Электроны и фононы. ИЛ, Москва, 1962.
9. З.Я. Евсеев, К.Б. Толпыго. ФТТ, 10, 1678 (1969).
10. R.K.Ahrenkiel, F.C.Brown. Phys.Rev., 136A, 223 (1964).
11. D.J.Howarth, E.H.Sondheimer. Proc.Roy.Soc., 219A, 52 (1953).
12. F.Garcia-Moliner. Phys.Rev., 130, 2290 (1963).
13. H.Fröhlich, N.F.Mott, Proc.Roy.Soc., 174A, 496 (1939).
14. Б.И. Давыдов, Н.М. Шмушкевич. УФН, 24, 21 (1940).
15. F.E.Low, D.Pines., Phys.Rev., 98, 414 (1955).
16. R.P.Feynman et al., Phys. Rev., 127, 1004 (1962).
17. А.Г. Башкиров, Д.Н. Зубарев. Препринт ОИЯИ, P4-4761, Дубна (1969).

Рукопись поступила в издательский отдел
21 февраля 1972 года.