ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2010. Т. 41. ВЫП. 7

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА В СЛУЧАЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ

Н. Н. Боголюбов (мл.)[1,*], *А. А. Казарян*[2,**]

[1]Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, Москва

[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

Построение кинетического уравнения для динамической системы, взаимодействующей с бозонным полем, в случае пространственной неоднородности основано на методе, представленном в [1–3]. В настоящей статье показано, что подходы, рассмотренные в [1, 2], могут быть обобщены для случая пространственной неоднородности. Произвольная операторная функция, зависящая от импульса и пространственной переменной, применяется для вывода кинетического уравнения. Рассматривается метод изучения электрон-фононной системы с помощью исключения бозонных операторов из соответствующих операторных уравнений. В частности, взаимодействие электрона с бозонным полем описывается с помощью кинетического уравнения для полярона в случае пространственной неоднородности. В соответствующем пределе из этого уравнения получается уравнение Больцмана для полярона.

PACS: 71.38.-k; 74.20.Mn

ВВЕДЕНИЕ

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

$$\Psi = \Psi(X_S, X_\Sigma). \tag{1}$$

Условимся обозначать символами вида

$$F(t, S), f(S) \tag{2}$$

*E-mail: nikolai_bogolubov@hotmail.com

**E-mail: 12rtu@mail.ru

операторы, вообще говоря, явно зависящие от времени t, действующие на $\Psi(X_S, X_\Sigma)$ только как функции от X_S. Символами вида

$$G(t,\Sigma), g(\Sigma) \tag{3}$$

будем обозначать операторы, действующие на Ψ как функции от (X_Σ).

Такими операторами являются, например, бозе-амплитуды $\ldots b_k \ldots b_k^+ \ldots$ Существенно подчеркнуть, что поскольку $F(t,S), G(t,S)$ действуют на различные переменные в волновой функции, они коммутируют между собой. В частности, $F(t,S)$ коммутирует со всеми $b_k(t)$ и $b_k^+(t)$. Примером оператора типа (3) может служить и собственный гамильтониан фононного поля

$$H(\Sigma) = \sum\nolimits_{(k)} \hbar\omega(k) b_k^+(t) b_k(t), \quad \omega(k) > 0. \tag{4}$$

Символами типа $U(t,S,\Sigma)$ 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 системы (S,Σ) имеет вид

$$H_t = H(t,S,\Sigma) = \Gamma(t,S) + \sum\nolimits_{(k)} [C_k(t,S) b_k(t) + C_k^+(t,S) b_k^+(t)] + H(\Sigma), \tag{5}$$

где $\Gamma(t,S)$ — собственный гамильтониан системы S, а следующий член в (5) с суммой по k — гамильтониан взаимодействия систем S и Σ. Рассмотрим два примера подобных систем.

1. ТЕОРИЯ ПОЛЯРОНА

Простейшая модель полярона описывает движение электрона в ионном кристалле. Система S состоит из одного электрона, находящегося во внешнем электрическом поле $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\begin{gathered}
\Gamma(t,S) = \frac{p^2}{2m} + \mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\mathbf{r}, \\
\mathbf{E}(t) = -e\boldsymbol{\varepsilon}t, \\
C_k(t,S) = \frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}}{V^{1/2}} \tilde{L}(k) \left(\frac{\hbar}{2\omega(k)}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}},
\end{gathered} \tag{6}$$

где e — заряд электрона,

$$\tilde{L}^*(k) = \tilde{L}(k),$$

$\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$ — положение и импульс электрона, $\tilde{L}(k)$, $\omega(k)$ — радиально-симметричные функции волнового вектора $\mathbf{k}$. Суммирование по $\mathbf{k}$ проводится по обычному квазидискретному спектру:

$$k = \left(\frac{2\pi n_1}{L}, \frac{2\pi n_2}{L}, \frac{2\pi n_3}{L}\right),$$

где $L^3 = V$, n_1, n_2, n_3 — целые числа; фактор $\mathrm{e}^{\varepsilon t}$ $(\varepsilon > 0)$, как обычно, вводится для реализации представления об адиабатическом включении взаимодействия. 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

$$\Gamma(t, S) = T(p) + \mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\mathbf{r}. \tag{7}$$

2. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

Система S является системой свободных фермионов, характеризуемых ферми-амплитудами a_f^+, a_f, причем

$$\begin{gathered}\Gamma(t, S) = \sum_{(f)} \Lambda(f) a_f^+ a_f, \quad C_k(t, S) = \frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}}{V^{1/2}} \bar{L}_k \sum_{(f)} a_{f+k}^+ a_f, \\ C_k^*(t, S) = \frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}}{V^{1/2}} \bar{L}_k^* \sum_{(f)} a_f^+ a_{f+k} = \frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}}{V^{1/2}} \bar{L}_k^* \sum_{(f)} a_{f-k}^+ a_f,\end{gathered} \tag{8}$$

$\bar{L}_k$, $\bar{L}_k^*$ — «c-величины».

В работе Н. Н. Боголюбова и Н. Н. Боголюбова (мл.) [2] было построено следующее обобщенное соотношение:

$$\begin{aligned}&\mathrm{Sp}_{(S)} \left(f(S) \frac{\partial \rho_t(S)}{\partial t} + \frac{\Gamma(t, S) f(S) - f(S)\Gamma(t, S)}{i\hbar} \rho_t(S) \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{(k)} \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)} \, \mathrm{e}^{-i\omega(k)(t-\tau)} \{ N_k C_k^+(\tau, S_\tau)[f(S_t), C_k(t, S_t)] + \\ &\qquad + (1 + N_k)[C_k^+(t, S_t), f(S_t)] C_k(\tau, S_\tau) \} D_{t_0} + \\ &+ \frac{1}{\hbar^2} \sum_{(k)} \int_{t_0}^{t} d\tau \, \mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)} \, \mathrm{e}^{i\omega(k)(t-\tau)} \{ (1 + N_k) C_k(\tau, S\tau)[f(S_t), C_k^+(t, S_t)] + \\ &\qquad + N_k [C_k^+(t, S_t), f(S_t)] C_k(\tau, S_\tau) \} D_{t_0},\end{aligned} \tag{9}$$

где

$$D_{t_0} = \rho(S)D(\Sigma)$$

и

$$N_k = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(k)}}{1-\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(k)}}.$$

В указанной работе был также осуществлен переход к модели полярона путем подставления формул (6) и (7) в (9). И было получено

$$\begin{gathered}
\mathrm{Sp}_{(S)}\left(f(S)\frac{\partial\rho_t(S)}{\partial t}+\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)[\mathbf{r}f(S)-f(S)\mathbf{r}]+T(p)f(S)-f(S)T(p)}{i\hbar}\rho_t(S)\right)= \\
=\frac{1}{V}\,\mathrm{e}^{2\varepsilon t}\sum_{(k)}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\int\limits_{t_0}^{t}d\tau\,\mathrm{e}^{-\varepsilon(t-\tau)}\big[N_k\,\mathrm{e}^{-i\omega(k)(t-\tau)}+(1+N_k)\,\mathrm{e}^{i\omega(k)(t-\tau)}\big]\times \\
\times\,\mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)}\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\tau}f(S_t)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_t}-\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\tau}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_t}f(S_t)\}D_{t_0}+ \\
+\frac{1}{V}\,\mathrm{e}^{2\varepsilon t}\sum_{(k)}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\int\limits_{t_0}^{t}d\tau\,\mathrm{e}^{-\varepsilon(t-\tau)}\big[(1+N_k)\,\mathrm{e}^{-i\omega(k)(t-\tau)}+N_k\,\mathrm{e}^{i\omega(k)(t-\tau)}\big]\times \\
\times\,\mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)}\big\{\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_t}f(S_t)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\tau}-f(S_t)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_t}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_\tau}\big\}D_{t_0}. \qquad (10)
\end{gathered}$$

Ранее при исследовании электрон-бозонных систем методом исключения бозонных операторов рассматривался только пространственно-однородный случай. При этом функция $f(S)$ выбиралась в виде $f(\mathbf{p})$ и выводились обобщенные кинетические уравнения для пространственно-однородного случая. Здесь мы рассмотрим специальный пространственно-неоднородный случай и выведем в этом случае обобщенное кинетическое уравнение. Выберем функцию $f(S)$ в виде

$$f(S)=f(\mathbf{p},\mathbf{r})=\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}. \qquad (11)$$

В дальнейшем мы сначала проведем все вычисления для левой части уравнения (10), а потом для правой части. Подставив (11) в левую часть (10), имеем

$$\begin{gathered}
\mathrm{Sp}_{(S)}\Bigg\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\,\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\,\frac{\partial\rho_t(S)}{\partial t}+ \\
+\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}[\mathbf{r}\phi(\mathbf{p})-\phi(\mathbf{p})\mathbf{r}]\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\rho_t(S)}{i\hbar}+ \\
+\frac{(T(p)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\,\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}-\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}\,\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}/2}T(p))\rho_t(S)}{i\hbar}\Bigg\}. \qquad (12)
\end{gathered}$$

С учетом того, что

$$\mathbf{r}\phi(\mathbf{p}) - \phi(\mathbf{p})\mathbf{r} = i\hbar\frac{\partial\phi(\mathbf{p})}{\partial(\mathbf{p})},$$

второй член в (12) можно представить в виде

$$\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\partial\phi(\mathbf{p})}{\partial(\mathbf{p})}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\right\} = \\ = \mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\frac{\partial\phi(\mathbf{p})}{\partial(\mathbf{p})}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\}.$$

Введем функцию $\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})$ следующим образом:

$$\mathrm{Sp}_{(S)}f(S)\rho_t(S) = \mathrm{Sp}_{(S)}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S) = \\ = \mathrm{Sp}_{(S)}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} = \int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}),$$

где

$$\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}) = \mathrm{Sp}_{(S)}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}. \tag{13}$$

Тогда выражение для второго члена в (12) примет вид

$$\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{\varepsilon t}\,\mathbf{E}(t)\frac{\partial\phi(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\} = \\ = \int d\mathbf{p}\,\mathrm{e}^{\varepsilon t}\,\mathbf{E}(t)\frac{\partial\phi(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}). \tag{14}$$

Учитывая определение (13) функции $\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})$, для первого члена (12) получим

$$\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\partial\rho_t(S)}{\partial t}\right\} = \int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\frac{\partial\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}. \tag{15}$$

Теперь преобразуем третий член в уравнении (12). Имеем

$$\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\frac{(T(p)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}-\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}T(p))\rho_t(S)}{i\hbar}\right\}=$$
$$=\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}/2}T(p)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\rho_t(S)}{i\hbar}\right\}-$$
$$-\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}T(p)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}/2}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\rho_t(S)}{i\hbar}\right\}=$$
$$=\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{T\left(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}}{2}\right)\phi(\mathbf{p})\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\rho_t(S)}{i\hbar}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\}-$$
$$-\mathrm{Sp}_{(S)}\left\{\phi(\mathbf{p})T\left(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}}{2}\right)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\frac{\rho_t(S)}{i\hbar}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\}=$$
$$=\mathrm{Sp}_{(S)}\phi(\mathbf{p})\left[\frac{T(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}/2)-T(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}/2)}{i\hbar}\right]\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}=$$
$$=\int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\left[\frac{T(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}/2)-T(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}/2)}{i\hbar}\right]\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}). \quad (16)$$

В случае $T(\mathbf{p})=p^2/2m$ для третьего члена окончательно получим

$$\int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\frac{i\mathbf{qp}}{m}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}). \quad (17)$$

Собирая (14), (15), (17) и интегрируя второй член по частям, окончательно для левой части уравнения (10) в случае $T(\mathbf{p})=p^2/2m$ получим

$$\int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\left\{\frac{\partial\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})}{\partial(t)}-\mathrm{e}^{\varepsilon t}\mathbf{E}(t)\frac{\partial\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}+\frac{i\mathbf{qp}}{m}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})\right\}. \quad (18)$$

Теперь обратимся к правой части уравнения (10). Сначала введем следующие обозначения:

$$\varepsilon_1=\mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)}A_1D_{t_0};\quad \varepsilon_2=\mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)}A_2D_{t_0}, \quad (19)$$

где

$$A_1=\mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_\tau}f(S_t)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t}-\mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_\tau}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t}f(S_t), \quad (19а)$$
$$A_2=\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t}f(S_t)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_\tau}-f(S_t)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_\tau}. \quad (19б)$$

В рамках модели Фрелиха интенсивность электрон-фононного взаимодействия определяется параметром α, входящим в нашем случае в $\tilde{L}(k)$ (6).

При малых α ограничимся аппроксимацией «нулевого приближения» и заменим сложную зависимость $\mathbf{r}_\tau$ равномерным движением

$$\mathbf{r}_\tau = \mathbf{r}_t - \frac{\mathbf{p}_t}{m}(t-\tau).$$

При этом выражения (19а) и (19б) примут вид

$$A_1^{app} = \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_t + (i\mathbf{kp}_t/m)(t-\tau)} f(S_t)\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t} - \\ - \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_t + (i\mathbf{kp}_t/m)(t-\tau)}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t} f(S_t) = F_1(S_t, (t-\tau));$$
$$A_2^{app} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t} f(S_t)\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_t + (i\mathbf{kp}_t/m)(t-\tau)} - \\ - f(S_t)\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}_t}\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr}_t + (i\mathbf{kp}_t/m)(t-\tau)} = F_2(S_t, (t-\tau)).$$

Соответственно, для выражений (19) будем иметь

$$\varepsilon_1^{app} = \mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)} A_1^{app} D_{t_0} = \mathrm{Sp}_{(S,\Sigma)} F_1(S_t, (t-\tau)) D_{t_0} = \\ = \mathrm{Sp}_{(S)} F_1(S, (t-\tau)) \rho_t(S); \tag{20а}$$
$$\varepsilon_2^{app} = \mathrm{Sp}_{(S)} F_2(S, (t-\tau)). \tag{20б}$$

Отметив, что в нашем специальном пространственно-неоднородном случае мы выбрали функцию $f(S)$ в виде (11), и, учитывая известные равенства

$$\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \phi(\mathbf{p}) = \phi(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}};$$
$$\phi(\mathbf{p})\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \phi(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}),$$

имеем

$$F_1(S, (t-\tau)) = \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr} + (i\mathbf{kp}/m)(t-\tau)} \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} \phi(\mathbf{p})\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} - \\ - \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr} + (i\mathbf{kp}/m)(t-\tau)} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} \phi(\mathbf{p})\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} = \\ = \mathrm{e}^{-i\mathbf{kr} + (i\mathbf{kp}/m)(t-\tau)} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} \left\{ \phi(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{p}) \right\} \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}.$$

Далее, используя формулы

$$\mathrm{e}^A \mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{[A,B]/2}\, \mathrm{e}^{A+B},$$
$$\left[\mathbf{kr} - \frac{\mathbf{kp}}{m}(t-\tau), \mathbf{kr} \right] = \frac{i\hbar k^2}{m}(t-\tau),$$

для F_1 получим следующее выражение:

$$F_1(S, (t-\tau)) = \mathrm{e}^{i\hbar k^2 (t-\tau)/2m}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{kp}(t-\tau)/m}\, \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} \{\phi(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{p})\} \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}.$$

Аналогично для F_2 получим

$$F_2(S,(t-\tau)) = \mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\,\{\phi(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})\}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\mathrm{e}^{-i\hbar k^2(t-\tau)/2m}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}(t-\tau)/m}.$$

Чтобы привести F_1 и F_2 к более удобному для нас виду, сделаем еще несколько преобразований. Используя формулу $\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{[A,B]}\mathrm{e}^B\mathrm{e}^A$ и вводя обозначение $(t-\tau)=\zeta$, запишем

$$\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} = \mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m},\\
&\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m} = \mathrm{e}^{i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}/m}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}.
\end{aligned}$$

Тогда для F_1 и F_2 окончательно получим

$$\begin{aligned}
F_1(S,\zeta) &= \mathrm{e}^{i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\times\\
&\qquad\times\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}[\phi(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\},\\
F_2(S,\zeta) &= \mathrm{e}^{-i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\times\\
&\qquad\times\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}[\phi(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\}.
\end{aligned}$$

Следовательно, для выражений (20а) и (20б) можем записать

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1^{app} &= \mathrm{Sp}_{(S)}F_1(S,\zeta)\rho_t(S) = \mathrm{Sp}_{(S)}\,\mathrm{e}^{i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\times\\
&\quad\times\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}[\phi(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\right\}\rho_t(S) =\\
&= \mathrm{Sp}_{(S)}\,\mathrm{e}^{i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}[\phi(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\times\\
&\quad\times\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2}\rho_t(S)\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{qr}/2} = \mathrm{e}^{i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\times\\
&\quad\times\int d\mathbf{p}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}\,[\phi(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}),
\end{aligned}\tag{21а}$$

$$\varepsilon_2^{app} = \mathrm{e}^{-i\hbar k^2\zeta/2m}\mathrm{e}^{i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\int d\mathbf{p}\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}[\phi(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}).\tag{21б}$$

Здесь мы использовали определение (13). Подставим теперь эти соотношения в правую часть уравнения (10). Переходя при этом к пределу $V\to\infty$, заменим суммы $1/V\sum\limits_{(k)}(\ldots)$ на соответствующие интегралы $1/(2\pi^3)\int d\mathbf{k}$, а также устремим $t_0\to-\infty$. Тогда правую часть уравнения (10) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\mathrm{e}^{2\varepsilon t}}{(2\pi)^3}\int\int d\mathbf{k}\,d\mathbf{p}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\int\limits_0^{\infty} d\zeta\,\mathrm{e}^{-\varepsilon\zeta}[N_k\,\mathrm{e}^{-i\omega(k)\zeta}+(1+N_k)\,\mathrm{e}^{i\omega(k)\zeta}]\times$$
$$\times\,\mathrm{e}^{i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}[\phi(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})+$$
$$+\frac{\mathrm{e}^{2\varepsilon t}}{(2\pi)^3}\int\int d\mathbf{k}\,d\mathbf{p}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\int\limits_0^{\infty} d\zeta\,\mathrm{e}^{-\varepsilon\zeta}[(1+N_k)\,\mathrm{e}^{-i\omega(k)\zeta}+$$
$$+N_k\,\mathrm{e}^{i\omega(k)\zeta}]\,\mathrm{e}^{-i\hbar k^2\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{kq})\hbar\zeta/2m}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kp}\zeta/m}\,[\phi(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})-\phi(\mathbf{p})]\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}). \quad (22)$$

Для того чтобы не приводить в явном виде громоздкие вычисления, отметим, что методом, аналогичным изложенному в [1, 2], выражение (22) можно представить в виде

$$\int d\mathbf{p}\phi(\mathbf{p})\xi,$$

где

$$\xi=\frac{\mathrm{e}^{2\varepsilon t}}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\Bigg\{\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})(1+N_k)\times$$
$$\times\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon|\zeta|}\,\mathrm{e}^{i\zeta(\mathbf{kp}/m+\hbar k^2/2m-\omega(k))}\,\mathrm{e}^{i|\zeta|(\hbar\mathbf{kq}/2m)}\,d\zeta+\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})N_k\times$$
$$\times\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon|\zeta|}\,\mathrm{e}^{i\zeta(\mathbf{kp}/m+\hbar k^2/2m+\omega(k))}\,\mathrm{e}^{i|\zeta|(\hbar\mathbf{kq}/2m)}\,d\zeta\Bigg\}-$$
$$-\frac{\mathrm{e}^{2\varepsilon t}}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})\times$$
$$\times\Bigg\{N_k\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon|\zeta|}\,\mathrm{e}^{i\zeta(\mathbf{kp}/m+\hbar k^2/2m-\omega(k))}\,\mathrm{e}^{-i|\zeta|(\hbar\mathbf{kq}/2m)}\,d\zeta+$$
$$+(1+N_k)\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon|\zeta|}\,\mathrm{e}^{i\zeta(\mathbf{kp}/m+\hbar k^2/2m+\omega(k))}\,\mathrm{e}^{-i|\zeta|(\hbar\mathbf{kq}/2m)}\,d\zeta\Bigg\}. \quad (23)$$

Введем функции $D_\varepsilon^{\pm}(z;y)$:

$$D_\varepsilon^{\pm}(z;y)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon|\zeta|+i\zeta z\pm i|\zeta|y}\,d\zeta. \quad (24)$$

Заметим, что

$$\lim_{\varepsilon\to 0} D^{\pm}_{\varepsilon}(z;0) = 2\pi\delta(z).$$

Теперь, собирая воедино (18), (23) и (24), учитывая, что $\phi(\mathbf{p})$ — произвольная функция, и устремляя $\varepsilon \to 0$, для нашего пространственно-неоднородного случая можем выписать следующее кинетическое уравнение:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})}{\partial t} - \mathbf{E}(t)\frac{\partial\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}} + \frac{i\mathbf{qp}}{m}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}) = \int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})\times\\ \times\left\{(1+N_k)D_0^{+}\left(\frac{\mathbf{kp}}{m}+\frac{\hbar k^2}{2m}-\omega(k);\frac{\hbar\mathbf{kq}}{2m}\right)+\right.\\ \left.+N_kD_0^{+}\left(\frac{\mathbf{kp}}{m}+\frac{\hbar k^2}{2m}+\omega(k);\frac{\hbar\mathbf{kq}}{2m}\right)\right\} - \int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\tilde{L}^2(k)}{2\hbar\omega(k)}\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})\times\\ \times\left\{N_kD_0^{-}\left(\frac{\mathbf{kp}}{m}+\frac{\hbar k^2}{2m}-\omega(k);\frac{\hbar\mathbf{kq}}{2m}\right)+\right.\\ \left.+(1+N_k)D_0^{-}\left(\frac{\mathbf{kp}}{m}+\frac{\hbar k^2}{2m}+\omega(k);\frac{\hbar\mathbf{kq}}{2m}\right)\right\}.\end{aligned} \tag{25}$$

Сравним полученное кинетическое уравнение (25) с кинетическим уравнением в однородном случае, полученным в [2]. Во-первых, в нашем случае функция распределения $\rho_t^{(q)}(\mathbf{p})$ зависит от параметра q и при $q=0$ переходит в функцию распределения в однородном случае. Во-вторых, в левой части уравнения (25) появляется дополнительный третий член. Далее, в правой части уравнения (25) появляются функции $D_0^{\pm}$, которые при $q=0$ переходят в δ-функции, описывающие однофононное поглощение и излучение. И видно, что при $q=0$, т. е. в пространственно-однородном случае, уравнение (25) переходит в соответствующее уравнение, полученное в [2].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей статье были рассмотрены кинетические уравнения в теории полярона. Из обобщенных кинетических уравнений в случае пространственной неоднородности получены квантовые кинетические уравнения Больцмана. В случае пространственной однородности последние совпадают с результатом, полученным в работе Н. Н. Боголюбова и Н. Н. Боголюбова (мл.) [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.)* // ТМФ. 1981. Т. 43. С. 1.
2. *Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.).* Аспекты теории полярона. М.: Физматлит, 2004.
3. *Шимода Ю., Накаджима Т., Савада А.* // Mod. Phys. Lett. B. 2005. V. 11. P. 539548.