

УДК 539.19

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ФОНОННЫМ ПОЛЕМ

Н. Н. Боголюбов,

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Н. Н. Боголюбов (мл.)

Математический институт им. В. А. Стеклова АН СССР, Москва

Обобщается работа Н. Н. Боголюбова [1] и формулируются методы изучения электронно-фононной системы и исключения из соответствующих кинетических уравнений фононных операторов. В частности, для взаимодействия электрона с фононным полем получено кинетическое уравнение для полярона, при этом, если ограничиться надлежащей аппроксимацией, из него следует, например, точное уравнение Болцмана для полярона.

Предлагаются также методы вычисления функций отклика (импеданса и адmittанса), основанные на введении аппроксимирующего гамильтониана с линейным взаимодействием. Проводится вычисление функции плотности вероятности распределения частицы.

In this review article that is a generalization of N. N. Bogolubov's paper [1], we formulate methods for studying the electron-phonon system and excluding the phonon operators from the kinetic equations.

In particular, for the electron interaction with the phonon field a kinetic equation is derived for the polaron which, within a reasonable approximation, results in the exact Boltzmann equation for the polaron.

Methods for calculating the «response» functions (impedance and admittance) are proposed on the basis of the introduced «approximating» Hamiltonian with linear interaction. The probability density for the particle distribution is calculated.

1. ОБОБЩЕННОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

Рассмотрим динамическую систему S , взаимодействующую с фононным полем Σ . Обозначим X_s совокупность аргументов волновых функций для одной изолированной системы S и аналогичным образом обозначим $X_\Sigma = (\dots n_k \dots)$ совокупность чисел заполнения поля Σ . Тогда динамические состояния (S, Σ) -системы можно характеризовать волновыми функциями типа

$$\Psi = \Psi(X_s, X_\Sigma). \quad (1)$$

Условимся обозначать символами вида

$$F(t, S), f(S) \quad (2)$$

операторы, могущие явно зависеть от времени t и действующие на $\Psi(X_s, X_\Sigma)$ только как функции от X_s . Символами вида

$$G(t, \Sigma), g(\Sigma) \quad (3)$$

будем обозначать операторы, действующие на Ψ как функции от X_Σ . Такими операторами являются, например, бозе-амплитуды $\dots b_k \dots b_k^\dagger \dots$. Существенно подчеркнуть, что поскольку $F(t, S)$, $G(t, \Sigma)$ действуют на различные переменные в волновой функции, они коммутируют между собой. В частности, $F(t, S)$ коммутирует со всеми b_k и b_k^\dagger . Примером оператора типа (3) может служить и собственный гамильтониан фононного поля

$$H(\Sigma) = \sum_k \hbar \omega_k b_k^\dagger b_k, \quad \omega_k > 0. \quad (4)$$

Символами типа $\mathfrak{A}(t, S, \Sigma)$ будем обозначать операторы, действующие как на переменные X_s , так и на переменные X_Σ волновых функций $\Psi(X_s, X_\Sigma)$.

Подчеркнем, что рассматриваемые сейчас операторы соответствуют обычному шредингеровскому представлению динамических величин. Возьмем случай, когда в принятых обозначениях полный гамильтониан (S, Σ) -системы имеет вид

$$\begin{aligned} H_t = H_t(t, S, \Sigma) = & \Gamma(t, S) + \\ & + \sum_{(k)} \{C_k(t, S) b_k + C_k^\dagger(t, S) b_k^\dagger\} + H(\Sigma), \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Gamma(t, S)$ — собственный гамильтониан системы S ; следующий член в (5) с суммой по k -гамильтониан взаимодействия систем S и Σ .

Рассмотрим два примера подобных систем.

1. *Теория полярона.* Модель полярона описывает движение электрона в ионном кристалле. Система S состоит из одного электрона, находящегося во внешнем электрическом поле $\mathcal{E}(t)$:

$$\begin{aligned} \Gamma(t, S) = & p^2/(2m) + \exp(\epsilon t) \bar{E}(t) \bar{r}; \quad E(t) = -e\bar{\mathcal{E}}(t); \\ C_k(t, S) = & \frac{\exp(\epsilon t)}{\sqrt{V}} \mathcal{L}(k) \left(\frac{\hbar}{2\omega_k}\right)^{1/2} \exp(i\bar{k}\bar{r}), \end{aligned} \quad (6)$$

где e — заряд электрона; $\mathcal{L}^*(k) = \mathcal{L}(k)$; \bar{r} , \bar{p} — положение и импульс электрона; $\mathcal{L}(k)$, ω_k — радиально симметричные функции волнового вектора \bar{k} .

Суммирование по \bar{k} проводится по обычному квазидискретному спектру:

$$k = (2\pi n_1/L, 2\pi n_2/L, 2\pi n_3/L); \quad L^3 = V,$$

где n_1, n_2, n_3 — целые числа (положительные и отрицательные); фактор $\exp(\epsilon t)$ ($\epsilon > 0$) , как обычно, вводится для реализации представления об адиабатическом включении взаимодействия.

В данном случае операторы типа $f(S)$ будут функциями от операторов \bar{p}, \bar{r} , например:

$$f(\bar{p}), \exp(i\bar{k}\bar{r}), f(\bar{p}) \exp(i\bar{k}\bar{r}) \text{ и т. п.}$$

Заметим, наконец, что в ряде случаев вместо выражения $p^2/(2m)$ необходимо использовать более общую форму энергии электрона $T(p)$.

Тогда вместо (6) будем иметь

$$G(t, S) = T(p) + \exp(\epsilon t) \bar{E}(t) \bar{r}. \quad (7)$$

2. *Фермионная система.* Система S является системой свободных фермионов, характеризуемых ферми-амплитудами a_f^\dagger, a_f , причем

$$\begin{aligned} \Gamma(t, S) &= \sum_{(f)} \Lambda(f) a_f^\dagger a_f; \\ C_k(t, S) &= \frac{\exp(\epsilon t)}{\sqrt{V}} L_k \sum_{(f)}^+ a_{f+k} a_f; \\ \dot{C}_k(t, S) &= \frac{\exp(\epsilon t)}{\sqrt{V}} L_k^* \sum_{(f)}^+ a_f^\dagger a_{f+k} = \frac{\exp(\epsilon t)}{\sqrt{V}} L_k^* \sum_{(f)}^+ a_{f-k} a_f, \end{aligned} \quad (8)$$

где L_k, L_k^* — « C -величины».

Поскольку фермионы обладают спином, здесь $f = (\mathbf{f}, \sigma)$, причем вектор \mathbf{f} принадлежит к квазидискретному спектру (σ — спиновый индекс). Символ $(f + k)$ раскрывается как $f + k = (\mathbf{f} + \mathbf{k}, \sigma)$. Мы можем также рассматривать и случай взаимодействующих между собой фермионов. Тогда надо лишь включить в $\Gamma(t, S)$ члены взаимодействия между фермионами, а также их взаимодействия с внешними полями.

Для динамических систем второго типа операторами вида $f(S)$ будут любые комбинации из ферми-амплитуд $\dots a_f^\dagger \dots a_f \dots$, не содержащие бозе-амплитуд, например: $a_{f_1}^\dagger a_{f_2}$. Заметим, что к динамическим системам второго типа приводятся задачи определения электропроводности металлов, теории сверхпроводимости и т. п.

Возвратимся к рассмотрению гамильтониана (5) и воспользуемся уравнением Лиувилля для статистического оператора $\mathcal{D}_t(S, \Sigma)$ -системы

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} = H(t, S, \Sigma) \mathcal{D}_t - \mathcal{D}_t H(t, S, \Sigma) \quad (9)$$

при начальном условии

$$\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma); \quad \mathcal{D}(\Sigma) = Z^{-1} \exp[-\beta H(\Sigma)], \quad (10)$$

где

$$\left. \begin{aligned} Z &= \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \exp[-\beta H(\Sigma)]; \\ \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(S) &= 1; \quad \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{D}(\Sigma) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Как видно, принятное начальное условие соответствует тому положению, когда в момент времени t_0 фононное поле Σ находится в состоянии статистического равновесия и в этот момент «включено» взаимодействие его с динамической системой S , характеризуемой статистическим оператором $\rho(S)$.

Так как из (9) следует, что

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathcal{D}_t &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathcal{D}_{t_0}, \\ \text{то } \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathcal{D}_t &= \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(S) \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{D}(\Sigma) = 1, \end{aligned}$$

и мы имеем обычную нормировку для статистического оператора \mathcal{D}_t динамической (S, Σ) -системы.

Введем оператор $U(t, t_0) = U(t, t_0, S, \Sigma)$, определяемый уравнением:

$$i\hbar \partial U(t, t_0) / \partial t = H(t, S, \Sigma) U(t, t_0),$$

где $U(t_0, t_0) = 1$. Так как гамильтониан эрмитов, то

$$-i\hbar \partial U^\dagger(t, t_0) / \partial t = U^\dagger(t, t_0) H(t, S, \Sigma),$$

где $U^\dagger(t_0, t_0) = 1$. Мы видим, что U является унитарным: $U(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0)$. С помощью операторов U из уравнения (9) $\mathcal{D}_t = U(t, t_0) \mathcal{D}_{t_0} U^{-1}(t, t_0)$.

Рассмотрим некоторую динамическую величину в шредингеровском представлении $\mathfrak{A}(t, S, \Sigma)$. Ее среднее значение в момент времени t будет:

$$\begin{aligned} \langle \mathfrak{A} \rangle_t &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(t, S, \Sigma) \mathcal{D}_t = \\ &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(t, S, \Sigma) U(t, t_0) \mathcal{D}_{t_0} U^{-1}(t, t_0) = \\ &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \{U^{-1}(t, t_0) \mathfrak{A}(t, S, \Sigma) U(t, t_0)\} \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned} \quad (12)$$

Как видно, выражение

$$U^{-1}(t, t_0) \mathfrak{A}(t, S, \Sigma) U(t, t_0) \quad (13)$$

является представлением Гейзенberга для рассматриваемой динамической величины, которое при $t = t_0$ совпадает с ее шредингеровским представлением.

Такое представление Гейзенберга будем обозначать символом $\mathfrak{A}(t, S_t, \Sigma_t)$:

$$\mathfrak{A}(t, S_t, \Sigma_t) = U^{-1}(t, t_0) \mathfrak{A}(t, S, \Sigma) U(t, t_0). \quad (14)$$

В частности, если мы рассмотрим динамическую переменную в шредингеровском представлении, данную оператором типа $F(t, S)$, то

$$\begin{aligned} F(t, S_t) &= U^{-1}(t, t_0) F(t, S) U(t, t_0) = \\ &= U^\dagger(t, t_0) F(t, S) U(t, t_0). \end{aligned} \quad (15)$$

Из (12) получим

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} F(t, S_t) \mathcal{D}_{t_0} = \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} F(t, S) \mathcal{D}_t = \operatorname{Sp}_{(S)} F(t, S) (\operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{D}_t).$$

Введем далее приведенный статистический оператор $\rho_t(S) = \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{D}_t$. Тогда

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} F(t, S_t) \mathcal{D}_{t_0} = \operatorname{Sp}_{(S)} F(t, S) \rho_t(S). \quad (16)$$

Рассмотрим динамическую систему с гамильтонианом (5) и начальным условием (10) для статистического оператора. Исходя из формулы (14) для представления Гейзенберга имеем

$$\begin{aligned} [\mathfrak{A}(t, S_t, \Sigma_t); \mathfrak{B}(t, S_t, \Sigma_t)] &= \\ &= U^{-1}(t, t_0) [\mathfrak{A}(t, S, \Sigma); \mathfrak{B}(t, S, \Sigma)] U(t, t_0), \end{aligned}$$

где $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}]$ обозначает коммутатор $[\mathfrak{A}, \mathfrak{B}] = \mathfrak{A}\mathfrak{B} - \mathfrak{B}\mathfrak{A}$. Отсюда видим, что если коммутатор двух динамических переменных в представлении Шредингера есть число C , то такое же значение будет иметь коммутатор этих динамических переменных в представлении Гейзенберга.

Обозначим представление Гейзенберга для бозе-амплитуд соответственно $\dots b_k(t), \dots b_k^\dagger(t) \dots$. Тогда по определению (14) $b_k(t_0) = b_k, b_k^\dagger(t_0) = b_k^\dagger$. Поскольку b_k^\dagger, b_k коммутируют с $\Gamma(t, S), C_k(t, S), C_k^\dagger(t, S)$ видим, что

$$\left. \begin{aligned} [b_k(t); \Gamma(t, S_t)] &= 0; & [b_k^\dagger(t); \Gamma(t, S_t)] &= 0; \\ [b_k(t); C_k(t, S_t)] &= 0; & [b_k^\dagger(t); C_k(t, S_t)] &= 0; \\ [b_k(t); C_k^\dagger(t, S_t)] &= 0; & [b_k^\dagger(t); C_k^\dagger(t, S_t)] &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

На этом же основании

$$[H(\Sigma_t); f(t, S_t)] = 0. \quad (18)$$

Ясно, что $b_k^\dagger(t), b_k(t)$ имеют те же обычные перестановочные соотношения, что и b_k^\dagger, b_k .

С учетом (5) и (17) уравнения для бозе-амплитуд дают

$$i\hbar \partial b_k(t)/\partial t = [b_k(t); H(t, S_t, \Sigma_t)];$$

$$i\hbar \partial b_k(t)/\partial t = \hbar \omega_k b_k(t) + \hat{C}_k^\dagger(t, S_t),$$

т. е.

$$\partial b_k(t)/\partial t = -i\omega_k b_k(t) - (i/\hbar) \hat{C}_k(t, S_t).$$

Сопряженное уравнение будет

$$\partial \hat{b}_k(t)/\partial t = i\omega_k \hat{b}_k(t) + (i/\hbar) C_k(t, S_t).$$

Принимая во внимание начальные условия, получим

$$\left. \begin{aligned} b_k(t) &= \tilde{b}_k(t) - i\mathfrak{B}_k(t), \quad \tilde{b}_k(t) = \\ &= \exp[-i\omega_k(t-t_0)] b_k; \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

$$\mathfrak{B}_k(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \hat{C}_k^\dagger(\tau, S_\tau) d\tau;$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{b}_k(t) &= \tilde{b}_k^\dagger(t) + i\mathfrak{B}_k^\dagger(t); \quad \tilde{b}_k^\dagger(t) = \exp[i\omega_k(t-t_0)] \hat{b}_k^\dagger; \\ \mathfrak{B}_k^\dagger(t) &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \exp[i\omega_k(t-\tau)] C_k(\tau, S_\tau) d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Рассмотрим динамическую величину, которая в шредингеровском представлении изображается оператором типа $f(S)$, явно не зависящим от времени.

Учитывая (5) и (17), уравнения движения для $f(S_t)$:

$$i\hbar \partial f(S_t)/\partial t = [f(S_t); H(t, S_t, \Sigma_t)]$$

могут быть записаны в виде

$$i\hbar \partial f(S_t)/\partial t = [f(S_t); \Gamma(t, S_t)] + \sum_{(k)} b_k(t) [f(S_t); C_k(t, S_t)] +$$

$$+ \sum_{(k)} \hat{b}_k(t) [f(S_t); \hat{C}_k(t, S_t)].$$

Подставим сюда (19), (20) и, проделав операцию $\text{Sp}_{(\bar{S}, \Sigma)} \dots \mathcal{D}_{t_0}$, получим

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} f(S_t) \mathcal{D}_{t_0} + \text{Sp}_{(S, \Sigma)} [\Gamma(t, S_t); f(S_t)] \mathcal{D}_{t_0} = \\ = -i \sum_{(k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{B}_k^\dagger(t) [f(S_t); C_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0} + \\ + i \sum_{(k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k^\dagger(t) [f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0} + \\ + \sum_{(k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) [f(S_t); C_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0} + \\ + \sum_{(k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} b_k^\dagger(t) [f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned} \quad (24)$$

Для того чтобы избавиться от входящих в правую часть уравнения (24) бозе-амплитуд \tilde{b}_k , \tilde{b}_k^\dagger , сформулируем лемму.

Для средних от произведения оператора $\tilde{b}_k(t)$ на оператор $\mathfrak{A}(S, \Sigma)$ справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t_0} = (1 + N_k) \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \\ - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t_0}; \\ \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t_0} = \\ = N_k \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t_0}, \end{aligned}$$

где

$$N_k = \exp(-\beta\hbar\omega_k)/[1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)].$$

Доказательство см. в приложении 1.

Выбирая в качестве $\mathfrak{A}(S, \Sigma) = [f(S_t); C_k(t, S_t)]$, имеем соотношения

$$\left. \begin{aligned} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) [f(S_t); C_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0} = \\ = (1 + N_k) \text{Sp}_{(S, \Sigma)} [\tilde{b}_k(t); [f(S_t); C_k(t, S_t)]] \mathcal{D}_{t_0}; \\ \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k^\dagger(t) [f(S_t); \dot{C}_k^\dagger(t, S_t)] \mathcal{D}_{t_0} = \\ = N_k \text{Sp}_{(S, \Sigma)} [[f(S_t); \dot{C}_k^\dagger(t, S_t)]; \tilde{b}_k^\dagger(t)] \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Так как $\dots b_k \dots \dot{b}_k \dots$ коммутируют с $[f(S); C_k(t, S)]$, $[f(S); \dot{C}_k(t, S)]$, то

$$[b_k(t); [f(S_t); C_k(t, S_t)]] = 0;$$

$$[[f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)]; \dot{b}_k(t)] = 0.$$

Подставив сюда соотношения (19) и (20), найдем

$$\left. \begin{aligned} [\tilde{b}_k(t); [f(S_t); C_k(t, S_t)]] &= i[\mathfrak{B}_k(t); [f(S_t); C_k(t, S_t)]] = \\ &= i\mathfrak{B}_k(t)[f(S_t); C_k(t, S_t)] - i[f(S_t); C_k(t, S_t)]\mathfrak{B}_k(t); \\ [[f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)]; \tilde{b}_k^+] &= -i[[f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)]; \dot{\mathfrak{B}}_k^+(t)] = \\ &= i\dot{\mathfrak{B}}_k^+(t)[f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)] - i[f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)]\dot{\mathfrak{B}}_k^+(t). \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Используя (22), (23), из (21) получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} f(S_t) \mathcal{D}_{t0} + \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} [\Gamma(t, S_t); f(S_t)] \mathcal{D}_{t0} = \\ = \sum_{(k)} i \{ N_k \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{B}_k(t) [f(S_t); C_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t0} + \\ + (1 + N_k) \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} [C_k(t, S_t); f(S_t)] \mathfrak{B}_k(t) \mathcal{D}_{t0} \} + \\ + i \sum_{(k)} \{ (1 + N_k) \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \dot{\mathfrak{B}}_k^+(t) [f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)] \mathcal{D}_{t0} + \\ + N_k \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} [\dot{C}_k(t, S_t); f(S_t)] \dot{\mathfrak{B}}_k^+(t) \mathcal{D}_{t0} \}. \end{aligned}$$

Заметим, что с учетом (16)

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} f(S_t) \mathcal{D}_{t0} = \operatorname{Sp}_{(S)} f(S) \rho_t(S);$$

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} [\Gamma(t, S_t); f(S_t)] \mathcal{D}_{t0} = \operatorname{Sp}_{(S)} \{ \Gamma(t, S) f(S) - f(S) \Gamma(t, S) \} \rho_t(S),$$

затем подставим вместо $\mathfrak{B}_k(t)$, $\dot{\mathfrak{B}}_k^+(t)$ их выражения (19), (20) и разделим обе части на $i\hbar$. Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S)} \left\{ f(S) \frac{\partial \rho_t(S)}{\partial t} + \frac{\Gamma(t, S) f(S) - f(S) \Gamma(t, S)}{i\hbar} \rho_t(S) \right\} = \\ = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{(k)} \int_{t_0}^t d\tau \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \{ N_k \dot{C}_k(\tau, S_\tau) [f(S_t); C_k(t, S_t)] + \\ + (1 + N_k) [\dot{C}_k(t, S_t); f(S_t)] C_k(\tau, S_\tau) \} \mathcal{D}_{t0} + \\ + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{(k)} \int_{t_0}^t d\tau \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \exp[i\omega_k(t-\tau)] \{ (1 + N_k) C_k(\tau, S_\tau) \times \\ \times [f(S_t); \dot{C}_k(t, S_t)] + N_k [\dot{C}_k(t, S_t); f(S_t)] C_k(\tau, S_\tau) \} \mathcal{D}_{t0}. \end{aligned} \quad (24)$$

Итак, мы построили обобщенное кинетическое уравнение. Переидем к рассмотрению модели полярона. Для этого подставим в правую часть этого уравнения формулы (6), т. е.

$$\Gamma(t, S) = T(\bar{p}) + \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \bar{r};$$

$$C_k(t, S) = \frac{\exp(\varepsilon t)}{\sqrt{V}} \mathcal{L}(k) \left(\frac{\hbar}{2\omega_k} \right)^{1/2} \exp[i(\bar{k}\bar{r})],$$

тогда найдем

$$\begin{aligned} & \text{Sp}_{(S)} \left\{ f(S) \frac{\partial \rho_t(S)}{\partial t} + \right. \\ & \left. + \frac{\exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) (\bar{r}f(S) - f(S) \bar{r}) + T(p) f(S) - f(S) T(p)}{i\hbar} \rho_t(S) \right\} = \\ & = \frac{1}{V} \exp(2\varepsilon t) \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\hbar\omega_k} \int_{t_0}^t d\tau \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \{N_k \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + \\ & + (1+N_k) \exp[i\omega_k(t-\tau)]\} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{ \exp(-i\bar{k}\bar{r}_\tau) f(S_\tau) \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) - \\ & - \exp(-i\bar{k}\bar{r}_\tau) \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) f(S_\tau) \} \mathcal{D}_{t_0} + \\ & + \frac{1}{V} \exp(2\varepsilon t) \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\hbar\omega_k} \int_{t_0}^t d\tau \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \times \\ & \times \{(1+N_k) \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + N_k \exp[i\omega_k(t-\tau)]\} \times \\ & \times \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{ \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) f(S_\tau) \exp(-i\bar{k}\bar{r}_\tau) - \\ & - f(S_\tau) \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) \exp(-i\bar{k}\bar{r}_\tau) \} \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned} \quad (25)$$

Интересно отметить, что в это уравнение фононные операторы не входят явно. Правая часть зависит только от траектории электрона $\bar{r}(\tau)$, $\bar{p}(\tau)$, $t_0 \leq \tau < t$.

Подчеркнем, что операторы электрона $\bar{r}(\tau)$, $\bar{p}(\tau)$ зависят сложным образом от начальных значений \bar{r} , \bar{p} , \dots , b_k , b_k^* . Поэтому, чтобы получить из последнего уравнения явное выражение, следует ограничиться надлежащей аппроксимацией. Например, полагая $f(S) = f(\bar{p})$ и заменяя сложную зависимость $\bar{r}(\tau)$ в «нулевом приближении» равномерным движением $\bar{r}(r) = \bar{r}(t) - \bar{p}(t)(t-\tau)/m$ в рамках модели Фрёлиха с учетом явного малого параметра, характеризующего интенсивность электрон-фононного взаимодействия, можно построить явное уравнение Больцмана для полярона с интегральным членом, соответствующим одноФононному поглощению и испусканию [1] квантов фононного поля.

Рассмотрим теперь случай пространственной однородности, когда

$$f(S) = f(\bar{p}),$$

и отсюда

$$f(S_t) = f(\bar{p}_t).$$

Имеем

$$\bar{r}f(\bar{p}) - f(\bar{p})\bar{r} = i\hbar \partial f(\bar{p})/\partial \bar{p}.$$

Отметим формулу

$$\operatorname{Sp}_{(S)} f(\bar{p}) \rho_t(S) = \int f(\bar{p}) W_t(\bar{p}) d\bar{p},$$

где

$$W_t(\bar{p}_0) = \operatorname{Sp}_{(S)} \delta(\bar{p} - \bar{p}_0) \rho_t(S). \quad (26)$$

Пусть p_t — оператор импульса в представлении Гейзенberга. Тогда с учетом (16)

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} F(\bar{p}_t) \mathcal{D}_{t0} = \int F(\bar{p}) W_t(\bar{p}) d\bar{p}.$$

Из формул (11) и (26) следует, что $\int W_t(\bar{p}) d\bar{p} = 1$. Ясно, что $W_t(\bar{p})$ можно интерпретировать как плотность вероятности в момент времени t .

Левую часть (24) запишем в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \operatorname{Sp}_{(S)} \left\{ f(\bar{p}) \frac{\partial \rho_t(S)}{\partial t} + \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial f(\bar{p})}{\partial \bar{p}} \rho_t(S) \right\} = \\ & = \int d\bar{p} \left\{ f(\bar{p}) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial t} + \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial f(\bar{p})}{\partial \bar{p}} W_t(\bar{p}) \right\}. \end{aligned}$$

Легко видеть, что

$$\begin{aligned} \exp(i\bar{k}\bar{r}) f(\bar{p}) &= f(\bar{p} - \hbar\bar{k}) \exp(i\bar{k}\bar{r}); \\ f(\bar{p}) \exp(i\bar{k}\bar{r}) &= \exp(i\bar{k}\bar{r}) f(\bar{p} + \hbar\bar{k}), \end{aligned} \quad (27)$$

а также

$$f(\bar{p}_t) \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) = \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) f(\bar{p}_t + \hbar\bar{k});$$

$$\exp(i\bar{k}\bar{r}_t) f(\bar{p}_t) = f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) \exp(i\bar{k}\bar{r}_t).$$

Учитывая инвариантность в обоих членах правой части (25) относительно замены k на $-k$ и сделанные выше замечания, получим

$$\begin{aligned}
 & \int d\bar{p} f(\bar{p}) \left\{ \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial t} - \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial \bar{p}} \right\} = \\
 &= \int d\bar{p} \left\{ f(\bar{p}) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial t} + \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial f(\bar{p})}{\partial \bar{p}} W_t(\bar{p}) \right\} = \\
 &= \exp(2\varepsilon t) \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\hbar\omega_k} \int_{t_0}^t d\tau \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \times \\
 &\quad \times \{N_k \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + (1+N_k) \exp[i\omega_k(t-\tau)]\} - \\
 &- \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{ \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) \exp[-i\bar{k}\bar{r}_t] \{f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - f(\bar{p}_t)\} \mathcal{D}_{t_0} \} + \\
 &+ \exp(2\varepsilon t) \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\hbar\omega_k} \int_{t_0}^t d\tau \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \{(1+N_k) \times \\
 &\quad \times \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + N_k \exp[i\omega_k(t-\tau)]\} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{ \{f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - \\
 &\quad - f(\bar{p}_t)\} \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) \exp(-i\bar{k}\bar{r}_t) \mathcal{D}_{t_0} \}, \tag{28}
 \end{aligned}$$

где $\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma)$.

Это точное соотношение будет рассмотрено в разд. 2 как источник для получения приближенных уравнений.

В заключение отметим, что обобщенное уравнение (24) может иметь и другие приложения. Например, его можно также использовать для изучения движения электронов в металле и вывода соответствующих кинетических уравнений. Для этого лишь стоит взять в качестве операторной функции в уравнении (24)

$$f(S) = a_f^+ a_f$$

и

$$\Gamma(t, S) = \sum_{(f)} T_f^+ a_f a_f.$$

Тогда

$$\text{Sp}_S f(S) \rho_t(S) = \text{Sp}_{(S)}^+ a_f a_f \rho_t(S) = \langle a_f^+(t) a_f(t) \rangle_{t_0} = n_f(t)$$

и

$$\text{Sp}_S f(S) \frac{\partial \rho_t(S)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} n_f(t),$$

а в качестве оператора $C_k(t, S)$ возьмем выражение

$$C_k(t, S) = \frac{\exp(\varepsilon t)}{\sqrt{V}} \mathcal{L}_k \sum_{(f)}^+ a_{f+k}(t), a_f(t).$$

Конкретизируем далее операторы $a_{f+k}^+(t)$, $a_f^+(t)$, входящие в эту конструкцию, сделав «приближение», положив, что они удовлетворяют уравнению движения без взаимодействия

$$i\hbar da_f/dt = T(f) a_f(t),$$

отсюда

$$a_f(\tau) = \exp[-i(T_f/\hbar)(\tau-t)] a_f(t); \quad a_f^+(\tau) = \exp[i(T_f/\hbar)(\tau-t)] a_f^+(t).$$

Тогда

$$C_k(\tau, S_\tau) = \frac{\exp(\varepsilon\tau)}{\sqrt{V}} \sum_{(f)} \exp\left[-i\frac{(T_{f+k}-T_f)}{\hbar}(t-\tau)\right] a_{f+k}^+(t) a_f(t).$$

Учитывая сделанные замечания и подставляя «приближенное» выражение для $C_k(\tau, S_\tau)$ в обобщенное кинетическое уравнение (24), после несложных преобразований и после стандартного предельного перехода $t_0 \rightarrow -\infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$, найдем известное квантовое кинетическое уравнение Блоха, на котором построена теория электропроводности и теплопроводности металлов и полупроводников [5].

2. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В ПЕРВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ МАЛЫХ ВЗАЙМОДЕЙСТВИЙ

Рассмотрим здесь случай малых взаимодействий. Удобно характеризовать константу связи малым параметром, который будем обозначать α , при условии, что $\mathcal{L}^2(k)$ пропорционально α .

Например, в рамках модели полярона Фрёлиха стандартным безразмерным параметром, характеризующим интенсивность электрон-фононного взаимодействия в наших обозначениях, принимается величина

$$\alpha = \frac{g^2}{4\pi\hbar\omega^2} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}. \quad (29)$$

Будем также считать, что внешняя сила E формально пропорциональна малому параметру.

В «нулевом приближении», когда мы полностью пренебрегаем взаимодействием, можем составить следующее уравнение:

$$i\hbar dr/dt = rT(p) - T(p)r, \quad (30)$$

из которого следует, что

$$\bar{r}_\tau = \exp [iT(p)(\tau - \tau_0)/\hbar] \bar{r}_{\tau_0} \exp [-iT(p)(\tau - \tau_0)/\hbar].$$

Пусть $\tau_0 = t$, тогда

$$\bar{r}_\tau = \exp [iT(p)(\tau - t)/\hbar] \bar{r}_t \exp [-iT(p)(\tau - t)/\hbar]$$

и

$$\begin{aligned} \exp(i\bar{k}\bar{r}_\tau) &= \exp\{(i/\hbar)T(p_t)(\tau - t)\} \exp\{i\bar{k}\bar{r}_t\} \times \\ &\quad \times \exp\{(-i/\hbar)T(p_t)(\tau - t)\}. \end{aligned} \quad (31)$$

С помощью формул (27), передвигая $\exp(i\bar{k}\bar{r}_t)$ вправо в формуле (31), найдем

$$\begin{aligned} \exp(i\bar{k}\bar{r}_\tau) &= \exp[iT(\bar{p}_t)(\tau - t)/\hbar] \exp[-iT(\bar{p}_t - \hbar\bar{k})(\tau - t)/\hbar] \times \\ &\quad \times \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) = \exp[i\{T(\bar{p}_t) - T(\bar{p}_t - \hbar\bar{k})\}(\tau - t)/\hbar] \exp(i\bar{k}\bar{r}_t), \end{aligned} \quad (32)$$

а также

$$\exp(i\bar{k}\bar{r}_\tau) = \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) \exp[i\{T(\bar{p}_t + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}_t)\}(\tau - t)/\hbar]. \quad (33)$$

Заменяя здесь $k \rightarrow -k$, имеем

$$\exp[-i\bar{k}\bar{r}_\tau] = \exp(-i\bar{k}\bar{r}_t) \exp[i\{T(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}_t)\}(\tau - t)/\hbar].$$

Это «приближение» будет использовано в (28) только для членов, пропорциональных α . А именно, подставим (32), (33) под знак шпера, используя приближение нулевого порядка следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{app} &= \left\{ \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} \exp(i\bar{k}\bar{r}_\tau) \exp(-i\bar{k}\bar{r}_t) [f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - \right. \\ &\quad \left. - f(\bar{p}_t)] \mathcal{D}_{t0} \right\}_{app} = \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} \exp[i\{T(\bar{p}_t) - \} \\ &\quad - T(\bar{p}_t - \hbar\bar{k})](\tau - t)/\hbar] \times [f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - f(\bar{p}_t)] \mathcal{D}_{t0}; \\ \mathcal{E}_{app}^* &= \left\{ \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} [f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - f(\bar{p}_t)] \exp(i\bar{k}\bar{r}_t) \exp(-i\bar{k}\bar{r}_\tau) \right\}_{app} = \\ &= \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} [f(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - f(\bar{p}_t)] \exp[i\{T(\bar{p}_t - \hbar\bar{k}) - \} \\ &\quad - T(\bar{p}_t)](\tau - t)/\hbar] \mathcal{D}_{t0}. \end{aligned} \quad (34)$$

Следует указать, что эти выражения умножаются на величину $\mathcal{L}^2(k)$, пропорциональную малому параметру.

Таким образом полагаем, что члены первого порядка по α в правой части (28) оцениваются правильно. Это приближение как раз то, которое мы хотели получить. Далее будем переходить к пределу $V \rightarrow \infty$, $t_0 \rightarrow -\infty$, а в конечном результате положим

$\varepsilon \rightarrow 0$. Но сначала раскроем выражения, задаваемые формулами (34) для \mathcal{E}_{app} , $\mathcal{E}_{\text{app}}^*$.

Вернемся к соотношению

$$\underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} F(\bar{p}_t) \mathcal{D}_{t_0} = \int F(\bar{p}) W_t(\bar{p}) d\bar{p},$$

справедливому для произвольной функции импульса $F(\bar{p})$. В качестве $F(\bar{p})$ выберем

$$F(\bar{p}) = \exp [i \{T(\bar{p}) - T(\bar{p} - \hbar \bar{k})\} (\tau - t)/\hbar] [f(\bar{p} - \hbar \bar{k}) - f(\bar{p})],$$

тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{app}} &= \int d\bar{p} \exp [i \{T(\bar{p}) - T(\bar{p} - \hbar \bar{k})\} (\tau - t)/\hbar] [f(\bar{p} - \hbar \bar{k}) - \\ &- f(\bar{p})] W_t(\bar{p}) = \int_{(\bar{p} \rightarrow \bar{p} + \hbar \bar{k})} d\bar{p} \exp [i \{T(\bar{p} + \hbar \bar{k}) - T(\bar{p})\} (\tau - t)/\hbar] \times \\ &\times f(\bar{p}) W_t(\bar{p} + \hbar \bar{k}) - \int d\bar{p} \exp [i \{T(\bar{p}) - T(\bar{p} - \hbar \bar{k})\} (\tau - t)/\hbar] \times \\ &\times f(\bar{p}) W_t(\bar{p}). \end{aligned}$$

Легко видеть, что $\mathcal{E}_{\text{app}}^*$ будет комплексно сопряженным к \mathcal{E}_{app}

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{app}}^* &= \int d\bar{p} \exp [i \{T(\bar{p}) - T(\bar{p} + \hbar \bar{k})\} (\tau - t)/\hbar] f(\bar{p}) W_t(\bar{p} + \hbar \bar{k}) - \\ &- \int d\bar{p} \exp [i \{T(\bar{p} - \hbar \bar{k}) - T(\bar{p})\} (\tau - t)/\hbar] f(\bar{p}) W_t(\bar{p}). \quad (35) \end{aligned}$$

Подставим теперь эти соотношения в уравнение (28). Переходя к пределу $V \rightarrow \infty$, заменим суммы $(1/V) \sum_{(\hbar)}$ соответствующими интегралами $(2\pi)^3 \int dk (\dots)$. В дальнейшем удобно также сделать преобразование $\bar{k} \rightarrow -\bar{k}$ в интегралах, содержащих $W_t(\bar{p})$. Введем также новую переменную интегрирования $t - \tau = \xi$, так что

$$\int_{t_0}^t d\tau (\dots) = \int_0^{t-t_0} d\xi (\dots).$$

В пределе $t_0 \rightarrow -\infty$ эти интегралы станут $\int_0^\infty d\xi (\dots)$.

Таким образом, можно записать уравнение в первом приближении в следующем виде:

$$\begin{aligned} \int d\bar{p} f(\bar{p}) \left\{ \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial t} - \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial \bar{p}} \right\} = \\ = \frac{\exp(2\varepsilon t)}{(2\pi)^3} \int d\bar{p} f(\bar{p}) \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\hbar\omega_k} A_\varepsilon(\bar{p}, \bar{k}), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_e(\bar{p}, \bar{k}) = & \int_0^\infty d\xi \exp(-\varepsilon\xi) ((1+N_k) \exp(i\omega_k\xi) + \\
 & + N_k \exp(-i\omega_k\xi)) \{ \exp(-i\xi\Delta_{p,k}) W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \\
 & - \exp(i\xi\Delta_{p,k}) W_t(p) \} + \int_0^\infty d\xi \exp(-\varepsilon\xi) ((1+N_k) \exp(-i\omega_k\xi) + \\
 & + N_k \exp(i\omega_k\xi)) \{ \exp(i\xi\Delta_{p,k}) W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \exp(-i\xi\Delta_{p,k}) W_t(\bar{p}) \}; \\
 \Delta_{p,k} = & [T(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p})]/\hbar.
 \end{aligned}$$

В связи с тем, что $f(\bar{p})$ — произвольная функция импульса \bar{p} , это уравнение сводится к следующему:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial W_t(p)}{\partial t} - \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial \bar{p}} = \\
 = \frac{\exp(2\varepsilon t)}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{Z}^2(k)}{2\hbar\omega_k} A_e(\bar{p}, \bar{k}). \quad (36)
 \end{aligned}$$

Собирая члены в выражении $A_e(\bar{p}, \bar{k})$, найдем

$$\begin{aligned}
 A_e(\bar{p}, \bar{k}) = & \{(1+N_k) W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - N_k W_t(\bar{p})\} \times \\
 & \times \left\{ \int_0^\infty \exp(-\varepsilon\xi) \exp[-i\xi(\Delta_{p,k} - \omega_k)] d\xi + \right. \\
 & + \int_0^\infty \exp(-\varepsilon\xi) \exp[i\xi(\Delta_{p,k} - \omega_k)] d\xi \Big\} + \\
 & + \{N_k W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - (1+N_k) W_t(\bar{p})\} \times \\
 & \times \left\{ \int_0^\infty \exp(-\varepsilon\xi) \exp[-i\xi(\Delta_{p,k} + \omega_k)] d\xi + \right. \\
 & \left. + \int_0^\infty \exp(-\varepsilon\xi) \exp[i\xi(\Delta_{p,k} + \omega_k)] d\xi \right\},
 \end{aligned}$$

здесь $N_k = \exp(-\beta\hbar\omega_k)/[1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]$, или короче

$$\begin{aligned}
 A_e(\bar{p}, \bar{k}) = & \frac{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \exp(-\beta\hbar\omega_k) W_t(\bar{p})}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \mathcal{D}_e(\Delta_{p,k} - \omega_k) + \\
 & + \frac{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) \exp(-\beta\hbar\omega_k) - W_t(\bar{p})}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \mathcal{D}_e(\Delta_{p,k} + \omega_k),
 \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{D}_\epsilon(Z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\epsilon|\xi|) \exp(i\xi Z) d\xi.$$

Заметим также, что

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{D}_\epsilon(\Delta_{p,k} \mp \omega_k) &= 2\pi\delta(\Delta_{p,k} \mp \omega_k) = \\ &= 2\pi\delta([\hbar\Delta_{p,k} \mp \hbar\omega_k]/\hbar) = 2\pi\hbar\delta(\hbar\Delta_{p,k} \mp \hbar\omega_k). \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} A_\epsilon(\bar{p}, \bar{k}) &= \frac{2\pi\hbar}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \\ &- \exp(-\beta\hbar\omega_k) W_t(\bar{p})\} \delta(T(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}) - \hbar\omega_k) + \\ &+ \frac{2\pi\hbar}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) \exp(-\beta\hbar\omega_k) - \\ &- W_t(\bar{p})\} \delta(T(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}) + \hbar\omega_k). \end{aligned}$$

Сделаем теперь последний шаг, полагая $\epsilon \rightarrow 0$ в уравнении (36). В результате получим уравнение первого приближения в окончательной форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial t} - \bar{E}(t) \frac{\partial W_t(\bar{p})}{\partial \bar{p}} &= \\ = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \\ &- \exp(-\beta\hbar\omega_k) W_t(\bar{p})\} \delta(T(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}) - \hbar\omega_k) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \{W_t(\bar{p} + \hbar\bar{k}) \exp(-\beta\hbar\omega_k) - \\ &- W_t(\bar{p})\} \delta(T(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{p}) + \hbar\omega_k). \end{aligned} \quad (37)$$

Итак, мы получили обобщенные уравнения Больцмана.

Остановимся теперь на рассмотрении важного частного случая

$$T(p) = p^2/(2m),$$

тогда под знаком δ -функций войдут выражения $\delta((\bar{p} + \hbar\bar{k})^2/(2m) - \bar{p}^2/(2m) \mp \hbar\omega_k)$.

Тогда очевидно, что уравнение (37) будет обычным уравнением Больцмана, интегральные члены в правой части которого соответствуют однофононному испусканию и поглощению. Такое уравнение Больцмана интенсивно изучалось при исследовании транспортных свойств. Для изучения стационарного состояния, когда

электрическое поле не зависит от времени, из (37) имеем

$$\begin{aligned} -\bar{E} \frac{\partial W(\bar{p})}{\partial \bar{p}} = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \{W(\bar{p} + \hbar\bar{k}) - \\ & - \exp(-\beta\hbar\omega_k) W(\bar{p})\} \delta\left(\frac{(\bar{p} + \hbar\bar{k})^2}{2m} - \frac{\bar{p}^2}{2m} - \hbar\omega_k\right) + \\ & + \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \{W(\bar{p} + \hbar\bar{k}) \exp(-\beta\hbar\omega_k) - \\ & - W(\bar{p})\} \delta\left(\frac{(\bar{p} + \hbar\bar{k})^2}{2m} - \frac{\bar{p}^2}{2m} + \hbar\omega_k\right). \end{aligned} \quad (38)$$

При рассмотрении специального случая низких температур множителем $\exp(-\beta\hbar\omega_k)$ в (38) можно пренебречь.

Полученное таким образом уравнение рассматривалось в работе [2] Дефрезом и Эвардом для полярной модели Фрёлиха. Они обнаружили весьма сложное поведение функции распределения $W(p)$, указывающее, по-видимому, на появление существенной особенности при $E = 0$.

В заключение скажем несколько слов об упрощенном способе приближения к определению зависимости между приложенным электрическим полем и средней равновесной скоростью \bar{v} электрона.

Умножим обе части уравнения (38) на \bar{p} и проинтегрируем по всему пространству импульсов. После простых преобразований найдем

$$\begin{aligned} -\bar{E} = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(\bar{k}) \hbar\bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \int d\bar{p} W(\bar{p}) \delta\left(-\frac{(\hbar\bar{k})^2}{2m} + \right. \\ & \left. + \hbar \frac{\bar{k}\bar{p}}{m} - \hbar\omega_k\right) - \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \hbar\bar{k}}{2\omega_k [\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1]} \times \\ & \times \int d\bar{p} W(\bar{p}) \delta\left(\frac{(\hbar\bar{k})^2}{2m} + \hbar \frac{\bar{k}\bar{p}}{m} - \hbar\omega_k\right). \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь, согласно обозначениям разд. 1

$$\bar{E} = -e_c \bar{\mathcal{E}}, \quad (40)$$

где $\bar{\mathcal{E}}$ — внешнее электрическое поле.

Таким образом, это есть точное следствие уравнения Больцмана. Сделаем «грубое приближение», выбирая в качестве пробной функции для $W(\bar{p})$ «сдвинутую» функцию распределения Максвелла со средней скоростью v

$$\bar{W}(\bar{p}) = \rho_M(\bar{p} - m\bar{v}); \quad \rho_M(\bar{p}) = \left(\frac{\beta}{2m\pi}\right)^{3/2} \exp(-\beta p^2/2m)$$

и подставим это распределение в уравнение (39). Это приведет к приближенному уравнению

$$\begin{aligned}
 e_c \bar{\mathcal{E}} = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \hbar \bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta \hbar \omega_k)]} \times \\
 & \times \int d\bar{p} \rho_M(\bar{p}) \delta \left(-\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \frac{\hbar \bar{k} \bar{p}}{m} - \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right) - \\
 & - \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \hbar \bar{k}}{2\omega_k [\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1]} \times \\
 & \times \int d\bar{p} \rho_M(\bar{p}) \delta \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \hbar \frac{\bar{k} \bar{p}}{m} - \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right). \quad (41)
 \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\begin{aligned}
 & \delta \left(-\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \frac{\hbar \bar{k} \bar{p}}{m} - \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right) = \\
 & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[i \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} - \frac{\hbar \bar{k} \bar{p}}{m} + \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right) \xi \right] d\xi; \\
 & \delta \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \frac{\hbar \bar{k} \bar{p}}{m} - \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right) = \\
 & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[i \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \frac{\hbar \bar{k} \bar{p}}{m} - \hbar (\omega_k - \bar{k} v) \right) \xi \right] d\xi
 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
 \int \rho_M(\bar{p}) \exp(-i\xi \hbar \bar{k} \bar{p}/m) d\bar{p} &= \exp[-(\hbar k)^2 \xi^2/(2m\beta)]; \\
 \int \rho_M(\bar{p}) \exp(i\xi \hbar \bar{k} \bar{p}/m) d\bar{p} &= \exp[-(\hbar k)^2 \xi^2/(2m\beta)].
 \end{aligned}$$

Поэтому из (41) найдем

$$\begin{aligned}
 e_c \bar{\mathcal{E}} = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\mathcal{L}^2(k) \hbar \bar{k}}{2\omega_k} \left\{ \frac{\exp[i\hbar(\omega_k - \bar{k}v)\xi]}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} - \right. \\
 & \left. - \frac{\exp[-i\hbar(\omega_k - \bar{k}v)\xi]}{\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1} \right\} \exp \left[-\frac{(\hbar k)^2}{2m} \left(\frac{\xi^2}{\beta} - i\xi \right) \right]. \quad (42)
 \end{aligned}$$

Это приближенное уравнение было получено Торнбером и Фейнманом для малых взаимодействий [3]*. Они обнаружили, что подвижность, полученная из (42) в пределе слабой связи, не согласуется с подвижностью, получаемой из стандартного рассмотрения уравнения Больцмана.

Мы здесь видим, что это несогласие вызвано использованием неадекватного приближения, — выбором в качестве пробной функции распределения по импульсам максвелловского распределения около средней скорости \bar{v} в уравнении (39), которое является точным следствием уравнения Больцмана. Связь между формулой (42) и использованием распределения Максвелла в качестве пробной функции равновесного распределения была также замечена Дефрезом (частное сообщение).

3. ЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛЯРОНА

Мы хотим здесь показать, что результаты работы [2] так же как и [3], касающиеся вычисления импеданса в модели полярона, можно получить непосредственно, без использования метода континуального интегрирования.

Начнем с рассмотрения точного уравнения (38), в котором в качестве произвольной функции импульсов $f(\bar{p})$ выберем

$$f(\bar{p}) = \bar{p}. \quad (43)$$

Обозначим средний импульс электрона

$$\langle \bar{p} \rangle_t = \int \bar{p} W_t(\bar{p}) d\bar{p}.$$

Введем обозначени

$$\underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} \exp[i\bar{k}\bar{r}(\tau)] \exp[-i\bar{k}\bar{r}(t)] \mathcal{D}_{t_0} = \Phi_k(t, \tau, t_0), \quad (44)$$

* В их обозначениях и системе единиц:

$$\hbar = 1, C_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\omega_k} \right)^{1/2} \mathcal{L}(k); \bar{E} = e_c \bar{\mathcal{E}}$$

уравнение (42) имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{E} = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \sum_{(k)} |C_k|^2 \bar{k} \left\{ \frac{\exp[i(\omega_k - \bar{k}\bar{v})\xi]}{1 - \exp(-\beta\omega_k)} - \frac{\exp[-i(\omega_k - \bar{k}\bar{v})\xi]}{\exp(\beta\omega_k) - 1} \right\} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{k^2}{2m} \left(\frac{\xi^2}{\beta} - i\xi \right) \right]. \end{aligned}$$

Это соответствует формуле (17) в упомянутой работе.

при этом

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \exp [i\bar{k}\bar{r}(t)] \exp [-i\bar{k}\bar{r}(\tau)] \mathcal{D}_{t_0} = \\ = \text{Sp} \{ \exp [i\bar{k}\bar{r}(\tau)] \exp [-i\bar{k}\bar{r}(t)] \}^+ \mathcal{D}_{t_0} = \Phi_k^*(t, \tau, t_0). \end{aligned}$$

Из уравнения (38) с учетом (43), (44) следует, что

$$\begin{aligned} d\langle \bar{p} \rangle_t / dt + \exp(\varepsilon t) \bar{E}(t) = \\ = -\frac{1}{V} \exp(2\varepsilon t) \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(\bar{k}) \bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \int_{t_0}^t d\tau \{ \exp[i\omega_k(t-\tau)] + \\ + \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \exp[-\beta\hbar\omega_k] \} \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \Phi_k(t, \tau, t_0) - \\ - \frac{1}{V} \exp(2\varepsilon t) \sum_{(k)} \frac{\mathcal{L}^2(\bar{k}) \bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\ \times \int_{t_0}^t d\tau \exp[-\varepsilon(t-\tau)] \{ \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + \\ + \exp[i\omega_k(t-\tau)] \exp[-\beta\hbar\omega_k] \} \Phi_k^*(t, \tau, t_0). \end{aligned} \quad (45)$$

Это еще точное соотношение. Чтобы получить из него какое-то приближенное *уравнение*, необходимо найти соответствующую аппроксимацию выражений $\Phi_k(t, \tau, t_0)$ в явной форме. Для этого целесообразно ввести в рассмотрение модельный гамильтониан, который приводил бы к точно решаемым уравнениям движения. Чтобы получить надлежащее приближение, этот модельный гамильтониан должен быть выбран так, чтобы поведение $r(\bar{t})$ как-то было похожим на поведение $\bar{r}(t)$, соответствующее точному гамильтониану (5).

Рассмотрим первый случай, когда внешнее поле отсутствует

$$\bar{E} = 0. \quad (46)$$

Возьмем гамильтониан

$$\begin{aligned} H_L = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{c^2 r^2}{2} + \sum_{(k)} \hbar v(k) b_k^\dagger b_k + \\ + \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(\bar{k})(\bar{k}\bar{r})(b_k + b_{-k}^+), \end{aligned} \quad (47)$$

где $J(\bar{k})$ — сферически симметричная функция \bar{k} ; $v(\bar{k})$ — сферически симметричная функция и также существенно положительна: $v(\bar{k}) > 0$. До того, пока мы не совершили предельного перехода $V \rightarrow \infty$, предполагается, что объем V финитен и число

членов \mathfrak{N}_V в суммах по k также финитно. Тогда соответствующие уравнения движения Гейзенберга образуют финитную линейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и, таким образом, точно решаемую, т. е.

$$\left. \begin{aligned} \bar{r}(t)/dt &= \bar{p}(t)/m^*; \\ \frac{d\bar{p}(t)}{dt} &= -c^2\bar{r}(t) - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)}\right)^{1/2} \mathcal{J}(k) \bar{k} \{b_k(t) + b_{-k}^+(t)\}; \\ \frac{db_k(t)}{dt} &= -iv(k)b_k(t) - \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)}\right)^{1/2} \mathcal{J}(k) (\bar{k}\bar{r}(t)); \\ \frac{db_{-k}^+(t)}{dt} &= iv(k)b_{-k}(t) + \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)}\right)^{1/2} \mathcal{J}(k) (\bar{k}\bar{r}(t)); \\ \bar{r}(t_0) &= \bar{r}; \quad \bar{p}(t_0) = \bar{p}; \quad b_k(t_0) = b_k; \quad b_{-k}^+(t_0) = b_{-k}^+. \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

Покажем теперь, что при соответствующем выборе константы c^2 гамильтониан (47) станет трансляционно-инвариантным. Начнем с тождества

$$\begin{aligned} \sum_{(k)} \hbar v(k) \left\{ b_k^+ + \frac{i(\bar{k}\bar{r})}{\sqrt{V}} \frac{\mathcal{J}(k)}{v(k) \sqrt{2\hbar v(k)}} \right\} \left\{ b_k - \frac{i(\bar{k}\bar{r})}{\sqrt{V}} \frac{\mathcal{J}(k)}{v(k) \sqrt{2\hbar v(k)}} \right\} &= \\ = \sum_{(k)} \hbar v(k) b_k^+ b_k + \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_k \left(\frac{\hbar}{2v(k)}\right)^{1/2} \mathcal{J}(k) (\bar{k}\bar{r}) b_k - & \\ - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)}\right)^{1/2} \mathcal{J}(k) (\bar{k}\bar{r}) b_k^+ + \frac{1}{V} \sum_k \frac{\mathcal{J}^2(k)}{2v^2(k)} (\bar{k}\bar{r})^2 & \end{aligned}$$

и заметим, что благодаря сферической симметричности функций $\mathcal{J}(k)$, $v(k)$

$$\frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{J}^2(k)}{v^2(k)} (\bar{k}\bar{r})^2 = r^2 \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{J}^2(k)}{3v^2(k)} k^2.$$

По этой причине

$$\begin{aligned} H_L &= \frac{p^2}{2m^*} + \left(c^2 - \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{J}^2(k)}{3v^2(k)} k^2 \right) \frac{r^2}{2} + \\ &+ \sum_{(k)} \hbar v(k) \left\{ b_k^+ + \frac{i(\bar{k}\bar{r}) \mathcal{J}(k)}{\sqrt{V} v(k) \sqrt{2\hbar v(k)}} \right\} \left\{ b_k - \frac{i(\bar{k}\bar{r}) \mathcal{J}(k)}{\sqrt{V} v(k) \sqrt{2\hbar v(k)}} \right\}. \end{aligned}$$

Поэтому если выберем

$$c^2 = \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\mathcal{J}^2(k) k^2}{3v^2(k)}, \quad (49)$$

то гамильтониан H_L станет инвариантным по отношению к трансляционной группе

$$\bar{r} \rightarrow \bar{r} + \bar{R}; \quad b_k \rightarrow b_k + \frac{i(\bar{k}\bar{R})\Lambda(k)}{\sqrt{\bar{V}\nu(k)(2\hbar\nu(k))^{1/2}}}. \quad (50)$$

Такая инвариантность должна привести к существованию сохраняющегося вектора $\bar{\mathcal{P}}$:

$$d\bar{\mathcal{P}}/dt = 0. \quad (51)$$

который можно представить себе как вид «суммарного импульса».

Для нахождения выражения для $\bar{\mathcal{P}}$ заметим, что из (48) следует:

$$\begin{aligned} \frac{d(b_k(t) - b_{-k}^+(t))}{dt} &= -i\nu(k)(b_k(t) + b_{-k}^+(t)) - \\ &- \frac{2}{\sqrt{\bar{V}}} \left(\frac{1}{2\hbar\nu(k)} \right)^{1/2} \Lambda(k) (\bar{k}\bar{r}(t)) \end{aligned}$$

и отсюда

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{1}{\sqrt{\bar{V}}} \sum_{(k)} \Lambda(k) \left(\frac{\hbar}{2\nu(k)} \right)^{1/2} \frac{b_k(t) - b_{-k}^+(t)}{\nu(k)} \bar{k} &= \\ = -i \frac{1}{\sqrt{\bar{V}}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2\nu(k)} \right)^{1/2} \Lambda(k) \bar{k} (b_k(t) + b_{-k}^+(t)) - \\ - \frac{1}{\bar{V}} \sum_{(k)} \frac{\Lambda^2(k)}{\nu^2(k)} (\bar{k}\bar{r}(t)) \bar{k} &= \frac{d\bar{p}(t)}{dt} + c^2 \bar{r}(t) - \frac{1}{\bar{V}} \sum_{(k)} \frac{\Lambda^2(k)}{\nu^2(k)} (\bar{k}\bar{r}(t)) \bar{k}. \end{aligned}$$

Но здесь благодаря (49)

$$\frac{1}{\bar{V}} \sum_{(k)} \frac{\Lambda^2(k)}{\nu^2(k)} (\bar{k}\bar{r}(t)) \bar{k} = \bar{r}(t) \frac{1}{\bar{V}} \sum_{(k)} \frac{\Lambda^2(k) k^2}{3\nu^2(k)} = c^2 \bar{r}(t),$$

поэтому

$$\frac{d}{dt} \left\{ \bar{p}(t) - \frac{1}{\sqrt{\bar{V}}} \sum_{(k)} \frac{\bar{k}\Lambda(k)}{\nu(k)} \left(\frac{\hbar}{2\nu(k)} \right)^{1/2} (b_k(t) - b_{-k}^+(t)) \right\} = 0.$$

Из последнего выражения следует, что сохраняющийся вектор «суммарного импульса» имеет вид

$$\bar{\mathcal{P}} = \bar{p} - \frac{1}{\sqrt{\bar{V}}} \sum_{(k)} \frac{\bar{k}\Lambda(k)}{\nu(k)} \left(\frac{\hbar}{2\nu(k)} \right)^{1/2} (b_k - b_{-k}^+). \quad (52)$$

Введем теперь внешнее электрическое поле, заменяя гамильтониан H_L на

$$\tilde{H}_L = H_L + \bar{E}(r) \bar{r} \quad (53)$$

Поскольку H_L коммутирует с $\bar{\mathcal{P}}$ и поскольку

$$[\mathcal{P}_\beta, r_\gamma] = [p_\beta, r_\gamma] = -i\hbar\delta_{\beta\gamma}; \quad \beta, \gamma = 1, 2, 3,$$

видим, что

$$\frac{d\bar{\mathcal{P}}}{dt}(t) = -\bar{E}(t). \quad (54)$$

Понятно, что для гамильтониана (5) при условии (36) трансляционная группа определяется преобразованием:

$$\bar{r} \rightarrow \bar{r} + \bar{R}; \quad b_k \rightarrow b_k \exp(-i\bar{k}\bar{R}). \quad (55)$$

В этой ситуации «суммарный импульс» задается выражением

$$\bar{\mathcal{P}} = \bar{p} + \sum_{(k)} \hbar \bar{k} b_k^+ b_k. \quad (56)$$

Когда внешнее поле включено, $\bar{\mathcal{P}}$ также удовлетворяет уравнению (54).

Рассмотрим гамильтониан (53), соответствующие уравнения Гейзенберга и начальные условия для статистического оператора \mathcal{D}_t . Воспользуемся той же формой этих условий, что и в (10):

$$\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}_L(\Sigma).$$

Только теперь, естественно, возьмем оператор для статистически равновесной модельной (\sum)-системы

$$\mathcal{D}_L(\Sigma) = \text{const} \exp[-\beta \sum_{(k)} \hbar v(k) b_k^+ b_k].$$

Уравнения движения для модельной $(S + \Sigma)$ -системы будут:

$$m^* d\bar{r}(t)/dt = \bar{p}(t);$$

$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -c^2 \bar{r}(t) - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(k) \bar{k} (b_k(t) + b_{-k}^+(t)) - \bar{E}(t); \quad (57)$$

$$\frac{db_k(t)}{dt} = -iv(k) b_k(t) - \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)} \right)^{1/2} J(k) (\bar{k} \bar{r}(t));$$

$$\frac{db_{-k}^+(t)}{dt} = iv(k) b_{-k}^+(t) + \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)} \right)^{1/2} J(k) (\bar{k} \bar{r}(t)); \quad (58)$$

$$\bar{r}(t_0) = \bar{r}; \quad \bar{p}(t_0) = \bar{p}; \quad b_k(t_0) = b_k; \quad b_{-k}^+(t_0) = b_{-k}^+,$$

из которых следует:

$$\begin{aligned} b_k(t) &= b_k \exp [-i v(k)(t - t_0)] - \\ &- \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)} \right)^{1/2} J(k) \int_{t_0}^t \exp [-i v(k)(t - \tau)] (\bar{k} \bar{r}(\tau)) d\tau; \\ b_{-k}^+(t) &= b_{-k}^+ \exp [i v(k)(t - t_0)] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{2\hbar v(k)} \right)^{1/2} J(k) \int_{t_0}^t \exp [i v(k)(t - \tau)] (\bar{k} \bar{r}(\tau)) d\tau. \end{aligned}$$

Подставим эти выражения в уравнение (57) и получим

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{p}(t)}{dt} + c^2 \bar{r}(t) + \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_k \frac{J^2(k) \bar{k}}{2v(k)} \int_{t_0}^t d\tau (\bar{k} \bar{r}(\tau)) \{ \exp [i v(k)(t - \tau)] - \\ - \exp [-i v(k)(t - \tau)] \} = \\ = - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(k) \bar{k} (b_k \exp [-i v(k)(t - t_0)] + \\ + b_{-k}^+ \exp [i v(k)(t - t_0)]) - \bar{E}(t). \end{aligned}$$

Выполним интегрирование по частям

$$\begin{aligned} i \int_{t_0}^t d\tau (\bar{k} \bar{r}(\tau)) \{ \exp [i v(k)(t - \tau)] - \exp [-i v(k)(t - \tau)] \} = \\ = - \frac{1}{v(k)} \int_{t_0}^t (\bar{k} \bar{r}(\tau)) \frac{d}{d\tau} \{ \exp [i v(k)(t - \tau)] + \exp [-i v(k)(t - \tau)] \} d\tau = \\ = - 2 \frac{(\bar{k} \bar{r}(t))}{v(k)} + \frac{2(\bar{k} \bar{r})}{v(k)} \cos v(k)(t - t_0) + \\ + \frac{2}{v(k)} \int_{t_0}^t d\tau \left(\bar{k} \frac{d\bar{r}(\tau)}{d\tau} \right) \cos v(k)(t - \tau) \end{aligned}$$

и вспомним, что:

$$\begin{aligned} - \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{J^2(k) \bar{k}}{v^2(k)} (\bar{k} \bar{r}(t)) &= - \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{J^2(k) k^2}{3v^2(k)} \bar{r}(t) = - c^2 \bar{r}(t); \\ \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{J^2(k) \bar{k}}{v^2(k)} \left(\bar{k} \frac{d\bar{r}(\tau)}{d\tau} \right) \cos v(k)(t - \tau) &= \\ = \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{J^2(k) k^2}{3v^2(k)} \cos v(k)(t - \tau) \frac{d\bar{r}(\tau)}{d\tau}. \end{aligned}$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{p}(t)}{dt} + \frac{1}{m^*} \int_{t_0}^t d\tau K(t-\tau) \bar{p}(\tau) = -\bar{r}K(t-t_0) - \\ - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(k) \bar{k}(b_k \exp[-iv(k)(t-t_0)] + \\ + b_{-k}^+ \exp[iv(k)(t-t_0)]) - \bar{E}(t), \end{aligned} \quad (59)$$

где

$$K(t-\tau) = \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{J^2(k) k^2}{3v^2(k)} \cos v(k)(t-\tau). \quad (60)$$

Рассмотрим усреднение этого уравнения по начальному статистическому оператору

$$\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma) \quad (61)$$

и обозначим:

$$m^* \langle \bar{v}(t) \rangle = \langle \bar{p}(t) \rangle = \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \bar{p}(t) \mathcal{D}_{t_0};$$

$$\langle \bar{r} \rangle = \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \bar{r} \mathcal{D}_{t_0} = \operatorname{Sp}_{(S)} \bar{r} \rho(s).$$

Поскольку $\langle b_k \rangle = 0$, $\langle b_{-k}^+ \rangle = 0$. Уравнение (59) приводит к

$$m^* \frac{d\langle \bar{v}(t) \rangle}{dt} + \int_{t_0}^t d\tau \langle \bar{v}(\tau) \rangle K(t-\tau) = -\langle \bar{r} \rangle K(t-t_0) - \bar{E}(t). \quad (62)$$

Здесь $\langle \bar{v}(t) \rangle$ — средняя скорость частицы.

Рассмотрим теперь ситуацию, когда $\bar{E}(t)$ — периодическая функция t , помноженная на множитель $\exp(\epsilon t)$ ($\epsilon > 0$), соответствующая включению внешнего электрического поля при $t \rightarrow -\infty$. Будем искать стационарные решения (62), т. е. решения, представляемые произведением множителя $\exp(\epsilon t)$ и периодической функции.

Поскольку уравнение (62) является линейным уравнением, можно ограничиться рассмотрением простейшего выражения

$$\bar{E}(t) = \bar{E}_\omega \exp[(-i\omega + \epsilon)t]. \quad (63)$$

Действительно, если бы $\bar{E}(t)$ была бы суммой таких членов с различными частотами ω , то результирующее устойчивое решение уравнения (62) должно быть суммой решения вида (63).

Итак, рассмотрим уравнение

$$m^* \frac{d\langle \bar{v}(t) \rangle}{dt} + \int_{-\infty}^t d\tau \langle \bar{v}(\tau) \rangle K(t - \tau) = -\bar{E}_\omega \exp [(-i\omega + \varepsilon)t].$$

Подставляя $\langle \bar{v}(t) \rangle = \bar{v}_\omega \exp [(-i\omega + \varepsilon)t]$, получаем

$$\left\{ m^* (-i\omega + \varepsilon) + \int_0^\infty K(t) \exp [(i\omega - \varepsilon)t] dt \right\} \bar{v}_\omega = -\bar{E}_\omega.$$

Определение (60) приводит к

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty K(t) \exp [(i\omega - \varepsilon)t] dt = \\ & = \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\Pi^2(k) k^2}{6v^2(k)} \left\{ \frac{1}{\varepsilon - i(\omega + v(k))} + \frac{1}{\varepsilon - i(\omega - v(k))} \right\}. \end{aligned}$$

Обозначим

$$\frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\Pi^2(k) k^2}{6v^2(k)} \{ \delta(v(k) - \Omega) + \delta(v(k) + \Omega) \} = I(\Omega), \quad (64)$$

тогда $I(-\Omega) = I(\Omega)$; $I(\Omega) \geq 0$

$$\int_0^\infty K(t) \exp [(i\omega - \varepsilon)t] dt = i \int_{-\infty}^{+\infty} I(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + i\varepsilon - \Omega}. \quad (65)$$

Поэтому

$$\begin{aligned} & \left\{ m^* (-i\omega + \varepsilon) + i \int_{-\infty}^{+\infty} I(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + i\varepsilon - \Omega} \right\} \langle \bar{v}(t) \rangle = \\ & = -\bar{E}_\omega \exp [(-i\omega + \varepsilon)t]. \end{aligned}$$

Благодаря (52) $\bar{E}_\omega = -e_c \bar{\mathcal{E}}_\omega$ и по определению тока

$$j_\omega(t) = -e_c \langle \bar{v}(t) \rangle.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} & \left\{ m^* (-i\omega + \varepsilon) + i \int_{-\infty}^{+\infty} I(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + i\varepsilon - \Omega} \right\} j_\omega(t) = \\ & = e_c^2 \mathcal{E}_\omega \exp [(-i\omega + \varepsilon)t]. \end{aligned} \quad (66)$$

Совершим теперь предельный переход $V \rightarrow \infty$, предполагая, что для любого действительного ω и положительного ε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} I(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + i\varepsilon - \Omega} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + i\varepsilon - \Omega}. \quad (67)$$

После совершения такого предельного перехода положим в уравнении (66) $\varepsilon \rightarrow 0$, тогда получим

$$j_{\omega}(t) = \frac{1}{Z_+(\omega)} e_c^2 \bar{\mathcal{E}}_{\omega} \exp(-i\omega t),$$

где

$$Z_+(\omega) = -m^* i\omega + i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega - \Omega + i0}. \quad (68)$$

Выбирая здесь заряд электрона e_c за единицу, видим, что выражение (68) представляет как раз импеданс, соответствующий частоте $-\omega$.

Как мы увидим позже в связи с процессом предельного перехода, все выражения, которые будут нами использованы, включая (44), зависят только от функции $J(\Omega)$, а не от частного выбора функций $v(k)$, $L(k)$.

Поэтому сначала выберем подходящее выражение для $J(\Omega)$. Выберем $J(\Omega)$ так, чтобы выполнялись следующие условия:

- 1) $J(\Omega)$ — аналитическая функция комплексной переменной, регулярная в полосе $|\operatorname{Im} \Omega| \leq \eta_0$;
- 2) $J(\Omega) = J(-\Omega)$;
- 3) $|J(\Omega)| \leq C/|\Omega|^2$ для $|\Omega| \geq \omega_0$; ω_0, C — постоянные;
- 4) для действительных значений Ω , $J(\Omega) > 0$.

Далее возьмем выражения для $L(k)$, $v(k)$ такие, что* $v(k) > 0$;

$$\frac{1}{V} \sum_{v(k) \geq \omega} \frac{L^2(k) k^2}{6v^2(k)} < \frac{C_1}{\omega} \quad (C_1 \text{ — постоянная, не зависящая от } V); \quad (70)$$

$$\frac{1}{V} \sum_{v(k) < \omega} \frac{L^2(k) k^2}{6v^2(k)} \rightarrow \int_0^{\omega} J(\Omega) d\Omega, \quad 0 < \omega < \infty. \quad (71)$$

В рассмотренной ситуации ясно, что соотношение (67) справедливо для любого фиксированного $\varepsilon > 0$ и что сходимость здесь равномерна по отношению к ω (в интервале $-\infty < \omega < +\infty$).

Введем функцию комплексной переменной W :

$$\Delta(W) = i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) d\Omega / (W - \Omega). \quad (72)$$

*) Одна из возможностей нахождения таких выражений для функций $L(k)$; $v(k)$ состоит в следующем. Берем $\bar{k} = (2\pi n_1/L, 2\pi n_2/L, 2\pi n_3/L)$, $L^3 = V(n_1, n_2, n_3)$ — целые положительные и отрицательные числа, предполагается, что $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \neq 0$. Это исключает появление нулевого значения для k в суммах по \bar{k} . Затем положим $v(\bar{k}) = S |\bar{k}|$; $L^2(\bar{k}) = 2\pi^2 \frac{S^3}{|\bar{k}|^2} \times X(J(S|\bar{k}|))$, где S — положительная постоянная, не зависящая от V .

Видим, что она регулярна для $| \operatorname{Im} W | > 0$. С учетом свойств (69) — (71) легко видеть, что

$$\Delta(W) = \lim_{(V \rightarrow \infty)} i \int_{-\infty}^{+\infty} I(\Omega) d\Omega / (W - \Omega), \quad \operatorname{Im} W \neq 0. \quad (73)$$

Здесь благодаря (64)

$$i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) \frac{d\Omega}{(W - \Omega)} = \frac{i}{V} \sum_{(k)} \frac{\pi^2(k) k^2}{6v^2(k)} \left(\frac{1}{W - v(k)} + \frac{1}{W + v(k)} \right),$$

и потому эта функция аналитична во всей комплексной плоскости и имеет особенности — полюса на вещественной оси $W = \pm v(k)$. Однако предельная функция имеет разрез по всей действительной оси $\Delta(\omega + i0) - \Delta(\omega - i0) = 2\pi J(\omega) > 0$.

Итак, имеем две аналитические функции

$$\left. \begin{array}{l} \Delta_+(W) = i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) d\Omega / (W - \Omega) \text{ для } \operatorname{Im} W \geq 0; \\ \Delta_-(W) = i \int_{-\infty}^{+\infty} J(\Omega) d\Omega / (W - \Omega) \text{ для } \operatorname{Im} W \leq 0. \end{array} \right\} \quad (74)$$

Благодаря условию (4) в (69) эти функции просто связаны друг с другом

$$\Delta_-(W) = -\Delta_+(-W) \text{ для } \operatorname{Im} W < 0. \quad (75)$$

Поэтому нам требуется исследовать только одну из них, например, $\Delta_+(W)$. Обозначим

$$\operatorname{Re} W = \omega, \quad \operatorname{Im} W = y > 0. \quad (76)$$

Тогда для любого фиксированного $\omega_1 > 0$:

$$\begin{aligned} \Delta_+(\omega + iy) &= i \int_{|\Omega - \omega| > \omega_1} J(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + iy - \Omega} + \\ &+ i \int_{\omega - \omega_1}^{\omega + \omega_1} J(\Omega) \frac{\omega - \Omega - iy}{(\omega - \Omega)^2 + y^2} d\Omega, \end{aligned}$$

но

$$\int_{\omega - \omega_1}^{\omega + \omega_1} \frac{\omega - \Omega}{(\omega - \Omega)^2 + y^2} d\Omega = - \int_{-\omega_1}^{\omega_1} \frac{\Omega}{\Omega^2 + y^2} d\Omega = 0$$

и таким образом

$$\Delta_+(\omega + iy) = i \int_{|\Omega - \omega| > \omega_1} J(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega + iy - \Omega} + \\ + i \int_{\omega - \omega_1}^{\omega + \omega_1} \frac{J(\Omega) - J(\omega)}{(\omega - \Omega)^2 + y^2} (\omega - \Omega) d\Omega + \int_{\omega - \omega_1}^{\omega + \omega_1} J(\Omega) \frac{y}{(\omega - \Omega)^2 + y^2} d\Omega. \quad (77)$$

Отсюда следует, что

$$\Delta_+(\omega) = \lim_{y \rightarrow 0} \Delta_+(\omega + iy) = i \int_{|\Omega - \omega| > \omega_1} J(\Omega) \frac{d\Omega}{\omega - \Omega} + \\ + i \int_{\omega - \omega_1}^{\omega + \omega_1} \frac{J(\Omega) - J(\omega)}{\omega - \Omega} d\Omega + \pi J(\omega). \quad (78)$$

Итак, $\Delta_+(\omega)$ — аналитическая функция также и на действительной оси. Используя (77), легко показать, что

$$|\Delta_+(\omega)| \leq \text{const}/|W|, \quad |W| \rightarrow \infty. \quad (79)$$

Далее имеем

$$\Delta_+(\omega) = \Delta_-(\omega) + 2\pi J(\omega) = -\Delta_+(-\omega) + 2\pi J(\omega).$$

Благодаря условию 1), в (69) функция $-\Delta_+(-W) + 2\pi J(\omega)$ аналитична в области

$$0 \geq \operatorname{Im} W \geq -\eta_0. \quad (80)$$

Поскольку она совпадает с $\Delta_+(W)$ на действительной оси, видим, что $\Delta_+(W)$, ранее определенная для $\operatorname{Im} W > 0$, может быть аналитически продолжена в область (80).

Так, можем записать

$$\Delta_+(W) = -\Delta_+(-W) + 2\pi J(W) \quad \text{для } 0 \geq \operatorname{Im} W \geq -\eta_0. \quad (81)$$

Можно показать, что неравенство (76) справедливо везде для

$$\operatorname{Im} W \geq -\eta_0. \quad (82)$$

Рассмотрим теперь функцию импеданса $Z_+(W) = -im^*W + \Delta_+(W)$ в области (82) и заметим, что в верхней полуплоскости и на действительной оси она не имеет нулей.

Учитывая (77), имеем $\operatorname{Re} Z_+(W) > 0$ для $\operatorname{Im} W \geq 0$. Поэтому нули последней функции в рассматриваемой области (82), если они существуют, все должны быть заключены в области (80). Но $\Delta_+(W) \rightarrow 0$ при $|W| \rightarrow \infty$, и по этой причине нули функции $Z_+(W)$ можно найти только в ограниченной области.

$$|\operatorname{Re} W| \leq \text{const}, \quad 0 \geq \operatorname{Im} W \geq -\eta_0. \quad (83)$$

Как хорошо известно, аналитическая функция может иметь только конечное число нулей в такой ограниченной области. Если нули действительно содержатся в (74), то возьмем величину $\eta > 0$ такую, что $-\eta$ больше, чем мнимые части этих нулевых точек. Если с другой стороны область (83) не содержит вообще нулей функции $Z_+(W)$, то выберем $\eta = \eta_0$. В любом случае видим, что, выбирая подходящее значение $\eta > 0$, можем всегда добиться того, чтобы область

$$\operatorname{Im} W \geq -\eta \quad (84)$$

не содержала нулей функции импеданса $Z_+(W)$. Поэтому функция адmittанса $1/Z_+(W)$ — регулярная аналитическая функция в области (84). Ее поведение в бесконечности задается соотношением

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z_+(W)} &= \frac{1}{-im^*W + \Delta_+(W)} = -\frac{1}{imW} + \\ &+ \frac{\Delta_+(W)}{im^*W(-im^*W + \Delta_+(W))} = -\frac{1}{im^*W} + O\left(\frac{1}{W^3}\right), \quad |W| \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (85)$$

В заключение рассмотрим пример. Возьмем

$$\Delta_+(W) = i \frac{k_0^2}{2} \left\{ \frac{1}{W - v_0 + i\gamma} + \frac{1}{W + v_0 + i\gamma} \right\}, \quad \gamma > 0, \quad \operatorname{Im} W > -\gamma;$$

$$\Delta_-(W) = -\Delta_+(-W) = i \frac{k_0^2}{2} \left\{ \frac{1}{W + v_0 - i\gamma} + \frac{1}{W - v_0 - i\gamma} \right\}, \quad \operatorname{Im} W < \gamma.$$

Тогда

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \frac{1}{(2\pi)} \{ \Delta_+(\omega) - \Delta_-(\omega) \} = \\ &= \frac{k_0^2}{2\pi} \left\{ \frac{\gamma}{(\omega - v_0)^2 + \gamma^2} + \frac{\gamma}{(\omega + v_0)^2 + \gamma^2} \right\}. \end{aligned} \quad (86)$$

В этом примере все наши условия выполняются. Сходный результат был бы получен также в случае, когда вместо одного члена (86) рассматривалась бы конечная сумма таких членов.

После этих довольно долгих рассуждений об аналитичности функций импеданса и адmittанса вернемся к нашему фундаментальному уравнению (59), в котором возьмем

$$\bar{E}(t) = \sum_{\omega} \bar{E}_{\omega} \exp(-i\omega t). \quad (87)$$

Решим его с помощью преобразования Лапласа. Итак, обе части (59) умножим на фактор

$$\exp(iWt), \quad W = \Omega + i\delta \quad (88)$$

и проинтегрируем по t

$$\begin{aligned}
 & \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) \frac{d\bar{p}(t)}{dt} + \frac{1}{m^*} \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) \int_{t_0}^t d\tau K(t-\tau) \bar{p}(\tau) = \\
 & = -\bar{r} \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) K(t-t_0) - \sum_{(\omega)} \bar{E}_{\omega} \int_0^{\infty} \exp[i(W-\omega)t] dt - \\
 & - \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(k) \bar{k} \left\{ b_k \int_{t_0}^{\infty} dt \exp[i(W-v(k))t] \times \right. \\
 & \times \exp[iv(k)t_0] + b_{-k}^+ \int_{t_0}^{\infty} dt \exp[i(W+v(k))t] \exp[-iv(k)t_0] \}. \quad (89)
 \end{aligned}$$

Но

$$\begin{aligned}
 & \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) \frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -\bar{p} \exp(iWt_0) - iw \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) \bar{p}(t); \\
 & \int_{t_0}^{\infty} dt \exp(iWt) \int_{t_0}^t d\tau K(t-\tau) \bar{p}(\tau) = \int_0^{\infty} K(t) \exp(iWt) dt \times \\
 & \times \int_{t_0}^{\infty} \exp(iWt) \bar{p}(t) dt,
 \end{aligned}$$

поэтому

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{m^*} \left\{ -im^*W + \int_0^{\infty} K(t) \exp(iWt) dt \right\} \int_{t_0}^{\infty} \bar{p}(t) \exp(iWt) dt = \\
 & = \bar{p} \exp(iWt_0) - \bar{r} \exp(iWt_0) \int_0^{\infty} K(t) \exp(iWt) dt + \\
 & + \sum_{(\omega)} \bar{E}_{\omega} \frac{\exp[i(W-\omega)t_0]}{i(W-\omega)} + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} J(k) \bar{k} \times \\
 & \times \left\{ \frac{b_k \exp(iWt_0)}{W-v(k)} + \frac{b_{-k}^+ \exp(iWt_0)}{W+v(k)} \right\}.
 \end{aligned}$$

Отсюда благодаря (65)

$$\int_0^{\infty} K(t) \exp(iWt) dt = i \int_{-\infty}^{+\infty} I(v) \frac{dv}{W-v}$$

Обозначим

$$\left. \begin{aligned} -im^*W + i \int_{-\infty}^{+\infty} I(v) \frac{dv}{W-v} &= Z^{(V)}(W); \\ i \int_{-\infty}^{+\infty} I(v) \frac{dv}{W-v} &= \Delta^{(V)}(W), \end{aligned} \right\} \quad (90)$$

затем получим:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{\infty} \bar{p}(t) \exp(iWt) dt &= \frac{m^* \bar{p} \exp(iWt_0)}{Z^{(V)}(W)} - m^* r \frac{\Delta^{(V)}(W)}{Z^{(V)}(W)} \exp(iWt_0) - \\ &- i \sum_{(\omega)} m^* \bar{E}_{\omega} \frac{\exp(iWt_0) \exp(-iWt_0)}{(W-\omega) Z^{(V)}(W)} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} m^* \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} \frac{i \pi(k) \bar{k} \exp(iWt_0)}{Z^{(V)}(W)} \left\{ \frac{b_k}{W-v(k)} + \frac{b_k^*}{W+v(k)} \right\}. \end{aligned} \quad (91)$$

Поскольку

$$f(t) = \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[(\delta - i\Omega)t] \left\{ \int_{t_0}^{\infty} f(t) \exp[(i\Omega - \delta)t] dt \right\} d\Omega.$$

$$t > t_0.$$

Поэтому, используя обозначения

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[(\delta - i\Omega)(t-t_0)]}{(\Omega + i\delta - v) Z^{(V)}(\Omega + i\delta)} d\Omega &= f(v, \delta, t-t_0); \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[(\delta - i\Omega)(t-t_0)]}{Z^{(V)}(\Omega + i\delta)} d\Omega &= \\ &= \frac{1}{2\pi m^*} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{1}{i\Omega - \delta} + \frac{\Delta^{(V)}(\Omega + i\delta)}{(i\Omega - \delta) Z^{(V)}(\Omega + i\delta)} \right\} \times \\ &\times \exp[(\delta - i\Omega)(t-t_0)] d\Omega = g_0(\delta, t-t_0); \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^{(V)}(\Omega + i\delta)}{Z^{(V)}(\Omega + i\delta)} \exp[(\delta - i\Omega)(t-t_0)] d\Omega &= \\ &= g_1(\delta, t-t_0), \end{aligned} \right\} \quad (92)$$

из (91) получаем

$$\left. \begin{aligned} \bar{p}(t) &= \bar{p}^{(S)}(t) + \bar{p}^{(E)}(t) + \bar{p}^{(\Sigma)}(t); \\ \bar{p}^{(S)}(t) &= m^* \bar{p} g_0(\delta, t - t_0) - m^* \bar{r} g_1(\delta, t - t_0); \\ \bar{p}^{(E)}(t) &= -m^* \sum_{(\omega)} \bar{E}_\omega f(\omega, \delta, t - t_0) \exp(-i\omega t_0); \\ \bar{p}^{(\Sigma)}(t) &= \frac{-im^*}{V\bar{V}} \sum_{(k)} \left(\frac{\hbar}{2v(k)} \right)^{1/2} \mathcal{L}(k) \bar{k} \{ b_k f(v(k), \delta, t - t_0) + b_{-k}^* f(-v(k), \delta, t - t_0) \}. \end{aligned} \right\} \quad (93)$$

Следует подчеркнуть, что функции (92) зависят существенно от V . Благодаря нашему выбору, который приводит к условиям (69) — (71), можно совершить предельный переход $V \rightarrow \infty$. До сих пор δ могла быть произвольной положительной величиной.

Выберем теперь

$$\delta = \eta/2. \quad (94)$$

С другой стороны, легко видеть, что:

$$\left. \begin{aligned} g_0(\delta, t - t_0) &\rightarrow \Psi_0(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[(\delta - i\Omega)(t - t_0)]}{Z_+(\Omega + i\delta)} d\Omega; \\ g_1(\delta, t - t_0) &\rightarrow \Psi_1(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_+(\Omega + i\delta)}{Z_+(\Omega + i\delta)} \times \\ &\quad \times \exp[(\delta - i\Omega)(t - t_0)] d\Omega; \\ f(v, \delta, t - t_0) &\rightarrow \Phi(v, t - t_0) = \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[(\delta - i\Omega)(t - t_0)] d\Omega}{(\Omega + i\delta - v) Z_+(\Omega + i\delta)} \quad \text{при } V \rightarrow \infty. \end{aligned} \right\} \quad (95)$$

Учитывая тождество $1/Z(\Omega + i\delta) = 1/(\delta - i\Omega) + \Delta(\Omega + i\delta)/[(i\Omega - \delta) \times Z(\Omega + i\delta)]$ и величину δ , фиксированную (94), можно показать, что сходимость

$$\left. \begin{aligned} |f(v, \delta, t - t_0) - \Phi(v, t - t_0)| &\rightarrow 0; \\ v|f(v, \delta, t - t_0) - \Phi(v, t - t_0)| &\rightarrow 0, \quad V \rightarrow \infty \end{aligned} \right\} \quad (96)$$

равномерна по отношению к действительному v , когда $|t - t_0| \leqslant T$, T — постоянная, не зависящая от V .

Приступим к изучению поведения предельных функций Ψ_0 , Ψ_1 , Φ для $t - t_0 \rightarrow \infty$. Будем удобным напомнить, что функции $\Delta_+(\Omega + i\delta)$; $1/Z_+(\Omega + i\delta)$ регулярные аналитические функции переменной Ω в области, где $\operatorname{Im} \Omega \geqslant -\delta - \eta = -3\delta$. Поэтому

интеграция, происходящая в выражениях Ψ_0 , Ψ_1 , может быть сдвинута от действительной оси к оси $(-3i\delta - \infty, -3i\delta + \infty)$ посредством замены переменных $\Omega \rightarrow \Omega - 3i\delta$. Поэтому

$$\begin{aligned}\Psi_1(t - t_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_+(\Omega - i\eta)}{Z_+(\Omega - i\eta)} \exp[-i\Omega(t - t_0)] d\Omega \exp[-\eta(t - t_0)]; \\ \Psi_0(t - t_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-i\Omega(t - t_0)]}{Z_+(\Omega - i\eta)} d\Omega \exp[-\eta(t - t_0)] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_+(\Omega - i\eta)}{(\eta + i\Omega) Z_+(\Omega - i\eta)} \exp[-i\Omega(t - t_0)] d\Omega \exp[-\eta(t - t_0)],\end{aligned}$$

поскольку

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-i\Omega(t - t_0)]}{\eta + i\Omega} d\Omega = 0, \quad \text{для } t > t_0.$$

Принимая во внимание ранее сформулированные неравенства, получим

$$\begin{aligned}|\Psi_1(t - t_0)| &\leq K_1 \exp[-\eta(t - t_0)]; \\ |\Psi_0(t - t_0)| &\leq K_0 \exp[-\eta(t - t_0)]; \quad t > t_0,\end{aligned}\tag{97}$$

где K_0 , K_1 — постоянные. Применим аналогичную процедуру к выражению $\Phi(v, t - t_0)$. Мы должны только заметить, что в области $\operatorname{Im} \Omega + \delta \geq -\eta$ функция под знаком интеграла (95) имеет полюс $\Omega = v - i\delta$. Отсюда

$$\begin{aligned}\Phi(v, t - t_0) &= \frac{\exp[-iv(t - t_0)]}{Z_+(v)} + \\ &+ \frac{i}{2\pi} \exp[-\eta(t - t_0)] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-i\Omega(t - t_0)] d\Omega}{(\Omega + i\delta - v) Z_+(\Omega - i\eta)} = \\ &= \frac{\exp[-iv(t - t_0)]}{Z_+(v)} + \frac{i}{2\pi} \exp[-\eta(t - t_0)] \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_+(\Omega - i\eta) \exp[-i\Omega(t - t_0)] d\Omega}{(\Omega - i\eta - v)(i\Omega + \eta) Z_+(\Omega - i\eta)},\end{aligned}\tag{98}$$

поскольку

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-i\Omega(t - t_0)]}{(\Omega - i\eta - v)(\Omega - i\eta)} d\Omega = 0, \quad t > t_0.$$

Выражения (98) приводят к следующим неравенствам

$$\left. \begin{aligned} \left| \Phi(v, t - t_0) - \frac{\exp[-iv(t-t_0)]}{Z_+(v)} \right| &\leq K_2 \exp[-\eta(t-t_0)]; \\ \left| v\Phi(v, t - t_0) - v \frac{\exp[-iv(t-t_0)]}{Z_+(v)} \right| &\leq K_3 \exp[-\eta(t-t_0)], \end{aligned} \right\} \quad (99)$$

здесь K_2, K_3 — постоянные.

Можно теперь перейти уже к вычислению выражений (44) в нашей модели, основанной на гамильтониане H_L . Имеем

$$\Phi_k^{(a)}(t, \tau, t_0) = S_p \exp[i\bar{k}\bar{r}(\tau)] \exp[-i\bar{k}\bar{r}(t)] \mathcal{D}_{t_0}. \quad (100)$$

Здесь индекс (a) указывает на использование приближения — вместо функции $\bar{r}(t)$, определенной точными уравнениями движения с данным гамильтонианом подставлена функция $\bar{r}(t)$, определяемая уравнениями (58), соответствующими модельному гамильтониану H_L .

Приближенное уравнение, которое предлагается решать вместо точного соотношения (45), сформулируем в виде

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\bar{p}\rangle_t}{dt} + \bar{E}(t) = & - \lim_{\substack{\epsilon > 0 \\ (\epsilon \rightarrow 0)}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\bar{k}\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\ & \times \int_{-\infty}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[i\omega_k(t-\tau)] + \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \times \\ & \times \exp[-\beta\hbar\omega_k] \} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, V \rightarrow \infty} \lim_{V \rightarrow \infty} \Phi_k^{(a)}(t, \tau, t_0) - \\ & - \lim_{\substack{\epsilon > 0 \\ (\epsilon \rightarrow 0)}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\bar{k}\mathcal{L}^2(k)}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\ & \times \int_{-\infty}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + \\ & + \exp[i\omega_k(t-\tau)] \exp[-\beta\hbar\omega_k] \} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \lim_{V \rightarrow \infty} \Phi_k^{*(a)}(t, \tau, t_0). \quad (101) \end{aligned}$$

Замечаем, что уравнение это получается из (45) заменой Φ_k на $\Phi_k^{(a)}$ и предельного перехода 1°) $V \rightarrow \infty$, 2°) $t_0 \rightarrow -\infty$, 3°) $\epsilon \rightarrow 0$.

Чтобы придать приближенному уравнению (101) явную форму, раскроем выражение (100) для $\Phi_k^{(a)}$. Обратим, прежде всего, внимание на то обстоятельство, что рассматриваемые «модельные уравнения» (58) являются линейными, ввиду чего коммутаторы

$[\bar{r}_j(t), \bar{r}_{j'}(t)]$, $j, j' = 1, 2, 3$ будут C -числами. Поэтому

$$\begin{aligned} & \exp[i\bar{k}\bar{r}(\tau)] \exp[-i\bar{k}\bar{r}(t)] = \\ & = \exp\{\bar{k}\bar{r}(\tau), \bar{k}\bar{r}(t)/2\} \exp[-i\bar{k}(\bar{r}(t) - \bar{r}(\tau))] \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \Phi_k^{(a)}(t, \tau, t_0) &= \exp\{\bar{k}\bar{r}(\tau), \bar{k}\bar{r}(t)/2\} \times \\ & \times \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \exp\left[-ik \int_{\tau}^t p(s) ds/m^*\right] \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned} \quad (102)$$

Подставив сюда (93) и заметив, что

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{t_0} &= \rho(S) \mathcal{D}_L(S); \quad \mathcal{D}(\Sigma) = \text{const} \exp[-\beta \sum_{(k)} \hbar v(k) b_k^+ b_k]; \\ \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(S) &= 1; \quad \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{D}(\Sigma) = 1, \end{aligned} \quad (103)$$

получим из (102)

$$\Phi_k^{(a)}(t, \tau, t_0) = \Phi_k^{(1)}(t, \tau, t_0) \Phi_k^{(2)}(t, \tau, t_0), \quad (104)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_k^{(1)}(t, \tau, t_0) &= \exp\{\bar{k}\bar{r}(\tau), \bar{k}\bar{r}(t)/2\} \exp\left[-i \frac{\bar{k}}{m^*} \int_{\tau}^t \bar{p}^{(E)}(s) ds\right] \times \\ & \times \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \exp\left[-i \frac{\bar{k}}{m^*} \int_{\tau}^t \bar{p}^{(\Sigma)}(s) ds\right] \mathcal{D}_L(\Sigma); \\ \Phi_k^{(2)}(t, \tau, t_0) &= \operatorname{Sp} \exp\left[-i \frac{\bar{k}}{m^*} \int_{\tau}^t \bar{p}^{(s)}(s) ds\right] p(s). \end{aligned}$$

Далее имеем

$$\left. \begin{aligned} [\bar{k}\bar{r}(\tau), \bar{k}\bar{r}(t)] &= \frac{1}{m^*} \left[\bar{k}\bar{r}(\tau); \int_{\tau}^t \bar{k}\bar{p}(s) ds \right]; \\ \bar{r}(\tau) &= \bar{r}(t) - \int_{\tau}^t \frac{\bar{p}(s)}{m} ds \end{aligned} \right\} \quad (105)$$

и

$$\begin{aligned} [\bar{k}\bar{r}(\tau), \bar{k}\bar{p}(s)] &= [\bar{k}(\bar{r}(\tau) - \bar{r}(s)), \bar{k}\bar{p}(s)] + i\hbar k^2 = \\ & = -\frac{1}{m^*} \left[\int_{\tau}^s \bar{k}\bar{p}(\sigma) d\sigma, \bar{k}\bar{p}(s) \right] + i\hbar k^2. \end{aligned}$$

Таким образом

$$[\bar{k}r(\tau); \bar{k}r(t)] = \frac{i\hbar k^2}{m^*} (t - \tau) - \left(\frac{1}{m^*} \right)^2 \int_{\tau}^t ds \int_{\tau}^s d\sigma [\bar{k}p(\sigma), \bar{k}p(s)] = \\ = i\hbar \frac{k^2}{m^*} (t - \tau) + \left(\frac{1}{m^*} \right)^2 \int_{\tau}^t ds \int_s^t d\sigma [\bar{k}p(\sigma), \bar{k}p(s)], \quad (106)$$

поскольку

$$\int_{\tau}^t ds \int_{\tau}^s d\sigma [\bar{k}p(\sigma), \bar{k}p(s)] = \left[\int_{\tau}^t \bar{k}p(\xi) d\xi, \int_{\tau}^t \bar{k}p(\xi) d\xi \right] = 0$$

и

$$\int_{\tau}^t \int_{\tau}^s A + \int_{\tau}^t \int_s^t A = \int_{\tau}^t \int_{\tau}^t A = 0.$$

Отсюда на основании (93), учитывая, что составляющие $\bar{p}(t) = \bar{p}^{(S)}(t) + \bar{p}^{(\Sigma)}(t) + p^{(E)}(t)$ коммутируют между собой, найдем

$$[\bar{k}r(\tau), \bar{k}r(t)] = i\hbar \frac{k^2}{m^*} (t - \tau) + \left(\frac{1}{m^*} \right)^2 \int_{\tau}^t ds \int_s^t d\sigma [\bar{k}p^{(S)}(\sigma); \\ \bar{k}p^{(S)}(s)] + \left(\frac{1}{m^*} \right)^2 \int_{\tau}^t ds \int_s^t d\sigma [\bar{k}p^{(\Sigma)}(\sigma), \bar{k}p^{(\Sigma)}(s)]. \quad (107)$$

Здесь, имея в виду (93)

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)^2 [\bar{k}p^{(S)}(\sigma); \bar{k}p^{(S)}(s)] = i\hbar k^2 \{ g_0(\delta, \sigma - t_0) g_1(\delta, s - t_0) - \\ - g_0(\delta, s - t_0) g_1(\delta, \sigma - t_0) \} \quad (108)$$

и

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)^2 [\bar{k}p^{(\Sigma)}(\sigma), \bar{k}p^{(\Sigma)}(s)] = k^2 \{ F(\sigma, s, t_0) - F(s, \sigma, t_0) \}, \quad (109)$$

где

$$F(\sigma, s, t_0) = \frac{1}{V} \sum_{(k)} \frac{\hbar}{6v(k)} \frac{\pi^2(k) k^2}{\{1 - \exp[-\beta\hbar v(k)]\}} \{ f(v(k), \delta, \sigma - t_0) \times \\ \times f(-v(k), \delta, s - t_0) + \\ + \exp[-\beta\hbar v(k)] f(-v(k), \delta, \sigma - t_0) f(v(k), \delta, s - t_0) \}$$

или

$$\begin{aligned} F(\sigma, s, t_0) = \\ = \int_0^\infty dv I(v) \frac{\hbar v}{1 - \exp(-\beta \hbar v)} \{ f(v, \delta, \sigma - t_0) f(-v, \delta, s - t_0) + \\ + \exp(-\beta \hbar v) f(-v, \delta, \sigma - t_0) f(v, \delta, s - t_0) \}. \end{aligned} \quad (110)$$

Заметим далее, что имея в виду форму (103) оператора $\mathcal{D}_L(\Sigma)$ и линейность $\overline{p^{(E)}}(s)$ по отношению к базе-операторам, можем написать *:

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{(\Sigma)} \exp \left\{ -i \frac{\bar{k}}{m} \int_\tau^t \overline{p^{(\Sigma)}}(s) ds \right\} \mathcal{D}_L(\Sigma) = \\ = \exp \left\{ -\frac{1}{2m^2} \text{Sp} \left(\int_\tau^t \overline{k p^{(\Sigma)}}(s) ds \right)^2 \mathcal{D}_L(\Sigma) \right\} = \\ = \exp \left\{ -\frac{1}{2m^2} \int_\tau^t ds \int_\tau^t d\sigma \text{Sp}_{(\Sigma)} (\overline{k p^{(\Sigma)}}(s)) (\overline{k p^{(\Sigma)}}(\sigma)) \mathcal{D}_L(\Sigma) \right\} = \\ = \exp \left\{ -\frac{k^2}{2} \int_\tau^t ds \int_\tau^t d\sigma F(s, \sigma, t_0) \right\}. \end{aligned} \quad (111)$$

Напомним также, что

$$\frac{1}{m^*} \overline{p^E}(t) = - \sum_{(\omega)} \overline{E}_\omega f(\omega, \delta, t - t_0) \exp(-i\omega t_0). \quad (112)$$

Принимая во внимание (69) — (71), (95), (96), получаем:

$$\begin{aligned} [\overline{k r}(\tau), \overline{k r}(t)] \xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} i\hbar \frac{k^2}{m^*} (t - \tau) + \\ + i\hbar k^2 \int_\tau^t ds \int_s^t d\sigma \{ \Psi_0(\sigma - t_0) \Psi_1(s - t_0) - \Psi_0(s - t_0) \Psi_1(\sigma - t_0) \} + \\ + k^2 \int_\tau^t ds \int_s^t d\sigma \{ F_\infty(\sigma, s, t_0) - F_\infty(s, \sigma, t_0) \}. \end{aligned} \quad (113)$$

* Здесь использована формула $\langle e^A \rangle = e^{1/2(A)^2}$, где A — линейная форма по базе-операторам, а усреднение происходит по квадратичному гамильтониану вида $\sum_\omega E_\omega b_\omega^+ b_\omega$.

Здесь с учетом (110)

$$\begin{aligned} F_\infty(\sigma, s, t_0) &= \lim_{V \rightarrow \infty} F(\sigma, s, t_0) = \\ &= \int_0^\infty J(v) \frac{\hbar v}{1 - \exp(-\beta \hbar v)} \{ \Phi(v, \sigma - t_0) \Phi(-v, s - t_0) + \\ &\quad + \exp(-\beta \hbar v) \Phi(v, s - t_0) \Phi(-v, \sigma - t_0) \} dv. \end{aligned} \quad (114)$$

Из (112) имеем также

$$\frac{1}{m^*} \bar{p}^{(E)}(t) \xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} - \sum_{(\omega)} \bar{E}_\omega \Phi(\omega, t - t_0) \exp(-i\omega t_0). \quad (115)$$

Принимая во внимание (113), (114), (115), можно теперь написать [см. (104)]:

$$\begin{aligned} \Phi_k^{(1)}(t, \tau, t_0) &\xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} \exp \left\{ 1/2 \lim_{V \rightarrow \infty} [\bar{k}r(\tau), \bar{k}r(t)] \right\} \times \\ &\times \exp \left[-i \frac{\bar{k}}{m^*} \int_{\tau}^t \lim_{(V \rightarrow \infty)} \bar{p}^{(E)}(s) ds \right] \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{k^2}{2} \int_{\tau}^t ds \int_{\tau}^t d\sigma F_\infty(s, \sigma, t_0) \right\}. \end{aligned} \quad (116)$$

Перейдем теперь к рассмотрению ситуации, когда $t_0 \rightarrow -\infty$. С учетом (99) и (115) замечаем

$$\left| \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{m^*} \bar{p}^E(t) - \bar{v}(t) \right| \leq \sum_{(\omega)} |\bar{E}_\omega| k_2 \exp[-\eta(t - t_0)], \quad (117)$$

где

$$\bar{v}(t) = - \sum_{(\omega)} \frac{\bar{E}_\omega}{Z_+(\omega)} \exp(-i\omega t). \quad (118)$$

Далее, воспользовавшись (99) для оценки выражения (114), найдем

$$\begin{aligned} |F_\infty(\sigma, s, t_0) - F(\sigma - s)| &\leq \tilde{K} \{ \exp[-\eta(\sigma - t_0)] + \\ &\quad + \exp[-\eta(s - t_0)] \}, \quad \tilde{K} = \text{const}, \end{aligned} \quad (119)$$

где

$$\begin{aligned} F(\sigma - s) &= \int_0^\infty dv J(v) \frac{\hbar v}{1 - \exp(-\beta \hbar v)} \times \\ &\times \frac{\exp[-iv(\sigma - s)] + \exp(-\beta \hbar v) \exp[iv(\sigma - s)]}{Z_+(v) Z_+(-v)} \end{aligned}$$

или, так как $J(v) = J(-v)$,

$$F(\sigma - s) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv J(v) \frac{\hbar v}{[1 - \exp(-\beta \hbar v)]} \frac{\exp[-iv(\sigma - s)]}{Z_+(v) Z_+(-v)}. \quad (120)$$

Преобразуем несколько эту формулу. Поскольку

$$2\pi J(v) = \Delta_+(v) - \Delta_-(v) = Z_+(v) - Z_-(v) = Z_+(v) + Z_+(-v),$$

то

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z_+(v) Z_+(-v)} J(v) &= \frac{1}{2\pi} \frac{Z_+(v) + Z_+(-v)}{Z_+(v) Z_+(-v)} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{Z_+(v)} + \frac{1}{Z_+(-v)} \right\} = \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{Z_+(v)} - \frac{1}{Z_-(v)} \right\}. \end{aligned}$$

Далее, ввиду вещественности $J(v)$:

$$\operatorname{Im} Z_+(v) = -\operatorname{Im} Z_+(-v),$$

но по определению

$$Z_+(v) = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega - v + i0} d\Omega,$$

и потому

$$\operatorname{Re} Z_+(v) = \pi J(v) = \operatorname{Re} Z_+(-v).$$

Таким образом

$$Z_+(-v) = Z_+^*(v).$$

Следовательно, можно переписать (120) в следующем виде:

$$\left. \begin{aligned} F(\sigma - s) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\hbar v}{[1 - \exp(-\beta \hbar v)]} \exp[-iv(\sigma - s)] dv; \\ G(v) &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{Z_+(v)} - \frac{1}{Z_-(v)} \right\} = \frac{J(v)}{|Z_+(v)|^2}. \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

Таким образом, учитывая (105), (113), (116), (117), (119), (97), получаем

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty, V \rightarrow \infty} \Phi_k^{(1)}(t, \tau, t_0) = \exp \left[-i \int_{\tau}^t (\bar{k}v(s)) ds \right] A(k^2, t - \tau), \quad (122)$$

где

$$\begin{aligned} A(k^2, t - \tau) &= \exp k^2 \left\{ \frac{i\hbar}{2m^*} (t - \tau) + \frac{1}{2} \int_{\tau}^t ds \int_s^t d\sigma (F(\sigma - s) - \right. \\ &\quad \left. - F(s - \sigma)) - \frac{1}{2} \int_{\tau}^t ds \int_{\tau}^t d\sigma F(s - \sigma) \right\}. \end{aligned} \quad (123)$$

Но с учетом (121):

$$\frac{1}{2} \int_{\tau}^t ds \int_{\tau}^t d\sigma F(s-\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\{1-\cos v(t-\tau)\}}{v^2} \frac{\hbar v}{1-\exp(-\beta\hbar v)} dv;$$

$$F(\sigma-s) - F(s-\sigma) = 2i \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\hbar v}{1-\exp(-\beta\hbar v)} \sin v(s-\sigma) dv =$$

$$= 2i \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\hbar v}{1-\exp(\beta\hbar v)} \sin v(s-\sigma) dv =$$

$$= -2i \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\exp(-\beta\hbar v)}{1-\exp(-\beta\hbar v)} \hbar v \sin v(s-\sigma) dv =$$

$$= i \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \hbar v \sin v(s-\sigma) dv;$$

$$\int_{\tau}^t ds \int_s^t d\sigma \{F(\sigma-s) - F(s-\sigma)\} = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \left\{ \frac{\sin v(t-\tau)}{v} - (t-\tau) \right\} dv.$$

Итак, учитывая (123), запишем:

$$\begin{aligned} A(k^2, t, \tau) &= A(k^2, t-\tau) = \\ &= \exp k^2 \left\{ \frac{i\hbar}{2m^*} (t-\tau) + \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \left\{ \frac{\sin v(t-\tau)}{v} - (t-\tau) \right\} dv - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} G(v) \frac{\hbar(1-\cos v(t-\tau))}{v[1-\exp(-\beta\hbar v)]} dv. \right. \end{aligned} \quad (124)$$

Рассмотрим теперь выражение

$$\Phi_h^{(2)}(t, \tau, t_0) = \underset{(S)}{\text{Sp}} \exp \left[-\frac{i}{m^*} \int_{\tau}^t \overline{k p}^{(s)}(\sigma) d\sigma \right] p(s).$$

Здесь

$$\frac{1}{m^*} \int_{\tau}^t \overline{k p}^{(s)}(\sigma) d\sigma = \overline{k p} \int_{\tau}^t g_0(\delta, \sigma-t_0) d\sigma - \overline{k r} \int_{\tau}^t g_1(\delta, \sigma-t_0) d\sigma.$$

В соответствии с упоминавшимися результатами:

$$\left. \begin{aligned} \int_{\tau}^t g_0(\delta, \sigma - t_0) d\sigma &\rightarrow \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma; \\ \int_{\tau}^t g_1(\delta, \sigma - t_0) d\sigma &\rightarrow \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma; \end{aligned} \right\} \quad (125)$$

$(V \rightarrow \infty),$

а также:

$$\begin{aligned} \left| \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma \right| &\leq K_0 \int_{\tau}^t \exp[-\eta(\sigma - t_0)] d\sigma; \\ \left| \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma \right| &\leq K_1 \int_{\tau}^t \exp[-\eta(\sigma - t_0)] d\sigma. \end{aligned} \quad (126)$$

Отсюда естественно ожидать, что

$$\begin{aligned} \Phi_k^{(2)}(t, \tau, t_0) = \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(s) \exp \left\{ -i \bar{k} \bar{p} \int_{\tau}^t g_0(\delta, \sigma - t_0) d\sigma + \right. \\ \left. + i \bar{k} \bar{r} \int_{\tau}^t g_1(\delta, \sigma - t_0) d\sigma \right\} \rightarrow \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(s) \exp \left\{ -i \bar{k} \bar{p} \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma + \right. \\ \left. + i \bar{k} \bar{r} \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma \right\} \quad (V \rightarrow \infty); \end{aligned} \quad (127)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(s) \exp \left\{ -i \bar{k} \bar{p} \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma + \right. \\ \left. + i \bar{k} \bar{r} \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma \right\} \rightarrow \operatorname{Sp}_{(S)} \rho(s) = 1 \quad (V \rightarrow \infty). \end{aligned} \quad (128)$$

Однако, несмотря на соотношения (125), (126), при доказательстве (127), (128) возникают существенные трудности, связанные с тем, что операторы \bar{p} , \bar{r} не являются ограниченными.

Тем не менее, справедливость (127), (128) удается установить * в том случае, когда статистический оператор $\rho(s)$ не зависит ни от V , ни от t_0 .

В этом случае, следовательно:

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty, V \rightarrow \infty} \lim \Phi_k^{(2)}(t, \tau, t_0) = 1 \quad (129)$$

* См. приложение 2.

и потому на основании (104), (122):

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty, V \rightarrow \infty} \Phi_k^{(a)}(t, \tau, t_0) = \exp \left[-i \int_{\tau}^t \bar{k}v(\sigma) d\sigma \right] A(k^2, t-\tau). \quad (130)$$

Подставив это выражение в приближенное уравнение (104), получим

$$\begin{aligned} d\langle \bar{p} \rangle_t / dt + \bar{E}(t) &= - \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\ &\times \int_{\tau}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[i\omega_k(t-\tau)] + \\ &+ \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \exp(-\beta\hbar\omega_k) \} \times \\ &\times \exp \left[-i \int_{\tau}^t \bar{k}v(\sigma) d\sigma \right] A(k^2, t-\tau) - \\ &- \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \bar{k}}{2\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\ &\times \int_{-\infty}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + \\ &+ \exp[i\omega_k(t-\tau)] \exp(-\beta\hbar\omega_k) \} \times \\ &\times \exp \left[i \int_{\tau}^t \bar{k}v(\sigma) d\sigma \right] A^*(k^2, t-\tau). \end{aligned} \quad (131)$$

Таким образом, мы получили общее приближенное уравнение, из которого вытекают результаты упоминавшихся работ [2, 3]. Заметим, что в них положено $m^* = m$, а функция (86) используется в пределе $\gamma \rightarrow 0$.

Рассмотрим, в частности, случай малого внешнего поля, когда можно воспользоваться линейным приближением для выражения средней скорости от \bar{E} . Положим тогда в (131)

$$\exp \left[\mp i \int_{\tau}^t (\bar{k}v(\sigma)) d\sigma \right] = 1 \mp i \int_{\tau}^t (\bar{k}v(\sigma)) d\sigma.$$

Учитывая соображения радиальной симметрии, найдем

$$\begin{aligned}
 d\langle\bar{p}_t\rangle/dt + \bar{E}(t) = & -\lim_{\substack{\epsilon>0 \\ \epsilon\rightarrow 0}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{k^2 \mathcal{L}^2(k)}{6\omega_k [1-\exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\
 & \times \int_{-\infty}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[i\omega_k(t-\tau)] + \\
 & + \exp[-i\omega_k(t-\tau)] \exp(-\beta\hbar\omega_k) \} i \int_{\tau}^t \bar{v}(\sigma) d\sigma A(k^2, t-\tau) - \\
 & - \lim_{\substack{\epsilon>0 \\ \epsilon\rightarrow 0}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{k^2 \mathcal{L}^2(k)}{6\omega_k [1-\exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \\
 & \times \int_{-\infty}^t d\tau \exp[-\epsilon(t-\tau)] \{ \exp[-i\omega_k(t-\tau)] + \\
 & + \exp[i\omega_k(t-\tau)] \exp[-\beta\hbar\omega_k] \} i \int_{\tau}^t \bar{v}(\sigma) d\sigma A^*(k^2, t-\tau). \quad (132)
 \end{aligned}$$

Здесь

$$\bar{v}(t) = -\sum_{\omega} \frac{E_{\omega}}{Z_+(\omega)} \exp(-i\omega t)$$

представляет стационарную среднюю скорость, возбуждаемую в модельной системе внешним полем:

$$E(t) = \sum_{(\omega)} E_{\omega} \exp(-i\omega t).$$

Заметим, что в рассматриваемом случае достаточно слабого поля можно представить стационарную среднюю скорость для реальной системы также в аналогичной форме:

$$\langle\bar{p}_t\rangle/m = -\sum_{(\omega)} \frac{R_{\omega}}{z_+(\omega)} \exp(-i\omega t)$$

только, разумеется, с другими коэффициентами, $z_+(\omega)$ здесь соответствуют импедансу реальной системы.

Чтобы получить приближенное «самосогласованное» уравнение для определения этого импеданса, выберем

$$Z_+(\omega) = z_+(\omega) \quad (133)$$

и воспользуемся приближенным уравнением (132).

Имеем

$$-i \int_{\tau}^t \bar{v}(\sigma) d\sigma = -\sum_{(\omega)} \frac{E_{\omega} \exp(-i\omega t)}{Z_+(\omega)} \left\{ \frac{1 - \exp[i\omega(t-\tau)]}{\omega} \right\}.$$

Введем переменную интегриации $t - \tau = s$. Тогда найдем:

$$\begin{aligned} m \sum_{(\omega)} \frac{E_\omega i\omega \exp(-i\omega t)}{z_+(\omega)} + \sum_{(\omega)} E_\omega \exp(-i\omega t) = \\ = \lim_{\substack{\epsilon > 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \sum_{(\omega)} \frac{E_\omega \exp(-i\omega t)}{z_+(\omega)} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{k^2 \mathcal{L}^2(k)}{6\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \times \right. \\ \times \int_0^\infty ds \exp(-\epsilon s) [\exp(-i\omega_k s) + \\ + \exp(i\omega_k s) \exp(-\beta\hbar\omega_k)] \left[\frac{\exp(i\omega s) - 1}{\omega} \right] A^*(k^2, s) - \\ - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{k^2 \mathcal{L}^2(k)}{6\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \int_0^\infty ds \exp(-\epsilon s) [\exp(i\omega_k s) + \\ + \exp(-i\omega_k s) \exp(-\beta\hbar\omega_k)] \left[\frac{\exp(i\omega s) - 1}{\omega} \right] A(k^2, s) \}. \end{aligned}$$

Отсюда и получается «самосогласованное» приближенное уравнение для определения импеданса:

$$\begin{aligned} z_+(\omega) = -im\omega + \\ + \lim_{\substack{\epsilon > 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\bar{k} \frac{k^2 \mathcal{L}^2(k)}{6\omega_k [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)]} \int_0^\infty ds \exp(-\epsilon s) \{ [\exp(-i\omega_k s) + \\ + \exp(i\omega_k s) \exp(-\beta\hbar\omega_k)] \left[\frac{\exp(i\omega s) - 1}{\omega} \right] A^*(k^2, s) - \\ - [\exp(i\omega_k s) + \exp(-i\omega_k s) \exp(-\beta\hbar\omega_k)] \times \\ \times \left[\frac{\exp(i\omega s) - 1}{\omega} \right] A(k^2, s) \}. \end{aligned} \quad (134)$$

Рассмотрим еще, в качестве примера, уравнение (131) для постоянного поля, когда

$$\bar{E} = \text{const}, \quad \bar{v} = \text{const}. \quad (135)$$

Так как с учетом (123)

$$A^*(k^2, s) = A(k^2, -s),$$

то, заменяя $\bar{k} \rightarrow -\bar{k}$ в членах, содержащих $\exp(\pm i\omega_k s) \exp(-\beta\hbar\omega_k)$, можем написать

$$\begin{aligned} -\bar{E} = \lim_{\substack{\epsilon > 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} \frac{\mathcal{L}^2(k) \bar{k}}{2\omega_k} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \exp(-\epsilon |s|) \times \\ \times \left\{ \frac{\exp[i(\omega_k - \bar{k}\nu)s]}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} - \frac{\exp[-i(\omega_k - \bar{k}\nu)s]}{\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1} \right\} A(k^2, s). \end{aligned} \quad (136)$$

Для слабого взаимодействия отсюда непосредственно получается уравнение (42) с помощью замены $A(k^2, s)$ его «нулевым приближением», не учитывающим взаимодействие, и положив $s = \hbar\xi$.

В заключение сделаем ряд замечаний о структуре стационарной плотности распределения вероятности импульсов для частицы s в модельной системе с гамильтонианом H_L .

Обозначая эту плотность распределения вероятности $w_t(\bar{p})$, имеем:

$$\begin{aligned} \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} &= \operatorname{Sp}_{S, \Sigma} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}(t)] \mathcal{D}_{t_0} = \\ &= \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}^{(E)}(t)] \operatorname{Sp}_{(S)} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}^{(S)}(t)] \rho(s) \times \\ &\quad \times \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}^{(\Sigma)}(t)] \mathcal{D}_L(\Sigma). \end{aligned} \quad (137)$$

Здесь, как и прежде,

$$\operatorname{Sp} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}^{(\Sigma)}(t)] \mathcal{D}_L(\Sigma) = \exp \left\{ -\frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F(t, t, t_0) \right\}. \quad (138)$$

Напомним теперь, что:

$$\left. \begin{aligned} \bar{p}^{(E)}(t) &\xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} \bar{p}_\infty^{(E)}(t) = -m^* \sum_{(\omega)} \bar{E}_\omega \Phi(\omega, t-t_0) \exp(-i\omega t_0); \\ \bar{p}_\infty^{(E)}(t) - m^* \bar{v}(t) &\xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0; \\ \bar{p}^{(S)}(t) &\xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} p_\infty(t) = m^* \bar{p} \psi_0(t-t_0) - m^* \bar{r} \psi_1(t-t_0) \end{aligned} \right\} \quad (139)$$

и

$$\left. \begin{aligned} F(t, t, t_0) &\xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} F_\infty(t_1, t, t_0); \\ |F_\infty(t, t, t_0) - F(0)| &< 2\tilde{K} \exp[-\eta(t-t_0)] \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 0 \end{aligned} \right\} \quad (140)$$

Здесь

$$F(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(v)}{|Z_+(v)|^2} \frac{\hbar v}{[1 - \exp(-\beta\hbar v)]} dv > 0. \quad (141)$$

Повторяя рассуждения, ранее применявшиеся для изучения функции $\Phi_k^{(a)}$, найдем на основании (134):

$$\begin{aligned} \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} &\xrightarrow[V \rightarrow \infty]{} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}_\infty^{(E)}(t)] \times \\ &\times \operatorname{Sp}_{(S)} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}_\infty^{(S)}(t)] \rho(s) \exp \left\{ -\frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F_\infty(t, t, t_0) \right\} \end{aligned} \quad (142)$$

и

$$\lim_{(V \rightarrow \infty)} \left\{ \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} - \exp[-im^*\bar{\lambda}\bar{v}(t)] \exp\left[-\frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F(0)\right] \right\} \rightarrow 0. \quad (143)$$

Рассмотрим теперь саму функцию распределения по импульсам \bar{p} :

$$w_t(\bar{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{\lambda} \exp(i\bar{\lambda}\bar{p}) \left\{ \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} \right\}. \quad (144)$$

Заметим:

$$\begin{aligned} \left| \exp(i\bar{\lambda}\bar{p}) \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} \right| &\leqslant \\ &\leqslant \exp\left[-\frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F(t, t_0)\right]. \end{aligned} \quad (145)$$

Но с учетом (140) и (142) нетрудно убедиться, что

$$F_\infty(t, t_0) > F(0)/2 > 0 \quad (146)$$

— для достаточно большой разности $t - t_0$.

Фиксируем такие t, t_0 . Поскольку для фиксированных t, t_0

$$F(t, t_0) \rightarrow F_\infty(t, t_0), \quad (V \rightarrow \infty),$$

мы видим, что для достаточно больших V

$$F(t, t_0) > F(0)/4 > 0$$

и

$$\begin{aligned} \left| \exp(i\bar{\lambda}\bar{p}) \left\{ \int \exp(-i\bar{\lambda}\bar{p}) w_t(\bar{p}) d\bar{p} \right\} \right| &\leqslant \\ &\leqslant \exp[-(\lambda^2 m^{*2}/8) F(0)]. \end{aligned}$$

Поэтому, переход к пределу в (144) для $V \rightarrow \infty$ можно совершить под знаком интеграла по $\bar{\lambda}$ на основании (142).

Таким образом, получим

$$\begin{aligned} \lim_{V \rightarrow \infty} w_t(\bar{p}) &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{\lambda} \exp[i\bar{\lambda}(\bar{p} - \bar{p}_\infty^{(E)}(t))] \left\{ \text{Sp}_{(S)} \exp[-i\bar{\lambda}\bar{p}_\infty^{(S)}(t)] \rho(S) \right\} \times \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F_\infty(t, t_0)\right\}. \end{aligned} \quad (147)$$

С учетом (146) подынтегральное выражение в (147) будет по модулю меньше, чем $\exp[-(\lambda^2 m^{*2}/4) F(0)]$ для достаточно большой разности $t - t_0$.

Мы можем, следовательно, опять перейти к пределу $t \rightarrow \infty$ под знаком интеграла по $\bar{\lambda}$ в (147) и получить в соответствии с (143):

$$\lim \left\{ w_t(\bar{p}) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{\lambda} \exp \left[i\bar{\lambda}(\bar{p} - m^* \bar{v}(t)) - \frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F(0) \right] \right\} \rightarrow 0. \quad (148)$$

Взяв гауссов интеграл, найдем

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{\lambda} \exp \left[i\bar{\lambda}(\bar{p} - m^* \bar{v}(t)) - \frac{\lambda^2 m^{*2}}{2} F(0) \right] = \\ = \left[\frac{2\pi}{m^{*2} F(0)} \right]^{3/2} \exp \left\{ - \frac{[\bar{p} - m^* \bar{v}(t)]^2}{2m^{*2} F(0)} \right\}. \end{aligned}$$

Таким образом, если начальный статистический оператор для модельной системы имеет вид:

$$\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}_L(\Sigma),$$

причем $\rho(S)$ не зависит ни от V , ни от t_0 , то соответствующая функция распределения импульсов \bar{p} в пределе $V \rightarrow \infty$:

$$\lim_{V \rightarrow \infty} w_t(\bar{p}) = \lim_{V \rightarrow \infty} \mathcal{D}_t$$

приближается к стационарной функции распределения:

$$\begin{aligned} \lim_{(V \rightarrow \infty)} \left\{ w_t(\bar{p}) - \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{m^*} \right)^3 \left(\frac{2\pi}{F(0)} \right)^{3/2} \exp \left[- \frac{(\bar{p} - m^* \bar{v}(t))^2}{2m^{*2} F(0)} \right] \right\} \rightarrow 0, \quad t \rightarrow \infty. \quad (149) \end{aligned}$$

Как видно, эта стационарная функция распределения импульсов \bar{p} представляется «сдвинутой» максвелловской функцией.

Тем самым, использование \bar{H}_L в качестве аппроксимирующего гамильтониана связано с представлением о том, что исходным приближением может служить сдвинутое максвелловское распределение.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Лемма. Для среднего от произведения оператора $\tilde{b}_k(t)$ на оператор $\mathfrak{A}(S, \Sigma)$ справедливо соотношение:

$$\begin{aligned} \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t_0} = \frac{1}{1 - \exp(-\beta \hbar \omega_k)} \underset{(S, \Sigma)}{\text{Sp}} \{ \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \\ - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \} \mathcal{D}_{t_0}. \end{aligned}$$

Доказательство. Заметим, что базе-операторы b_k коммутируют с произвольными операторами электронной подсистемы $\Phi(S)$. Составим операторное выражение, усредненное по статистическому оператору всей

системы, т. е. $\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma)$:

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t_0} &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma) = \\ &= \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \tilde{b}_k(t) \left\{ \operatorname{Sp}_S \mathfrak{A}(S, \Sigma) \rho(S) \right\} \mathcal{D}(\Sigma); \\ \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t_0} &= \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \rho(S) \mathcal{D}(\Sigma) = \\ &= \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \left\{ \operatorname{Sp}_S \mathfrak{A}(S, \Sigma) \rho(S) \right\} \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}(\Sigma). \end{aligned}$$

Обозначим $\operatorname{Sp}_{(S)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \rho(S) = \mathfrak{B}(\Sigma)$, тогда

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t_0} &= \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} b_k(t) \mathfrak{B}(\Sigma) \mathcal{D}(\Sigma); \\ \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t_0} &= \operatorname{Sp}_{(\Sigma)} \mathfrak{B}(\Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}(\Sigma). \end{aligned} \right\} \quad (\Pi.4)$$

Напомним здесь важное свойство равновесных средних в статистической механике. Рассмотрим изолированную динамическую систему, характеризуемую некоторым гамильтонианом H , не зависящим от времени, и две динамические переменные A, B , соответствующие этой системе, которые не зависят явно от времени t .

Тогда для равновесных средних

$$\langle A(t) B \rangle_{\text{eq}} = \operatorname{Sp} A(t) B \mathcal{D}_{\text{eq}}, \quad \langle B A(t) \rangle_{\text{eq}} = \operatorname{Sp} B A(t) \mathcal{D}_{\text{eq}},$$

в которых

$$A(t) = \exp(iHt/\hbar) A(0) \exp(-iHt/\hbar),$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle A(t) B \rangle_{\text{eq}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega; \\ \langle B A(t) \rangle_{\text{eq}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\beta\hbar\omega) J(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega. \end{aligned}$$

Запишем эти соотношения в форме

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Sp} \{ \exp[iH(t-t_0)/\hbar] A \exp[-i(t-t_0)/\hbar] B \mathcal{D}_{\text{eq}} \} &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) \exp[-i\omega(t-t_0)] d\omega; \\ \operatorname{Sp} \{ B \exp[i(t-t_0)/\hbar] A \exp[-i(t-t_0)/\hbar] \mathcal{D}_{\text{eq}} \} &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\beta\hbar\omega) J(\omega) \exp[-i\omega(t-t_0)] d\omega. \end{aligned} \right\} \quad (\Pi.2)$$

Возьмем теперь в качестве этой системы нашу Σ -систему и положим:

$$H = H(\Sigma); \quad \mathcal{D}_{\text{eq}} = \mathcal{D}(\Sigma); \quad A = b_k, \quad B = \mathfrak{B}(\Sigma).$$

Заметим также, что в этом случае

$$\begin{aligned}\tilde{b}_k(t) &= \exp[-i\omega_k(t-t_0)] b_k = \\ &= \exp[i(t-t_0)(H/\hbar)] b_k \exp[-i(t-t_0)H/\hbar].\end{aligned}$$

Таким образом, формула (П.2) приводится к виду:

$$\left. \begin{aligned} \text{Sp}_{(\Sigma)} \tilde{b}_k \mathcal{B}(\Sigma) \mathcal{D}(\Sigma) &= \exp[-i\omega_k(t-t_0)] \text{Sp}_{(\Sigma)} b_k \mathcal{B}(\Sigma) \mathcal{D}(\Sigma) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} J_k(\omega) \exp[-i\omega(t-t_0)] d\omega; \\ \text{Sp}_{(\Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}(\Sigma) &= \exp[-i\omega_k(t-t_0)] \text{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{B}(\Sigma) b_k \mathcal{D}(\Sigma) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\beta\hbar\omega) J_k(\omega) \exp[-i\omega(t-t_0)] d\omega. \end{aligned} \right\} \quad (\text{П.3})$$

Эти соотношения показывают, что $J_k(\omega)$ пропорционально $\delta(\omega - \omega_k)$:

$$J_k(\omega) = I_k \delta(\omega - \omega_k)$$

и отсюда

$$\exp(-\beta\hbar\omega) J_k(\omega) = \exp(-\beta\hbar\omega_k) J_k(\omega).$$

Поэтому из (П.3) получим

$$\begin{aligned}\text{Sp}_{(\Sigma)} \mathcal{B}(\Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}(\Sigma) &= \\ &= \exp(-\beta\hbar\omega_k) \text{Sp}_{(\Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathcal{B}(\Sigma) \mathcal{D}(\Sigma).\end{aligned}$$

С использованием (П.1)

$$\begin{aligned}\text{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t0} &= \\ &= \exp(-\beta\hbar\omega_k) \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t0},\end{aligned}$$

что дает

$$\begin{aligned}\text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t0} &= \\ &= [1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)] \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t0}.\end{aligned}$$

Видим теперь, что:

$$\left. \begin{aligned} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t0} &= \\ &= \frac{1}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t0}; \\ \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t0} &= \\ &= \frac{\exp(-\beta\hbar\omega_k)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)} \text{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{A}(S, \Sigma) - \mathfrak{A}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t0}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{П.4})$$

Итак, лемма доказана.

Обозначим $\exp(-\beta\hbar\omega_k)/[1 - \exp(-\beta\hbar\omega_k)] = N_k$. Тогда соотношение (П.4) можно записать через числа заполнения $b_k^\dagger b_k$

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \tilde{b}_k(t) \mathfrak{U}(S, \Sigma) \mathcal{D}_{t0} = (1 + N_k) \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{U}(S, \Sigma) - \mathfrak{U}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t0};$$

$$\operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \mathfrak{U}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t) \mathcal{D}_{t0} = N_k \operatorname{Sp}_{(S, \Sigma)} \{\tilde{b}_k(t) \mathfrak{U}(S, \Sigma) - \mathfrak{U}(S, \Sigma) \tilde{b}_k(t)\} \mathcal{D}_{t0}.$$

Примечание. Из рассмотрения приведенного доказательства леммы может создаться впечатление, что оператор $\mathfrak{U}(S, \Sigma)$ не должен явно зависеть от времени t . Нетрудно, однако, заметить, что из справедливости леммы только для операторов, не зависящих явно от времени, непосредственно вытекает ее верность и для общего случая операторов, явно зависящих от t .

Рассмотрим в самом деле оператор $\mathfrak{U}(t, S, \Sigma)$, фиксируем $t = t_1$. Тогда оператор $\mathfrak{U}(t_1, S, \Sigma)$ формально не зависит от времени и для него выполняется соотношение (П.4). Поскольку t_1 можно фиксировать произвольно, в соотношениях (П.4) можем положить $t_1 = t$ и убедиться в справедливости сделанного утверждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Заметим, что наше утверждение об установлении соотношений (127) (128) будет доказано, если докажем следующую лемму.

Лемма. Пусть A_N, B_N — последовательность вещественных 3-векторов, стремящаяся к конечным пределам при $N \rightarrow \infty$:

$$A_N \rightarrow A, \quad B_N \rightarrow B \text{ при } N \rightarrow \infty. \quad (\text{П.5})$$

Тогда, если наш статистический оператор $\rho(S)$ не зависит от N , то

$$\operatorname{Sp}_{(S)} \exp[i(A_N r + B_N p)] \rho(S) \rightarrow \operatorname{Sp}_{(S)} \exp[i(Ar + Bp)] \rho(S). \quad (\text{П.6})$$

Действительно, для соотношения (127) стоит лишь положить в этой лемме:

$$N = V, \quad B_N = -k \int_{\tau}^t g_0(\delta, \sigma - t_0) d\sigma; \quad A_N = k \int_{\tau}^t g_1(\delta, \sigma - t_0) d\sigma;$$

$$B = -k \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma; \quad A = k \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma.$$

В случае же предельного соотношения (128) можно взять $N = t - t_0$, τ — фиксировано,

$$B_N = -k \int_{\tau}^t \psi_0(\sigma - t_0) d\sigma; \quad A_N = k \int_{\tau}^t \psi_1(\sigma - t_0) d\sigma;$$

$$B = 0; \quad A = 0.$$

Приступим поэтому к доказательству упомянутой леммы.

Доказательство. Так как коммутатор от компонент векторов p и r есть C числа: $p_\alpha r_\beta - r_\beta p_\alpha = -i\hbar\delta_{\alpha\beta}$, то по известному тождеству:

$$\exp[i(C_1 r + C_2 p)] \equiv \exp[i\hbar C_1 C_2 / 2] \exp(iC_1 r_1) \exp(iC_2 p_2)$$

можем написать:

$$\begin{aligned} & \exp [i(\bar{A}_N \bar{r} + \bar{B}_N \bar{p})] - \exp [i(\bar{A} \bar{r} + \bar{B} \bar{p})] = \\ & = \exp(i\hbar \bar{A}_N \bar{B}_N / 2) \exp(i\bar{A}_N \bar{r}) \exp(i\bar{B}_N \bar{p}) - \\ & - \exp(i\hbar \bar{A} \bar{B} / 2) \exp(i\bar{A} \bar{r}) \exp(i\bar{B} \bar{p}) = \\ & = [\exp(i\hbar \bar{A}_N \bar{B}_N / 2) - \exp(i\hbar \bar{A} \bar{B} / 2)] \exp(i\bar{A}_N \bar{r}) \exp(i\bar{B}_N \bar{p}) + \\ & + \exp(i\hbar \bar{A} \bar{B} / 2) \{\exp(i\bar{A}_N \bar{r}) [\exp(i\bar{B}_N \bar{r}) - \exp(i\bar{B} \bar{p})] + \\ & + \exp(i\bar{A}_N \bar{r}) - \exp(i\bar{A} \bar{r}) \exp(i\bar{B} \bar{p})\}. \end{aligned}$$

Но, поскольку оператор $\exp(i\bar{A}_N \bar{r}) \exp(i\bar{B}_N \bar{p})$ ввиду вещественности \bar{A}_N , \bar{B}_N , является унитарным, то

$$|\operatorname{Sp}_{(S)} \exp(i\bar{A}_N \bar{r}) \exp(i\bar{B}_N \bar{p}) \rho(S)| \leq 1$$

и потому

$$\begin{aligned} |\operatorname{Sp}_{(S)} (\exp[i(\bar{A}_N \bar{r} + \bar{B}_N \bar{p})] \rho(S)) - \operatorname{Sp}_{(S)} (\exp[i(\bar{A} \bar{r} + \bar{B} \bar{p})] \rho(S))| & \leq \\ & \leq |\exp[i\hbar(\bar{A}_N \bar{B}_N - \bar{A} \bar{B})/2] - 1| + \\ & + |\operatorname{Sp}_{(S)} \exp(i\bar{A}_N \bar{r}) [\exp(i\bar{B}_N \bar{p}) - \exp(i\bar{B} \bar{p})] \rho(S)| + \\ & + |\operatorname{Sp}_{(S)} [\exp(i\bar{A}_N \bar{r}) - \exp(-i\bar{A} \bar{r})] \exp(i\bar{B} \bar{p}) \rho(S)|. \quad (\text{П.7}) \end{aligned}$$

Принимая во внимание, что статистический оператор $\rho(S)$ является неотрицательным, имеет место общее неравенство (см. приложение 3):

$$|\operatorname{Sp}_{(S)} UV \rho(S)|^2 \leq \operatorname{Sp}_{(S)}^+ UU^\dagger \rho(S) \operatorname{Sp}_{(S)}^+ VV^\dagger \rho(S). \quad (\text{П.8})$$

Воспользуемся этим неравенством для оценки первого и второго выражения со знаком Sp в правой части (П.7), положив:

$$\begin{aligned} U_I &= \exp(i\bar{A}_N \bar{r}); \quad V_I = [\exp(i\bar{B}_N \bar{p}) - \exp(i\bar{B} \bar{p})]; \\ U_{II} &= [\exp(i\bar{A}_N \bar{r}) - \exp(i\bar{A} \bar{r})]; \quad V_{II} = \exp(i\bar{B} \bar{r}). \end{aligned}$$

Как видно, V_{II} и U_I являются унитарными и, поскольку для статистического оператора $\operatorname{Sp}_{(S)} \rho(S) = 1$, имеем

$$\operatorname{Sp}_{(S)}^+ U_I U_I^\dagger \rho(S) = \operatorname{Sp}_{(S)}^+ V_{II} V_{II}^\dagger \rho(S) = 1.$$

Далее, поскольку компоненты вектора \bar{r} между собой коммутируют, так же как и компоненты \bar{p} между собой, получим

$$U_{II} U_{II}^\dagger = 2(1 - \cos(\bar{A}_N - \bar{A}) \bar{r}); \quad V_I^\dagger V_I = 2(1 - \cos(\bar{B}_N - \bar{B}) \bar{p}).$$

Таким образом, из (П.7) найдем:

$$\begin{aligned} & |\operatorname{Sp}_{(S)} \{\exp [i(\bar{A}_N \bar{r} + \bar{B}_N \bar{p})] \rho(S)\} - \operatorname{Sp}_{(S)} \{\exp [i(\bar{A}\bar{r} + \bar{B}\bar{p})] \rho(S)\}| \leqslant \\ & \leqslant \sqrt{2\{1-\cos[\hbar(\bar{A}_N \bar{B}_N - \bar{A}\bar{B})/2]\}} + \sqrt{\operatorname{Sp}_{(S)} 2(1-\cos(\bar{B}_N - \bar{B})\bar{p})\rho(S)} + \\ & + \sqrt{\operatorname{Sp}_{(S)} 2(1-\cos(\bar{A}_N - \bar{A})\bar{r})\rho(S)}. \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

Рассмотрим матричные элементы $\rho(S)$ в \bar{r} -представлении $\langle \bar{r} | \rho(S) | \bar{r}' \rangle$ и в p -представлении $\langle \bar{p} | \rho(S) | \bar{p}' \rangle$. Тогда

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp}_{(S)} (1-\cos(\bar{B}_N - \bar{B})\bar{p})\rho(S) &= \int [1-\cos(\bar{B}_N - \bar{B})\bar{p}] \langle \bar{p} | \rho(S) | \bar{p} \rangle d\bar{p}; \\ \operatorname{Sp}_{(S)} [1-\cos(\bar{A}_N - \bar{A})\bar{r}]\rho(S) &= \int [1-\cos(\bar{A}_N - \bar{A})\bar{r}] \langle \bar{r} | \rho(S) | \bar{r} \rangle d\bar{r}. \end{aligned}$$

Но диагональные элементы неотрицательного оператора не отрицательны

$$\langle \bar{p} | \rho(S) | \bar{p} \rangle \geqslant 0; \quad \langle \bar{r} | \rho(S) | \bar{r} \rangle \geqslant 0$$

и, так как $\operatorname{Sp} \rho(S) = 1$, то

$$\int \langle \bar{p} | \rho(S) | \bar{p} \rangle d\bar{p} = 1; \quad \int \langle \bar{r} | \rho(S) | \bar{r} \rangle d\bar{r} = 1.$$

Учитывая, что $\rho(S)$ не зависит от N , $(1-\cos x) \leqslant 2$; $[1-\cos(\bar{A}_N - \bar{A})\bar{r}] \rightarrow 0$ при ограниченных \bar{r} и $[1-\cos(\bar{B}_N - \bar{B})\bar{p}] \rightarrow 0$ при ограниченных \bar{p} , видим, что

$$\operatorname{Sp}_{(S)} (1-\cos(\bar{A}_N - \bar{A})\bar{r})\rho(S) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} 0;$$

$$\operatorname{Sp}_{(S)} (1-\cos(\bar{B}_N - \bar{B})\bar{p})\rho(S) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} 0.$$

Таким образом, на основании (П.9) заключаем, что лемма доказана. Как видно, неравенство (П.9) справедливо без относительно того, зависит ли $\rho(S)$ от N или нет.

Кроме того, ясно, что $2(1-\cos x) < x^2$, поэтому имеем

$$\begin{aligned} & |\operatorname{Sp}_{(S)} \{\exp [i(\bar{A}_N \bar{r} + \bar{B}_N \bar{p})] \rho(S)\} - \operatorname{Sp}_{(S)} \{\exp [i(\bar{A}\bar{r} + \bar{B}\bar{p})] \rho(S)\}| \leqslant \\ & \leqslant \hbar |\bar{A}_N \bar{B}_N - \bar{A}\bar{B}|/2 + \sqrt{\operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{p}|^2 \rho(S)} |\bar{B}_N - \bar{B}| + |\bar{A}_N - \bar{A}| \sqrt{\operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{r}|^2 \rho(S)}. \end{aligned}$$

Следовательно, если $\rho(S)$ и зависит от N , но так, что

$$\operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{p}|^2 \rho(S) \leqslant k_1^2; \quad \operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{r}|^2 \rho(S) \leqslant k_2^2,$$

где k_1, k_2 не зависят от N , то соотношение (П.6) справедливо.

Таким образом, если в разд. 3 $\rho(S)$ зависит от t_0 и V , но так, что

$$\langle \bar{p}^2 \rangle_{t_0} = \operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{p}|^2 \rho(S); \quad \langle \bar{r}^2 \rangle_{t_0} = \operatorname{Sp}_{(S)} |\bar{r}|^2 \rho(S)$$

ограничены величинами, не зависящими ни от V , ни от t_0 , то все рассуждения разд. 3 остаются справедливыми.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Рассмотрим среднее от произведения двух операторов $\langle AB \rangle$ как билинейную форму из A и B (линейную по отношению к каждому из этих операторов).

Пусть $Z(A, B)$ — произвольная билинейная форма из A и B со свойствами

$$Z(\overset{+}{A}, A) \geq 0; \quad (\text{П.10})$$

$$\{Z(A, B)\}^* = Z(\overset{+}{B}, \overset{*}{A}). \quad (\text{П.11})$$

Покажем, что всегда справедливо неравенство:

$$|Z(A, B)|^2 \leq Z(\overset{+}{A}, \overset{+}{A}) Z(\overset{+}{B}, \overset{+}{B}). \quad (\text{П.12})$$

Полагая здесь $A = U \sqrt{\rho(S)}$, $B = V \sqrt{\rho(S)}$, придем к неравенству (П.8).

Доказательство этого неравенства содержится в работе [4]. Приведем это доказательство. Заметим, что на основании (П.10)

$$Z(xA + \overset{*+}{yB}, \overset{*+}{xA} + yB) \geq 0, \quad (\text{П.13})$$

где x, y — произвольные числа.

Отсюда, раскрывая это выражение, получим

$$xxZ(A, \overset{+}{A}) + xyZ(A, B) + yxZ(\overset{+}{B}, \overset{+}{A}) + yyZ(\overset{+}{B}, B) \geq 0.$$

Положим в качестве чисел $x, y, \overset{*}{x}, \overset{*}{y}$:

$$\overset{*}{x} = -Z(A, B); \quad x = -\{Z(A, B)\}^* = -Z(\overset{+}{B}, \overset{+}{A}); \quad \overset{*}{y} = \overset{*}{y} = Z(A, \overset{+}{A}).$$

Тогда

$$-|Z(A, B)|^2 Z(A, \overset{+}{A}) + \{Z(A, \overset{+}{A})\}^2 Z(\overset{+}{B}, B) \geq 0.$$

Отсюда, если $Z(A, \overset{+}{A}) \neq 0$, мы получаем неравенство (П.12).

Нам остается лишь показать, что если

$$Z(A, \overset{+}{A}) = 0,$$

то и

$$Z(A, B) = 0. \quad (\text{П.14})$$

Для этого в (П.13) положим

$$x^* = -Z(A, B)R; \quad x = -Z(\overset{+}{B}, \overset{+}{A})R, \quad y = y^* = 1,$$

где R — произвольное положительное число.

Найдем

$$-2R|Z(A, B)|^2 + Z(\overset{+}{B}, B) \geq 0. \quad (\text{П.15})$$

Пусть $R \rightarrow \infty$, тогда, если (П.14) неверно, видим, что левая часть должна стремиться к $-\infty$, а это невозможно.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Пусть Γ будет квадратичной положительной определенной формой из бозе-операторов b_α^+, b_α .

Обозначим статистическую сумму $Z = \text{Sp exp}(-\beta\Gamma)$ и рассмотрим линейные формы A_1, A_2, \dots, A_s , построенные из бозе-операторов b_α^+, b_α , и среднее состоящее из произведения операторов $A_1 \dots A_s$

$$\langle A_1 A_2 \dots A_s \rangle = Z^{-1} \text{Sp exp}(-\beta\Gamma) A_1 \dots A_s. \quad (\text{П.16})$$

Применим к (П.16) известную теорему Блоха и Де Доминициса, обобщающую теорему Вика. Вводя спаривания $\overline{A_j A_l} = \langle A_j A_l \rangle_\Gamma$, видим, что (П.16) равно сумме произведений всех возможных спариваний.

Например:

$$\begin{aligned} \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle_\Gamma &= \langle \overline{A_1 A_2} \overline{A_3 A_4} \rangle + \langle \overline{A_1 A_3} \overline{A_2 A_4} \rangle + \langle \overline{A_1 A_4} \overline{A_2 A_3} \rangle = \\ &= \langle A_1 A_4 \rangle \langle A_2 A_3 \rangle + \langle A_1 A_3 \rangle \langle A_2 A_4 \rangle + \langle A_1 A_2 \rangle \langle A_3 A_4 \rangle. \end{aligned}$$

Конечно, выражение (П.16) равно нулю, если s — нечетно, поскольку в такой ситуации одно из произведений операторов $A_1 \dots A_s$ остается неспаренным $\langle A_j \rangle_\Gamma = 0$, поскольку A_j — линейная форма из b_α, b_α^+ ; Γ — квадратичная форма.

Применим теперь эту хорошо известную технику к вычислению выражения $\langle e^A \rangle_\Gamma$ (A — линейная форма в рассматриваемых бозе-операторах). В результате имеем

$$\langle e^A \rangle_\Gamma = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle A^n \rangle_\Gamma = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \langle A^{2k} \rangle_\Gamma = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \underbrace{\langle A^{2k} \rangle_\Gamma}_{2k}. \quad (\text{П.17})$$

Благодаря теореме Блоха и Де Доминициса $\langle A^{2k} \rangle_\Gamma = G(k) \langle A^2 \rangle_\Gamma^k$, где $G(k)$ — число всех возможных способов спаривания в выражении $\underbrace{\langle A_1 \dots A_s \rangle_\Gamma}_{2k}$.

Видим, что

$$\begin{aligned} G(1) &= 1; \\ G(2) &= 3; \\ &\dots \\ G(k+1) &= (2k+1) G(k). \end{aligned}$$

Итак, $G(k) = 1 \cdot 3 \dots (2k-1)$

$$\frac{G(k)}{(2k)!} = \frac{1 \cdot 3 \dots (2k-1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \dots (2k)} = \frac{1}{2^k k!}.$$

Отсюда

$$\langle e^A \rangle = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left\langle \frac{1}{2} A^2 \right\rangle_\Gamma^k = e^{\langle A^2 \rangle_\Gamma / 2}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Боголюбов Н. Н. Препринт ОИЯИ, Е17-11822, Дубна, 1978.
2. Devreese J. T., Evard R. Linear and Nonlinear Transport in Solids. Plenum Press, 1976, p. 91.
3. Thornber K. K., Feynman R. P.— Phys. Rev. B, 170, v. 31, p. 4099.
4. Боголюбов Н. Н. Избранные труды. Том 3. Киев. Изд-во «Наукова Думка», 1971, с. 213.
5. Займан Дж. Электроны и фотоны. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1962.