ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 6446

Т. Пашкевич, Б. Козажевски

УРАВНЕНИЕ ТИПА ШРЕДИНГЕРА С ЗАТУХАНИЕМ ДЛЯ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1972

Р4 - 6446

Т.Пашкевич, Б. Козажевски

УРАВНЕНИЕ ТИПА ШРЕДИНГЕРА С ЗАТУХАНИЕМ ДЛЯ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Направлено в ***Acta Physica Polonica***

Введение

В системе многих частиц малая подсистема (например, броуновская частица, погруженная в среду, квазичастица или коллективная мода) испытывает воздействие со стороны окружающей ее среды. Так как среда имеет по сравнению с подсистемой большое число степеней свободы, можно рассматривать ее как термостат, в который погружена малая подсистема. Эта малая подсистема может не характеризоваться температурой. Из-за сложности взаимодействия между термостатом и подсистемой можно считать, что его влияние приводит к диссипации энергии подсистемы и появлению действующих на нее случайных сил. Таким образом, система приобретает черты статистической, сохраняя также черты механической системы. Это означает, что в уравнении движения для динамической переменной подсистемы присутствуют случайные силы и члены с затуханием /1/. Пользуясь этим методом, можно рассмотреть коллективную моду (непример, спиновую волну) как вид броуновского движения под влиянием остальных степеней свободы.

Чтобы вычислить затухание, можно идти по другому пути и получить уравнения движения для корреляционных функций динамических переменных подсистемы (например, методом функций Грина) или уравнения движения для средних значений этих динамических переменных. Для вывода таких уравнений очень удобен метод неравновесного статистического оператора (НСО) [2]. Этот метод основан на идее Н.Н. Боголюбова о существовании иерархии характерных времен и сокращении числа параметров, описывающих систему. Для рассмотрения кинетического режима запишем гамильтониан системы многих частиц в виде

$$H = H_0 + H_{int.} ,$$

где $H_0 = E_i a_i^+ a_i + H_T$ – гамильтониан малой подсистемы и термостата, $H_{int} = a_i^+ V_i^+ + V_i a_i$ – оператор взаимодействия между подсистемой и термостатом, a_i , a_i^+ – операторы уничтожения и рождения частицы i , операторы V_i , V_i^+ зависят только от переменных термостата. Предположим, что систему на этом этапе развития можно описать с помощью набора средних значений операторов $\langle a_i^+ a_i \rangle^t$, $\langle a_i^+ \rangle^t$, $\langle a_i \rangle^t$, $\langle H_T \rangle$. Способ разбиения гамильтониана на свободную часть и взаимодействие зависит от рассматриваемой стадии развития системы (см., например, [3]). С помощью метода НСО для средних значений операторов, определяющих поведение подсистемы, получим кинетические уравнения путем исключения во втором порядке по взаимодействию влияния термостата, считая взаимодействие между системой и термостатом слабым. Тогда это влияние будет проявляться как эффект трения частиц в среде, т.е. как диссипация их энергии.

Кинетические уравнения для $\langle a_i \rangle^t$, $\langle a_i^+ \rangle^t$, $\langle n_i \rangle^t$ получены в работе [4] именно таким способом. Уравнения для $\langle a_i \rangle^t$, $\langle a_i^+ \rangle^t$ названы в этой работе уравнениями типа Шредингера, поскольку они содержат механические и статистические черты. В этой работе рассматривается малая система в термостате. Систему составляют невзаимодействующие частицы одного сорта (например, экситоны). Частицы другого сорта (например, фононы) образуют термостат. Релаксация системы связана только с взаимодействием частиц разных родов. В рассматриваемом нами варианте в термостат входят частицы того же сорта, что и части–

цы подсистемы, частицы других сортов или примеси. Такая постановка задачи позволяет значительно расширить класс рассматриваемых задач.

В §2 выводится уравнение типа Шредингера и кинетическое уравнение для $< a_i^+ a_i >^t$, §3 посвящен рассмотрению физических примеров, в §4 обсуждается связь метода с теорией линейного отклика Кубо.

2. Рассмотрим систему N частиц с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} \quad , \tag{1}$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i E_i a_i^+ a_i \; ,$$

E_i – энергия одночастичных состояний, a_i^+ , a_i – бозонные или фермионные операторы, $\mathcal{V}$ – взаимодействие между частицами или частицами и примесью. С помощью гамильтониана $\mathcal{H}$ построим с точностью до членов порядка N^{-1} гамильтониан H полной системы. Полную систему составляют малая подсистема (частицы с индексом i) и термостат (остальная часть исходной системы). Гамильтониан H имеет вид:

$$H = H_0 + H_{int.} \; , \tag{2}$$

где

$$H_0 = E_i a_i^+ a_i + H_T \; , \tag{3}$$

$$H_{int} = a_i^+ V_i^+ + V_i a_i \quad , \tag{4}$$

H_T – гамильтониан термостата, $V_i^+ = (V_i)^+$ зависит только от переменных термостата. Построение H поясняется на примерах в §3.

Согласно методу НСО [2] статистический оператор системы получим с помощью квазиравновесного статистического оператора

$$\rho_q\ (t,0) = \exp\{-S(t,0)\}, \tag{5}$$

где

$$S(t,0) = \Omega(t) + \sum_m F_m(t) P_m, \tag{6}$$

$$\Omega(t) = \ln Sp \exp\{-\sum_m P_m F_m(t)\}. \tag{7}$$

В качестве операторов P_m, определяющих неравновесное состояние малой подсистемы, возьмем a_i, a_i^+, $a_i^+ a_i$. Этот выбор операторов связан с тем, что мы интересуемся динамическим описанием системы. Термостат будем описывать гамильтонианом H_T. Функции $F_m(t)$ являются термодинамическими параметрами, сопряженными $\langle P_m\rangle^t$ в смысле неравновесной статистической термодинамики. Обозначим через $f_i^*(t)$, $f_i(t)$, $F_i(t)$ параметры, соответствующие $\langle a_i^+\rangle^t$, $\langle a_i\rangle^t$, $\langle n_i\rangle^t$. $\langle H_T\rangle$ соответствует обратная температура термостата β.

Неравновесный статистический оператор системы получим путем взятия инвариантной части $\rho_q(t,0)$

$$\rho(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{it_1 L} \rho_2(t+t_1,0), \tag{8}$$

где $\epsilon \to 0^+$ после термодинамического перехода, L – оператор Лиувилля

$$iLA = \frac{1}{i\hbar}[A,H], \qquad e^{itL}A = e^{itH/\hbar} A\, e^{-itH/\hbar}.$$

Оператор $\rho(t,0)$ является решением уравнения Лиувилля с бесконечно малым источником

$$\frac{\partial \rho\ (t,0)}{\partial t} + iL\rho(t,0) = -\epsilon\ (\rho\ (t,0) - \rho_q(t,0)).$$

Проинтегрируем по частям правую сторону (8):

$$\rho(t,0)=\rho_q(t,0)-\int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{it_1 L}\{ iL_1\rho_q\,(t+t_1,0)+(\frac{\partial}{\partial t_1}+iL_0)\rho_q(t+t_1,0)\}, \quad (9)$$

где

$$iL_0 A = \frac{1}{i\hbar}\,[\,A\,,H_0\,]\;, \qquad iL_1 A = \frac{1}{i\hbar}\,[\,A,H_{int}\,]\;.$$

Для нашего выбора операторов P_m и H_0 имеет место соотношение /5/

$$[\,P_m\,,H_0\,] = \sum_k a_{mk} P_k\,, \qquad a\; - \;\text{c– число}\;, \qquad (10)$$

поэтому

$$\frac{\partial\rho_q(t,0)}{\partial t} + iL_0\rho_q(t,0) = \sum_m \frac{\delta\rho_q(t,0)}{\delta<P_m>^t}\, Sp\,\{\,\frac{1}{i\hbar}[P_m,H_{int}]\,\rho\,(t,0)\,\}. \quad (11)$$

Будем вычислять $\rho\,(t,0\,)$ в первом порядке по взаимодействию H_{int}. Так как второй член подынтегрального выражения (9) пропорционален H_{int}, в этом приближении можно считать эволюцию свободной. Тогда

$$e^{it_1L_0}\,\rho_q\,(t_1+t\,,0\,) = \rho_q\,(t,0\,)\;.$$

В интегральном уравнении для $\rho\,(t,0\,)$

$$\rho(t,0)=\rho_q(t,0)-\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\,[\,\rho_q(t,0),\;H_{int}(t_1)\,]-\int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{it_1L_0}\,\times$$

$$\times\sum_m \frac{\delta\rho_q(t+t_1,\,0\,)}{\delta<P_m>^{t+t_1}}\; Sp\;\{\,\frac{1}{i\hbar}\,[\,P_m\,,H_{int}\,]\,\rho\,(\,t+t_1,0\,)\,\}$$

заменим в последнем члене $\rho(t+t_1,0)$ на $\rho_q(t+t_1,0)$, что соответствует первому шагу решения этого уравнения методом итерации. Будем рассматривать только такие системы, для которых

$$Sp(V_i\,\rho_q(t,0)) \equiv \langle V_i\rangle_q^t = \langle V_i\rangle \equiv Sp\left(V_i\,\frac{e^{-\beta H_T}}{Sp\,e^{-\beta H_T}}\right) = 0 = \langle V_i^+\rangle\ .$$

Это равенство эквивалентно предположению о "случайности" сил V_i, V_i^+. Тогда

$$\langle [P_m, H_{int}]\rangle_q^t \sim \langle V_i\rangle,\ \langle V_i^+\rangle = 0\ ,$$

и окончательно получаем оператор $\rho(t,0)$ в виде

$$\rho(t,0) = \rho_q(t,0) - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}[\rho_q(t,0), H_{int}(t_1)]\ . \qquad (12)$$

На среднее значение операторов P_m налагаем условия /2/

$$Sp\,\{P_m\,\rho(t,0)\} \equiv \langle P_m\rangle^t = \langle P_m\rangle_q^t\ , \qquad (13)$$

с помощью которых можно определить $F_m(t)$. Усредняя уравнения движения для операторов P_m с помощью статистического оператора $\rho(t,0)$ (12) и учитывая (13), запишем кинетические уравнения:

$$i\hbar\frac{\partial\langle P_m\rangle^t}{\partial t} = \sum_k a_{mk}\langle P_m\rangle^t + \frac{1}{i\hbar}\int dt\ e^{\epsilon t_1}\langle[[P_m, H_{int}], H_{int}(t_1)]\rangle_q^t\ . \qquad (14)$$

Заметим, что благодаря (10) мы получили уравнения марковского типа. Для нашего набора операторов P_m эти уравнения принимают вид

$$i\hbar\frac{\partial\langle a_i\rangle^t}{\partial t} = E_i\langle a_i\rangle^t + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\langle[[a_i, H_{int}], H_{int}(t_1)]\rangle_q^t\ , \qquad (15)$$

$$\frac{\partial \langle n_l \rangle^t}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle [\, n_l, H_{int} \,],\, H_{int}(t_1) \,] \rangle_q^t \,, \tag{16}$$

плюс уравнение, комплексно сопряженное к (15).

Ограничимся рассмотрением систем, для которых $\langle V_l \; V_l \; (t) \rangle = \langle V_l^+ \; V_l^+ (t) \rangle = 0$.

Это условие обычно имеет место вследствие законов сохранения. Введем фурье-образы корреляционных функций

$$\langle V_l (t) \; V_l^+ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \langle V_l \; V_l^+ \rangle_\omega \,, \tag{17а}$$

$$\langle V_l^+ V_l \; (t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \langle V_l \; V_l^+ \rangle_\omega \; e^{\beta \hbar \omega} \,. \tag{17б}$$

Вычисляя двойные коммутаторы и используя (17а) , (17б), запишем (15), (16) в виде

$$i\hbar \frac{\partial \langle a_l \rangle^t}{\partial t} = (E_l + \Delta (E_l)) \langle a_l^+ \rangle^t - \frac{1}{2} i\hbar \gamma (E_l) \langle a_l \rangle^t \,, \tag{18}$$

$$\frac{\partial \langle n_l \rangle^t}{\partial t} = -\gamma (E_l) (\langle n_l \rangle^t - \bar{n}_l) \,, \tag{19}$$

где

$$\Delta (E_l) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \langle V_l \; V_l^+ \rangle_\omega \frac{(e^{\beta \hbar \omega} \mp 1)}{\hbar \omega - E_l} \,, \tag{20а}$$

$$\gamma (E_l) = \frac{1}{\hbar^2} \langle V_l \, V_l^+ \rangle_{\hbar\omega = E_l} (e^{\beta E_l} \mp 1) \,, \tag{20б}$$

$$\bar{n}_l = (e^{\beta E_l} \mp 1)^{-1} \quad -$$

– среднее число заполнения состояния i (верхний знак относится к бозонам, нижний – к фермионам).

Как видно из формул (20а), (20б), сдвиг энергии $\Delta(E_i)$ уровня i и затухание $\gamma(E_i)$ связаны соотношениями Крамерса–Кронига

$$\Delta(E_i) = -\frac{h}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\gamma(\omega)}{\omega - E_i} . \qquad (21)$$

Таким образом, мы получили для $\langle a_i \rangle^t$ уравнение (18), которое описывает сдвиг энергии и затухание из-за взаимодействия частиц со средой. Оно соединяет статистические и механические черты, и поэтому его можно назвать уравнением типа Шредингера. Это выражение отличается от выражения, полученного в работе /4/, определением "случайных" сил V_i, V_i^+. Заметим, что уравнения вида (18), (19) для ангармонического осциллятора выведены в работе Лэкса /6/, в которой в уравнение движения для матрицы плотности подсистемы вводятся конечные источники.

3. Рассмотрим несколько примеров:

а) Рассмотрим фононную систему с трехфононным взаимодействием. В этой системе термостат составляют другие частицы того же рода, что и частицы, составляющие подсистему. Гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H}_0 = \sum_Q \omega_Q a_Q^+ a_Q , \qquad (22а)$$

$$\mathcal{V} = \sum_{Q_1, Q_2, Q_3} V(Q_1, Q_2, Q_3) A_{Q_1} A_{Q_2} A_{Q_3} , \qquad (22б)$$

где ω_Q – частота фононов, $Q=(\vec{q}, j)$, $\vec{q}$ – квазиимпульс, j – поляризация фононов, $-Q=(-q, j)$, $V(Q_1, Q_2, Q_3)$ – матричный элемент взаимодействия трех фононов, $A_Q = a_Q + a_{-Q}^+$, a_Q^+, a_Q – операторы рождения и уничтожения фононов. Получим с помощью гамильтониана (23) гамильтониан H малой системы (фононная мода Q) в термостате (остальные фононные моды)

$$H = H_0 + H_{int} \quad , \tag{23}$$

где

$$H_0 = \omega_Q n_Q + H_T \quad ,$$

$$H_T = \sum_{P \neq Q} \omega_P n_P + \sum_{P_1, P_2, P_3 \neq Q} V(P_1, P_2, P_3)\, A_{P_1} A_{P_2} A_{P_3} \quad ,$$

$$H_{int} = a_Q^{+} V_Q^{+} + V_Q a_Q \quad ,$$

$$V_Q = 3 \sum_{P_1, P_2 \neq Q} V(P_1, P_2, Q)\, A_{P_1} A_{P_2} \quad .$$

Рассмотрим решетку Браве, для которой $< V_Q > = 0$. Вычисляя двойные коммутаторы в уравнениях (15), (16), будем иметь систему трех связанных уравнений,

$$i \frac{\partial < a_Q >^t}{\partial t} = (\omega_Q + \Delta(\omega_Q)) < a_Q >^t - i \frac{\hbar}{2} \gamma(\omega_Q) < a_Q >^t \quad , \tag{24}$$

$$\frac{\partial < n_Q >^t}{\partial t} = -\gamma(\omega_Q) (< n_Q >^t - \bar{n}_Q) \quad , \tag{25}$$

и уравнение, комплексно сопряженное к (24). Для $\Delta(\omega_Q)$ и $\gamma(\omega_Q)$ получаем выражения

$$\Delta(\omega_Q) = \frac{1}{\hbar} Im \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\frac{-it_1}{\hbar}(\omega_Q + i\epsilon)} <[V_Q^{+}, V_Q(t_1)]> \quad , \tag{26}$$

$$\gamma(\omega_Q) = \frac{2}{\hbar^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\frac{-it_1}{\hbar}(\omega_Q + i\epsilon)} < [V_Q^+ , V_Q(t_1)] > . \tag{27}$$

Эти формулы совпадают с теми, которые можно вывести, вычисляя массовый оператор запаздывающей функции Грина $\ll A_Q(t);\ A_Q^+ \gg^{(r)}$. Выражения, соответствующие (26), (27), получены в работах /1,7,8/. С помощью уравнения (27) можно изучать поглощение звука в сверхтекучем гелии или диэлектрических кристаллах /9/.

б) Более сложным примером является система электронов проводимости s, взаимодействующих с магнитной примесью со спином $\vec{S}$.

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}_1, s_1} \epsilon_{\vec{k}_1} c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_1 s_1} - \frac{1}{N} \sum_{s_1, s_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2} J_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} (\vec{S}\vec{\sigma}_{s_1 s_2})\, c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_2 s_2} ,$$

где $c^+_{\vec{k}s}$, $c_{\vec{k}s}$ – операторы электронов, $\vec{k}$ – квазиимпульс электрона, s – его спин, $\epsilon_{\vec{k}}$ – энергия одноэлектронных состояний, $\vec{\sigma}$ – вектор, составляющие которого – матрицы Паули. В качестве подсистемы рассмотрим электрон с импульсом $\vec{q}$ и спином s. Остальные электроны и примесь составляют термостат. Оператор взаимодействия подсистемы и термостата имеет вид

$$H_{int} = c^+_{\vec{q}s} V^+_{\vec{q}s} + V_{\vec{q}s} c_{\vec{q}s} = -\frac{1}{N} \sum_{(\vec{k}, s) \neq (\vec{q}, s)} J_{\vec{q}\vec{k}_1} (S\sigma_{ss_1})\, c^+_{\vec{q}s} c_{\vec{k}_1 s_1} + \text{э.с.}, \tag{28а}$$

а гамильтониан термостата

$$H_T = \sum_{(\vec{k}_1 s_1) \neq (\vec{q}, s)} \epsilon_{\vec{k}_1} c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_1 s_1} - \frac{1}{N} \sum_{(\vec{k}_1 s_1), (\vec{k}_2, s_2) \neq (\vec{q}, s)} J_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} (\vec{S}\vec{\sigma}_{s_1 s_2})\, c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_2 s_2} . \tag{28б}$$

Гамильтониан H_0 равен

$$H_0 = \epsilon_{\vec{q}} c^+_{\vec{q}s} c_{\vec{q}s} + H_T .$$

Для рассматриваемой системы $< V_{\vec{q}s} > = 0$ и для $< c_{\vec{q}s} >^t$, $< n_{\vec{q}s} >^t$ получаем уравнения (24), (25), где

$$\Delta(\epsilon_{\vec{q}}) = -\frac{3}{2N^2} \sum_{(\vec{k}_1, s_1) \neq (\vec{q}, s)} |J_{\vec{q}\vec{k}_1}|^2 \, P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega\, d\omega}{(2\pi)^2} \frac{< S^{+s} S^{-s} >_\omega < c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_1 s_1} >_\Omega}{e_{\vec{q}} - \hbar\omega - \hbar\Omega} (1 + e^{\beta\hbar(\omega+\Omega)}), \tag{29}$$

$$\gamma(\epsilon_{\vec{q}}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{3}{N^2} \sum_{(\vec{k}_1, s_1) \neq (\vec{q}, s)} |J_{\vec{q}\vec{k}_1}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega\, d\omega}{(2\pi)^2} \frac{< \vec{S}^{+s} \vec{S}^{-s} >_\omega < c^+_{\vec{k}_1 s_1} c_{\vec{k}_1 s_1} >_\Omega}{\bar{n}(\epsilon_{\vec{q}})} \delta(\epsilon_{\vec{q}} - \hbar\omega - \hbar\Omega). \tag{30}$$

При выводе формул (29), (30) мы сделали предположение, что корреляционную функцию $<(\vec{S}(t)\vec{\sigma}_{s_1 s})\, c^+_{\vec{k}_1 s_1}(t)(\vec{S}\vec{\sigma}_{s_2 s})\, c_{\vec{k}_2 s_2}>$ с достаточной точностью приближает произведение корреляционных функций локализованных спинов и электронов проводимости $<(\vec{S}(t)\vec{\sigma}_{s_1 s})(\vec{S}\vec{\sigma}_{s s_2})> < c^+_{\vec{k}_1 s_1}(t)\, c_{\vec{k}_1 s_1}>$. Формула (29) является обобщением формулы, выведенной в работе /10/.

в) Найдем время релаксации $\tau(\epsilon_{\vec{q}}) \equiv \gamma^{-1}(\epsilon_{\vec{q}})$ электронов проводимости, взаимодействующих с примесью согласно модели, предложенной Андерсоном /11/. Термостат составляют d электроны примеси и электроны проводимости; гамильтониан подсистемы и термостата имеет вид

$$H_0 = \epsilon_{\vec{q}} n_{\vec{q}s} + \sum_{(\vec{k}_1, s_1) \neq (\vec{q}, s)} \epsilon_{\vec{k}_1} n_{\vec{k}_1 s_1} + E \sum_{s_1} n_{s_1} + U n_+ n_- + \sum_{(\vec{k}_1, s_1) \neq (\vec{q}, s)} (V_{\vec{k}_1} d^+_{s_1} c_{\vec{k}_1 s_1} + V^* c^+_{\vec{k}_1 s_1} d_{s_1}),$$

где $n_s = d^+_s d_s$ – оператор числа электронов в локализованном d -состоянии, E – энергия d-состояния, U – энергия кулоновского отталкивания электронов d, а последний член описывает взаимодействие электронов s и d.

Гамильтониан взаимодействия подсистемы с термостатом имеет форму

$$H_{int} = V_q^* c_{\vec{q}s}^+ d_s + \text{э.с.} \; .$$

Время жизни и сдвиг энергии электронов проводимости связаны с запаздывающей функцией Грина $\langle\langle d_s^+(t); d_s \rangle\rangle^{(r)} \equiv \frac{1}{i\hbar} \Theta(t) \langle [d_s^+(t), d_s]_+ \rangle$.

$$\tau^{-1}(\epsilon_{\vec{q}}) = \gamma(\epsilon_{\vec{q}}) = -\frac{2|V_{\vec{q}}|^2}{\hbar} Im \langle\langle d_s^+; d_s \rangle\rangle_{\hbar\omega = -\epsilon_{\vec{q}}} , \tag{31}$$

$$\Delta(\epsilon_{\vec{q}}) = -|V_{\vec{q}}|^2 Re \langle\langle d_s^+; d_s \rangle\rangle_{\hbar\omega = -\epsilon_{\vec{q}}} . \tag{32}$$

Так как в этом случае функция Грина $\langle\langle d_s^+; d_s \rangle\rangle^{(r)}$ играет роль матрицы рассеяния, то результат (31) представляет обычное "транспортное" время релаксации.

г) В качестве последнего примера рассмотрим двухчастичное взаимодействие магнонов [12]

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} \psi_s(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{k}_3, \vec{k}_4) \Delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) c_{\vec{k}_1}^+ c_{\vec{k}_2}^+ c_{\vec{k}_3} c_{\vec{k}_4} + \text{э.с.},$$

где $c_{\vec{k}}^+$, $c_{\vec{k}}$ – бозонные операторы. Гамильтониан системы и термостата имеет вид

$$H_0 = \epsilon_{\vec{q}} c_{\vec{q}}^+ c_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 \neq \vec{q}} \psi_s(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{k}_3, \vec{k}_4) \Delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) c_{\vec{k}_1}^+ c_{\vec{k}_2}^+ c_{\vec{k}_3} c_{\vec{k}_4} + \text{э.с.},$$

а гамильтониан взаимодействия подсистемы с термостатом имеет форму

$$H_{int} = c^{+}_{\vec{q}} \{ 2 \sum_{\vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 \neq \vec{q}} \psi_s (\vec{q}, \vec{k}_2; \vec{k}_3, \vec{k}_4) \Delta (\vec{q} + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) c^{+}_{\vec{k}_2} c_{\vec{k}_3} c_{\vec{k}_4} \} + \text{э.с.}\ .$$

Вычислим время жизни в приближении эволюции со свободным гамильтонианом $H^{(0)} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}}$ и тогда получим известный результат /12/:

$$\frac{1}{\tau(\epsilon_{\vec{q}})} = \frac{16}{\pi \hbar} \sum_{\vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4 \neq \vec{q}} | \psi_s (\vec{q}, \vec{k}_2; \vec{k}_3, \vec{k}_4) |^2 \Delta (\vec{q} + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \delta (\epsilon_{\vec{q}} + \epsilon_{\vec{k}_2} - \epsilon_{\vec{k}_3} - \epsilon_{\vec{k}_4}) \times$$

$$\times \{ \bar{n}_{\vec{k}_2} (1 + \bar{n}_{\vec{k}_3}) (1 + \bar{n}_{\vec{k}_4}) - (1 + \bar{n}_{\vec{k}_2}) \bar{n}_{\vec{k}_3} \bar{n}_{\vec{k}_4} \} .$$

4. На примере фононной системы с трехфононным взаимодействием покажем, что уравнения вида (18) можно получить в рамках теории линейного отклика Кубо /2/. Рассмотрим линейный отклик фононной системы с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} ,$$

где $\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{V}$ определяют формулы (22а), (22б) на внешнее воздействие вида

$$H_t = \sum_{ia} F_a (\vec{X}_i, t)\, u_{ia} , \qquad i = 1, \ldots, N , \quad a = 1, 2, 3 .$$

$F(\vec{X}_i, t)$ является внешней силой, действующей на i -тый атом решетки, $\vec{X}_i$ – координата равновесного положения этого атома, $\vec{u}_i$ – оператор смещения атома. Среднее равновесное значение оператора смещения равно нулю: $\langle \vec{u}_i \rangle = 0$. Вычислим изменение среднего значения оператора $\langle a_Q \rangle^t$ под влиянием внешней силы $(\langle a_Q \rangle = 0)$ /2/.

$$\langle a_Q \rangle^t = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle\langle a_Q(t) ; H_{t_1}(t_1) \rangle\rangle^{(r)} = \sum_{a,i} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 F_a (\vec{X}_i, t) \langle\langle a_Q(t); u_{ia}(t_1) \rangle\rangle^{(r)},$$

где введена запаздывающая функция Грина

$$\langle\langle A(t)\,;\,B(t')\rangle\rangle^{(r)} = \frac{1}{i\hbar}\,\Theta(t-t')\,\langle [\,A(t)\,,\,B(t')\,]\rangle\;;\langle\ldots\rangle = Sp\Big(\ldots\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Sp\,e^{-\beta\mathcal{H}}}\Big).$$

Разлагая оператор смещения по плоским волнам, получим

$$\langle a_Q\rangle^t = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 F_Q(t_1)\,\langle\langle a_Q(t)\,,\;a_Q^+(t_1)\rangle\rangle^{(r)} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 F_Q(t_1)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,e^{-i\omega(t-t_1)}\,G_Q(\omega-i\epsilon). \quad (33)$$

При выводе формулы (33) мы учли закон сохранения импульса и пренебрегли смешиванием поляризаций. $F_Q(t)$ равно

$$F_Q(t) = \sum_i \vec{F}(\vec{X}_i\,,t)\,e^{-i\vec{q}\vec{X}_i}\,\frac{e^*_Q}{\sqrt{2MN\omega_Q}}\,,$$

где M – масса атомов решетки, e^*_Q – вектор поляризации. Вычисляя функцию Грина $G_Q(\omega)$, запишем в полюсном приближении:

$$G_Q(\omega - i\epsilon) = \Big(\omega - \tilde{\omega}_Q - i\,\frac{1}{2}\,\gamma(\omega_Q)\Big)^{-1}\,, \quad (34)$$

где $\tilde{\omega}_Q = \omega_Q + \Delta(\omega_Q)$.

Выполняя интегрирование по ω в (33) с учётом (34), получим

$$\langle a_Q\rangle^t = -i\int_{-\infty}^{t} dt_1 F_Q(t_1)\,e^{-i(t-t_1)\tilde{\omega}_Q-(t-t_1)\frac{1}{2}\gamma(\omega_Q)}\,. \quad (35)$$

Измеряемую величину $\langle u_i\rangle^t$ определяет линейная комбинация $\langle a^+_Q\rangle^t$ и $\langle a_Q\rangle^t$.

В эксперименте по поглощению звука в кристалл вводится короткий импульс высокочастотной волны напряжения и изучается поведение системы после промежутка времени, значительно большего длительности этого импульса /13/. Можно принять, что $F_Q(t) \sim \delta(t-\tau)$, где τ – момент включения внешнего поля. Дифференцируя уравнение (35) по времени t, получаем

$$i\hbar \frac{\partial \langle a_Q \rangle^t}{\partial t} = \hbar F_Q(t) + (\hbar\tilde{\omega}_Q - \frac{i\hbar}{2}\gamma(\omega_Q))\langle a_Q \rangle^t. \qquad (36)$$

Уравнение (36) определяет поведение системы после промежутка времени порядка длительности переходных процессов от момента включения внешнего поля, но для времен не слишком больших. Для таких промежутков времени систему можно описать с помощью набора операторов a_Q, a_Q^+, n_Q, H_T. На этом интервале времени уравнения (18) и (36) совпадают по форме. Но имеются отличия: уравнение (36) определяет отклик на механическое возмущение и сила $F_Q(t)$ считается заданной. Уравнение (18) определяет поведение системы под влиянием термического возмущения, в известном смысле "самосогласованного", так как мы можем с помощью уравнения (13) определить $f_Q(t)$.

Авторы выражают благодарность Д.Н. Зубареву и А.Л. Куземскому за полезные обсуждения.

Литература

1. H.Mori. Progr.Theor.Phys., 33, 423, 1965 .
2. Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, Наука, Москва, 1971.
3. Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. Препринт ИТФ-70-82Р, Киев.
4. К. Валясек, Д.Н. Зубарев, А.Л. Куземский. ТМФ, 5, 281, 1970 .
5. Л.А. Покровский. ДАН, 183, 806, 1968 .
6. M.Lax. Phys.Rev., 145, 140, 1966.
7. M.Lax. J.Phys.Chem.Solids., 25, 487, 1964.
8. A.H.Opie. Phys.Rev., 172, 640, 1968.
9. T.Paszkiewicz. JINR Preprint, E4-5886, Dubna, 1971.
10. D.L.Mills, P.Lederer. J.Phys.Chem.Solids., 27,1805,1966 .
11. P.W.Anderson. Phys.Rev., 124, 41, 1961 .

12. А.И. Ахиезер, В.Г. Барьяхтар, С.В. Пелетминский. Спиновые волны, Наука, Москва, 1967.

13. R.Truell, Ch.Elbaum, B.B.Chick. Ultrasonic Methods in Solid State Physics. Acad. Press. New York - London, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 мая 1972 года.