

ბეჟან კოტია

ელექტრონების და პოლარონების ძვრადობის
კვანტური თეორიის ზოგიერთი საკითხი
ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში

წარდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის
მოსაპოვებლად

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
თბილისი, 0175, საქართველო
2010 წელი

© საავტორო უფლება ბეჟან კოტია, 2010 წ.

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ინფორმატიკისა და მართვის სისტემების ფაკულტეტი

ჩვენ, ქვემოთ ხელისმომწერი ვადასტურებთ, რომ გავეცანით ბეჟან კოტიას მიერ შესრულებულ სადისერტაციო ნაშრომს დასახელებით: „ელექტრონების და პოლარონების ძვრადობის კვანტური თეორიის ზოგიერთი საკითხი ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში“ და ვაძლევთ რეკომენდაციას საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის „ინფორმატიკისა და მართვის სისტემების“ სადისერტაციო საბჭოში მის განხილვას დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად.

2010 წელი

ხელმძღვანელი:

რეცენზენტი:

რეცენზენტი:

რეცენზენტი:

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

2010 წელი

ავტორი: კოტია ბეჟან
დასახელება: “ელექტრონების და პოლარონების ძვრადობის კვანტური თეორიის ზოგიერთი საკითხი ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში”
ფაკულტეტი : ინფორმატიკისა და მართვის სისტემები
აკადემიური ხარისხი: დოქტორი
სხდომა ჩატარდა: 2010 წ.

ინდივიდუალური პიროვნებების ან ინსტიტუტების მიერ ზემომოყვანილი დასახელების დისერტაციის გაცნობის მიზნით მოთხოვნის შემთხვევაში მისი არაკომერციული მიზნებით კოპირებისა და გავრცელების უფლება მინიჭებული აქვს საქართველოს ტექნიკურ უნივერსიტეტს.

ავტორის ხელმოწერა

ავტორი ინარჩუნებს დანარჩენ საგამომცემლო უფლებებს და არც მთლიანი ნაშრომის და არც მისი ცალკეული კომპონენტების გადაბეჭდვა ან სხვა რაიმე მეთოდით რეპროდუქცია დაუშვებელია ავტორის წერილობითი ნებართვის გარეშე.

ავტორი ირწმუნება, რომ ნაშრომში გამოყენებული საავტორო უფლებებით დაცული მასალებზე მიღებულია შესაბამისი ნებართვა (გარდა იმ მცირე ზომის ციტატებისა, რომლებიც მოითხოვენ მხოლოდ სპეციფიურ მიმართებას ლიტერატურის ციტირებაში, როგორც ეს მიღებულია სამეცნიერო ნაშრომების შესრულებისას) და ყველა მათგანზე იღებს პასუხისმგებლობას.

რეზიუმე

ელექტრონებისა და პოლარონების ძვრადობის კვანტური თეორიის აგება და კვაზინაწილაკების კინეტიკური მახასიათებლების გამოთვლა კვლავ რჩება ერთ-ერთ აქტუალურ ამოცანად მყარი სხეულების ფიზიკაში. უკანასკნელ პერიოდში დიდ ინტერესს იწვევს კუბოს წრფივი გამოძახილის მეთოდზე დაყრდნობით ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების კორექტული კვანტური თეორიის აგება და მექანიკური კოეფიციენტების (ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) გამოთვლა ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში.

სადისერტაციო ნაშრომის მიზანს წარმოადგენს-ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის კვაზინაწილაკის სუსტი (ფროლიხისა და აკუსტიკური პოლარონის მოდელები) და ძლიერი (პოლარონის ფეინმანის განზოგადოებული მოდელი (ფგმ)) ურთიერთქმედების შემთხვევაში ფონონურ ველთან - ახალი, სუსტი, განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებების მიღება და გამოკვლევა დროითი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისათვის; ამ განტოლებათა გამოყენებით, ამ მოდელთათვის თანმიმდევრული, კორექტული ელექტრონული და პოლარონული დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის კვანტური თეორიის აგება ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში.

სადისერტაციო ნაშრომში განხილულია ახალი, სუსტი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებების მიღების ორი მიდგომა დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის: პირველი მიდგომა დაფუძნებულია მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმზე და ქრონოლოგიურ და ანტიქრონოლოგიურ T-ნამრავლთა მეთოდზე, და მეორე მიდგომა ეყრდნობა ლიუვილის სუპეროპერატორულ ფორმალიზმსა და პროექციული ოპერატორის მეთოდს.

ნაშრომის პირველი თავის პირველ პარაგრაფში მოყვანილია მოდელური ჰამილტონიანის სახე დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ბოზონურ (ფონონურ) თერმოსტატთან და განხილულია ზოგიერთი აქტუალური მაგალითი კვანტური დისიპაციური და ღია არაწონასწორული მოდელური სისტემებისა თანამედროვე ფიზიკის სხვადასხვა დარგიდან, რომლებიც გახდნენ ინტენსიური კვლევისა და შესწავლის საგანი უკანასკნელი 30-40 წლის განმავლობაში. მეორე პარაგრაფში განხილულია დინამიურად მოუწესრიგებელი სისტემა - ელექტრონ-ფონონური სისტემა და ელექტრონის ურთიერთქმედება აკუსტიკურ და პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან; მოყვანილია ელექტრონ-ფონონური სისტემის ჰამილტონიანის ზოგადი სახე (ფროლიხ-პეკარის ტიპის ჰამილტონიანი), ელექტრონის აკუსტიკურ და პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან ურთიერთქმედების ჰამილტონიანთა სახეები და მოკლედ მიმოხილულია აგრეთვე დეფორმაციის პოტენციალის მეთოდი. დიდი რადიუსის მქონე პოლარონთა მოდელები - პოლარონის ფროლიხისა და პეკარის, ფეინმანის ერთოსცილატორიანი და ფგ მოდელები - მიმოხილულია მესამე პარაგრაფში.

ამავე პარაგრაფში განხილულია აგრეთვე უკანასკნელ წლებში განვითარებული და გამოყენებული ახალი მიდგომა პოლარონული სისტემების თერმოდინამიკისა და კინეტიკის საკითხების გამოკვლევებისას

– მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმი, T-ნამრავლთა მეთოდი და ფონონური ოპერატორების გამორიცხვის ტექნიკა ელექტრონ-ფონონური სისტემის მახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეების წონასწორული და არაწონასწორული საშუალო მნიშვნელობებიდან. აღნიშნულია ზოგიერთ შემთხვევაში ამ ახალი მიდგომის უპირატესობა ელექტრონ-ფონონური სისტემის კინეტიკის საკითხების შესწავლისას, კონტინუალური ინტეგრირების მეთოდთან შედარებით. მეოთხე პარაგრაფში განხილულია ფიზიკური კინეტიკის ზოგიერთი პრინციპული საკითხი დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ (ბოზონურ) ველთან. მიმოხილულია მნიშვნელოვანი და პრინციპული საკითხი K-ტიპის დინამიურ სისტემებში (როგორც კლასიკურის, ასევე კვანტურისთვის), ევოლუციური განტოლებების გამოყვანის დროს შემოკლებული აღწერის შესაძლებლობაზე, რომელიც არ ეყრდნობა საწყისი კორელაციების შესუსტებისა და შემთხვევითი ფაზების მიახლოების (შფმ) ჰიპოთეზას. აღწერილია ძირითადი სქემები და მეთოდები, რომლებსაც მიყვავართ ბოლცმანის სახის კინეტიკური განტოლებისა და ძირითადი კინეტიკური განტოლების პოვნამდე. განხილულია ის ძირითადი პრინციპული ხასიათის სირთულეები, რომლებიც წარმოიშვებიან ელექტრონ-ფონონური სისტემისა და პოლარონის ზემოთმოყვანილ მოდელთათვის დრეიფული ძვრადობების გამოთვლისას, გამომდინარე როგორც ბოლცმანის კინეტიკური განტოლებიდან და კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიიდან, ასევე ელექტროგამტარობის წრფივი და არაწრფივი თეორიის ზოგიერთი სხვა მეთოდის (არაწონასწორული სიმკვრივის მატრიცის მეთოდი, ბალანსის განტოლების მეთოდი) გამოყენებისას.

სადისერტაციო ნაშრომის მეორე თავი ორიგინალური ხასიათისაა. ამ თავში დასმულია ზოგადი ამოცანა – დინამიური ქვესისტემისთვის, რომელიც ურთიერთქმედებს ბოზონურ (ფონონურ) თერმოსტატთან-ახალი, ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებების მიღება წონასწორული კორელაციური და გრინის ფუნქციებისთვის. პირველ პარაგრაფში განხილულია მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმი და T-ნამრავლთა მეთოდი. მეორე და მეოთხე პარაგრაფებში გამოყვანილია ახალი, ზუსტი განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებები დროის ორმომენტური წონასწორული კორელაციური და გრინის დაგვიანებული ფუნქციებისთვის, ლიუვილის სუპეროპერატორული ფორმალიზმისა და პროექციული ოპერატორის მეთოდის გამოყენებით, საწყისი კორელაციების შესუსტების პრინციპისა და შფმ-ს გამოყენების გარეშე. განსხვავებით სამეცნიერო ლიტერატურაში სხვადასხვა ავტორთა მიერ მიღებული კინეტიკური განტოლებებისაგან კორელაციური ფუნქციებისთვის, ნაშრომში გამოყვანილი ევოლუციური განტოლებების დაჯახებითი ინტეგრალები შეიცავენ დამატებით წევრებს, რომლებიც აღწერენ საწყისი კორელაციების ევოლუციას დროში, და რომლებიც განპირობებულია ქვესისტემის ურთიერთქმედებით ბოზონურ თერმოსტატთან დროის საწყის მომენტში. მესამე და მეხუთე პარაგრაფებში განხილულია მარკოვისეული მიახლოება ქვესისტემის დინამიკისთვის და შესაბამისად ორივე ფორმალიზმისა და მეთოდის დახმარებით ნაპოვნია შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში კვანტური კინეტიკური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის გამორიცხული ბოზონური ამპლიტუდებით და საწყისი კორელაციების ევოლუციის აღმწერი დამატებითი წევრებით დაჯახებით ინტეგრალებში.

ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების კვანტური თეორიის საკითხები – ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში – განხილულია და გამოკვლეულია სადისერტაციო ნაშრომის მესამე თავში. ამ თავის ოთხივე პარაგრაფი ეძღვნება ელექტრონული და პოლარონული დაბალსიხშირული გამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის კვანტურ თეორიას, რომელიც დაფუძნებულია კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიაზე, კვანტურ დინამიური სისტემების ზემოთმითითებულ მოდელზე, და წინა თავში მიღებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებზე. პირველ პარაგრაფში გამოკვლეულია და ამოხსნილია რელაქსაციის დროის მიახლოებაში მარკოვის სახის კინეტიკური განტოლებები ელექტრონის “სიჩქარე-სიჩქარეზე” კორელაციური ფუნქციებისთვის; მიღებულია დაბალსიხშირული გამტარობის ტენზორის ანალიზური გამოსახულება და გამოთვლილია ელექტრონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობა ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის ერთი ზონის მიახლოებაში იზოტროპულ შემთხვევაში – ელექტრონის სიჩქარისა და ფონონების დისპერსიის ნებისმიერი ზოგადი, იზოტროპული კანონის შემთხვევაში. მეორე და მესამე პარაგრაფებში ნაპოვნია დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის გამოსათვლელი ფორმულები ფროლიხისა და აკუსტიკური პოლარონის მოდელში. პოლარონის ფროლიხის მოდელში მიღებულია ოსაკას შედეგის განზოგადოება ელექტრონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობისთვის დაბალსიხშირულ გარეშე ელექტრულ ველში; მოყვანილია $\frac{3 K_B T}{2 \hbar \omega_0}$

პრობლემის” ნაწილობრივი გადაწყვეტა ფროლიხის პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის თეორიაში და ნაჩვენებია, რომ ნაშრომში მიღებული ძვრადობის მნიშვნელობა 3-ჯერ აღემატება ძვრადობის იმ მნიშვნელობას, რომელიც მიიღება ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოხსნით რელაქსაციის დროის მიახლოებაში. აკუსტიკური პოლარონის მოდელში ნაშრომში ნაპოვნი ელექტრონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის მნიშვნელობა 2-ჯერ ნაკლებია ძვრადობის იმ მნიშვნელობაზე, რომელიც ასევე მიიღება ბოლცმანის განტოლების ამოხსნით რელაქსაციის დროის მიახლოებაში. მეოთხე პარაგრაფში გამოყვანილია და ამოხსნილია (რელაქსაციის დროის მიახლოებაში) კინეტიკური განტოლებები პოლარონის “იმპულსი-იმპულსზე” წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის ფგმ-ში. მიღებულია დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობის ტენზორის ანალიზური გამოსახულება და გამოთვლილია პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობა. ნაპოვნი ძვრადობის დამოკიდებულება ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების (ბმის) მუდმივაზე ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში, და დადგენილია დაბალტემპერატურული ძვრადობის განსხვავებული ყოფაქცევა (ბმის მუდმივას რიგის მიხედვით) პოლარონის პეკარის მოდელთან შედარებით. ნაშრომში გამოთვლილია ასევე ტემპერატურული შესწორებები ელექტრონისა და პოლარონის დაბალტემპერატურულ დრეიფულ ძვრადობებზე განხილულ მოდელში, და ნაჩვენებია, რომ ეს შესწორებები წარმოადგენენ მცირე სიდიდეებს განხილული თეორიისა და გამოყენებული მიახლოებების ფარგლებში.

Abstract

In modern conditions a subject to research is a subject of electron and polaron transport phenomena study in solid states and condensed matter physics. Making electron and polaron mobility and electrical conductivity quantum theory and quasi-particle kinetic features calculation remains one of the actual problem in modern theory of electron and polaron. In the latest years a tendency of making materials of difficult molecular building and studying polaron features gave stimuli to implement a lot of theoretical research for describing autolocalized (polaron) matter. Polaron concepts, which represents a simple example of nonlinear quasi-particle, has great importance and is highly used in solid states and condensed matter physics and especially it is closely connected to the fundamental problems of quantum dynamical systems theory and to the subjects of quantum theory of a field. In the latest period it became actual to research subjects of electron-phonon system and polaron kinetic on the base of Kubo linear response theory and to build correct quantum theory of electron and polaron transfer phenomena and calculation of mechanical coefficients (mobility, electrical conductivity) in semiconductors and ionic crystals.

The aim of thesis work is to receive and research new, exact generalized quantum kinetic equations for time correlation functions for some quantum dynamical systems of solid physics, which interacts with phonon field (electron-phonon system, Frohlich and acoustical polaron models, polaron generalized model of Feynman) and on the base of such models building of consecutive, correct electron and polaron low-frequency conductivity and low-temperature drift mobility quantum theory for non degenerated wide-band semiconductors and ionic crystals based on Kubo linear response and perturbation theory and calculation of mechanical coefficients transport (mobility, electrical conductivity) for above mentioned quantum subsystems models.

The thesis work discusses two method of approach for new, exact generalized quantum kinetic equations for double-time equilibrium correlation functions for quantum dynamical systems, which interacts with boson (phonon) field (thermostat).

The first method of approach is based on ordered operators formalism and chronological and antichronological T-product method; and the second method of approach which is based on Liouville superoperative formalism and projection operator method.

The first chapter of the work generally gives a short brief. In the first paragraph of this chapter deals with model Hamiltonian kind of dynamical systems, which interact with boson (phonon) thermostat and there are discussed some actual examples of quantum dissipative and open nonequilibrium modeling systems and from different fields of modern physics, which became the subject of intensive research and learn in the latest 30-40 years. The spectrum of the wide research contained subjects of metals' electrical conductivity and superconductivity theories, subjects of metal alloy and cold "metal glasses" electronic theory; subjects of weak and strong localization and strong inhomogeneous substances electrical conductivity theory in disordered systems physics; aspects of laser radiation and superradiation theory aspects in quantum radiophysics; subjects of magnetic polaron and fluctuon (phason) and etc in magnetic substances (environment) and others. The second paragraph deals with dynamically disordered system - electron-phonon system and electron interaction with acoustical and polar optical phonons and gives general introduction of Hamiltonian of electron-phonon system (Frohlich - Pekar type Hamiltonian), Hamiltonians of electron acoustical and polar optical phonons interaction and short brief of deformation potential method. The third part of the work

deals with large radius polaron models. There are reviewed polaron Frohlich and Pekar models and polaron Feynman oscillator and generalized Feynman models there. The same paragraph deals with a new approach for polaron systems thermodynamics and kinetic subjects, developed in latest years – ordered operators formalism, T-product method and phonon operators elimination method from equilibrium and nonequilibrium average value – physical quantity characteristic for electron-phonon system. The advantage of a new method of approach in some occasions to at studying kinetic subjects of electron-phonon system. The fourth paragraph deals with several principal subjects of physical kinetics of dynamical systems, which interact with phonon (boson) field. There is given review of very important and principal subject such as opportunity of shorten description at evolution (kinetic) equation for K-type dynamical systems (for classic and quantum as well), which is not based of a hypothesis about usage of initial correlations weakness and random phase approximation (RPA). There is described those basic schedules and methods, which lead us to Boltzmann type kinetic equation and master equation there. The chapter deals with such basic principal difficulties, which are arisen at calculation of drift mobilities for above mentioned models, as according to Boltzmann kinetic equation and Kubo linear response theory and also at using some methods of linear and nonlinear conductivity theories (nonequilibrium density matrix and balance equation methods).

The second chapter of thesis work deals with general question – to receive exact, generalized, quantum evolutionary equations for equilibrium correlation and Green functions of dynamical subsystems, which interacts with boson (phonon) thermostat. The first paragraph deals with ordered operators formalism and T-product method. The second paragraph deals with new and exact quantum evolutionary (kinetic) initial correlations weakness principles equations for without random phase approximation usage and double-time equilibrium correlation and Green retarded functions, with eliminated boson amplitudes. The fourth paragraph deals with new and exact generalized quantum kinetic equations for double-time equilibrium correlation and Green functions been found by using Liouville superoperative formalism and projection operator method. Unlike kinetic equations for correlation functions, received by different authors in scientific literature, integrals of evolutionary equations presented in this work contain additional members, which describe initial correlations evolution in the period of time and which are caused by subsystem interaction with boson thermostat in initial moment of time. The third and fifth paragraphs discuss Markov method of approach for subsystem dynamics and accordingly by the help of both formalism and methods there has been found approximately quantum kinetic equations for correlation functions with eliminated boson amplitudes and initial correlation description and additional members in collision integrals. Researches and results have been conducted in this chapter of the work give opportunity for better and wider studying of kinetic phenomena, which take place in dynamical systems and which interact with boson field.

Subjects of electron and polaron transport phenomena quantum theories in solid states – in semiconductors and ionic crystals – have been researched in the third chapter of thesis work. All four paragraphs of the same work are dedicated to electron and polaron low-frequency conductivity and low-temperature drift mobility quantum theory, which is based on the above mentioned models of quantum dynamical systems, Kubo linear response and perturbation theory and on quantum kinetic equations for equilibrium correlation functions presented in the second chapter. The first paragraph researches Markovian type kinetic equations for

correlation functions of electron “velocity – on velocity” in relaxation time approximation and there has been found decrements of damping correlation functions and oscillation factors; for electron-phonon systems in the case of weak electron-phonon interaction in one band approximation there has been received analyze image of low-frequency electrical conductivity tensor and low-temperature drift mobility of electron in the case of anisotropy has been calculated there – conductivity band is of electron velocity. The second and third paragraphs deals with several subjects of electronic transport phenomena in Frohlich and acoustical polaron models. There have been found formulas for calculating drift mobility and low-frequency conductivity at low-temperatures for electron in such models. Generalization of Osaka result for electron low-temperature mobility and low-frequency conductivity in electric field are received in polaron Frohlich model. There is given partial decision for “ $\frac{3}{2} \frac{K_B T}{\hbar \omega_0}$ problem” in Frohlich polaron low-temperature mobility theory and is shown, that meaning of mobility given in this work excels three times those meaning of mobility which is received by Boltzmann kinetic equation in relaxation time approximation. In acoustical polaron model (at scattered electron on acoustical phonons) meaning of low-temperature mobility is two times less than the meaning of mobility, which is also received by Boltzmann equation in relaxation time approximation. The fourth paragraph of the same chapter deals researches several subjects of polaron kinetic in generalized Feynman model and kinetic equations are solved for polaron “momentum-on momentum” equilibrium correlation functions; there is calculated frequency of polaron momentum relaxation (relaxation time) at low temperature crystal and analyze image of low-frequency electrical conductivity tensor (dissipative part) is received; there is found polaron low-temperature drift mobility meaning there. There is analyzed polaron low-temperature mobility behavior in the event of electron phonon interaction there and there is found mobility dependence on coupling constant in the case of strong electron-phonon interaction and different behavior of low-temperature mobility according to the degree of coupling constant by polaron Pekar model is established. The work also calculates temperature corrections on electron and polaron low-temperature mobilitys in the discussed models and there is shown, that these corrections represent small quantities within discussed theory and approaches has been used there.

შინაარსი

| | |
|---|------|
| შინაარსი..... | x |
| ნახაზების ნუსხა..... | xiii |
| შესავალი..... | xiv |
| თავი I. დინამიური სისტემები, რომლებიც ურთიერთქმედებენ თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან)..... | 23 |
| 1.1. კვანტური დისიპაციური და ღია არაწონასწორული მოდელური სისტემები (ზოგიერთი მაგალითი)..... | 25 |
| 1.1.1. ფერმიონული სისტემა | 25 |
| 1.1.2. თხევადი მეტალის ან შენადნობის მოდელი | 25 |
| 1.1.3. ნაწილაკი, რომელიც ურთიერთქმედებს გარემოსთან | 27 |
| 1.1.4. ელექტრონ-მინარევეული სისტემა..... | 30 |
| 1.1.5. დიკეს მოდელები გამოსხივების თეორიაში..... | 31 |
| 1.1.6. ელექტრონები მაგნეტიკში, რომლებიც ურთიერთქმედებენ კრისტალის მაგნეტურ ქვესისტემასთან | 33 |
| 1.2. ელექტრონ-ფონონური სისტემა. ელექტრონის ურთიერთქმედება აკუსტიკურ და პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან..... | 36 |
| 1.2.1. ელექტრონის ურთიერთქმედება კრისტალური მესრის აკუსტიკურ რხევებთან. დეფორმაციის პოტენციალის მეთოდი | 37 |
| 1.2.2. ელექტრონის ურთიერთქმედება პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან | 39 |
| 1.3. პოლარონის ამოცანა. დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის მოდელები..... | 41 |
| 1.3.1. პოლარონის ფროლიხისა და პეკარის მოდელები..... | 42 |
| 1.3.2. პოლარონის ფეინმანის მოდელი..... | 52 |

| | |
|---|-----|
| 1.3.3. პოლარონის ფეინმანის განზოგადოებული მოდელი..... | 60 |
| (ლატინჯერ-ლუს მოდელი)..... | 60 |
| 1.4. ფიზიკური კინეტიკის ზოგიერთი საკითხი დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ (ბოზონურ) ველთან..... | 66 |
| თავი II. განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებები დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციებისთვის დინამიური ქვესისტემისა, რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან)..... | 82 |
| 2.1. მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმი და T-ნამრავლთა მეთოდი..... | 82 |
| 2.2. ზუსტი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციებისთვის | 91 |
| 2.3. მარკოვისეული მიახლოება ქვესისტემის დინამიკისთვის მიახლოებითი განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის..... | 95 |
| 2.4. განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის შფმ-ის გამოყენების გარეშე. პროექციული ოპერატორის მეთოდი..... | 99 |
| 2.5. თერმოსტატის ბოზონური ამპლიტუდების გამორიცხვა ევოლუციური განტოლებიდან კორელაციური ფუნქციისათვის. მარკოვისეული მიახლოება ქვესისტემის დინამიკისთვის..... | 103 |
| თავი III. ნახევარგამტარებსა და იონური კრისტალებში ელექტრონული და პოლარონული გამტარობისა და დაბალტემპერატურული ძვრადობის კვანტური თეორია დაფუძნებული კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიაზე..... | 108 |
| 3.1. ელექტრონ-ფონონური სისტემა. ელექტრონის დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობისა და დაბალტემპერატურული ძვრადობის გამოთვლა სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში | |

| | |
|---|-----|
| 3.2. ელექტრონის ძვრადობა ფროლიხის პოლარონის მოდელში..... | 117 |
| 3.3. ელექტრონის ძვრადობა აკუსტიკური პოლარონის მოდელში სუსტი ელექტრონ –ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში | 127 |
| 3.4 პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობა ფეინმანის განზოგადოებულ მოდელში | 134 |
| დასკვნა..... | 143 |
| გამოყენებული ლიტერატურა..... | 146 |
| დანართი | |
| ბოზონური (ფონონური) ამპლიტუდების გამორიცხვა ქრონოლოგიურ და ანტიქრონოლოგიურ T-ნამრავლთა დახმარებით..... | 153 |
| დისერტაციის თემასთან დაკავშირებით გამოქვეყნებულია შემდეგი ნაშრომები | 156 |

ნახაზების ნუსხა

- ნახ.1.** პოტენციალური ორმო, ენერგეტიკული დონეები
და ელექტრონის Ψ -ტალღური ფუნქცია პეკარის
პოლარონის მოდელში----- 51
- ნახ.2.** პოლარონის ფეინმანის მოდელი. ელექტრონი,
რომელიც დაკავშირებულია “ზამბარის” მეშვეობით
მეორე ნაწილაკთან მასით M_F ----- 56
- ნახ.3.** V და W – ვარიაციული პარამეტრების ყოფაქცევა,
როგორც α -ურთიერთქმედების (ბმის) მუდმივას ფუნქციები,
პოლარონის ფეინმანის თეორიაში-----58

შესავალი

უკანასკნელი 50-60 წლის განმავლობაში დიდი ყურადღება ეთმობოდა დენის (მუხტის) გადამტანების დინამიური და კინეტიკური თვისებების შესწავლას მყარ სხეულებში. ზოგადად დენის ასეთ გადამტანებს წარმოადგენს სხვადასხვა სახის პოლარონები; თითოეული მათგანი მოიცავს გამტარობის ელექტრონს (ან ხვრელს) და მათ მიერ გამოწვეულ მესრის სტრუქტურის დეფორმაციას. ასეთი თვალსაზრისით გამტარობის ელექტრონი (ან ხვრელი) ფაქტიურად წარმოადგენს პოლარონს ზღვრული, სუსტი დეფორმაციის შემთხვევაში. ელექტრონების და პოლარონების დინამიური და კინეტიკური ყოფაქცევის შესწავლა სტიმულირებული იყო მრავალი ექსპერიმენტული მასალით, რომელიც ეხებოდა გადატანის მოვლენების გამოკვლევას მყარ სხეულებში, რომელთა ინტერპრეტაცია მრავალ შემთხვევაში სტანდარტული ზონური თეორიის ჩარჩოებში ძალზე რთული იყო, განსაკუთრებით იონურ კრისტალებში და პოლარულ ნახევარგამტარებში. გარდა ამისა, გადატანის მოვლენების ზოგადი დებულებები კრისტალებში არსებითად იქნა განვითარებული იმ ფუნდამენტალური გამოკვლევების საფუძველზე, რომელიც ასახავს დისიპაციური სისტემების დინამიურ და კინეტიკურ თვისებებს და რომლებშიც მიმდინარეობს შეუქცევადი გადატანის მოვლენები. ელექტრონული გადატანის მოვლენების თეორიის განვითარების ასეთმა პირობებმა გამოიწვია მნიშვნელოვანი ზეგავლენა ისეთი კვლევის არეების ჩამოყალიბებაში, როგორც არის – პოლარონული გადატანის მოვლენები, ელექტრონული გადატანის მოვლენები ძლიერ (კვანტურ) მაგნიტურ ველში, ელექტრონული გადატანის მოვლენების თეორია მაგნიტურ კრისტალებში და მოუწესრიგებელ გარემოებში (სისტემებში) და სხვა.

როგორც ცნობილია, კრისტალებში ელექტრონული გადატანის მოვლენების ზონური თეორია პრინციპში დაფუძნებულია სამ ძირითად კონცეფციაზე: 1) დენის გადამტანები წარმოადგენს კვაზინაწილაკებს განსაზღვრული კვაზიმპულსით და დისპერსიის კანონით. 2) დენის გადამტანთა ელექტროგამტარობა და ძვრადობა განისაზღვრება მათი გაბნევით კრისტალის იდეალური მესრის სტრუქტურის დინამიურ და სტატიკურ დამახინჯებებზე (დეფექტებზე). 3) დენის გადატანის თავი-

სუფალი განარბენის სიგრძე წარმოადგენს სასრულ სიდიდეს და ის ბევრად აღემატება შესაბამისად კვაზინაწილაკის დე-ბროილის ტალღის სიგრძეს. ამ პირობების გათვალისწინებით დენის გადამტანთა გაბნევა შეიძლება ჩაითვალოს როგორც “იშვიათი”. ამ დებულებებიდან გამომდინარე, დენის გადამტანთა ყოფაქცევა კრისტალში აღიწერება ალბათური განაწილების ფუნქციით კვაზიიმპულსების მიხედვით, რომელიც განისაზღვრება, როგორც ბოლცმან-ბლოხის კინეტიკური განტოლების ამოხსნა. უკანასკნელი შეიძლება განხილული იქნას, როგორც ბალანსის (უწყვეტობის) განტოლება, რომელშიც გათვალისწინებულია დენის გადამტანთა განაწილების ფუნქციის ცვლილება კრისტალში, გამოწვეული როგორც გარეშე მოდებული ძალების ზეგავლენით, აგრეთვე დენის გადამტანთა კვაზიიმპულსის გადანაწილებით (ცვლილებით) გაბნევის პროცესში. ასეთი გაგებით (თუ მხედველობაში არ მივიღებთ დისპერსიის კანონის კვანტურ-მექანიკურ ბუნებას და დენის გადამტანების გაბნევის ალბათურობას), გადატანის მოვლენების თეორია, რომელსაც ხშირად უწოდებენ ბოლცმანისეულს, არსებითად წარმოადგენს კლასიკურს და იგი არ მოიცავს სპეციფიურ კვანტურ ეფექტებს. ამრიგად, კლასიკურ არეებში გადატანის კინეტიკური (მექანიკური) კოეფიციენტების (ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) გამოსათვლელად გამოიყენება დენის გადამტანების არაწონასწორული განაწილების ფუნქციისათვის კინეტიკური განტოლება – ბოლცმანის განტოლება – რომელიც ითვალისწინებს დენის (მუხტის) მატარებელთა ურთიერთქმედებას (გაბნევას) კრისტალური მესრის რხევებზე.

უკანასკნელ წლებში, ელექტრონული გადატანის მოვლენების გამოკვლევებში მყარი სხეულების და ნახევარგამტარების ფიზიკაში, ძალიან ფართო გამოყენება ჰპოვა უფრო ზოგადმა, ალტერნატიულმა მიდგომამ, რომელიც დაფუძნებულია კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიაზე. ამ თეორიაში - რომელსაც გადამწყვეტი მნიშვნელობა აქვს წრფივ არაწონასწორულ თერმოდინამიკაში – გადატანის კინეტიკური (მექანიკური) კოეფიციენტები ბუნებრივად გამოისახებიან (აღიწერებიან) დროითი კორელაციური ფუნქციებით. ისინი ასახავენ სისტემის რეაქციას ჰამილტონიანის შეშფოთებისას, რომლის ტიპურ მაგალითს წარმოადგენს ელექტროგამტარობა. კუბო-გრინის ფორმულები გადატანის კოეფიციენტები-

სათვის წარმოადგენენ კერძო შემთხვევას თანაფარდობათა ფართო კლასისა, რომელიც ცნობილია ფლექტუაციურ-დისიპაციური თეორემების სახელწოდებით. ამ თეორემების ამსახველი მათემატიკური ფორმულები ამყარებენ კავშირს მიკროსკოპულ და მაკროსკოპულ დამზერად სიდიდეებს შორის. წრფივი გადატანის მოვლენების განხილვისას კუბოს ფორმულა “დენი-დენზე” დროითი კორელაციური ფუნქციისათვის წარმოადგენს არსებითად ზუსტ გამოსახულებას კვანტურ მრავალნაწილაკოვან ფორმალიზმში, იმ განსხვავებით ბოლცმანის კინეტიკური განტოლებისაგან, რომ არავითარი დაშვება არ კეთდება გაბნევის კვების სიდიდის შესახებ დენის გადამტანების (ელექტრონების) გაბნევისას კრისტალურ მესრის რხევებზე. უნდა აღინიშნოს, რომ ტრადიციულად ექვივალენტობას კუბოს ფორმულასა და ბოლცმანის განტოლებას შორის მკაცრად იკვლევენ მხოლოდ დენის გადამტანების სუსტი გაბნევის ზღვრულ შემთხვევაში კრისტალური მესრის რხევებზე. როგორც ცნობილია, კუბოს ფორმულა ამყარებს კავშირს ელექტროგამტარობასა და დროით წონასწორულ კორელაციურ ფუნქცია “დენი-დენს” შორის, რომელიც არის ორნაწილაკოვანი (ოთხწერტილოვანი) გრინის ფუნქციის მსგავსი, მაშინ, როდესაც ბოლცმანის განტოლება წარმოადგენს – კინეტიკურ განტოლებას არაწონასწორული განაწილების ფუნქციისათვის, და რომელიც არის ერთნაწილაკოვანი (ორწერტილოვანი) გრინის ფუნქციის სახის.

თეორიული გამოკვლევების ძალიან დიდი რაოდენობა სამეცნიერო ლიტერატურაში მიძღვნილი არის ელექტრონებისა და პოლარონების ელექტროგამტარობისა და ძვრადობის გამოთვლაზე ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში. ეს გამოკვლევები დაფუძნებული არის სხვადასხვა თეორიულ მეთოდებზე – გრინის ფუნქციის ტექნიკაზე, ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების შესწავლაზე, თვითშეთანხმებულ მეთოდებზე და სხვ. რეზულტატები მიღებული სხვადასხვა მეთოდების გამოყენებით და შესაბამისად სხვადასხვა მიახლოებებზე დაყრდნობით, ძირეულად განსხვავდება ერთმანეთისაგან. მიუხედავად იმისა, რომ ელექტრონების და პოლარონების ელექტროგამტარობისა და ძვრადობის გამოთვლა წარმოადგენს ერთ-ერთ უძველეს პრობლემას მყარი სხეულე-

ბის ფიზიკაში, ის მაინც რჩება ერთ-ერთ ურთულეს და ძნელ ამოცანად თეორიულად ამოხსნის თვალსაზრისით.

ამგვარად, თანამედროვე პირობებში კვლავ აქტუალურს წარმოადგენს საკითხი ელექტრონების და პოლარონების ელექტროგამტარობის და ძვრადობის კორექტული გამოთვლისა ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში.

როგორც ცნობილია, ეფექტურ მეთოდს ურთიერთქმედ ნაწილაკთა სისტემის კინეტიკური მახასიათებლების გამოთვლისა წარმოადგენს წონასწორულ კორელაციურ ფუნქციათა და გრინის ფუნქციების მეთოდი. კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიის უპირატესობა არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკის სხვა მიდგომებთან შედარებით მდგომარეობს იმაში, რომ ეს თეორია საშუალებას იძლევა უშუალოდ გამოყენებული იქნას წონასწორული მრავალნაწილაკოვანი მეთოდები გადატანის კინეტიკური (მექანიკური) კოეფიციენტების გამოსათვლელად მყარ სხეულებში. ამ მიდგომის დროს ძირითად პრობლემას წარმოადგენს წონასწორული კორელაციური ფუნქციების გამოთვლა, რომლებისთვისაც იწერება კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები.

მყარი სხეულების ფიზიკისა და არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკის მრავალი ამოცანის განხილვისას შეისწავლება მცირე დინამიური ქვესისტემის ევოლუცია დროში, რომელიც იმყოფება კონტაქტში დიდი თავისუფლების რიცხვის მქონე, თერმოდინამიკურ წონასწორობაში მყოფ სისტემასთან – თერმოსტატთან.

ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების გამოკვლევისას მყარ სხეულებში კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიაზე დაყრდნობით, ძირითად ამოცანას წარმოადგენს ზუსტი განზოგადოებულნი. კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებების მიღება დროის ორმომენტური წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის კვაზინაწილაკების აღმწერი შესაბამისი დინამიური სიდიდეებისათვის, როდესაც ხდება ამ უკანასკნელთა ურთიერთქმედება (გაბნევა) კრისტალური მესრის რხევებზე (ფონონებზე), და როდესაც ფონონური (ბოზონური) ველი განიხილება როგორც თერმოსტატი. სამეცნიერო ლიტერატურაში, ასეთი სახის განტოლებების მისაღებად, როგორც წესი გამოიყენება აპრიორული ჰიპოთეზა – საწყისი კორელაციების შესუსტების

პრინციპი, ან მსგავსი დებულებები – მაგ. შემთხვევითი ფაზების მიახლოება (შფმ) – როდესაც დროის საწყისი მომენტისათვის მთელი სისტემის (ქვესისტემა პლუს თერმოსტატი) სტატისტიკური ოპერატორი მოიცემა ფაქტორიზებული სახით (მთელი სისტემის სტატისტიკური ოპერატორი განიხილება როგორც ქვესისტემისა და თერმოსტატის სტატისტიკურ ოპერატორთა პირდაპირი ნამრავლი). ნათელია, რომ ასეთი დაშვებების შედეგად მიღებული განზოგადოებული, კვანტური ევოლუციური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისათვის არ არის ზუსტი. ამიტომ ცხადია, რომ ზოგადად კვანტური დისიპაციური სისტემების განხილვისას და კინეტიკური მოვლენების შესწავლისას მცირე დინამიურ სისტემებში, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ბოზონურ (ფონონურ) თერმოსტატთან, კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიის ფარგლებში მკაცრი მიდგომის განსავითარებლად საჭიროა ზუსტი, განზოგადოებული, კვანტური ევოლუციური განტოლებების გამოყვანა ქვესისტემის დინამიური სიდიდეების წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის.

ამრიგად, ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების კორექტული თეორიის ასაგებად და მექანიკური კოეფიციენტების (მაგ. ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) გამოსათვლელად ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში და აგრეთვე ელექტრონ-ფონონური სისტემის კინეტიკის საკითხების გამოსაკვლევად კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიის ჩარჩოებში, აქტუალურს წარმოადგენს ამოცანა კვაზინაწილაკების დინამიური სიდიდეებისთვის დროის ორმომენტანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის ზუსტი, განზოგადოებული, კვანტური ევოლუციური განტოლებების მიღება – საწყისი კორელაციების შესუსტების პრინციპისა და შფმ-ის გამოყენების გარეშე.

სადისერტაციო ნაშრომის მიზანს წარმოადგენს:

– მყარი სხეულების ფიზიკის ზოგიერთი კვანტური დინამიური სისტემისთვის, რომელიც ურთიერთქმედებს ფონონურ (ბოზონურ) ველთან (ელექტრონ-ფონონური სისტემა, ფროლიხის პოლარონის მოდელი,

აკუსტიკური პოლარონის მოდელი სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში, პოლარონის ფგმ), მოწესრიგებულ ოპერა-

ტორთა ფორმალიზმსა და T-ნამრავლთა ტექნიკაზე დაყრდნობით, აგრეთვე ლიუვილის სუპეროპერატორული ფორმალიზმისა და პროექციული ოპერატორის მეთოდის გამოყენებით ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებების მიღება და გამოკვლევა დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის შფმ-ის გამოყენების გარეშე.

– ამ მოდელებზე დაყრდნობით თანმიმდევრული, სრულყოფილი ელექტრონული და პოლარონული გამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის კვანტური თეორიის აგება ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში დაფუძნებული კუბოს წრფივი გამოძახილისა და შეშფოთების თეორიაზე. გადატანის მექანიკური (კინეტიკური) კოეფიციენტების (ელექტროგამტარობა, ძვრადობა) გამოთვლა კვანტური დისიპაციური სისტემების ზემოთმითითებული მოდელებისთვის.

ძირითადი შედეგები და მეცნიერული სიახლე

წარმოდგენილ სადისერტაციო ნაშრომში გადაწყვეტილია შემდეგი ამოცანები:

– მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმისა და T-ნამრავლთა ტექნიკის დახმარებით, საწყისი კორელაციების შესუსტების პრინციპისა და შფმ-ის გამოყენების გარეშე, გამოყვანილია და გამოკვლეულია ახალი, ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები გამორიცხული ბოზონური (ფონონური) ამპლიტუდებით დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური და გრინის ფუნქციებისთვის დინამიური ქვესისტემისთვის, რომელიც ურთიერთქმედებს ბოზონურ თერმოსტატთან. ასეთივე სახის კვანტური კინეტიკური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისათვის მიღებულია ლიუვილის სუპეროპერატორული ფორმალიზმისა და პროექციული ოპერატორის მეთოდის დახმარებით.

– დინამიური ქვესისტემის ბოზონურ (ფონონურ) თერმოსტატთან ურთიერთქმედების ჰამილტონიანის მიხედვით, შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში მიღებულია ახალი, განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები გამორიცხული ბოზონური ამპლიტუდებით,

ქვესისტემის დროის ორმოქმენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის – როგორც მარკოვისეული, ისე არამარკოვისეული ფორმით – რომელთა დაჯახებითი ინტეგრალები შეიცავენ ცხადად გამოყოფილ საწყისი კორელაციების ევოლუციურ წევრებს.

– კუბოს წრფივი რეაქციისა და შეშფოთების თეორიის ფარგლებში, ნახევარგამტარებისა და იონური კრისტალებისთვის აგებულია ელექტრონული და პოლარონული დაბალსიხშირული გამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის თანმიმდევრული, კორექტული კვანტური თეორია, დაფუძნებული კვანტური დისიპაციური სისტემების ზემოთმითითებული მოდელებისთვის განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებზე კორელაციური ფუნქციებისათვის “დენი-დენზე” ელექტრონისა და პოლარონისათვის, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონებთან შფმ-ის გამოყენების გარეშე.

– მიღებულია და გამოკვლეულია ანალიზური გამოსახულებები ელექტრონისა და პოლარონის რელაქსაციური მახასიათებლებისთვის (იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე და სხვ.); გამოთვლილია წონასწორული კორელაციური ფუნქციების – “დენი-დენზე” – მიღების დეკრემენტები. ნაპოვანია ელექტროგამტარობის ტენზორის ანალიზური სახე ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის კრისტალის დაბალი ტემპერატურებისა და დაბალსიხშირული გარეშე ელექტრული ველების შემთხვევაში და გამოთვლილია გადატანის მექანიკური კოეფიციენტები (ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) კვანტური დისიპაციური სისტემების აღნიშნული მოდელებისთვის; ნაპოვანია აგრეთვე “ $\frac{3 K_B T}{2 \hbar \omega_0}$ -პრობლემის”

ნაწილობრივი გადაწყვეტა ფროლიხის პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის თეორიაში.

– მიღებულია ტემპერატურული შესწორებები ელექტრონისა და პოლარონის დრეიფულ ძვრადობებზე, რომლებიც განპირობებულია საწყისი კორელაციების ევოლუციური წევრების არსებობით კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებში წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის “სინქარე-სინქარეზე” (“იმპულსი-იმპულსზე”) ელექტრონისა და პოლარონისთვის. დადგენილია, რომ ეს შესწორებები წარმოადგენენ მცირე

სიდიდეებს შესრულებული მიახლოებებისა და განხილული თეორიის ფარგლებში.

სადისერტაციო ნაშრომის პრაქტიკული მნიშვნელობა:

ნაშრომში დასმული ამოცანების გადაწყვეტამ მოითხოვა არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკის ზოგიერთი მეთოდის შემდგომი განვითარება. მიღებული ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის შესაძლებელია გამოყენებული იქნას გადატანის მოვლენების განსახილველად და გამოსაკვლეველად - კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიის ფარგლებში, საწყისი კორელაციების შესუსტების პრინციპისა და შფამის დაშვებების გარეშე - მყარი სხეულების და კონდენსირებულ გარემოთა ფიზიკის დინამიურ ქვესისტემათა სხვა მოდელთათვის (კვანტური დისიპაციური სისტემებისთვის), რომლებიც ურთიერთქმედებენ ბოზონურ ველთან (თერმოსტატთან). (მაგ. ბროუნის კვანტური ნაწილაკის მოძრაობის შესასწავლად, რომელიც განიხილება როგორც წრფივი, მიღვევადი ჰარმონიული ოსცილატორი, და რომლის დინამიკა აღიწერება კალდერა-ლეგეტის მიკროსკოპული მოდელური ჰამილტონიანით).

ნაშრომში განვითარებული ფორმალიზმი, მეთოდები და მიღებული კინეტიკური განტოლებები მარტივად შესაძლებელია განვრცობილი იქნას კინეტიკური მოვლენების შესასწავლად და გადატანის მექანიკური კოეფიციენტების (მაგ. ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) გამოსათვლელად: ელექტრონების ურთიერთქმედებისას (გაბნევისას) არაპოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე, პიეზოელექტრულ ფონონებზე, აგრეთვე სხვა დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის მოდელთათვის (მაგ. აკუსტიკური პოლარონის მოდელისთვის - ელექტრონის ფონონებთან ძლიერი ურთიერთქმედების შემთხვევაში). გამოყვანილი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის კვანტური დინამიური ქვესისტემისთვის, რომელიც ურთიერთქმედებს ფონონურ ველთან, შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას ნორმალური (არაზე-გამტარი) მეტალების ელექტროწინააღმდეგობის გამოსათვლელად ელექტრონების გაბნევისას აკუსტიკურ ფონონებზე. ნაშრომში წარმოდგენილი ფორმალიზმის დახმარებით შესაძლებელია ტემპერატურული შესწორე-

ბების პოვნა მეტალთა ელექტროწინაღობისთვის (შესწორებები ბლოხ-გრუნაიზენის ფორმულაში), რომლებიც აგრეთვე განპირობებულია ელექტრონების ფონონებთან ურთიერთქმედებისას საწყისი კორელაციების გათვალისწინებით.

სადისერტაციო ნაშრომში მიღებული ძირითადი თეორიული შედეგების პრაქტიკული მნიშვნელობა (ღირებულება) განისაზღვრება აგრეთვე იმით, რომ უკანასკნელ წლებში სამეცნიერო ლიტერატურაში გამოქვეყნდა მრავალი თეორიული ნაშრომი, რომელიც შეეხება ბოზონურ ველთან (თერმოსტატთან) ურთიერთქმედებაში მყოფი კვანტური დინამიური სისტემის კინეტიკის საკითხებს, სადაც განიხილება მსგავსი ფორმალიზმი და მეთოდები, რომელიც განვითარებულია ავტორის მიერ წარმოდგენილ ნაშრომში.

**თავი I. დინამიური სისტემები, რომლებიც ურთიერთქმედებენ
თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან)**

უკანასკნელი ათწლეულების განმავლობაში არსებითად გაიზარდა ინტერესი იმ დინამიური სისტემების შესწავლაში, რომლებიც ურთიერთქმედებაში იმყოფებიან თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან) [1]. ამასთან ერთად დიდი ყურადღება ეთმობოდა იმ პროცესების დეტალურ შესწავლას, რომლებიც მიმდინარეობდნენ იმ მცირე სისტემებში, რომლებიც ურთიერთქმედებდნენ როგორც სუსტად, აგრეთვე ძლიერად თერმოდინამიკურ წონასწორობაში მყოფ დიდი თავისუფლების ხარისხის მქონე სისტემასთან – თერმოსტატთან. ძირითადი მეთოდი, რომლის საშუალებითაც ხდებოდა ამ პროცესების გამოკვლევა ეყრდნობოდა მიდგომებს, რომლებიც განვითარებული იყო არაწონასწორულ სტატისტიკურ მექანიკაში და სტოქასტიკური (შემთხვევითი) პროცესების თეორიაში [1-2].

უკანასკნელ პერიოდში, მკაცრი მიდგომების განვითარებამ არაწონასწორულ სტატისტიკურ მექანიკაში შესაძლებელი გახადა ჩამოყალიბებულიყო საკმაოდ სრული და მკაცრი მათემატიკური თეორია არაწონასწორული მოდელური სისტემებისა [3]. ღია არაწონასწორული მოდელური სისტემების (ღია სისტემა წარმოადგენს მცირე ქვესისტემას, რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან) სრულყოფილი მათემატიკური თეორიის შექმნა წარმოადგენს შედარებით უფრო მარტივ და პერსპექტიულ პრობლემას (ამოცანას) არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკისა [3-4].

არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკის და ფიზიკური კინეტიკის პრობლემათა ფართო წრე დაკავშირებულია იმ მოდელური ჰამილტონიანების შესწავლასთან, როდესაც დინამიური ქვესისტემა s ურთიერთქმედებს Σ თერმოსტატთან, რომელიც აღიწერება ბოზონური ველით; თანაც, როგორც წესი, ურთიერთქმედება აიღება წრფივი თერმოსტატის (ბოზე) ოპერატორების (ამპლიტუდების) მიხედვით. ზოგად შემთხვევაში, მთლიანი $(s+\Sigma)$ სისტემის ჰამილტონიანი შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$H(t,s,\Sigma) = \Gamma(t,s) + H_{\Sigma} + H_{\text{int}}(t) \tag{1.1}$$

სადაც: $\Gamma(t,s)$ არის s ქვესისტემის საკუთარი ჰამილტონიანი;

H_{Σ} - თერმოსტატის (ბოზონური ველის) ჰამილტონიანია, ხოლო

H_{int} წარმოადგენს ურთიერთქმედების ჰამილტონიანს s ქვესისტემისა Σ თერმოსტატთან.

s ქვესისტემის ურთიერთქმედებისას ბოზონურ ველთან H_{int} -ს აქვს შემდეგი სახე:

$$H_{\text{int}}(t) = \sum_k [C_k(t,s)b_k + C_k^+(t,s)b_k^+]. \quad (1.2)$$

ოპერატორები, რომლებიც ფიგურირებენ (1.1) და (1.2) გამოსახულებებში არიან ჩვეულებრივ შრედინგერისეულ წარმოდგენაში ჩაწერილი დინამიური ცვლადები. b_k და b_k^+ წარმოადგენენ თერმოსტატის ბოზე ამპლიტუდებს – გაქრობისა და დაბადების ოპერატორებს ჩაწერილს მეორადი დაკვანტვის წარმოდგენაში. ბოზონურ ველთან ურთიერთქმედების შემთხვევაში: $H_{\Sigma} = \sum_k \hbar\omega(k)b_k^+b_k$ წარმოადგენს ბოზონური ველის საკუთარ ჰამილტონიანს. k – არის იმ კვანტური რიცხვების ერთობლიობა, რომლებიც აღწერენ s ქვესისტემის ურთიერთქმედებას Σ თერმოსტატთან და თვით თერმოსტატის მდგომარეობას. უნდა აღინიშნოს, რომ s დინამიური ქვესისტემის ოპერატორების ცხადი სახე არსად არ კონკრეტდება.

გამოკვლევათა ძალიან დიდი რაოდენობა მიძღვნილია კინეტიკურ მოვლენებისადმი და პროცესებისადმი, რომლებიც მიმდინარეობენ კვანტურ დინამიურ სისტემებში, რომლებიც ურთიერთქმედებენ თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან) და აღიწერებიან (1.1-1.2) ჰამილტონიანით [1-21].

განვიხილოთ ახლა თანამედროვე ფიზიკის თვალსაზრისით ზოგიერთი აქტუალური და მნიშვნელოვანი მაგალითები, რომლებიც ფართო შესწავლის საგანი გახდა სტატისტიკური ფიზიკის, მყარი სხეულებისა და კონდენსირებულ გარემოთა ფიზიკის, გამოსხივების თეორიის და სხვ. - კვანტური დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ თერმოსტატთან.

1.1. კვანტური დისიპაციური და ღია არაწონასწორული მოდელური სისტემები
(ზოგიერთი მაგალითი)

1.1.1. ფერმიონული სისტემა

ქვესისტემა s წარმოადგენს არაურთიერთქმედ ფერმიონთა სისტემას, რომლებიც ხასიათდებიან ფერმი ამპლიტუდებით და ადგილი აქვს შემდეგ თანაფარდობებს:

$$\Gamma(t,s) = \sum_{(f)} \Lambda(f) a_f^+ a_f; \quad C_k(t,s) = \frac{e^{\varepsilon t}}{\sqrt{V}} L_k \sum_{(f)} a_{f+k}^+ a_f$$

$$C_k^+(t,s) = \frac{e^{\varepsilon t}}{\sqrt{V}} L_k^* \sum_{(f)} a_f^+ a_{f+k} = \frac{e^{\varepsilon t}}{\sqrt{V}} L_k^* \sum_{(f)} a_{f-k}^+ a_f, \quad (1.3)$$

სადაც L_k, L_k^* წარმოადგენენ “C-სიდიდეებს”. ვინაიდან ფერმიონებს გააჩნიათ სპინი, (1.3) გამოსახულებებში $f \equiv (\vec{f}, \sigma)$ და \vec{f} მიეკუთვნება კვაზიმომენტუმულ სპექტრს (σ - წარმოადგენს სპინის აღმნიშვნელ მაჩვენებელს). სიმბოლო $(f+k)$ წაიკითხება როგორც $(f+k) \equiv (\vec{f} + \vec{k}, \sigma)$; შესაძლებელია აგრეთვე განხილული იქნას შემთხვევა, როდესაც ფერმიონები ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან. მაშინ $\Gamma(t,s)$ ჰამილტონიანში გათვალისწინებული უნდა იქნას აგრეთვე დამატებითი წევრები, რომლებიც აღწერენ ფერმიონებს შორის ურთიერთქმედებას და მათ ურთიერთქმედებას გარეშე ველებთან. უნდა აღინიშნოს, რომ ასეთი სახის დინამიური სისტემების განხილვამდე მივყავართ ამოცანებს, რომლებიც მოითხოვენ მეტალთა ელექტროგამტარობის განსაზღვრას, ზეგამტარობის მოვლენის ახსნას და სხვ. [14-15].

1.1.2. თხევადი მეტალის ან შენადნობის მოდელი

მრავალკომპონენტიანი თხევადი მეტალის ან შენადნობის ჰამილტონიანი შესაძლებელია ჩაწეროს შემდეგი სახით [9]:

$$H = \Gamma(t,s) + H_{\text{int}}; \quad H_{\text{int}} = \sum_{l=1}^M \sum_k C_{l\bar{k}}(t,s) \delta\rho_{l\bar{k}}$$

$$C_{l\bar{k}}^+(t,s) = C_{l,-\bar{k}}(t,s); \quad \delta\rho_{l\bar{k}} = N_l^{-1} \sum_{j=1}^{N_l} e^{-i\vec{k}\vec{R}_j} - \delta_{\bar{k},0}$$

$$\delta\rho_{l\bar{k}}^* = \delta\rho_{l,-\bar{k}}. \quad (1.4)$$

აქ s წარმოადგენს ელექტრონული სისტემის მაჩვენებელს, $\Gamma(t,s)$ არის ელექტრონული სისტემის საკუთარი ჰამილტონიანი, რომელიც ზოგად შემთხვევაში შეიცავს

ელექტრონ-ელექტრონული ურთიერთქმედების წევრებსაც; H_{int} წარმოადგენს ელექტრონულ და იონურ სისტემებს შორის ურთიერთქმედების ჰამილტონიანს, l არის იონური სისტემის მაჩვენებელი, $1 \leq l \leq M$; M - კომპონენტების რიცხვია; R_{lj} წარმოადგენს l -ური კომპონენტის j -ური იონის კოორდინატას; $\delta\rho_{\vec{k}}$ არის l -ური კომპონენტის კოლექტიური კოორდინატი, ხოლო N_l არის l -ური კომპონენტის იონთა რიცხვი: აჯამვა \vec{k} სიმბოლოთი ხორციელდება კვაზიდიკრეტული სპექტრის მიხედვით. V -კი წარმოადგენს სისტემის მოცულობას. მაგალითად, არაურთიერთქმედი ელექტრონების მოდელისთვის, რომლებიც იმყოფებიან გარეშე ელექტრონულ ველში $\vec{E}(t)$ დაძაბულობით, ერთელექტრონიან ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე:

$$H = T(\vec{p}) - e\vec{E}(t) \cdot \vec{r} + V(\vec{r}); \quad V(\vec{r}) = \sum_{l=1}^M \sum_{j=1}^{N_l} v_l(\vec{r} - \vec{R}_{lj}),$$

სადაც: e - ელექტრონი მუხტია, $T(\vec{p})$ - წარმოადგენს ენერგიას (მაგალითად, $T(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, m - ელექტრონი მასაა), \vec{r} და \vec{p} არის ელექტრონის კოორდინატი და იმპულსი. $V(\vec{r})$ - ელექტრონის იონებთან ურთიერთქმედების პოტენციალია, ხოლო $v_l(\vec{r} - \vec{R}_{lj})$ წარმოადგენს ელექტრონის ურთიერთქმედების პსევდოპოტენციალს l -ური კომპონენტის j -ურ იონთან. ამ შემთხვევაში ჩვენ გვექნება:

$$\Gamma(t, s) = \varepsilon(\vec{p}) - e\vec{E}(t) \cdot \vec{r}; \quad \varepsilon(\vec{p}) = T(\vec{p}) + \overline{V(\vec{r})}$$

$$\overline{V(\vec{r})} = \sum_{l=1}^M C_l \tilde{v}_l(0); \quad \tilde{v}_l(\vec{k}) = n \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} v_l(\vec{r})$$

$$C_l = N_l / N; \quad \sum_{l=1}^M C_l = 1; \quad v_l^*(\vec{r}) = v_l(\vec{r}); \quad n = N/V$$

$$C_{l\vec{k}}(t, s) = e^{i\vec{k}\vec{r}} C_l \tilde{v}_l(\vec{k}).$$

თხევადი მეტალის ან შენადნობის მოდელში, რომელიც აღიწერება (1.4) ჰამილტონიანით, იონური სისტემა განიხილება როგორც კლასიკური და აღიწერება კოლექტიური ცვლადით $\delta\rho_{\vec{k}}$. თხევადი მეტალის მოდელისათვის იონური სისტემის კონფიგურაციების მიხედვით გასაშუალოება დაფუძნებულია $\tilde{f}\{\rho_{\vec{k}}\}$ კოლექტიური ცვლადებით გაუსის განაწილების ფუნქციით გასაშუალოებაზე, რომლისთვისაც სამართლიანია შემდეგი ფორმულა:

$$\left\langle \exp \left\{ \sum_{i=1}^M \alpha_{i\vec{k}} \delta \rho_{i\vec{k}} \right\} \right\rangle_{\vec{f}} = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{e,m=1}^M \sum_{\vec{k}} \alpha_{e,-\vec{k}} \alpha_{m\vec{k}} \langle \delta \rho_{e\vec{k}}^* \cdot \delta \rho_{m\vec{k}} \rangle_{\vec{f}} \right\}.$$

აქ $\langle \dots \rangle_{\vec{f}} \equiv \int \prod_{l=1}^M \prod_{\vec{k}} d\delta \rho_{l\vec{k}} \tilde{f}(\{\delta \rho_{l\vec{k}}\}) \dots$; სადაც $\alpha_{i\vec{k}}$ წარმოადგენს l და \vec{k} -ს ნებისმიერ ფუნქციას და ადგილი აქვს შემდეგ თანაფარდობებს:

$$\langle \delta \rho_{i\vec{k}}^* \cdot \delta \rho_{i\vec{k}} \rangle_{\vec{f}} = \frac{1}{C_l N} s_{ll}(k) = \frac{1}{C_l N} \left[1 + C_l n \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} (g_{ll}(\vec{r}) - 1) \right].$$

$$\langle \delta \rho_{i\vec{k}}^* \cdot \delta \rho_{m\vec{k}} \rangle_{\vec{f}} = \frac{1}{N} s_{lm}(k) = \frac{n}{N} \int d\vec{r} (g_{lm}(r) - 1) e^{-i\vec{k}\vec{r}} : l \neq m,$$

სადაც $g_{lm}(r)$ წარმოადგენს რადიალური განაწილების ფუნქციებს:

$$g_{lm}(r) = g_{lm}(|R_{li} - R_{mj}|),$$

ხოლო $s_{lm}(k)$ სიდიდეები წარმოადგენს იონური სისტემის სტრუქტურულ ფაქტორებს: $s_{lm}(k) = s_{ml}(k)$, $s_{lm}^*(k) = s_{lm}(k)$. სტრუქტურული ფაქტორები იძლევიან სრულ ინფორმაციას თხევადი მეტალის ან შენადნობის იონური სისტემის შესახებ, რომლებიც აიღება ექსპერიმენტული მონაცემებიდან. უნდა აღინიშნოს, რომ მოდელის სრული ფორმულირებისათვის აუცილებელია იონების R_j შემთხვევითი კოორდინატების განაწილების ფუნქციის მითითება, რომლის მიხედვითაც ხდება გასაშუალოება. თხევადი მეტალის ან შენადნობის აღნიშნული მოდელი ხშირად გამოიყენება მეტალების, შენადნობებისა და გადაცივებული “მეტალური მინების” კვანტურ ელექტრონულ თეორიაში, რომლებიც დაფუძნებულია ამ ნივთიერებათა ატომურ და სტრუქტურულ თავისებურებებზე [9].

1.1.3. ნაწილაკი, რომელიც ურთიერთქმედებს გარემოსთან

ამ მოდელში განიხილება ქვესისტემა s (გამოყოფილი ნაწილაკი), რომელიც ურთიერთქმედებაში იმყოფება სხვა ნაწილაკებისაგან შედგენილ გარემოსთან. ასეთი სისტემის ჰამილტონიანს აქვს სახე:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2M_i} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N).$$

აქ: m და \vec{p} წარმოადგენს მასასა და იმპულსს გამოყოფილი ნაწილაკისა; M_i და \vec{p}_i არიან მასები და იმპულსები გარემოს ნაწილაკებისა. \vec{r}_i – გარემოს ნაწილაკთა რადიუს-ვექტორებია, U წარმოადგენს მთელი სისტემის ნაწილაკთა ურ-

თიერთქმედების პოტენციურ ენერგიას, ხოლო \vec{r} – გამოყოფილი ნაწილაკის რადიუს-ვექტორია.

საწყისი ჰამილტონიანი შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი ფორმით:

$$H = \Gamma(s) + H_{\Sigma} + H_{\text{int}},$$

სადაც:

$$\begin{aligned} \Gamma(s) &\equiv H_s = \frac{\vec{P}^2}{2m} + (e^{\vec{U}\vec{\nabla}} - 1) \langle U(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) \rangle_{\Sigma} \\ H_{\Sigma} &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{P}_i^2}{2M_i} + U(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) \\ H_{\text{int}} &= (e^{\vec{U}\vec{\nabla}} - 1) [U(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) - \langle U(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) \rangle_{\Sigma}]. \end{aligned} \quad (1.5)$$

ჰამილტონიანის ასეთი სახით წარმოდგენისას იგულისხმება, რომ განსახილველ გამოყოფილ ნაწილაკს გააჩნია წონასწორული მდებარეობა რადიუს-ვექტორით \vec{r}_0 რაღაც საშუალო ველში, რომელიც განპირობებულია გარემოს ნაწილაკებთან ურთიერთქმედებით და U - პოტენციალური ენერგია გაშლილია უსასრულო მწკრივად ნაწილაკის \vec{u} წანაცვლების მიხედვით წონასწორული მდებარეობიდან: $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{u}$; $U(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) = e^{\vec{U}\vec{\nabla}} U(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)$ ($\vec{\nabla}$ - წარმოადგენს გრადიენტის ოპერატორს გამოყოფილი ნაწილაკის კოორდინატების მიხედვით).

ამრიგად, გამოყოფილი ნაწილაკი, რომელიც იმყოფება საშუალო ველში (H_s ჰამილტონიანი), განიცდის ამ საშუალო ველის ფლუქტუაციების ზემოქმედებას (H_{int} ჰამილტონიანი). სიმბოლო $\langle \dots \rangle$ (1.5) ფორმულაში აღნიშნავს გასაშუალოებას გარემოს მდგომარეობათა მიხედვით. თუ გავშლით \vec{u} წანაცვლებას ნორმალური კოორდინატების მიხედვით: $\vec{u} = \sum_{\chi} \vec{\alpha}_{\chi} a_{\chi} + \vec{\alpha}_{\chi}^* a_{\chi}^+$ და გამოვიყენებთ ფორმულას:

$$e^{\vec{U}\vec{\nabla}} \approx \vec{u}\vec{\nabla} = \sum_{\chi} (\vec{\alpha}_{\chi} a_{\chi} + \vec{\alpha}_{\chi}^* a_{\chi}^+) \vec{\nabla} \quad (\text{რაც შეესაბამება ნაწილაკის მხოლოდ წრფივი}$$

ურთიერთქმედების გათვალისწინებას გარემოსთან, რომელიც აღიწერება H_{int} - ჰამილტონიანით), და დავიყვანთ დიაგონალურ სახეზე H_s ჰამილტონიანის იმ ნაწილს, რომელიც კვადრატულია \vec{u} წანაცვლების მიხედვით, მაშინ შესაძლებელია (1.5) ჰამილტონიანი წარმოვადგინოთ (1.1) ფორმით. სიმბოლოები χ აღნიშნავს გამოყოფილ ოსცილატორებს, ხოლო a_{χ} და a_{χ}^+ წარმოადგენენ გაქრობისა და დაბადების ოპერატორებს χ ოსცილატორებისა. ამრიგად s ქვესისტემის როლში გვექნება ოსცილატორების ერთობლიობა ჰამილტონიანით $H_s = \sum_{\chi} \omega_{\chi} a_{\chi}^+ a_{\chi}$, სადაც

ω_χ არის χ ოსცილატორის სიხშირე. თუ გავშლით $U(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ პოტენციურ ენერგიას წანაცვლებების - $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_N$ მიხედვით მწკრივად, მაშინ გარემოს ჰამილტონიანი H_Σ შესაძლებელია წარმოვადგინოთ აგრეთვე როგორც ოსცილატორების ერთობლიობა (რასაკვირველია, ამ შემთხვევაშიც უნდა გამოვიყენოთ შესაბამისი მიახლოებები). გარემოს ნაწილაკთა რადიუს-ვექტორებისთვის გვექნება: $\vec{r}_i = \vec{r}_{i0} + \vec{u}_i$ ($i=1, 2, \dots, N$), სადაც, \vec{r}_{i0} - წარმოადგენს გარემოს ნაწილაკთა წონასწორული მდებარეობების შესაბამის რადიუს-ვექტორებს.

სამეცნიერო ლიტერატურაში ხშირად განიხილება მაგალითი კვანტური ოსცილატორისა, რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან) [6]. ასეთი სისტემის ჰამილტონიანისთვის გვაქვს გამოსახულება:

$$H = \Gamma(t, s) + H_\Sigma + H_{\text{int}},$$

სადაც:
$$\Gamma(t, s) = \hbar\omega_0 a^+ a + \hbar[f^*(t)a + f(t)a^+]; \quad H_\Sigma = \sum_k \hbar\omega(k) b_k^+ b_k;$$

$$H_{\text{int}} = \sum_k [C_k(t, s)b_k + C_k^+(t, s)b_k^+]; \quad C_k(t, s) = \hbar\lambda_k a^+ + \hbar\nu_k a;$$

$C_k^+(t, s) = \hbar\lambda_k^* a + \hbar\nu_k^* a^+$ და კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორი იმყოფება გარეშე, ცვლადი კლასიკური ძალის მოქმედების ქვეშ, რომელიც წრფივად დაკავშირებული (ურთიერთქმედებს) თერმოსტატთან - არაურთიერთქმედი კვანტური ოსცილატორების სისტემასთან. a, a^+, b_k, b_k^+ არიან გაქრობის და დაბადების ბოზე ოპერატორები, $\lambda_k, \lambda_k^*, \nu_k, \nu_k^*$ წარმოადგენენ ურთიერთქმედების მუდმივებს, რომლებიც პროპორციული არიან $\frac{1}{\sqrt{V}}$ სიდიდისა, სადაც: V - სისტემის მოცულობაა, \vec{k} ტალღური ვექტორია, რომელიც იღებს კვაზიდისკრეტულ მნიშვნელობებს, $f(t)$ არის ცვლადი კლასიკური გარეშე ძალა, ხოლო ω_0, ω_k - ოსცილატორების სიხშირეებია.

ასეთი სახის დინამიურ სისტემებს ვხვდებით ზოგიერთი ამოცანების განხილვისას კვანტური რადიოფიზიკიდან, მყარი სხეულებისა და კონდენსირებულ გარემოთა ფიზიკიდან და სხვ. მაგალითების სახით შესაძლებელია მოვიყვანოთ სისტემები, რომლებიც შედგებიან ატომებისა და მოლეკულებისაგან და იმყოფებიან ლაზერის ტალღის ველში მყარ სხეულებში ან აირებში, რომლებიც თამაშობენ თერმოსტატის როლს [7-8, 10-12].

1.1.4. ელექტრონ-მინარევეული სისტემა

ეს მოდელი წარმოადგენს სისტემას, რომელიც შედგება ელექტრონებისაგან, რომლებიც ურთიერთქმედებენ გარემოში შემთხვევით განლაგებულ მინარევეული ცენტრებთან და გარეშე ელექტრულ ველთან, რომლის დაძაბულობაა - $\vec{E}(t)$. ასეთი სახის მოდელი აღიწერება შემდეგი ჰამილტონიანით:

$$H = \Gamma(t, s) + H_{\text{int}}; \quad \Gamma(t, s) = H_s - e\vec{E}(t) \cdot \vec{r};$$

$$H_s = \frac{\vec{P}^2}{2m}; \quad H_{\text{int}} = \sum_{l=1}^{N_{\Pi}} \varphi_e \equiv \sum_{l=1}^{N_{\Pi}} \varphi(\vec{r} - \vec{r}_l), \quad (1.6)$$

სადაც: e, m, \vec{r}, \vec{p} შესაბამისად წარმოადგენენ ელექტრონის მუხტს, მასას, რადიუს-ვექტორს და იმპულსს. $\varphi(\vec{r} - \vec{r}_l)$ არის ელექტრონის ურთიერთქმედების ენერგია მინარევეულ ცენტრთან, რომელიც იმყოფება წერტილში, რომლის რადიუს-ვექტორია \vec{r}_l , ხოლო N_{Π} - მინარევეული ცენტრების რიცხვია. ხშირად განიხილავენ უფრო ზოგად მოდელს ელექტრონ-მინარევეული სისტემისა, რომლის ჰამილტონიანი ჩაიწერება შემდეგი სახით [22]:

$$H = \Gamma(s) + H_e + H_{\Sigma} + H_{\text{int}}, \quad (1.7)$$

სადაც: $H_{\text{int}} = H_{ie} + H_{e\Sigma}$; $H_{e\Sigma} = \sum_{e=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ წარმოადგენს N ელექტრონების

ჰამილტონიანს, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან კულონური ძალით, \vec{r}_i და \vec{p}_i არის i -ური ელექტრონის კოორდინატა და იმპულსი მასათა ცენტრის მიმართ და $\Gamma(s), H_{ie}, H_{e\Sigma}$ მოიცემა შემდეგი ფორმულებით:

$$\Gamma(s) = \frac{\vec{P}^2}{2Nm} - N\vec{E}\vec{R}; \quad H_{ie} = \sum_{\vec{q}, a} U(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{R}a}$$

$$H_{e\Sigma} = \sum_{\vec{q}, \lambda} M(\vec{q}, \lambda) \Phi_{\vec{q}, \lambda} \rho_{\vec{q}}. \quad (1.8)$$

(1.8) ფორმულებში H_{ie} და $H_{e\Sigma}$ - ელექტრონის ურთიერთქმედების ჰამილტონიანებია მინარევეთან და ფონონურ ველთან; $\Gamma(s)$ წარმოადგენს ელექტრონული სისტემის მასათა ცენტრის ჰამილტონიანს (\vec{P} და \vec{R} - მასათა ცენტრის იმპულსი და კოორდინატა შესაბამისად), ხოლო $\rho_{\vec{q}} = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_i}$ არის ელექტრონების სიმკვრივის ოპერატორის ფურიე სახე (წარმოდგენა); $\Phi_{\vec{q}, \lambda} = b_{\vec{q}, \lambda} + b_{-\vec{q}, \lambda}^+$ ფონონური ველის ოპერატორია; $b_{\vec{q}, \lambda}, b_{-\vec{q}, \lambda}^+$ - ფონონების გაქრობის და დაბადების ოპერატორებია ტალღური ვექტორით \vec{q} , λ წარმოადგენს ფონონური სპექტრის

შტოს, $M(\vec{q}, \lambda)$ - ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების მატრიცული ელემენტებია, $U(\vec{q})$ - მინარევთა პოტენციალის ფურიე სახეა, ϵ_0 - დიელექტრიკული შეღწევადაობაა, ხოლო \vec{R}_a - a -ური მინარევული ცენტრის კოორდინატია. (1.7) და (1.8) ფორმულები ფაქტიურად წარმოადგენენ N -ურთიერთქმედი ელექტრონებისა და N_{II} - შემთხვევით განლაგებული მინარევული ცენტრების მოდელურ ჰამილტონიანს, რომლებიც იმყოფებიან \vec{E} დაძაბულობის მქონე გარეშე ელექტრულ ველში და ურთიერთქმედებენ თერმოსტატთან, რომელიც აღიწერება ფონონური (ბოზონური) ველის H_{Σ} ჰამილტონიანით.

მოდელური ჰამილტონიანები (1.6)–(1.8) ხშირად გამოიყენება მოუწესრიგებელი სისტემების სპექტრალური და კინეტიკური მახასიათებლების შესწავლისას და გამოკვლევისას. ზემოთმითითებული ჰამილტონიანების შესწავლაში მივყავართ ელექტრონული გადატანის მოვლენების თეორიის მრავალ ამოცანას (როგორც წრფივს, ასევე არაწრფივს) მყარ სხეულებში; ზოგიერთ საკითხს სუსტი და ძლიერი ლოკალიზაციის თეორიისა, მოუწესრიგებელი სისტემების ელექტროგამტარობის თეორიის სხვადასხვა ამოცანებს და სხვ. [22-23].

1.1.5. დიკუს მოვლენები გამოსხივების თეორიაში

ამ სისტემებში უმარტივესი მოდელური ჰამილტონიანი აღწერს ქვესისტემის ურთიერთქმედებას ფოტონებთან (ფოტონურ ველთან). ურთიერთქმედების ჰამილტონიანი აიღება წრფივი ფოტონების (ბოზე) ოპერატორების მიხედვით. ამ მოდელის ფარგლებში განიხილება N რადიონობის ორი ენერგეტიკული დონის მქონე (ორდონიანი) გამომსხივებლები, რომელთა სიხშირეა Ω . უშვებენ, რომ გამომსხივებლები ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან მხოლოდ ველის საშუალებით. როგორც ცნობილია, ასეთი სახის ჰამილტონიანი პირველად შემოღებული იყო ატომთა სპონტანური კოჰერენტული გამოსხივების მოვლენის აღსაწერად.

თუ უგულვებელყოფთ კინეტიკურ ეფექტებს, რომლებიც განპირობებულია გამომსხივებელთა მოძრაობით, გაცვლითი და ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედებებით და აღვწერთ გამომსხივებელთა დიპოლურ ურთიერთქმედებას ელექტრომაგნიტურ ველთან “მბრუნავი ტალღის” მიახლოებაში, მაშინ მივიღებთ მოდელს, რომელიც აღიწერება ჰამილტონიანით [10-11]:

$$H(t, s, \Sigma) = \Gamma(s) + H_\Sigma + H_{\text{int}}(t, s, \Sigma),$$

სადაც:

$$\Gamma(s) = \hbar \Omega S_0^z; \quad H_\Sigma = \sum_k \hbar \omega(k) b_k^+ b_k^- \quad (1.9)$$

$$H_{\text{int}}(t, s, \Sigma) = \frac{e^{\varepsilon t}}{\sqrt{V}} \sum_k g_{\vec{k}} S_{\vec{k}}^- b_{\vec{k}}^+ + \frac{e^{\varepsilon t}}{\sqrt{V}} \sum_k g_{\vec{k}}^* S_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}^-$$

და გამომსხივებელი სისტემის სპინური ოპერატორები S , დაკავშირებულია პაულის მატრიცებთან სტანდარტული თანაფარდობებით:

$$S_k^\pm = \sum_j S_j^\pm e^{\pm i \vec{k} \vec{r}_j}; \quad S_k^z = \sum_j S_j^z e^{\pm i \vec{k} \vec{r}_j};$$

$$S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y; \quad S_j^{(x,y,z)} = \frac{1}{2} \sigma_j^{(x,y,z)}$$

აქ: \vec{r}_j არის j -ური გამომსხივებლის რადიუს-ვექტორი, $b_{\vec{k}}^-$ და $b_{\vec{k}}^+$ - წარმოადგენენ ფოტონების გაქრობის და დაბადების ბოზე ოპერატორებს (ამპლიტუდებს) ტალღური ვექტორით \vec{k} , ურთიერთქმედების (ბმის) მუდმივა $g_{\vec{k}}$ დაკავშირებულია d_\pm გადასვლის დენის დადებით-სიხშირიანი ოპერატორის ფურიე-კომპონენტასთან შემდეგი თანაფარდობით:

$$g_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{2\pi \hbar^3 \omega(\vec{k})}{v}} d_\pm (\vec{e}_{\vec{k}} \cdot \vec{e}_{\vec{d}})$$

სადაც: v წარმოადგენს ნივთიერების კუთრ მოცულობას, \hbar - პლანკის მუდმივაა, ხოლო $\omega(\vec{k})$ - ფოტონის სიხშირეა. აქ: Σ თერმოსტატის როლს თამაშობს ფოტონური ველი, რომელშიც “მოთავსებულია” გამომსხივებელთა s სისტემა. ცალკე აღებული, ერთეულოვანი ურთიერთქმედების აქტის შედეგად, რომელიც ხორციელდება ელექტრომაგნიტურ ველსა და გამომსხივებელს შორის, ადგილი აქვს ფოტონური ველის კვანტის გამოსხივებას (შთანქმას), რის გამოც გამომსხივებელი გადადის ორი შესაძლო ენერგეტიკულ მდგომარეობიდან ერთ-ერთში. უნდა აღინიშნოს, რომ მოცემული მოდელისთვის შესაძლებელია აგრეთვე სხვა მიდგომა, რომლის დროსაც თერმოსტატის როლს თამაშობს გამომსხივებელთა სისტემა, ხოლო დინამიური ქვესისტემის სახით გვევლინება ბოზონური ველი [10]. საკითხი თერმოსტატისა და დინამიური სისტემის შერჩევის შესახებ წყდება იმისდა მიხედვით, თუ როგორი პროცესები განიხილება. ასე მაგალითად, მიდგომა რომელიც განხილულია [7]-ში შეესაბამება ელექტრომაგნიტური ველის რელაქსაციის პროცესების შესწავლას რეზონატორში, ხოლო მიდგომა, რომელიც გაშუქებულია [8]-ში აღწერს თავისუფალ სივრცეში გამოსხივებისას სპინური სის-

ტემის რელაქსაციის პროცესებს, რომლის დროსაც სივრცე განიხილება თერმოსტატის როლში. ხშირად განიხილავენ დიკეს ისეთ მოდელებს, რომლებიც აღიწერებიან უფრო ზოგადი ჰამილტონიანით და რომლებიც შეიცავენ აგრეთვე ორდონიანი ობიექტების კინეტიკური ენერჯის ოპერატორს [იხ. მაგ. [11,24]]. შესწავლილი იყო აგრეთვე დიკეს მოდელები, როდესაც დინამიური ქვესისტემა s (გამოსხივება) ურთიერთქმედებდა ერთდროულად Σ ატომურ და Σ_1 ფონონურ სისტემებთან [12].

აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ასეთი ტიპის დინამიურ სისტემებამდე (დიკეს მოდელებამდე) მიყვავართ მრავალი პრობლემის განხილვას კვანტური რადიოფიზიკიდან და ლაზერული გამოსხივების ფიზიკიდან, ზეგამოსხივების თეორიიდან და სხვ. ამიტომ დიკეს ტიპის მოდელები სისტემების შესწავლა და გამოკვლევა, როგორც ღია არაწონასწორული კვანტური დინამიური სისტემებისა, წარმოადგენს დიდ სამეცნიერო ინტერესს. ცხადია, რომ დიკეს მოდელების აღმწერი ჰამილტონიანები მიეკუთვნებიან (1.1) და (1.2) ფორმულებით გამოხატულ ჰამილტონიანთა კლასს.

1.1.6. ელექტრონები მაგნეტიკში, რომლებიც ურთიერთქმედებენ კრისტალის მაგნიტურ ძვესისტემასთან

ასეთი სახის დინამიურ სისტემებში განიხილება ელექტრონების ურთიერთქმედება მაგნეტიკის ატომთა სპინებთან $S-d$ მოდელების ფარგლებში [25-26]. ერთხონიან მიახლოებაში სისტემის ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე:

$$H = H_e + H_M + H_A$$

$$H_e = \sum_{\vec{\chi}\sigma} E_{\vec{\chi}} a_{\vec{\chi}\sigma}^+ a_{\vec{\chi}\sigma}; \quad H_A = \frac{2A}{N} \sum_{\substack{\vec{\chi}, \vec{\chi}' \\ \sigma, \sigma'}} a_{\vec{\chi}\sigma}^+ (\vec{S}_e \vec{S}_{n\alpha}) \sigma \sigma' a_{\vec{\chi}'\sigma'} e^{i(\vec{\chi}-\vec{\chi}')\vec{R}_{n\alpha}} \quad (1.10)$$

აქ H_e – გამტარობის ელექტრონების ჰამილტონიანია, H_A – წარმოადგენს ჰამილტონიანს, რომელიც აღწერს ელექტრონების ურთიერთქმედებას მაგნეტიკის ლოკალიზებულ სპინებთან (A – სპინ-ელექტრონული ურთიერთქმედების მუდმივა, N – მაგნიტურ ატომთა რიცხვია, \vec{S}_e – ზონური ელექტრონის სპინის ოპერატორია, $\vec{S}_{n\alpha}$ – წარმოადგენს მაგნიტური ატომის სპინის ოპერატორს, რომელიც მოთავსებულია კვანძში, რომლის რადიუს-ვექტორია $\vec{R}_{n\alpha}$; n – კვანძის ნომერია, α – ქვემესრის ნომერი). H_M – მაგნიტური ქვესისტემის ჰამილტონიანია (ჩვეულებრივ, როგორც წესი იღებენ ჰაიზენბერგის გაცვლითი ურთიერთქმედების ჰამილტონიანს

ლოკალიზებული სპინებისათვის). H_A – ჰამილტონიანში ელექტრონის სპინის $\langle S_{n\alpha} \rangle$ საშუალო სპინებთან ურთიერთქმედების განცალკევების შემდეგ, (1.10) ჰამილტონიანი შესაძლებელია ჩაიწეროს შემდეგი სახით:

$$H = H_0 + H_1 + H_M$$

$$\text{სადაც: } H_0 = \sum_{\bar{\chi}\sigma} E_{\bar{\chi}} a_{\bar{\chi}\sigma}^+ a_{\bar{\chi}\sigma} + \frac{2A}{N} \sum_{\substack{\bar{\chi}, \bar{\chi}' \\ \sigma, \sigma', n\alpha}} a_{\bar{\chi}\sigma}^+ (\bar{S}_e)_{\sigma\sigma'} a_{\bar{\chi}'\sigma'} \langle \bar{S}_\alpha \rangle e^{i(\bar{\chi}-\bar{\chi}')\bar{R}_{n\alpha}} \quad (1.11)$$

$$H_1 = \frac{2A}{N} \sum_{\substack{\bar{\chi}, \bar{\chi}' \\ \sigma, \sigma', n\alpha}} a_{\bar{\chi}\sigma}^+ (\bar{S}_e)_{\sigma\sigma'} a_{\bar{\chi}'\sigma'} (\bar{S}_{n\alpha} - \langle \bar{S}_\alpha \rangle) e^{i(\bar{\chi}-\bar{\chi}')\bar{R}_{n\alpha}}$$

თუ ჩავატარებთ კანონიკურ გარდაქმნას და გადავალთ $a_{\bar{\chi}\sigma}^+$, $a_{\bar{\chi}\sigma}$ ოპერატორებიდან ახალ C_g^+ , C_g ოპერატორებზე კრისტალის მოცემული განსაზღვრული მაგნიტური სტრუქტურის დროს, მაშინ შესაძლებელია H_0 ჰამილტონიანის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე (მაგალითად: ფერომაგნეტიკი-ორმესრიანი ანტიფერომაგნეტიკი და ა.შ.). მაგნიტური მოწესრიგებისას მაგნიტური სტრუქტურის წარმოქმნას მიყვართ ელექტრონული ზონის გახლეჩამდე ორ ზონად (ქვეზონად) [26], ისე რომ ახალი $C_g^{(+)}$ და C_g ელექტრონული ოპერატორები ხასიათდებიან კვანტური რიცხვების ერთობლიობით: $\vec{g} = (\bar{\chi}, \sigma, \nu)$ და ენერგეტიკული სპექტრით ε_g ელექტრონებისთვის (ν წარმოადგენს ქვეზონის ნომერს). მაგალითად, ასეთ შემთხვევაში აქვს ადგილი ცალკეულმა ჰელიკოიდალური სტრუქტურების შემთხვევაში, რომელთა კერძო შემთხვევაში წარმოადგენენ ფერომაგნეტიკი და ანტიფერომაგნეტიკი). ჰოლსტეინ-პრიმაკოვის გარდაქმნის გამოყენებით შესაძლებელია $S_{\bar{n},\alpha}$ სპინური ოპერატორებიდან გადავიდეთ სპინური ტალღების ოპერატორებზე და მივიღოთ ჰამილტონიანი, რომელიც აღწერს ელექტრონების ურთიერთქმედებას მაგნონებთან და რომელიც ზოგადად შეიცავს მრავალმაგნონიან (ერთმაგნონიანი, ორმაგნონიანი და ა.შ.) წევრებს. (ჰოლსტეინ-პრიმაკოვის გარდაქმნის სამართლიანობა შესაძლებელია მარტივად დავასაბუთოთ მაგნეტიკებისათვის, რომლებიც იმყოფებიან მოწესრიგებულ ფაზაში ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროს: $T < T_e$ (T_e წარმოადგენს კრიტიკულ ტემპერატურას) და დიდი სპინების მქონე ატომთა მატრიცის შემთხვევაში, როდესაც $2S \gg 1$). ზოგიერთ შემთხვევაში, როგორც წესი, შესაძლებელია შემოვიხსნათ მხოლოდ წრფივი ოპერატორული წევრებით მაგნონების

მიხედვით. ასეთ შემთხვევებში (1.10)-(1.11) ჰამილტონიანები ერთმანეთთან პროცესებისათვის მიიღებენ შემდეგ სახეს:

$$H = H_s + H_\Sigma + H_{\text{int}}$$

$$H_s = \sum_g \varepsilon(g) C_g^+ C_g; \quad H_\Sigma = \sum_k \hbar \Omega_k d_k^+ d_k \quad (1.12)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_k [B_k(s) d_k + B_k^+(s) d_k^+]; \quad B_k(s) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{g, g'} A_{g, g' k} C_g^+ C_{g'},$$

სადაც: Ω_k - k მაგნონური მოდის სიხშირეა; $(k = (\vec{k}, j))$, j - მაგნონური შტოს ნომერია, d_k, d_k^+ - მაგნონების გაქრობის და დაბადების ბოზე ოპერატორებია, ხოლო $A_{g, g' k}$ წარმოადგენს “C-სიდიდეს”.

მაგალითად, ანტიფერომაგნეტიკებში, სადაც ელექტრონების ენერგეტიკული დონეები გადაგვარებულია სპინის მიხედვით, შესაძლებელია შემოვისაზღვროთ ერთმანეთთან პროცესების განხილვით დაბალი ტემპერატურების დროს. (ორმანეთთან პროცესები, რომლებიც აღიწერება H_1 წევრით (1.11) ჰამილტონიანში, რომელიც შეიცავს $S_{n\alpha}^z - \langle S_\alpha^z \rangle$ წევრებს, წარმოადგენს მცირე სიდიდეებს, როდესაც $2S \gg 1$ და ტემპერატურა არის დაბალი. ($S - \langle \vec{S} \rangle \ll S$). ქვეშე-სერთა დამაგნიტება მიმართულია z ღერძის პარალელურად, ე.ი. $\langle S_{n_1}^z \rangle = -\langle S_{n_2}^z \rangle$; $\langle S_{n\alpha}^x \rangle = \langle S_{n\alpha}^y \rangle = 0$). შევნიშნოთ, რომ მაგნიტურ ნახევარგამტარებში $S-d$ ურთიერთქმედების A_s პარამეტრი პრინციპში არ წარმოადგენს მცირე სიდიდეს ელექტრონული ენერგეტიკული ზონის ΔE სიგანესთან შედარებით, ასე რომ ადგილი აქვს ძლიერი ურთიერთქმედების (ბმის) შემთხვევას. ამიტომ, ამ ურთიერთქმედებამ შესაძლებელია მიგვიყვანოს მაგნიტური ფლუქტუაციების და პოლარონების წარმოქმნამდე, რაც არსებით გავლენას ახდენს კრისტალის ოპტიკურ, მაგნიტურ და კინეტიკურ თვისებებზე [27-28].

ამრიგად, ჩვენს მიერ განხილული (1.12) ჰამილტონიანი ფორმალურად მიეკუთვნება (1.1)-(1.2) სახის ჰამილტონიანთა კლასს.

ამ მოკლე განხილვის შემდეგ დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან), ან უფრო ზოგადად – კვანტური, დისიპაციური და ღია არაწონასწორული მოდელური სისტემების ზოგიერთი მაგალითისა თანამედროვე ფიზიკის სხვადასხვა დარგიდან, გადავიდეთ უშუალოდ იმ დინამიური სისტემების მიმოხილვასა, შესწავლასა და გამოკვლევაზე, რომლებიც შეადგენს მოცემული სადისერტაციო ნაშრომის ძირითად შინაარს –

ელექტრონ-ფონონურ სისტემაზე და დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის მოდელებზე.

12. ელექტრონ-ფონონური სისტემა. ელექტრონის ურთიერთქმედება აკუსტიკურ და პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან

კრისტალურ მყარ სხეულებში, მაგალითად ფართოზონიან ნახევარგამტარებში, ელექტრონის ფიზიკური თვისებები, რომელიც გადაადგილდება კრისტალში, ძირითადად განისაზღვრება პერიოდული პოტენციალით, რომელსაც ქმნიან კრისტალური მესრის კვანძებში განლაგებული იონები.

იონთა რხევებს წონასწორული მდებარეობების მახლობლობაში მივყავართ ელექტრონების ენერგიების პრაქტიკულად მყისიერ ცვლილებამდე და კრისტალისათვის შრედინგერის ადიაბატური განტოლების ჰამილტონიანში, რომელიც აღწერს ელექტრონების მდგომარეობებს, დამატებითი წევრის - H_{int} -ის წარმოქმნამდე. ეს დამატებითი წევრი აღწერს ელექტრონების ურთიერთქმედებას ფონონებთან. იონების მცირე ამპლიტუდებით რხევების შემთხვევაში, ფონონური (ბოზონური) სისტემა Σ წარმოადგენს არაურთიერთქმედი ჰარმონიული ოსცილატორების ერთობლიობას. ამ სისტემის ენერგიას აქვს შემდეგი სახე: $H_{\Sigma} = \sum_k \hbar \omega(k) b_k^+ b_k$, და იგი წარმოადგენს ფონონური ველის საკუთრივ ჰამილტონიანს მეორადი დაკვანტვის წარმოდგენაში (ნულოვანი რხევები მხედველობაში არ მიიღება). რაც შეეხება ურთიერთქმედების ენერგიას - H_{int} - იგი წრფივად არის დამოკიდებული ცალკეული, აღებული ჰარმონიული ოსცილატორის ნორმალურ კოორდინატებზე.

იმ სისტემის თვისებების შესწავლა, რომელიც შედგება კვაზინაწილაკისაგან (ელექტრონისაგან) და ფონონური (ბოზონური) ველისაგან, რომელთა შორის ურთიერთქმედება არის წრფივი ფონონური ოპერატორების მიხედვით, წარმოადგენს მყარი სხეულების და კონდენსირებულ გარემოთა ფიზიკის და აგრეთვე ველის კვანტური თეორიის მეტად მნიშვნელოვან ამოცანას.

ამგვარად, ელექტრონ-ფონონური სისტემა წარმოადგენს მაგალითს ელექტრონის ურთიერთქმედებისა დაკვანტულ ფონონურ ველთან კრისტალში. ამ შემთხვევაში ქვესისტემა S შედგება ერთი კვაზინაწილაკისაგან (ელექტრონისაგან), ხოლო Σ თერმოსტატის როლში გვევლინება ფონონური ველი.

ცნობილი გამარტივებების შემდეგ, არარელატივისტური კვაზინაწილაკი (ელექტრონი), რომელიც ურთიერთქმედებს კრისტალური მესრის რხევების დაკვა-

ნტულ სკალარულ ველთან, აღიწერება ფროლის-პეკარის ტიპის ჰამილტონიანით [29-31]:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \left[V_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} b_{\vec{k}} + V_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} b_{\vec{k}}^+ \right] \quad (1.13)$$

$$\omega(\vec{k}) > 0,$$

სადაც \vec{r} – ელექტრონის რადიუს-ვექტორია, \vec{P} – კვაზიმპულსის ოპერატორი, $b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^+$ – ფონონების გაქრობის და დაბადების ოპერატორებია ტალღური ვექტორით \vec{k} , m – ელექტრონის ეფექტური მასაა კრისტალური მესრის პერიოდულ პოტენციალურ ველში, ხოლო $\omega(\vec{k})$ – წარმოადგენს ფონონური ველის კვანტის სიხშირეს, რომელიც არის \vec{k} -ტალღური ვექტორის რადიალურად სიმეტრიული ფუნქცია: $\omega(-\vec{k}) = \omega(\vec{k})$.

1.2.1. ელექტრონის ურთიერთქმედება კრისტალური მესრის აკუსტიკურ რხევებთან.

დეფორმაციის პოტენციალის მეთოდი

როგორც ცნობილია, ელექტრონების გაბნევისას აკუსტიკურ ფონონებზე გრძელტალღოვან მიახლოებაში $ka \ll 1$ (a - მესრის მუდმივაა) ფონონების დისპერსიის მიახლოებით კანონს აქვს შემდეგი სახე [32-33]: $\omega(\vec{k}) = V_s |\vec{k}|$, სადაც V_s – ბგერის სიჩქარეა კრისტალში, ხოლო (1.13) ფორმულის $V_{\vec{k}}$ – მუდმივები, რომლებიც წარმოადგენენ ელექტრონის ფონონებთან ურთიერთქმედების ენერჯიის ფურიე-კომპონენტებს, მოიცემა თანაფარდობით:

$$V_{\vec{k}} = \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{m} k^{1/2}, \quad (1.14)$$

სადაც: V – კრისტალის მოცულობაა, ხოლო $\alpha = \frac{D^2 m^2}{8\pi\rho\hbar^3 V_s}$ – წარმოადგენს ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების უგანზომილებო მუდმივას; D არის დეფორმაციის პოტენციალის მუდმივა და ρ – კრისტალის მასური სიმკვრივე. უნდა აღინიშნოს, რომ ზემოთმოყვანილი გამოსახულებები სამართლიანია $A^{III} B^V$ და $A^{II} B^{VI}$ ნახევარგამტარებისათვის, რომელთათვისაც ადგილი აქვს დისპერსიის იზოტროპულ კანონს და რომლებშიც ზონის ექსტრემუმი იმყოფება ბრილუენის ზონის ცენტრში.

მოკლედ შევეხეთ დეფორმაციის პოტენციალის მეთოდს. ამ მეთოდის იდეა მდგომარეობს შემდეგში: როდესაც კრისტალში ვრცელდება დრეკადი ტალღა ელემენტარული უჯრედი განიცდის დეფორმაციას, იცვლება მისი მოცულობა (იცვლება კრისტალური მესრის მუდმივა), რაც თავის მხრივ იწვევს გამტარობის ზონის ფსკერისა და სავალენტო ზონის ჭერის მდებარეობის ცვლილებას, ვინაიდან ზონის სიგანე მგრძობიარეა მესრის მუდმივას სიდიდის ცვლილების მიმართ. გამტარობის ზონის ფსკერის ცვლილება კი ფაქტიურად წარმოადგენს გამტარობის ელექტრონის ურთიერთქმედების ენერგიას კრისტალური მესრის რხევებთან. აკუსტიკური რხევების შემთხვევაში, როდესაც $\vec{k} \rightarrow 0$ ყველა ატომი ელემენტარულ უჯრედში ირხევა სინფაზურად. როგორც ცნობილია, \vec{r} წერტილის $\vec{U}(\vec{r})$ წანაცვლება კრისტალში გრძელტალღოვან მიახლოებაში ($ka \ll 1$) შესაძლებელია ჩავწეროთ შემდეგი სახით [32]:

$$\vec{U}_{\text{sg}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, j=1}^3 \vec{e}_{\vec{k}j}(\vec{k}) \left[b_{j\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} + b_{j\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right], \quad (1.15)$$

სადაც $\vec{e}_{\vec{k}j}(\vec{k})$ არის პოლარიზაციის ვექტორი, რომლის აბსოლუტური მნიშვნელობა აკუსტიკური რხევებისათვის გრძელტალღოვან მიახლოებაში ერთის ტოლია, ხოლო N – ელემენტარულ უჯრედთა რაოდენობაა კრისტალში.

ვინაიდან გრძელტალღოვან მიახლოებაში აკუსტიკური რხევებისას ირხევა მხოლოდ ელემენტარული უჯრედის მასათა ცენტრი და თვით უჯრედი კი არ განიცდის დეფორმაციას, ამიტომ ურთიერთქმედების ენერგია წარმოადგენს მხოლოდ $\vec{U}_{\text{sg}}(\vec{r})$ წანაცვლების კოორდინატების მიხედვით პირველი წარმოებულების წრფივ ფუნქციას და არ არის დამოკიდებული თვით წანაცვლების სიდიდეზე. ამიტომ ურთიერთქმედების ენერგია ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$H_{\text{int}} = D \text{Div} \vec{U}_{\text{sg}}(\vec{r}). \quad (1.16)$$

H_{int} სიდიდეს უწოდებენ დეფორმაციის პოტენციალს, ხოლო D პროპორციულობის კოეფიციენტს დეფორმაციის პოტენციალის მუდმივას, რომელიც ძირითადად განისაზღვრება ექსპერიმენტიდან. (1.15) და (1.16) ფორმულების დახმარებით მარტივად მივიღებთ:

$$H_{\text{int}} = \frac{iD}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, j=1}^3 (\vec{k} \vec{e}_{\vec{k}j}(\vec{k})) \left[b_{j\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} - b_{j\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right]. \quad (1.17)$$

უკანასკნელი ფორმულიდან ჩანს, რომ იმ შემთხვევაში, როდესაც გვაქვს იზოტროპული გაბნევა გამტარობის ელექტრონი ურთიერთქმედებს მხოლოდ გრძივ

გრძელტალღოვან აკუსტიკურ ფონონებთან ($\vec{k} // \vec{e}_{\vec{k}}(\vec{k})$). ზოგად შემთხვევაში, როდესაც გაბნევა ანიზოტროპულია და დეფორმაციის პოტენციალის მუდმივა წარმოადგენს ტენზორულ სიდიდეს $D_{\alpha\beta}$. ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$) - დეფორმაციის პოტენციალისთვის გვექნება გამოსახულება: $H_{\text{int}} = \sum_{j=1}^3 D_{\alpha\beta}^{(j)} U_{\alpha\beta}^{(j)}$, სადაც $U_{\alpha\beta}^{(j)}$ წარმოადგენს დეფორმაციის ტენზორს. ამ შემთხვევაში ურთიერთქმედების პროცესში მონაწილეობას ღებულობენ აგრეთვე განივი ფონონებიც [32-33].

1.2.2. ელექტრონის ურთიერთქმედება პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან

პოლარულ ნივთიერებებში (პოლარულ ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში) იონთა რხევებისას წარმოიქმნება არა მარტო დეფორმაციის პოტენციალი, არამედ გარდა ამისა, ადგილი აქვს შორსმქმედი მაკროსკოპული ელექტრული ველის წარმოშობას და ამიტომ ელექტრონის ურთიერთქმედებას ამ ველთან მიყვავართ დამატებითი გაბნევის მექანიზმის წარმოშობამდე. ეს ურთიერთქმედება, რომელსაც უწოდებენ ელექტრონის გაბნევას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე, ბევრ კრისტალებში უფრო არსებითია, ვიდრე დენის (მუხტის) გადამტანის გაბნევა აკუსტიკურ ფონონებზე. ამ სახის გაბნევაც გრძელტალღოვან მიახლოებაში აღიწერება (1.13) სახის ჰამილტონიანით. $V_{\vec{k}}$ - სიდიდეებს ელექტრონის გაბნევისას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე აქვს შემდეგი სახე [29-31]:

$$V_{\vec{k}} = -i \frac{\hbar \omega(\vec{k})}{|\vec{k}|^{1/2}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}; \quad U = \left(\frac{2m\omega(\vec{k})}{\hbar} \right)^{1/2} \quad (1.18)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2 U}{\hbar \omega(\vec{k})}.$$

აქ V არის სისტემის (კრისტალის) მოცულობა, e და m - ელექტრონის მუხტი და ეფექტური მასაა, შესაბამისად; α - ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ფროლიხის უგანზომილებო ბმის მუდმივაა, ხოლო ϵ_0 და ϵ_{∞} - წარმოადგენენ მოცემული ნივთიერების სტატიკური და ოპტიკური დიელექტრიკული შეღწევალობის მუდმივებს. ელექტრონის ურთიერთქმედებისას გრძივ ოპტიკურ ფონონებთან: $\max \omega(\vec{k}) \equiv \omega_0$ - წარმოადგენს დისპერსიის არმქონე, კრისტალის გრძივი ოპტიკური რხევების სიხშირეს. ზოგიერთ შემთხვევაში, ელექტრონ-

ფონონური სისტემისთვის: $H_s = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ გამოსახულების ნაცვლად აუცილებელია გამოყენებული იქნას უფრო ზოგადი სახე ელექტრონის ენერჯისა გამტარობის ზონიდან- $H_s = T(\vec{p})$. ისევე როგორც (1.2) ფორმულაში, აწამვა \vec{k} -ტალღური ვექტორით (1.13). ფორმულაში ხორციელდება კვაზიდისკრეტული სპექტრის მიხედვით:

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L} h_1, \frac{2\pi}{L} h_2, \frac{2\pi}{L} h_3 \right); L^3 = V, \quad (1.19)$$

სადაც h_1, h_2, h_3 - მთელი რიცხვებია (როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი).

ამრიგად, ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის (1.1), (1.2), (1.13) ფორმულების თანახმად, $C_k(s)$ და $C_k^+(s)$ ოპერატორებს აქვს შემდეგი სახე:

$$C_k(s) = V_k e^{i\vec{k}\vec{r}}; \quad C_k^+(s) = V_k^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.20)$$

(სიმბოლო * აღნიშნავს კომპლექსურად შეუღლებულს).

როდესაც ელექტრონ-ფონონური სისტემა იმყოფება გარეშე, ერთგვაროვან ელექტრულ ველში, რომლის დაძაბულობა $\vec{E}(t)$, მაშინ ელექტრონის გარეშე ელექტრულ ველთან ურთიერთქმედების ჰამილტონიანს აქვს სახე:

$$H_{s\text{ext}} = -e\vec{E}(t)\vec{r}. \quad (1.21)$$

იმ შემთხვევაში, როდესაც გარეშე ელექტრული ველი იცვლება ჰარმონიული კანონით ელექტრული ველის დაძაბულობისთვის გვაქვს:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-\varepsilon|t|} \cos(\omega t), \quad (1.22)$$

სადაც: ω წარმოადგენს ცვლადი ელექტრული ველის სიხშირეს, ხოლო \vec{E}_0 - არის ველის ამპლიტუდა, $e^{-\varepsilon|t|}$ თანამამრავლი აღწერს გარეშე ურთიერთქმედების ადიაბატურ ჩართვას (გამორთვას), როდესაც $t \rightarrow \mp\infty$ და $\varepsilon \rightarrow 0^+ (\varepsilon > 0)$.

ელექტრონის პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების (უფრო ზოგადად პოლარონის ამოცანის) სპეციფიკა მდგომარეობს იმაში, რომ საერთოდ, უგანზომილებო პარამეტრი α , რომელიც აღწერს ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების სიძლიერეს, არ შეიძლება ჩაითვალოს როგორც მცირე სიდიდე. III-V ჯგუფის ნახევარგამტარებში ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება შესაძლებელია იყოს სუსტი ($\alpha < 1$); II-VI ჯგუფის პოლარულ ნახევარგამტარებსა და დიელექტრიკებში საშუალო სიძლიერის ($\alpha \approx 1$), და იონურ კრისტალებში ძლიერი ($\alpha \gg 1$). ამიტომ, ზოგად შემთხვევაში, უარყოფილი უნდა იქნას დაშვება იმის შესახებ, რომ მუხტის გადამტანთა

(ელექტრონების) ენერგეტიკული სპექტრი განისაზღვრება მათი სუსტი ურთიერთქმედებით იდეალური კრისტალური მესრის პოტენციალურ ველთან და კრისტალური მესრის რხევების როლი მდგომარეობს იმაში, რომ მათ მივყავართ შედარებით იშვიათ გადასვლებთან ელექტრონის მდგომარეობებს შორის იდეალურ კრისტალში. პოლარულ კრისტალებში ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება იწვევს ელექტრონული სპექტრის არსებით ცვლილებას (პოლარონული ეფექტი), დენის გადამტანების შედარებით ძლიერ გაბნევას ოპტიკურ ფონონებზე და ამ უკანასკნელთა დისპერსიის კანონის ცვლილებას. ყველაფერი ეს კი ართულებს პოლარული კრისტალების ელექტრული და აგრეთვე ოპტიკური თვისებების შესწავლას [29-31, 36-39].

ამრიგად, ძლიერი (არასუსტი) ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში, ზოგადად ელექტრონ-ფონონური სისტემის თერმოდინამიკის საკითხების განხილვისას და კინეტიკური მოვლენების შესწავლისას ჩვენ ბუნებრივად დავდივართ პოლარონის ამოცანის განხილვამდე [29-30, 37-39].

13. პოლარონის ამოცანა. დიდი რაზიუსის მქონე

პოლარონის მოდელები

უკანასკნელ წლებში აქტუალური გახდა საკითხი სტრუქტურულად შედგენილი ნაწილაკების დინამიური მოდელების აგებისა. წარმოდგენები ნაწილაკის რთული სტრუქტურისა და ამ ნაწილაკის აგზნებული მდგომარეობების არსებობის შესახებ ყოველთვის წარმოადგენდა ძლიერი ურთიერთქმედების (ბმის) თეორიის ძირითად საკითხს. უნდა აღინიშნოს რომ ძლიერი ბმის თეორიების სიძნელეები თავიდანვე განპირობებული იყო ისეთი ცნებების შემოღებასა და ოპერირებასთან, რომლებიც არსებითად განსხვავებოდნენ თავისუფალი ველების თეორიის წარმოდგენებისაგან. ნ.ნ. ბოგოლუბოვის შრომებში განხილული და გამოკვლეული იყო ამოცანა არარელატივისტური ნაწილაკის ურთიერთქმედებისა დაკვანტულ სკალარულ ველთან ადიაბატური მიახლოების ზღვრულ შემთხვევაში [35,40].

1.3.1. პოლარონის ფროლიხისა და პეკარის მოდელები

პირველად ამოცანა არარელატივისტური ნაწილაკის ურთიერთქმედებისა დაკვანტულ სკალარულ ველთან დასმული იყო ფროლიხის მიერ ეგრეთწოდებული პოლარონების პრობლემის გამოსაკვლევად. პოლარონების პრობლემა მდგომარეობს გამტარობის ელექტრონების ყოფაქცევის შესწავლაში პოლარულ კრისტალებში. ელექტრონი, რომელიც იმყოფება კრისტალში, თავისი კულონური ველით წაანაცვლებს იონებს თავიანთი წონასწორული მდებარეობებიდან; თავის მხრივ წარმოქმნილი იონური პოლარიზაცია მოქმედებს ელექტრონზე და იწვევს მისი ენერჯის შემცირებას. კრისტალში გადაადგილებისას, ელექტრონს თან გადააქვს კრისტალური მესრის დამახინჯების არე. ელექტრონი და მასთან ერთად აღებული თვითშეთანხმებული პოლარიზაციული ველი შესაძლებელია განხილული იქნეს როგორც კვაზინაწილაკი, რომელსაც უწოდებენ პოლარონს [29,38]. უნდა აღინიშნოს, რომ თვით პოლარონის კონცეპცია შემოღებული იქნა პეკარის მიერ, რომელიც განიხილავდა ზღვრულ შემთხვევას ელექტრონისა და კრისტალური მესრის რხევების ძლიერი ურთიერთქმედებისა და მის აღსაწერად იყენებდა ადიაბატურ მიახლოებას, რომელიც წარმოადგენს ნახევრადკლასიკურ მეთოდს [29-30].

ისტორიულად პირველი და ყველაზე გავრცელებული მიდგომა პოლარონული ამოცანის ამოხსნისათვის დაფუძნებული იყო ორ ძირითად მიახლოებაზე, რომლებიც არსებითად განსაზღვრავენ პოლარონული მდგომარეობების თვისებებს: 1) ეფექტური მასის მიახლოება, რომლის თანახმადაც ელექტრონის ურთიერთქმედება ხისტი კრისტალური მესრის პერიოდულ პოტენციალთან გათვალისწინებულია m ეფექტური მასით, როგორც პარამეტრით. ასეთ შემთხვევაში ელექტრონის კინეტიკური ენერჯია $T(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ გამტარობის ზონაში და თვით ზონის სივანე ფორმალურად წარმოადგენენ შემოუსაზღვრელ სიდიდეებს და ამიტომ არ თამაშობენ პარამეტრების როლს პოლარონის ამოცანისათვის; 2) კონტინუალური მიახლოება, რომლის დროსაც არ გაითვალისწინება კრისტალური მესრის დისკრეტული სტრუქტურა. ამ მიახლოებათა ჩარჩოებში, პოლარონის ამოცანა წარმოადგენს ველის კვანტური თეორიის ტიპურ მაგალითს ფერმინაწილაკის ურთიერთქმედებისა დაკვანტულ ფონონურ ველთან, და ამიტომ, როგორც ასეთი, იგი გახდა ერთ-ერთი მაგალითი ველის თეორიის მეთოდების გამოყენებისა მყარი სხეულების ფიზიკაში.

პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის თვისებების შესწავლა არსებითად მარტივდება სუსტი და ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ზღვრულ შემთხვევებში. სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში პოლარონის ფიზიკური მახასიათებლები კარგად აღიწერება ჩვეულებრივი შეშფოთების თეორიის გამოყენებით, ხოლო ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში პოლარონული მდგომარეობა აღიწერება თვითშეთანხმებული მიდგომით, რომელიც პირველად განხილული იყო პეკარის მიერ და რომელიც ეყრდნობოდა ადიაბატურ მიახლოებას [30-31, 39].

ველის თეორიის ლაგრანჟისეული ფორმულირებისა და სტანდარტული დაკვანტვის პროცედურის გამოყენებით, ფროლიხისა და პეკარის მიერ მიღებული და განხილული იყო პოლარონული სისტემის ჰამილტონიანი (1.13-1.18) სახით. ვინაიდან შრედინგერის განტოლების ზუსტი ამოხსნა (1.13) სახის ჰამილტონიანით ვერ იქნა ნაპოვნი, ამიტომ სხვადასხვა დროს მრავალი ავტორის მიერ გამოყენებული იყო მიახლოებითი მეთოდები, რომლებსაც სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში მიყვავართ ან სტანდარტული ტიპის შეშფოთების თეორიასთან, ან სხვადასხვა სახის ვარიაციულ მიდგომებთან, რომლებიც ფაქტიურად წარმოადგენენ ჰარტრი-ფოკის მიახლოების ამა თუ იმ მოდიფიკაციას [30, 37-38]. ამ გამოკვლევების შედეგები გვიჩვენებს, რომ უძრავი ელექტრონის ენერგია მცირდება სიდიდით: $\Delta E = -\hbar\omega_0\alpha$, რომელიც შესაძლებელია განხილულ იქნას, როგორც პოლარონის საკუთარი ენერგია. გარდა ამისა იცვლება ელექტრონის ეფექტური მასა: $m^* = m(1 - \alpha/6)^{-1}$.

სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში პოლარონი პირველ მიახლოებაში შესაძლებელია წარმოვიდგინოთ როგორც კვაზინაწილაკი (ელექტრონი), რომელიც გარემოცულია ფონონური ველის არაკორელირებული კვანტების ღრუბლით, რომელთა საშუალო რიცხვი პროპორციულია ბმის მუდმივასი (პოლარონის ფროლიხის მოდელი) [29].

ფიზიკის თვალსაზრისით ბევრად უფრო საინტერესო და აქტუალურია ძლიერ ურთიერთქმედების შემთხვევა ნაწილაკისა ფონონურ ველთან. ძლიერ ელექტრონ-ფონონურ ურთიერთქმედებას მიყვავართ ფონონური ვაკუმის პოლარიზაციაზე, რაც იწვევს საბოლოოდ შედგენილი კვაზინაწილაკის სტრუქტურის ჩამოყალიბებას. ცხადია, რომ ნებისმიერ გამოთვლით სქემას

(აღგორითმს) უნდა შესწევდეს უნარი ამ ჩამოყალიბებული სტრუქტურის მოდელირებისა უკვე პირველ მიახლოებაში [38-40].

პეკარის თანახმად, ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში, კრისტალური მესრის დეფორმაციას, რომელიც გამოწვეულია გამტარობის ელექტრონით, მიჰყვაროთ ეფექტური პოტენციალური ორმოს ჩამოყალიბებამდე და ელექტრონის ჩაჭერამდე დისკრეტულ ენერგეტიკულ დონეზე, რომელსაც შეესაბამება უკანასკნელის ფინიტური მოძრაობა. აერთიანებული სისტემა (ელექტრონი პლუს დეფორმაციის არე), როგორც მთლიანი გადაადგილება კრისტალში ეფექტური მასით, რომელიც საგრძნობლად აღემატება ელექტრონის მასას (ეფექტურს) გამტარობის ზონაში [30,37,39].

ამგვარად, ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში პეკარის მიერ განვითარებული თეორია ითვალისწინებს იონური კრისტალის დიელექტრიკულ პოლარიზაციას გამოწვეულს გამტარობის ელექტრონის ელექტრული ველით. წარმოქმნილი ლოკალური პოლარიზაცია დაკავშირებულია იონთა წანაცვლებასთან და ამიტომ ის არის ინერციული; მას არ შეუძლია “მხარი აუბას” შედარებით უფრო სწრაფად მოძრავ ელექტრონს და ამიტომ ეს ლოკალური ინერციული პოლარიზაცია, როგორც უკვე ითქვა, ელექტრონისთვის ქმნის პოტენციალურ ორმოს. საკმარისად ღრმა ორმოში ხდება ელექტრონის ავტოლოკალიზაცია და ამ წარმოქმნილი პოტენციალური ორმოს სიღრმე საკმარისია, რათა მასში არსებობდეს დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები ელექტრონისთვის. კრისტალთა დიდი უმრავლესობისთვის ორმოს სიღრმე 0,5-1 ელექტრონ-ვოლტის რიგისაა. ელექტრონი, რომელიც იმყოფება ავტოლოკალიზებულ მდგომარეობაში ერთ-ერთ ასეთ ენერგეტიკულ დონეზე თავისი ელექტრული ველით “იჭერს” კრისტალური მესრის ლოკალურ პოლარიზაციას. იონები თავიანთი ინერციულობის გამო “აღიქვამენ” ელექტრონის არა მყისიერ, არამედ საშუალო ელექტრულ ველს. ელექტრონის ასეთი ავტოლოკალიზებული მდგომარეობა ანუ კრისტალის ასეთი მდგომარეობები პოლარიზაციული პოტენციალური ორმოთი, რომელშიაც ლოკალიზებულია ელექტრონი, იწოდება პოლარონულ მდგომარეობებად (პოლარონის პეკარის მოდელი) [30,39-40].

ერთ-ერთ მნიშვნელოვან და ძირითად პარამეტრს, რომელიც ახასიათებს პოლარონულ მდგომარეობას, წარმოადგენს პოლარონის რადიუსი, რომელიც აღწერს მახასიათებელ ზომებს კრისტალური გარემოს დეფორმაციის არისა. თუ ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება არის სუსტი, მაშინ პოლარონის რადიუსი შესაძლებელია შეფასებული იქნას განუსაზღვრელობის თანაფარდობიდან: $r_p \approx \hbar^{1/2}/(m\omega_0)^{1/2}$, როგორც მახასიათებელი ზომა ელექტრონის ფლუქტუაციებისა

სივრცეში, რომელიც განპირობებულია ვირტუალური ფონონების გამოსხივებისა და შთანთქმის პროცესებით. ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში პოლარონის რადიუსის სიდიდე არსებითადაა დამოკიდებული ამ ურთიერთქმედების ხასიათზე. ფროლიხ-პეკარის პოლარონის მოდელში, როდესაც $\alpha \gg 1$, მარტივი თვისობრივი შეფასება პოლარონის რადიუსისათვის იძლევა შემდეგ მნიშვნელობას: $r_p \approx \hbar^{1/2}/(m\omega_0)^{1/2}\alpha$, რაც შეესაბამება პოლარონის რადიუსის შემცირებას ბმის მუდმივას ზრდასთან ერთად [37,41].

დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის ადიაბატურ თეორიაში პოლარონის ზომა განისაზღვრება ოპტიმალური ბალანსის პირობიდან გამომდინარე ელექტრონის კინეტიკური ენერჯის დადებითი წვლილისა, რომელიც ლოკალიზებულია შემოსაზღვრული სივრცეში, დადებითი წვლილისა დეფორმირებული კრისტალური მესრის ენერჯისა და უარყოფითი წვლილისა ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ენერჯისა. ყველა ეს წვლილი ერთი და იგივე რიგისაა სიდიდის მიხედვით, რაც ჯამში იძლევა მოგებას პოლარონის ენერჯისათვის, შედარებით თავისუფალი ელექტრონის მდგომარეობისათვის არადეფორმირებული კრისტალური მესრისათვის (პოლარონული წანაცვლება) [37,42-43]. უნდა აღინიშნოს, რომ პრინციპში პოლარონული მდგომარეობების თვისებები არსებითად განისაზღვრება სამი მასშტაბური ენერგეტიკული პარამეტრით: D , $\hbar\omega$, E_p , სადაც E_p წარმოადგენს პოლარონულ წანაცვლებას – ენერჯის შემცირებას ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის პოლარიზაციული სახის ურთიერთქმედების გამო და წარმოადგენს იმ ენერგეტიკულ მასშტაბს, რომელიც ახასიათებს ამ ურთიერთქმედების ინტენსივობას. D არის ელექტრონების გადაუნომრვი ზონის სიგანე, ხოლო ω წარმოადგენს ფონონების მახასიათებელ რხევების საშუალო სიხშირეს. დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის პირობა მოიცემა შემდეგი თანაფარდობით: $r_p > a$, სადაც a არის კრისტალური მესრის მუდმივა. შესაძლებელია ნაჩვენებ იქნას, რომ დიდი რადიუსის მქონე პოლარონისათვის ადგილი აქვს უტოლობას: $E_p/D < 1$, რომელიც ფაქტიურად ეკვივალენტურია ზემოთ მოყვანილი უტოლობისა [37,41].

პოლარონული მდგომარეობების მდგრადობისთვის აუცილებელია, რომ ელექტრონის ბმის ენერჯია პოტენციალურ ორმოში აღემატებოდეს იონთა სითბური მოძრაობის საშუალო ენერჯიას კრისტალში. ვარიაციული მეთოდის დახმარებით პეკარმა განავითარა მკაცრი თეორია ელექტრონის ძლიერი ურთიერთქმედებისა

იზოტროპულ იონურ დიელექტრიკთან, როდესაც კრისტალი განიხილებოდა როგორც უწყვეტი გარემო.

პეკარის თანახმად ელექტრონის ენერგია პოლარიზებულ კრისტალში (დიელექტრიკში), რომლის პოლარიზაციის ვექტორია - $\vec{P}(\vec{r})$, წარმოიღვინება შემდეგი სახით [29-30] (ნულოვან ადიაბატურ მიახლოებაში, როდესაც არ გაითვალისწინება იონთა მოძრაობის კინეტიკური ენერგია).

$$E[\Psi, \vec{P}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^*(\vec{r}) \Delta \Psi(\vec{r}) d\vec{r} + 2\pi\epsilon^* \int \vec{P}^2(\vec{r}) d\vec{r} - \int \vec{P}(\vec{r}) D(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.23)$$

სადაც: $D(\vec{r}) = e \int |\Psi(\vec{r}_1)|^2 \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}|^3} d\vec{r}_1$ წარმოადგენს ელექტრული ველის ინდუქციის ვექტორს დიელექტრიკის წერტილში, რომლის რადიუს-ვექტორია \vec{r} , ხოლო $\epsilon^{*-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}$ არის პოლარიზებული გარემოს ეფექტური დიელექტრიკული შეღწევადობა (იხ. (1.18) ფორმულა). (1.23) ფორმულის პირველი ორი წევრი აღწერს ელექტრონისა და პოლარიზაციული ველის ენერგიებს, ხოლო უკანასკნელი წევრი - მათ შორის ურთიერთქმედების ენერგიას. (1.23) გამოსახულება განიხილება როგორც ფუნქციონალი - $\Psi(\vec{r})$ და $\vec{P}(\vec{r})$ ფუნქციების მიმართ. როდესაც კრისტალი იმყოფება ძირითად მდგომარეობაში, მაშინ ამ ფუნქციონალს უნდა გააჩნდეს აბსოლუტური მინიმუმი, $\Psi(\vec{r})$ და $\vec{P}(\vec{r})$ ფუნქციების დამოუკიდებელი ვარიაციების დროს, იმ პირობით რომ ადგილი ექნება ტალღური ფუნქციის ნორმირების შენახვის პირობას:

$$\int |\Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1. \quad (1.24)$$

თუ გაგუტოლებთ ნულს (1.23) ფუნქციონალის ვარიაციას, რომელიც განპირობებულია $\vec{P}(\vec{r})$ პოლარიზაციის ცვლილებით, როდესაც $\Psi(\vec{r})$ ტალღური ფუნქცია ფიქსირებულია, მაშინ მარტივად დაგადგენთ კავშირს $\vec{P}(\vec{r})$ და $D(\vec{r})$ სიდიდეებს შორის:

$$\vec{P}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon^*} D(\vec{r}), \quad (1.25)$$

სადაც: $D(\vec{r})$ - ინდუქცია (1.23) ფორმულის თანახმად განისაზღვრება $\Psi(\vec{r}_1)$ ტალღური ფუნქციის საშუალებით. (1.25) გამოსახულების დახმარებით, მარტივად ვპოულობთ (1.23) ფუნქციონალის სახეს, რომელიც დამოკიდებულია მხოლოდ $\Psi(\vec{r})$ ტალღურ ფუნქციაზე:

$$\mathfrak{Z}[\Psi] = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} - \frac{1}{8\pi\epsilon^*} \int \vec{D}^2(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (1.26)$$

$\Psi[\Psi]$ ფუნქციონალი განსაზღვრავს პოლარიზებული კრისტალის (დიელექტრიკის) ენერგიას, რომლისთვისაც პოლარიზაცია შეთანხმებულია ელექტრონის მდგომარეობასთან, რომელიც აღიწერება $\Psi(\vec{r})$ -ფუნქციით. პოლარიზებული კრისტალის ასეთი მდგომარეობისათვის, ელექტრონისთვის უფრო “ხელსაყრელია” ენერგეტიკული თვალსაზრისით იმყოფებოდეს არა გამტარობის ზონაში, არამედ მდგომარეობაში, რომელიც შეესაბამება ელექტრონის მოძრაობას კრისტალის შემოსაზღვრულ (ფინიტურ) არეში და რომელიც განისაზღვრება - $\Psi(\vec{r})$ ტალღური ფუნქციით. ელექტრონისთვის ეს ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელი მდგომარეობა შესაძლებელია განისაზღვროს (1.26) ფუნქციონალის მინიმუმის პირობიდან, (1.24) თანაფარდობის გათვალისწინებით, $\Psi(\vec{r})$ ფუნქციის მიხედვით. (1.26) ფუნქციონალის მინიმიზაციისათვის პეკარმა გამოიყენა პირდაპირი ვარიაციული მეთოდი [29-30]. ძირითადი მდგომარეობის (პოლარონული მდგომარეობის) ფუნქციის - $\Psi(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r})$. აპროქსიმაცია ხდებოდა რამოდენიმე პარამეტრის საშუალებით. ამ ფუნქციას ჰქონდა შემდეგი სახე:

$$\Psi_0(\vec{r}) = A[1 + \alpha'r + \beta r^2]e^{-\alpha'r} \quad (1.27)$$

სადაც: A მუდმივა განისაზღვრებოდა ნორმირების პირობიდან (ტალღური ფუნქციისთვის) და იგი ტოლი იყო სიდიდის:

$$A^2 = \frac{2\alpha^3}{\pi(14 + 168\gamma + 720\gamma^2)};$$

$$\gamma = \frac{\beta}{4\alpha'^2}; \quad \Psi_0(x) = A\left(1 + \frac{1}{2}x + \gamma x^2\right)e^{-\frac{1}{2}x}; \quad x = 2\alpha'\gamma, \quad (1.28)$$

სადაც x წარმოადგენდა უგანზომილებო ცვლადს. ვარიაციული გათვლები α' და γ პარამეტრებისათვის იძლეოდა შემდეგ მნიშვნელობებს: $\alpha' = 0,6585 \frac{me^2}{\hbar^2 \epsilon^*}$, $\gamma = 0,1129$; (1.28) ფორმულების დახმარებით პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯისათვის მიღებული იყო შემდეგი გამოსახულება [30]:

$$E_0(\alpha, \gamma) = \frac{3}{2} \frac{\pi \hbar^2 A^2}{m\alpha} (1 + 4\gamma + 24\gamma^2) - \frac{\pi^2 e^2 A^4}{\epsilon^* \alpha^5} (10,494 + 209,88\gamma + 1884\gamma^2 + 8507,8\gamma^3 + 16727\gamma^4). \quad (1.29)$$

შედარებით უფრო უხეში გათვლებისთვის, პეკარის მიერ გამოყენებული იყო აგრეთვე ტალღური ფუნქცია, რომელიც შეიცავდა ერთ ვარიაციულ პარამეტრს. საერთოდ პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯია არ იყო ძალიან “მკონობიარე” შერჩეული ვარიაციული პარამეტრების რაოდენობის მიმართ.

მაგალითად, ერთი დამოუკიდებელი მეორე პარამეტრის დამატება ტალღურ ფუნქციაში საშუალებას იძლეოდა ძირითადი მდგომარეობის ენერჯის მხოლოდ 2%-ით შემცირებას. ერთი ვარიაციული პარამეტრის მქონე ნორმირებულ ტალღურ ფუნქციას ჰქონდა შემდეგი სახე:

$$\Psi_0(\vec{r}) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{7\pi}} (1 + \alpha' r) e^{-\alpha' r}, \quad (1.30)$$

სადაც $\alpha' \equiv \frac{1}{r_0} = \frac{me^2}{2\hbar^2 \varepsilon^*}$, α' პარამეტრის (1.30) მნიშვნელობა განისაზღვრებოდა (1.23),

(1.26) და (1.30) ფორმულების დახმარებით – (1.26) ფუნქციონალის მინიმუმის პირობიდან. თვით (1.30) ტალღურ ფუნქციას შეესაბამებოდა (1.26) ფუნქციონალის შემდეგი მნიშვნელობა:

$$\mathfrak{J}[\Psi_0] = -0,054 \frac{me^4}{\hbar \varepsilon^{*2}} \equiv -2 \cdot 0,054 \hbar \omega_0 \alpha^2, \quad (1.31)$$

სადაც: α - არის ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ფროლიხის უგანზომილებო მუდმივა (იხ. (1.18) ფორმულა). (1.31) გამოსახულება ფაქტიურად განსაზღვრავს პოლარიზებული კრისტალის სრულ ენერჯიას. (1.23) და (1.25) გამოსახულებების დახმარებით შესაძლებელია განისაზღვროს კრისტალის პოლარიზაცია, რომელიც შეესაბამება (1.30) მდგომარეობას.

$$\vec{P}_0(\vec{r}) = \frac{e}{4\pi \varepsilon^*} \int |\Psi_0(\vec{r}_1)|^2 \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}|^3} d\vec{r}_1, \quad (1.32)$$

ხოლო (1.32) ფორმულისა და $V_0(r) = -\int \frac{\text{div} \vec{P}_0(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$ თანაფარდობის დახმარებით

ვიპოვით სფერული პოლარიზაციული პოტენციალური ორმოს ფორმას (სახე), რომელშიაც მოძრაობს ელექტრონი (იხ. ნახ.1). ელექტრონის ტალღური ფუნქცია (იხ. 1.28) ნაპოვნი α' ვარიაციული პარამეტრის საშუალებით ჩაიწერება შემდეგი სახით:

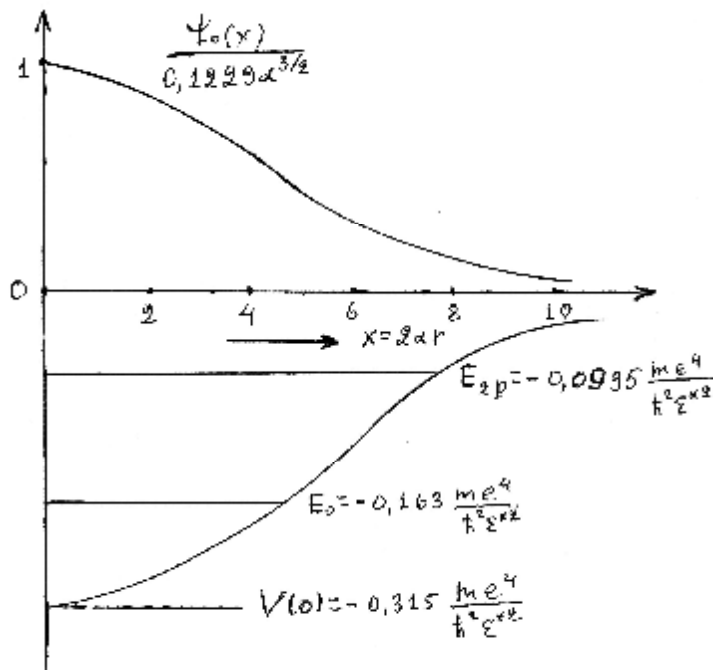
$$\Psi_0(r) = 0,1229 \alpha^{3/2} (1 + \alpha r + 0,4516 \cdot \alpha^2 r^2) e^{-\alpha r}.$$

თვით $V_0(r)$ პოტენციალს აქვს შემდეგი ანალიზური სახე:

$$V_0(r) = -\frac{2\alpha e^2}{\varepsilon^*} \left[\frac{1}{x} - e^{-x} \left(\frac{1}{x} + 0,7605 + 0,2605x + 0,05087x^2 + 0,005703x^3 + 0,0003024x^4 \right) \right], \quad (1.33)$$

სადაც, x განისაზღვრება (1.28) ფორმულით. როდესაც $x \gg 1$, მაშინ ექსპონენციალური თანამამრავლი არის ძალიან მცირე და $V_0(r)$ პოტენციალის სახე არის

კულონური: $V_0(r) \rightarrow -\frac{e^2}{\epsilon^* r}$; ხოლო $r=0$ წერტილში პოტენციალს გააჩნია პარაბოლური ტიპის მინიმუმი. პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერგია (1.33) ფიქსირებულ პოტენციალურ ორმოში გამოითვლება (1.23), (1.30) და (1.32) ფორმულების დახმარებით. გამოთვლები იძლევა ელექტრონის ენერგიის შემდეგ მნიშვნელობას: $E_0 = -0,163 \frac{me^4}{\hbar^2 \epsilon^{*2}} = -2 \cdot 0,163 \hbar \omega_0 \alpha^2$; თუ პოლარიზაციული პოტენციალური ორმო არის საკმაოდ ღრმა, მაშინ მასში შესაძლებელია აგრეთვე სხვა დისკრეტული ენერგეტიკული დონეების არსებობა ელექტრონისათვის (იხ. ნახ.1).



ნახ.1. პოტენციალური ორმო, ენერგეტიკული დონეები და ელექტრონის Ψ -ტალღური ფუნქცია პეკარის პოლარონის მოდელში

ამრიგად, პეკარის პოლარონული მდგომარეობები შესაძლებელია განხილული იქნეს როგორც ელექტრონისა და კრისტალის ლოკალური პოლარიზაციის ბმული (ავტოლოკალიზებული) მდგომარეობები. ეს მდგომარეობები ხასიათდებიან ერთი ან რამოდენიმე დისკრეტული შინაგანი ენერგეტიკული დონეების არსებობით ავტოლოკალიზებული ელექტრონისთვის. განსხვავებით პოლარონის ფროლიხის მოდელისაგან, რომელიც აღიწერება სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების α მუდმივით ($\alpha < 1$), პეკარის პოლარონული მდგომარეობები ხორციელდება მხოლოდ α ბმის მუდმივას დიდი მნიშვნელობების დროს ($\alpha \gg 1$). ასეთი ავტოლოკალიზებული მდგომარეობები – პოლარონები შესაძლებელია

გადაადგილდნენ კრისტალში, როგორც ერთიანი მთლიანი სტრუქტურა (კვაზინაწილაკი), რაღაც ეფექტური მასით – პოლარონის მასით.

პეკარის მიერ გამოთვლილი იყო აგრეთვე პოლარონის მასა, როდესაც პოლარონი ასრულებდა გადატანით მოძრაობას კრისტალში მცირე სიჩქარეებით: $V \ll \omega_0 r_0$, სადაც r_0 განისაზღვრება (1.30) ტოლობით. მიღებული პოლარონის ეფექტური მასის მნიშვნელობა პეკარის თეორიაში შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით [30]:

$$M = 5,8 \cdot 10^{-3} \left(\frac{me^2}{\hbar^2 \epsilon^*} \right)^3 e^2 C_2 = 9,08 \cdot 10^3 \left(\frac{m}{m_e} \right)^3 \frac{1}{\epsilon^{*3}} C_2, \quad (1.34)$$

სადაც $C_2 = \frac{1}{\epsilon^* \omega_0^2}$ და m_e წარმოადგენს ელექტრონის მასას.

ზოგადად, პოლარონის ეფექტური მასა M ბევრად აღემატება ელექტრონის ეფექტურ მასას გამტარობის ზონიდან. ასე მაგალითად, $NaCl$ იონური კრისტალისთვის, გამოთვლები გვიჩვენებს, რომ $M \approx 391m$.

პეკარის მოდელში, პოლარონის ძვრადობისა და ელექტროგამტარობის გამოსათვლელად გამოიყენებოდა ბოლცმანის კინეტიკური განტოლება. იონები განიხილებოდა როგორც სითბურ წონასწორობაში მყოფი. ამ განტოლების დახმარებით გამოთვლილი იყო პოლარონის დაბალტემპერატურული ($K_B T \ll \hbar \omega_0$) ძვრადობა, როდესაც ხდებოდა ელექტრონის გაბნევა პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე და გაბნევის პროცესში მონაწილეობას იღებდა ფონონის ერთი კვანტი (ერთფონონიანი პროცესები). პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობისთვის მიღებული იყო თანაფარდობა:

$$\mu = \frac{e}{M} \tau, \quad (1.35)$$

სადაც: თავისუფალი განარბენის საშუალო დრო τ ტოლი იყო სიდიდის:

$$\tau = \left[W_{\vec{k}, \vec{k}'} \right]^{-1}. \quad (1.36)$$

აქ: $W_{\vec{k}, \vec{k}'}$ - წარმოადგენს პოლარონის \vec{k} -დან \vec{k}' მდგომარეობაში გადასვლის ალბათობას დროის ერთეულში (გადასვლის სიხშირეს) და განისაზღვრება შემდეგი თანაფარდობით (\vec{k} და \vec{k}' -ტალღური ვექტორებია):

$$W_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{e^2}{4\pi\hbar^{3/2}} \frac{\sqrt{2M\omega_0} \left(1 + \frac{1}{7}Z\right)^2}{(1+Z)^8} N; \quad (1.37)$$

$$N = \left[e^{\frac{\hbar\omega_0}{K_B T}} - 1 \right]^{-1}; \quad Z = \frac{|\vec{k}' - \vec{k}|^2}{4\alpha'^2},$$

სადაც: α' - სიდიდე მოიცემა (1.30) ფორმულით. მცირე სიხქარეებით მოძრავი პოლარონისთვის, როდესაც $\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} \ll \hbar\omega_0$ (1.34) ფორმულის გათვალისწინებით გვექნება:

$$Z \approx \frac{M\omega_0}{2\hbar\alpha'^2} = 0,0116 \frac{me^4}{\hbar^3\omega_0\epsilon^{*2}}. \quad (1.38)$$

(1.35) - (1.37) თანაფარდობების დახმარებით მარტივად მივიღებთ პოლარონის ძვრადობისათვის შემდეგ გამოსახულებას კრისტალის დაბალი ტემპერატურების დროს:

$$\mu = \mu_0 N; \quad \mu_0 = \frac{\hbar^{3/2} \epsilon^*}{M^{3/2} e \sqrt{2\omega_0}} \frac{(1+Z)^8}{\left(1 + \frac{1}{7}Z\right)^2}. \quad (1.39)$$

ხოლო, თუ ვისარგებლებთ პოლარონის M მასის (1.34) მნიშვნელობით, მაშინ დაბალტემპერატურული ძვრადობა წარმოიდგინება შემდეგი სახით [30]:

$$\mu_0 = 5,8 \cdot 10^{-38} \frac{\omega_0^{5/2} (1+Z)^8 \epsilon^{*7}}{\left(\frac{m}{m_e}\right) \left(1 + \frac{1}{7}Z\right)^2}. \quad (1.40)$$

აქვე უნდა აღინიშნოს პოლარონის M მასისა და μ_0 დაბალტემპერატურული ძვრადობის დამოკიდებულება α -ბმის მუდმივაზე პოლარონის პეკარის თეორიაში. როგორც (1.18) და (1.34) ფორმულები გვიჩვენებენ პოლარონის მასის ყოფაქცევა მოიცემა თანაფარდობით: $M \sim \alpha^4 (\alpha \gg 1)$, ხოლო (1.18), (1.34) და (1.39)-ის თანახმად დაბალტემპერატურული ძვრადობის ყოფაქცევა აისახება დამოკიდებულებით: $\mu_0 \sim \alpha^5 (\alpha \gg 1)$ (როდესაც განიხილება მხოლოდ ერთფონონიანი პროცესები პოლარონის გაბნევისას ოპტიკურ ფონონებზე). ამრიგად, პეკარის პოლარონის მოდელში მიღებული ყველა ფიზიკური სიდიდის (პოლარონის მასა, ძვრადობა და სხვ.) მნიშვნელობა, განსხვავებით პოლარონის ფროლიხის მოდელისაგან, სამართლიანია მხოლოდ ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha \gg 1$).

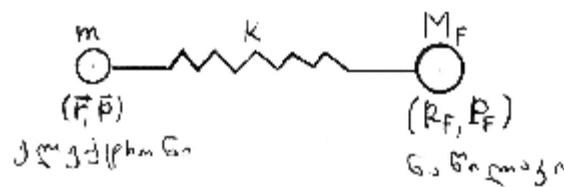
განვიხილოთ ახლა დინამიური მოდელი სტრუქტურულად შედგენილი კვაზინაწილაკის-პოლარონის, რომელიც აღიწერება ელექტრონ-ფონონური ბმის α -მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს, ე.წ. პოლარონის ფეინმანის მოდელი.

1.3.2. პოლარონის ფეინმანის მოდელი

ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის და პოლარონის ამოცანაში ფართო გამოყენება ჰპოვა ფეინმანის კონტინუალური ინტეგრების მეთოდმა (ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ) [44-45]. ამ მეთოდის წარმატება პოლარონის თერმოდინამიკის საკითხების განხილვისას დაკავშირებულია შემდეგ მთავარ ტექნიკურ მომენტებთან: 1) ეს მეთოდი შესაძლებელს ხდის, რათა მოხდეს ზუსტი გამორიცხვა ფონონური ამპლიტუდებისა პოლარონის ამოცანიდან (პრობლემიდან), რის შედეგადაც მრავალნაწილაკოვანი ამოცანა დაიყვანება ერთნაწილაკოვანი ამოცანის განხილვამდე, რომელიც აღიწერება არალოკალური ფუნქციონალით და რომელიც დამოკიდებულია მხოლოდ ელექტრონის ტრაექტორიებზე. პოლარონის ფეინმანის მოდელის ფორმულირებისას ფონონური ოპერატორები (ამპლიტუდები) გამოირიცხება ზუსტად ელექტრონ-ფონონური სისტემის ქმედებიდან. ამგვარად, მიღებული ქმედება, რომელიც არ არის ლოკალური ფონონური ოპერატორების გამორიცხვის შემდეგ ელექტრონ-ფონონური სისტემიდან, აღწერს ელექტრონის ისეთ მოძრაობას, როდესაც ამოცანა ერთი ნაწილაკის ურთიერთქმედებისა ნაწილაკთა უსასრულო რიცხვთან, დაიყვანება ერთი ნაწილაკის (ელექტრონის) ურთიერთქმედებაზე თავის თავთან (თვითქმედებაზე). 2) ამოცანის ასეთი არსებითი გამარტივების შედეგად ადვილი ხდება ამოხსნებისთვის ვარიაციული მეთოდების ფორმულირება, დაფუძნებული იენსენის უტოლობაზე, რომელიც წარმოადგენს ფუნქციონალურ ანალოგს ნ.ნ. ბოგოლუბოვის ვარიაციული პრინციპისა კვანტურ-სტატისტიკური სისტემების თავისუფალი ენერჯისთვის [25]. 3) მიღებულ ფუნქციონალთა დახმარებით, შესაძლებელი ხდება ზუსტად ამოხსნად მოდელთა კლასის აგება, რომლებიც შეესაბამებიან კვადრატულ ფუნქციონალებს და რომლებიც გამოიყენებიან როგორც მიახლოებითი მოდელები ვარიაციული გამოთვლებისათვის.

ფეინმანის მოდელის (მიახლოების) არსი პოლარონის ამოცანისთვის მდგომარეობს იმაში, რომ განიხილება ზუსტი, არალოკალური ქმედების აპროსიმირება არალოკალური კვადრატული ქმედებით. არალოკალურობის გათვალისწინება ანუ “მასსოვრობის” ეფექტის ჩართვა ქმედებაში, აძლევს ფეინმანის მიდგომას პოლარონის ამოცანისადმი უნიკალობის თვისებას, პოლარონის სხვა

თეორიებისაგან განსხვავებით [46]. ფეინმანის საცდელი ქმედება აღწერს ელექტრონს, რომელიც ურთიერთქმედებს მეორე ფიქტიურ ნაწილაკთან, რომლის კოორდინატების გამორიცხვა ხდება ქმედებიდან–მას შემდეგ, რაც განიხილება ელექტრონის მოძრაობა იონურ კრისტალში და კრისტალური მე-სრის რხევების (ფონონების) გავლენა ელექტრონზე მოდელირდება მეორე ნაწილაკით–რომლის მასაა M_F და რომელიც ურთიერთქმედებს კვადრატულად, k -ურთიერთქმედების მუდმივით ელექტრონთან. ასეთი სახის სისტემას, რომელიც აღწერს ელექტრონის ურთიერთქმედებას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან, ურთიერთქმედების (ბმის) α მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს, უწოდებენ პოლარონის ფეინმანის (ერთოსცილატორიან) მოდელს, რომელიც არის ტრანსლაციურად ინვარიანტული [44,46] (იხ. ნახ. 2).



ნახ.2. პოლარონის ფეინმანის მოდელი. ელექტრონი, რომელიც დაკავშირებულია “ზამბარის” მეშვეობით მეორე ნაწილაკთან მასით M_F

ამრიგად, პოლარონის ფეინმანის მოდელში ელექტრონისა და მასთან დაკავშირებული ვირტუალური, კორელირებული ფონონების “დრუბლის” მოძრაობა აღიწერება ელექტრონის ურთიერთქმედებით ფიქტიურ ნაწილაკთან. ამ მოდელის ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე [44,46]:

$$H_s^F = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{\vec{P}_F^2}{2M_F} + \frac{1}{2}k(\vec{r} - \vec{r}_F)^2, \quad (141)$$

სადაც: \vec{P} და \vec{P}_F - წარმოადგენენ ელექტრონისა და ფიქტიური ნაწილაკის იმპულსის ოპერატორებს, შესაბამისად; ხოლო \vec{r} და \vec{r}_F არიან ელექტრონისა და ფიქტიური ნაწილაკის რადიუს-ვექტორები, m არის ელექტრონის ეფექტური მასა გამტარობის ზონიდან, ხოლო M_F – ფიქტიური ნაწილაკის მასა. (141) პოლარონის ფეინმანის მოდელური ჰამილტონიანი აღწერს ნულოვან მიახლოებაში პოლარონის არადისპაციურ ყოფაცქევას ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების (ბმის) α მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს. თუ შემოვიღებთ ახალ კანონიკურ ცვლადებს, (141) ჰამილტონიანი შესაძლებელია დავიყვანოთ დიაგონალურ სახეზე. მართლაც გვექნება:

$$H_s^F = \frac{\bar{\mathcal{P}}^2}{2(m+M_F)} + \frac{M_F+m}{2mM_F} \bar{\mathbf{P}}_{os}^2 + \frac{k}{2} \bar{r}_{os}^2. \quad (1.42)$$

აქ: $\bar{\mathcal{P}} = \bar{\mathbf{P}} + \bar{\mathbf{P}}_F$ - წარმოადგენს მთლიანი იმპულსის ოპერატორს სისტემისა, რომელიც კანონიკურად შეუღლებულია მასათა ცენტრის რადიუს-ვექტორთან:

$$\bar{\mathbf{R}} = \frac{m\bar{\mathbf{r}} + M_F\bar{\mathbf{r}}_F}{m + M_F};$$

ხოლო $\bar{r}_{os} = \bar{r} - \bar{r}_F$ - წარმოადგენს ფარდობით კოორდინატს.

$\bar{\mathbf{P}}_{os} = \frac{M_F\bar{\mathbf{P}} - m\bar{\mathbf{P}}_F}{m + M_F}$ არის \bar{r}_{os} კოორდინატის კანონიკურად შეუღლებული იმპულსი. (1.42)

ჰამილტონიანის ენერგეტიკულ სპექტრს აქვს შემდეგი სახე:

$$E_{\bar{\mathcal{P}}, \bar{h}} = \frac{\bar{\mathcal{P}}^2}{2(m+M_F)} + \hbar v (h_x + h_y + h_z + 3/2); \quad (1.43)$$

$$(h_x, h_y, h_z = 0, 1, 2, \dots),$$

ხოლო: $v = \sqrt{k \frac{M_F+m}{mM_F}}$ წარმოადგენს ჰარმონიული ოსცილატორის სიხშირეს და

$\frac{mM_F}{M_F+m}$ არის სისტემის დაყვანილი მასა. M_F+m - სიდიდე მოცემულ მოდელში წარმოადგენს პოლარონის ეფექტურ მასას.

ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში, როდესაც $\alpha \gg 1$, ადგილი აქვს უტოლობებს: $M_F \gg m$ და $v \gg \omega_0$. ფეინმანის მიერ შე-
მოღებული იყო უგანზომილებო პარამეტრები V და W , რომლებიც დაკავშირებულია

M_F და v სიდიდეებთან შემდეგი ტოლობებით: $M_F = m \left[\left(\frac{V}{W} \right)^2 - 1 \right]$; $v = V\omega_0$; V და W

პარამეტრები განისაზღვრებოდნენ პოლარონის თავისუფალი ენერჯიის მინიმიზაციით [44,46]. მოდელის ყველა სხვა დანარჩენი პარამეტრი, როგორებიც

არიან: k , M_F+m , $\frac{mM_F}{m+M_F}$ და სხვ. შესაძლებელია განისაზღვრონ (m, ω_0) და (V, W)

პარამეტრების დახმარებით. სუსტი და საშუალო სიძლიერის (ინტენსივობის) ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha < 1$): $V \gg W$; $M_F \rightarrow 0$; $v \geq \omega_0$;

$V \geq 1$; $V \approx 1 + \frac{\alpha}{12}$ [47]. (V და W ვარიაციული პარამეტრების ყოფაქცევის შესახებ პოლარონის ფეინმანის მოდელში იხ. ნახ. 3).

პოლარონის პრობლემისადმი ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით, ფეინმანის მიერ ნაპოვნი იყო პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯიის ზედა

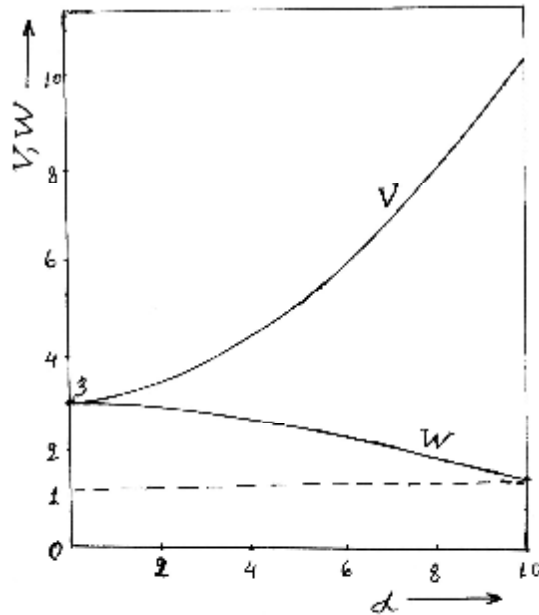
საზღვარი, კრისტალური მესრის (ფონონების) ნულოვანი ტემპერატურის ($T = 0$) დროს:

$$E \leq \frac{3}{4V}(V-W)^2 - \frac{\alpha V}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dU e^{-U}}{\left\{ W^2 U + \left[\left[(V^2 - W^2)/V \right] (1 - e^{-UV}) \right] \right\}^{1/2}} \quad (1.44)$$

$(\hbar = \omega_0 = m = 1)$

ფონონური ოპერატორების (ამპლიტუდების) გამორიცხვის შედეგად მიღებულ ზუსტ ქმედებას ჰქონდა შემდეგი სახე (გამოიყენებოდა ფეინმანის მეთოდი ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ კრისტალური მესრის ნულოვანი ტემპერატურის პირობებში):

$$S = \frac{1}{2} \int \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 dt - \frac{\alpha}{\sqrt{8}} \iint_0^\infty \frac{e^{-|t-s|}}{|\vec{r}(t) - \vec{r}(s)|} dt ds \quad (1.45)$$



ნახ.3. V და W – ვარიაციული პარამეტრების ყოფაქცევა, როგორც α -ურთიერთქმედების (ბმის) მუდმივას ფუნქციები, პოლარონის ფეინმანის თეორიაში

(1.44) და (1.45) თანაფარდობების განზოგადოება კრისტალური მესრის ნებისმიერი ტემპერატურების დროს შესრულებული იყო [48] ნაშრომში. V და W პარამეტრების ვარირების შედეგად (1.44) ფორმულიდან მიიღებოდა პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯიის ყველაზე საუკეთესო უმცირესი ზედა საზღვრის შეფასება α -ბმის მუდმივას სხვადასხვა მნიშვნელობების დროს:

1) α -ს მცირე მნიშვნელობების დროს ($\alpha < 1$), V და W -ს საუკეთესო მნიშვნელობებია: $V = 3[1 + 2\alpha(1-P)/3W]$, სადაც $P = \frac{2}{W}[(1-W)^{1/2} - 1]$ და $W = 3$. V და W -ს ამ მნიშვნელობებისათვის პოლარონის E -ენერჯისათვის გვექნება შემდეგი შეფასება:

$$E \leq -\alpha - \frac{1}{81}\alpha^2 + O(\alpha^3) = -\alpha - 0.0123\alpha^2 + O(\alpha^3). \quad (1.46)$$

სოლო შემფოტების თეორიის შედეგად მიღებული რეზულტატი ტოლია სიდიდის

$$E = -\alpha - 0.0126\alpha^2 + \dots \quad (1.47)$$

2) α -ს დიდი მნიშვნელობების შემთხვევაში, როდესაც ($\alpha \gg 1$), V და W -ს საუკეთესო მნიშვნელობებისთვის გვაქვს: $V = \frac{4}{9\pi}\alpha^2 4\left(\ln 2 + \frac{C}{2}\right) + 1$, სადაც C - ეილერ-მასკერონის მუდმივაა: $C = 0,5772\dots$ და $W = 1$. ამ შემთხვევაში პოლარონის ენერჯისთვის გვექნება შეფასება:

$$E \leq -\frac{\alpha^2}{3\pi} - \frac{3}{2}(2\ln 2 + C) - \frac{3}{4} + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) + \dots \quad (1.48)$$

როგორც მე-3 ნახ. ნათლად ჩანს, V და W ვარიაციული პარამეტრები, პოლარონის ფეინმანის მოდელში, წარმოადგენენ ბმის α -მუდმივას უწყვეტ ფუნქციებს. რიცხვითი გამოთვლების შედეგად მიღებული იყო პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯის დამოკიდებულება ბმის მუდმივაზე. გამოთვლებმა აჩვენა, რომ პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯის მნიშვნელობა პეკარის თეორიაში: $E_0 = -0.326\alpha^2$ ($\hbar\omega_0$ -ერთეულებში) – უფრო მცირე სიდიდისაა, ვიდრე პოლარონის ფეინმანის თეორიაში, როდესაც $\alpha > 34.29$. საერთოდ კი უნდა აღინიშნოს, რომ პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯის შეფასება ფეინმანის თეორიაში ბევრად უფრო მცირეა ყველა სხვა შეფასებებთან შედარებით, რომლებიც მიიღება პოლარონის სხვა თეორიების საშუალებით; გარდა ამისა, უნდა აღინიშნოს აგრეთვე ის გარემოებაც, რომ ფეინმანის მეთოდს გააჩნია დიდი უპირატესობა სხვა მეთოდებთან შედარებით პოლარონის თეორიებში, ვინაიდან ეს მეთოდი (ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ) იძლევა საშუალებას რომ ვიპოვოთ პოლარონის ენერჯის შეფასებები ბმის α -მუდმივას როგორც მცირე, ასევე საშუალო და დიდი მნიშვნელობების დროს; თანაც ეს მეთოდი იძლევა ერთადერთ საიმედო შედეგებს α -ბმის მუდმივას საშუალო ($5 < \alpha < 10$) მნიშვნელობებისათვის [46,49].

ფუნქციონალურ-ვარიაციული მეთოდის დახმარებით ფეინმანის მიერ გამოთვლილი იყო აგრეთვე პოლარონის ეფექტური მასის სიდიდე [44,46]. ინტეგრალებით ტრაექტორიების გასწვრივ მიახლოებით გამოთვლას – პოლარონის ფეინმანის მოდელის ქმედებისთვის – მიყვავართ პოლარონის ეფექტური მასის შემდეგ გამოსახულებამდე:

$$m_F^* = 1 + \frac{\alpha V^3}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\tau e^{-\tau} \tau^2 \left[\tau + \frac{V^2 - 1}{VW} (1 - e^{-VW\tau}) \right]^{-3/2} \quad (m=1). \quad (1.49)$$

(1.49) ფორმულაში V და W ვარიაციული პარამეტრების ოპტიმალური მნიშვნელობების ჩასმით შესაძლებელია შეფასებული იქნას m_F^* ეფექტური მასა α -ბმის პარამეტრის მნიშვნელობათა მთელ ინტერვალში. მცირე სიხქარეებით მოძრავი ფეინმანის პოლარონის ეფექტური მასის (1.49) მნიშვნელობა სუსტი და ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ზღვრულ შემთხვევებში წარმოდგინება შემდეგი სახით:

$$m_F^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{2\alpha^2}{81}; \quad \alpha \ll 1 \quad (m=1) \quad (1.50)$$

$$m_F^* = \left(\frac{4\alpha^2}{9\pi} \right)^2 - \frac{4\alpha^2}{\pi} (1 + 2 \ln 2 + C); \quad \alpha \gg 1.$$

რასაკვირველია, (1.49-1.50) გამოსახულებები სამართლიანია კრისტალის ნულოვანი ტემპერატურის ($T=0$) შემთხვევაში. (1.50) გამოსახულებები ეფექტური მასისათვის ძირითადი რიგით α -პარამეტრის მიხედვით ემთხვევა, შედეგებს გამომდინარე როგორც შეშფოთების თეორიიდან ($\alpha \ll 1$), ასევე ადიაბატური მიახლოებიდან ($\alpha \gg 1$).

საინტერესოა აღინიშნოს ის გარემოება, რომ m_F^* ეფექტური მასის მნიშვნელობები, რომლებიც ნაპოვნია (1.49) გამოსახულებიდან მხოლოდ უმნიშვნელოდ (რამოდენიმე პროცენტით) განსხვავდება საცდელი მოდელის სრული მასის

მნიშვნელობისაგან: $M_F + 1 = \left(\frac{V}{W} \right)^2$ (m – ელექტრონის ეფექტური მასის

ერთეულებში). სასრული ტემპერატურების დროს, პოლარონის ფეინმანის თეორიის ფორმულირებისას გამოითვლებოდა გიბსის ოპერატორის კვალი, ტრაექტორიების გასწვრივ ინტეგრალების მეთოდის გამოყენებით, ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში [48]. ელექტრონ-ფონონური სისტემის მდგომარეობათა ერთობლიობა დაკავშირებულია ჰელმჰოლცის თავისუფალი ენერჯის

მნიშვნელობებთან, რომლის მინიმიზაცია ხდებოდა V და W პარამეტრების მიხედვით მოცემული, ფიქსირებული ტემპერატურის პირობებში; ამგვარად განისაზღვრებოდა პოლარონის საშუალო ენერგია, როგორც ტემპერატურის ფუნქცია. ტემპერატურის ზრდასთან ერთად (α -პარამეტრის ფიქსირებული მნიშვნელობის დროს), პოლარონის საშუალო ენერგიისა და მისი ეფექტურ მასის მნიშვნელობები მცირდება. პოლარონის საშუალო ენერგიისა და ეფექტური მასის ასეთი ყოფაქცევა, როდესაც $T \rightarrow \infty$, $E \rightarrow 0$ და $m_F \rightarrow 0$ [48] ნაშრომში აიხსნება იმით, რომ ვინაიდან ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროს ფონონები არიან “თავისუფალი”, მათი ენტროპია იზრდება იმ ფონონების ენტროპიასთან შედარებით, რომლებიც დაკავშირებული არიან ელექტრონთან.

ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების თეორიაში არსებულ იმ მრავალრიცხოვან გამოკვლევათა შორის, რომელიც მიძღვნილია პოლარონის ფენიზანის მოდელის კინეტიკის საკითხებისადმი, განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭება ნაშრომებს, რომლებშიაც გამოკვლეულია პოლარონის ძვრადობა და ელექტროგამტარობა. ეს გამოკვლევები დამყარებულია გრინის ფუნქციითა მეთოდზე [50] ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების შესწავლაზე [51-52], თვითშეთანხმებული და ფენიზანის კონტინუალური ინტეგრების მეთოდების გამოყენებაზე [53-54], კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიაზე [55-56] და სხვ. როგორც წესი, რეზულტატები მიღებული ამ სხვადასხვა მეთოდების დახმარებით, რომლებშიაც გამოიყენება სხვადასხვა მიახლოებები, არის სხვადასხვა (ზოგჯერ არსებითადაც განსხვავდება ერთმანეთისაგან). უნდა აღინიშნოს, რომ ზოგადად პოლარონის კინეტიკის განხილვისას ყველა ზემოთ ჩამოთვლილი მეთოდი ითვალისწინებს ძირითადი მდგომარეობის ენერგიის შემცირებას და კვაზინაწილაკის მასის გაზრდას ფონონებთან ურთიერთქმედების შედეგად, რომელიც გამოწვეულია ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების დიდი ნაწილის გათვალისწინებით. დარჩენილი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება (ე.წ. “ნარჩენი” ურთიერთქმედება) აღწერს პოლარონის გაბნევას რეალურ (სითბურ) ფონონებზე და იძლევა შესწორებებს პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიისათვის და ეფექტური მასისთვის.

ამგვარად, თვით საკუთრივ პოლარონის ფენიზანის მოდელში, ელექტრონის ურთიერთქმედებას პოლარიზაციულ ველთან მიყვავართ არსებითად ორ, ერთმანეთისაგან განსხვავებულ მოვლენასთან (ეფექტთან):

1) ელექტრონი გარშემორტყმულია ვირტუალური ფონონების “ღრუბლით”. საკმარისად ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში,

სტრუქტურულად შედგენილ კვაზინაწილაკს – პოლარონს გააჩნია შინაგანი მდგომარეობა. ეს “ჩაცმის” ეფექტი, რომელიც არის შედეგი ვირტუალური ფონონების გამოსხივებისა და შთანთქმისა, ნულოვან მიახლოებაში აღიწერება ფეინმანის მოდელური ჰამილტონიანით (1.41).

2) დისიპაციის ეფექტი. ეს ეფექტი, რომელიც არსებითად განსხვავდება პირველისაგან, აღწერს პოლარონის დისიპაციის მოვლენას; ელექტრონი, ფონონურ ველთან ურთიერთქმედების შედეგად - ასხივებს და შთანთქავს რეალურ (სითბურ) ფონონებს, რის გამოც გადადის ერთი სტაციონარული მდგომარეობიდან მეორეში, მაგალითად გარეშე ველის ზემოქმედების შედეგად. თვით პოლარონის ურთიერთქმედება რეალურ ფონონებთან ამ მოდელში მოიცემა ფროლის-პეკარის (1.13) ურთიერთქმედების ჰამილტონიანით, სადაც V_k სიდიდეები განისაზღვრება (1.18) თანაფარდობებით.

ამგვარად, ფეინმანის კონტინუალური ინტეგრების ფორმალიზმისა და ფუნქციონალური-ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით შესაძლებელი ხდება ერთიანი მიდგომის ფარგლებში აღწერილ იქნას პოლარონის ამოცანა α -ბმის მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს, თანაც α -მუდმივას მნიშვნელობათა ფართო ინტერვალში ვლდებულობთ პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერჯის შეფასებას ბევრად უფრო ზუსტს, ვიდრე სხვა ცნობილი მეთოდების და მიახლოებების გამოყენებისას; ამ ფორმალიზმის დახმარებით შესაძლებელია გამოთვლილ იქნას თითქმის ყველა სტატიკური (თერმოდინამიკური) და დინამიური სიდიდე, რომელიც კი წარმოადგენს ინტერესს პოლარონის ამოცანისთვის დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის თეორიაში. რასაკვირველია, არ არსებობს წინასწარ გარანტია იმისა, რომ კარგი მიახლოება პოლარონის თავისუფალი ენერჯისთვის ასევე კარგად აღწერს პოლარონის სხვა ფიზიკურ მახასიათებლებს (ზოგიერთ შემთხვევაში, მართლაც ეს ასე არ არის), მაგრამ ზოგადად უნდა ითქვას, რომ ფუნქციონალურ-ვარიაციული მიდგომა შესაძლებელს ხდის პოლარონული სისტემის ყოფაქცევის ერთიანი სურათის ჩამოყალიბებას α -ბმის პარამეტრის მნიშვნელობათა ფართო ინტერვალში, კრისტალის სხვადასხვა ტემპერატურის დროს, გარეშე ველების სხვადასხვა დაძაბულობებისა და სიხშირეების შემთხვევაში და სხვ.

მაგრამ მიუხედავად პოლარონის ფეინმანის მოდელის უნიკალობისა, ამ მოდელსაც გააჩნია ერთგვარი შემოსაზღვრულობა. როგორც უკვე იყო აღნიშნული, ფეინმანის პოლარონის თეორიაში ხდება ზუსტი, არალოკალური ქმედების მიახლოება არალოკალური კვადრატული ქმედებით, რაც ადებს ერთგვარად შეზ-

ღუდვას ურთიერთქმედების პოტენციალის ფორმას, რომელიც შემოიფარგლება მხოლოდ ჰარმონიული ურთიერთქმედებით. გარდა ამისა, ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ნათლად არ ჩანს კავშირი პოლარონის ფეინმანის თეორიასა და პოლარონის პეკარის მოდელს შორის.

პოლარონის ფეინმანის მოდელის განზოგადოება შესრულებული იყო [57-58] ნაშრომებში. განსხვავებით პოლარონის ფეინმანის მოდელისაგან, განზოგადოებულ მოდელში არ ხდებოდა ქმედების აპროქსიმირება არალოკალური კვადრატული ქმედებით, ანუ ურთიერთქმედების პოტენციალი ფიქტიურ ნაწილაკთან არ იყო ჰარმონიული ტიპის; უფრო მეტიც, ელექტრონის ურთიერთქმედების პოტენციალი ფიქტიურ ნაწილაკთან არ იყო ფიქსირებული სახის - ამ პოტენციალის პოვნა ხდებოდა ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით [57-58]. მიმოვიხილოთ ახლა შედეგებით უფრო დაწვრილებით პოლარონის ფეინმანის განზოგადოებული მოდელი (ფგმ).

1.3.3. პოლარონის ფეინმანის განზოგადოებული მოდელი (ლატინჯერ-ლუს მოდელი)

პოლარონის ფეინმანის მოდელისაგან განსხვავებით ფგმ-ში, ელექტრონისა და მასთან დაკავშირებული ვირტუალური, კორელირებული, ოპტიკური ფონონების “ღრუბლის” მოძრაობის აპროქსიმირება ხდება ელექტრონის ტრაექტორიით, რომლის დროსაც ელექტრონი ურთიერთქმედებს M_{GF} მასის მქონე ფიქტიურ ნაწილაკთან V_{GF} პოტენციალის მეშვეობით. შედეგებით ყველაზე უფრო მარტივ შემთხვევაში ასეთი სისტემის (ელექტრონი+ფიქტიური ნაწილაკი) ჰამილტონიანი აიღება შემდეგი სახით [57]:

$$H_{GF}^s = \frac{\bar{P}^2}{2} + \frac{\bar{P}_{GF}^2}{2M_{GF}} + V_{GF}(\vec{r} - \vec{R}_{GF}), \quad (1.51)$$

სადაც: \bar{P}_{GF} , \vec{R}_{GF} და M_{GF} წარმოადგენენ იმპულსის ოპერატორს, რადიუს-ვექტორს და მასას ფიქტიური ნაწილაკისა, შესაბამისად. გამოთვლების გამარტივების მიზნით, ჩვენ შემოვისახდვრებით ერთეულთა სისტემით, რომელშიაც: $\hbar = m = \omega_0 = 1..$ (1.51) ფორმულაში, დაშვებულია, რომ ელექტრონი ურთიერთქმედებს ფიქტიურ ნაწილაკთან $V_{GF}(\vec{r} - \vec{R}_{GF})$ - ცენტრალური, ძალური პოტენციალით. თუ შემოვიღებთ ახალ კანონიკურ ცვლადებს, შესაძლებელია (1.51) ჰამილტონიანის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე და მისი წარმოდგენა შემდეგი ფორმით:

$$H_{GF}^s = \frac{\bar{\mathcal{P}}^2}{2(M_{GF} + 1)} + \frac{M_{GF} + 1}{2M_{GF}} \bar{\mathcal{P}}_{1GF}^2 + V_{GF}(\bar{\xi}). \quad (1.52)$$

აქ: $\bar{\mathcal{P}} = \bar{\mathcal{P}} + \bar{\mathcal{P}}_{GF}$ არის სისტემის სრული იმპულსის ოპერატორი, რომელიც კანონიკურად შეუღლებულია მასათა ცენტრის რადიუს-ვექტორთან: $\bar{R} = \frac{\bar{r} - \bar{R}_{GF} M_{GF}}{M_{GF} + 1}$; $\bar{\xi} = \bar{r} - \bar{R}_{GF}$ წარმოადგენს ფარდობით კოორდინატას, ხოლო $\bar{\mathcal{P}}_{1GF} = \frac{M_{GF} \bar{\mathcal{P}} - \bar{\mathcal{P}}_{GF}}{M_{GF} + 1}$ არის შესაბამისი იმპულსი. უნდა აღინიშნოს, რომ სიდიდე $M_{GF} + 1$ მოცემულ მიახლოებაში წარმოადგენს პოლარონის ეფექტურ მასას ფგმ-ში; თვით V_{GF} პოტენციალი ზოგადად არ არის ფიქსირებული, მისი ფორმა (სახე) მოიძებნება ვარიაციული პრინციპიდან მოცემულ მოდელში (შევნიშნავთ, რომ პოლარონის ფეინმანის მოდელში თეორიის ვარიაციულ პარამეტრებს წარმოადგენენ k და M_F სიდიდეები).

[57-58] ნაშრომებში განხილული იქნა ფეინმანის კონტინუალური ინტეგრების მეთოდი (ფეინმანის ფორმალიზმი – ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ), რომლის დახმარებითაც და იენსენის უტოლობის გათვალისწინებით, მიღებული იყო ოპტიკური პოლარონისთვის ენერჯის მნიშვნელობა E_0^{GF} , როგორც ქვედა საზღვარი ვარიაციული ენერჯისა E_V^{GF} , ისე რომ არ იყო ფიქსირებული ფორმა (სახე) V_{GF} ვარიაციული პოტენციალისთვის.

$$E_0^{GF} \leq E_V^{GF} = \left\langle u_0 \left| \frac{\bar{\mathcal{P}}_{1GF}^2}{2\mu} \right| u_0 \right\rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{2\mu}} \sum_{n=0}^{\infty} \iint d\bar{\xi} d\bar{\xi}' \times$$

$$\times \frac{u_0^*(\bar{\xi}') u_0(\bar{\xi}) u_n^*(\bar{\xi}) u_n(\bar{\xi}')}{|\bar{\xi} - \bar{\xi}'|} \left\{ \frac{1 - \exp[-2C(1 + \Delta\varepsilon_n)^{1/2} |\bar{\xi} - \bar{\xi}'|]}{1 + \Delta\varepsilon_n} \right\}, \quad (1.53)$$

სადაც: $\mu = \frac{M_{GF}}{M_{GF} + 1}$; $\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_n - \varepsilon_0$; $C = \frac{M_{GF}}{\sqrt{2(M_{GF} + 1)}}$ და: $u_n(\bar{\xi})$ და ε_n წარმოადგენენ საკუთარ ფუნქციებს და საკუთარ მნიშვნელობებს შრედინგერის განტოლებისა, არაფიქსირებული (განუსაზღვრელი) ვარიაციული პოტენციალით V_{GF} :

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \Delta_{\bar{\xi}} + V_{GF}(\bar{\xi}) \right] u_n(\bar{\xi}) = \varepsilon_n u_n(\bar{\xi}); \quad (1.54)$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots).$$

(1.52) ჰამილტონიანის ცხადი სახე გვიჩვენებს, რომ შრედინგერის განტოლება სისტემისათვის (ელექტრონი+ფიქტიური ნაწილაკი) შესაძლებელია განვაცადკევოთ

და ჩავწერთ როგორც (1.54) შრედინგერის განტოლება $V_{GF}(\vec{\xi})$ პოტენციალით, და აგრეთვე შემდეგი სახის შრედინგერის განტოლება $\Psi_{\vec{\vartheta}}(\vec{R})$ ტალღური ფუნქციისთვის:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{1}{M_{GF} + 1} \Delta_{\vec{R}} \right] \Psi_{\vec{\vartheta}}(\vec{R}) = E_{\vec{\vartheta}} \Psi_{\vec{\vartheta}}(\vec{R}), \quad (1.55)$$

სადაც: სისტემის სრული ენერგია $E_{\vec{\vartheta},n}^{GF}$ მოიცემა თანაფარდობით

$$E_{\vec{\vartheta},n}^{GF} = E_{\vec{\vartheta}} + \varepsilon_n \equiv \frac{\vec{\vartheta}^2}{2(M_{GF} + 1)} + \varepsilon_n, \text{ ხოლო } \Psi_{\vec{\vartheta}}(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{\vartheta}\vec{R}} \text{ წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას,}$$

რომელიც ნორმირებულია სისტემის V მოცულობაზე.

ვინაიდან (1.53) განტოლების ყველა წევრი, რომელიც ფიგურირებს აჯამვის სიმბოლოს ქვეშ, წარმოადგენს დადებით სიდიდეს, ამიტომ ცხადია, რომ თუ ჩვენ შემოვისაზღვრებით მხოლოდ ძირითადი წევრით ($h=0$) (1.53) განტოლების მარჯვენა ნაწილში, მაშინ ამ განტოლების მარჯვენა მხარე გახდება ზედა საზღვარი პოლარონის ენერგიისთვის. ძირითადი მდგომარეობის მიახლოებაში ჩვენ გვექნება:

$$E_0^{GF} \leq E_V^{GF} = \int d\vec{\xi} u_0^*(\vec{\xi}) \frac{\vec{P}_{1GF}^2}{2\mu} u_0(\vec{\xi}) - \frac{\alpha}{\sqrt{2\mu}} \iint d\vec{\xi} d\vec{\xi}'. \quad (1.56)$$

$$\frac{|u_0(\vec{\xi})u_0(\vec{\xi}')|^2}{|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|} \left\{ 1 - \exp[-2C|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|] \right\}.$$

ვინაიდან (1.56) ფუნქციონალი შეიცავს μ და $u_0(\vec{\xi})$ სიდიდეებს, შესაძლებელია ამ სიდიდეების ვარირება, იმისათვის, რომ ვიპოვოთ $E_V^{0GF}(\mu, u_0)$ ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა. თუ გამოვიყენებთ რიტცის ვარიაციულ პრინციპს (მეთოდს) პეკარის ტიპის საცდელი ტალღური ფუნქციებით, რომელსაც აქვს შემდეგი სახე:

$$u_0(\vec{\xi}) = N(1 + b\mu\xi + ab^2\mu^2\xi^2) e^{-b\mu\xi}; N^2 = \frac{2b^3\mu^3}{\pi(14 + 42a + 45a^2)}, \quad (1.57)$$

სადაც a და b წარმოადგენენ ვარიაციულ პარამეტრებს, მაშინ შესაძლებელია გამოთვლილ იქნას $E_V^{0GF}(\mu, a, b)$ - პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა. შესაძლებელია აგრეთვე გამოვიყენებუი იქნას ვარიაციული მეთოდი პირდაპირი ინტეგრირებისა. ვინაიდან E_V^{0GF} წარმოადგენს μ (დაყვანილი მასის) პარამეტრის ფუნქციას და $u_0(\vec{\xi})$ ფუნქციის ფუნქციონალს, და შეიცავს დამატებითი პირობის სახით მხოლოდ $u_0(\vec{\xi})$ ფუნქციის ნორმირებას:

$\int d\vec{\xi} |u_0(\vec{\xi})|^2 = 1$, ამიტომ მოთხოვნა საუკეთესო (ოპტიმალური) ურთიერთქმედების პოტენციალის შერჩევისა (რომელიც განაპირობებს პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის - $E_V^{0GF}(\mu, a, b)$ ენერჯის მინიმალური მნიშვნელობის მიღებას) ეკვივალენტურია შემდეგ განტოლებათა სისტემისა:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta u_0(\vec{\xi})} \left\{ E_V^{0GF} - \lambda \int d\vec{\xi}' |u_0(\vec{\xi}')|^2 \right\} &= 0; \\ \frac{\delta}{\delta \mu} E_V^{0GF} &= 0. \end{aligned} \quad (1.58)$$

ამრიგად, ამოცანა ფაქტიურად დაიყვანება μ სიდიდის თითოეული მნიშვნელობისათვის, პარტრის სახის თვითშეთანხმებული შრედიანგერის განტოლების ამოხსნამდე:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{P}_{1GF}^2}{2\mu} u_0(\vec{\xi}) - \frac{\alpha\sqrt{2}}{\mu} \int d\vec{\xi}' \frac{|u_0(\vec{\xi}')|^2}{|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|} [1 - \exp(-2C|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|)] \times \\ \times u_0(\vec{\xi}) = \varepsilon_0 u_0(\vec{\xi}). \end{aligned} \quad (1.59)$$

ამიტომ, ასეთი მიახლოების დროს V_{GF} თვითშეთანხმებული ვარიაციული პოტენციალისთვის გვექნება შემდეგი სახის გამოსახულება:

$$V_{GF}^0(\vec{\xi}) = -\frac{\alpha\sqrt{2}}{\mu} \int d\vec{\xi}' \frac{|u_0(\vec{\xi}')|^2}{|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|} [1 - \exp(-2C|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|)]. \quad (1.60)$$

(1.56-1.57) და (1.59) განტოლებების დახმარებით შესაძლებელია აღდგენილი (მიღებული) იქნას პეკარის ნახევრადკლასიკური თეორია [30,58]. ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha \gg 1$), როდესაც $M_{GF} \gg 1$, ($\varepsilon_0 \gg \hbar\omega_0$) და $C \rightarrow \infty$. (1.60) განტოლების თანახმად $V_{GF}^0(\vec{\xi})$ პოტენციალისთვის გვექნება გამოსახულება:

$$V_{GF}^0(\vec{\xi}) = -\frac{\alpha\sqrt{2}}{\mu} \int d\vec{\xi}' \frac{|u_0(\vec{\xi}')|^2}{|\vec{\xi} - \vec{\xi}'|}. \quad (1.61)$$

სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha < 1$), როდესაც $M_{GF} \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow 0$, $C \rightarrow 0$, თუ (1.56), (1.60) ფორმულების, ინტეგრალქვეშა გამოსახულებებში გავშლით ექსპონენტას მწკრივად, მაშინ მარტივად დაურწმუნდებით, რომ ამ ზღვრულ შემთხვევაში პოლარონის ენერჯია ფგმ-ში შემოსაზღვრულია მნიშვნელობით: $-\alpha$, ანუ $E_0 \leq -\alpha$. ზოგად შემთხვევაში, პოლარონის

$E_V^{0GF}(\mu, a, b)$ ენერგიის მნიშვნელობა შესაძლებელია გამოთვლილ იქნას ანალიზურად თუ გამოვიყენებთ შემდეგ ცნობილ ფორმულებს:

$$\frac{\exp\left(ik\left|\bar{\xi} - \bar{\xi}'\right|\right)}{4\pi\left|\bar{\xi} - \bar{\xi}'\right|} = ik \sum_{l=1}^{\infty} I_e(k\xi <) h_l^{(1)}(k\xi >) \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta, \varphi);$$

$$\int_0^Z t^n e^{-bt} dt = \frac{n!}{b^{n+1}} - e^{-bZ} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!} \frac{Z^k}{b^{n-k+1}}; \quad (1.62)$$

$$\int_Z^{\infty} t^n e^{-bt} dt = e^{-bZ} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n!}{k!} \frac{Z^k}{b^{n-k+1}}.$$

პოლარონის ენერგიის $E_V^{0GF}(\mu, a, b)$ მნიშვნელობა გამოთვლილი იყო [58] ნაშრომში. ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha \gg 1$) პოლარონის ენერგიის ზედა საზღვრის მნიშვნელობა ტოლია სიდიდის: $-0,108504\alpha^2$ [57-58].

რიცხვითი მეთოდების გამოყენებით, თვითშეთანხმებული (1.60) პოტენციალი როგორც საწყისი პოტენციალი, საშუალებას იძლევა რომ გამოვთვალოთ $u_n(\bar{\xi})$ აღგზნებული ტალღური ფუნქციები, შრეინგერის (1.59) განტოლების დახმარებით. პოლარონის ფგმ-ში, თვითშეთანხმებულ პოტენციალის ყოფაქცევა დიდ მანძილზე არის კულონური ტიპის, ხოლო მცირე მანძილზე (არეში, სადაც ელექტრონის ტალღური ფუნქცია არის დიდი) პოტენციალი არის პარაბოლური სახის (ჰარმონიული ოსცილატორის პოტენციალის ტიპის) [30,57-58]. განსხვავებით პოლარონის ფეინმანის მოდელისაგან, ამ მოდელში მარტივად ხერხდება მიღებული შედეგების (მაგალითად: პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიის) დაკავშირება შედეგებთან, რომლებიც გამომდინარეობენ პოლარონის პეკარის თეორიიდან, ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში. [58] ნაშრომში ნაჩვენებია, რომ მიდგომა, რომელიც ეყრდნობა ვარიაციული მეთოდის გამოყენებას ოპტიმალური, თვითშეთანხმებული პოტენციალის საპოვნელად, უკეთეს შედეგს იძლევა პოლარონის ძირითადი მდგომარეობის ენერგიის გამოთვლისას, ვიდრე ჰარმონიული აპროქსიმაცია ურთიერთქმედების პოტენციალისთვის.

ისევე როგორც პოლარონის ფეინმანის მოდელში, პოლარონის ფგმ-ში (1.51) მოდელური ჰამილტონიანი აღწერს ნულოვან მიახლოებაში პოლარონის არადისპაციურ ყოფაქცევას, α -პარამეტრის ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს. ამრიგად, პოლარონის ფგმ-შიც, ელექტრონის ურთიერთქმედებას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან მივყავართ ორ განსხვავებულ ეფექტთან. ერთი ეფექტი განაპირობებს პოლარონის - როგორც კვაზინაწილაკის სტრუქტურის ჩამოყა-

ლიბებს, რომელიც არის შედეგი ვირტუალური ფონონების გამოსხივებისა და შთანთქმისა და რომელსაც ადგილი აქვს ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების დროს და მეორე ეფექტი, რომელიც განსხვავდება პირველისაგან და რომელიც აღწერს პოლარონის დისიპაციის მოვლენას, განპირობებულს ელექტრონის ურთიერთქმედებით სითბურ პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან. ეს უკანასკნელი ეფექტი, ისევე როგორც პოლარონის ფეინმანის მოდელში, აღიწერება ფროლის-პეკარის ტიპის - (1.13) ურთიერთქმედების ჰამილტონიანით.

მიუხედავად კონტინუალური ინტეგრირების (ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ) მეთოდის უპირატესობისა სხვა მეთოდებთან შედარებით და ფუნქციონალურ-ვარიაციული მიდგომის დადებითი მხარეებისა, რომლებსაც ჩვენ შევეხეთ პოლარონის ფეინმანის მოდელისა და ფგმ-ის განხილვის დროს, წონასწორულ და არაწონასწორულ სტატისტიკურ მექანიკაში და, კერძოდ პოლარონული სისტემების თერმოდინამიკისა და კინეტიკის საკითხების შესწავლისას ფართო გამოყენება ჰპოვა მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმმა და T-ნამრავლთა მეთოდმა, რომელიც აგრეთვე ემყარება ფონონური ამპლიტუდების გამორიცხვის ტექნიკას [59-62]. უფრო მეტიც, შეიძლება ითქვას, რომ ზოგიერთი შედეგი პოლარონის თეორიაში პირველად მიღებულ იქნა სწორედ ამ მიდგომის გამოყენებით. გარდა ამისა, მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმსა და T-ნამრავლთა მეთოდს ენიჭება უპირატესობა ზოგიერთი საკითხის განხილვისას, განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც საჭიროა რეზულტატების მართებულობის საფუძვლიანობისა და ზოგიერთი თეორემების დამტკიცება სტატისტიკურ მექანიკაში, და კერძოდ, პოლარონის თეორიაში [60-62].

გასული საუკუნის 80-იან წლებში ნ.ნ. ბოგოლუბოვისა და ნ.ნ. ბოგოლუბოვ (უმც.) მიერ განვითარებულ იქნა ახალი მიდგომა ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის და პოლარონის წონასწორულ თეორიაში (განიხილებოდა ელექტრონის ურთიერთქმედება პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან), რომელიც სამართლიანია ნებისმიერი ტემპერატურებისა და ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების α -პარამეტრის ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს. ამ მიდგომას საფუძვლად ედო T-ნამრავლთა ტექნიკის გამოყენება ფონონების თავისუფლების ხარისხის გამოსარიცხად ელექტრონ-ფონონური სისტემიდან, და შესაბამისად ელექტრონ-ფონონური სისტემის მახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეების წონასწორული საშუალო მნიშვნელობების გამოთვლა [62]. T-ნამრავლთა ტექნიკა საშუალებას იძლევა მკაცრი მათემატიკური სიზუსტით და შედარებით მარტივ დონეზე დაასაბუთოს კონტინუალური ინტეგრების მეთოდის საფუძვლიანობის იდეა

[14-15]. ზუსტად ამოხსნადი ჰამილტონიანისა და აგრეთვე ვარიაციული პრინციპის გამოყენებამ პოლარონის თეორიაში, შესაძლებელი გახდა პოლარონის თავისუფალი ენერჯიის ზედა საზღვრის შეფასება სასრული ტემპერატურებისა და α -ბმის მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს [40,62]. უნდა აღინიშნოს, რომ მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმი და T-ნამრავლთა ტექნიკა განსაკუთრებით ეფექტური აღმოჩნდა პოლარონის თავისუფალი ენერჯიის გამოსათვლელად შეშფოთების თეორიის მეთოდების გამოყენებისას სასრული ტემპერატურების შემთხვევაში და აგრეთვე ელექტრონ-ფონონური სისტემის (პოლარონის) კინეტიკის საკითხების განხილვისას [5,14-16,62].

ახლა გადავიდეთ ფიზიკური კინეტიკის ზოგიერთი პრინციპული საკითხის მიმოხილვაზე დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ბოზონურ (ფონონურ) თერმოსტატთან.

1.4. ფიზიკური კინეტიკის ზოგიერთი საკითხი დინამიური სისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ (ბოზონურ) ველთან

როგორც ცნობილია, კინეტიკური განტოლებების მიღების ჩვეულებრივი პროცედურა დაკავშირებულია კორელაციების შესუსტების ჰიპოთეზასთან ან ეკვივალენტურ დაშვებებთან, მაგალითად შფმ-თან. ეს ჰიპოთეზა ან მიახლოება საშუალებას იძლევა რომ მოხდეს სისტემის შემოკლებული აღწერა კინეტიკური განტოლების სახით. მაგრამ, როგორც ცნობილია, დინამიურ სისტემებში მიმდინარე სტოქასტიკური პროცესების თეორიიდან, თუ დინამიური სისტემა წარმოადგენს K ტიპის სისტემას (ა.ნ. კოლმოგოროვის სახის სისტემები) [20,63], მაშინ არავითარი ჰიპოთეზა არ არის საჭირო კინეტიკური განტოლების მისაღებად, შემოკლებული აღწერა წარმოიქმნება ავტომატურად დინამიური სისტემის ევოლუციის პროცესში ფაზურ სივრცეში შერევის პროცესების არსებობის გამო ერთ-ერთი ან რამდენიმე დინამიური ცვლადის მიხედვით. სწორედ ამ ცვლადის ან ცვლადების მიხედვით ხდება კორელაციების სწრაფი შესუსტება. ანალოგიური დებულება სამართლიანია აგრეთვე კვანტური - K სისტემებისათვის. ტრადიციულად, როგორც წესი, კინეტიკური განტოლების გამოყვანას თან ახლავს სპეციფიური ტიპის აპრიორული ჰიპოთეზა. კარგად არის ცნობილი, რომ კინეტიკური განტოლების ფორმა და სტრუქტურა განისაზღვრება იმ პროცესების ალბათური ბუნებით და თვისებებით, რომლებსაც აღწერს თვით ეს განტოლება. თუ გამოვალთ ლიუვილის განტოლებიდან განაწილების ფუნქციისთვის (კვანტურ-მექანიკური მიდგომისას

ფონ-ნეიმანის განტოლებიდან სტატისტიკური ოპერატორისთვის), ჩვენ შეგვიძლია ვიპოვოთ კინეტიკური განტოლების სახე, თუ უგულვებელყოფთ წევრებს რომელთა გამო მოძრაობის დინამიური ხასიათი არსებითად განსხვავდება შემთხვევითი პროცესებისაგან. ამის გამო კინეტიკური განტოლების მიღებას ამა თუ იმ ფორმით თან ახლავს რაიმე პრინციპის ან აპრიორული ჰიპოთეზის ფორმულირება, და ამიტომ ასეთი ჰიპოთეზის არსი (დატვირთვა) მდგომარეობს იმაში, რომ მოცემული დინამიური სისტემისთვის შემოაქვთ შემთხვევითობის (ქაოსის) ესა თუ ის ელემენტი [3,20].

იმ მეთოდებს შორის, რომლებსაც მივყავართ კინეტიკური განტოლების მიღებამდე, ყველაზე უფრო სრულყოფილი განვითარება და გამოყენება ჰპოვა ნ.ნ. ბოგოლუბოვის მეთოდმა, რომელიც გადაბმული განტოლებების იერარქიული ჯაჭვის დახმარებით საშუალებას იძლევა განაწილების ფუნქციის აგებისა, და რომელიც გამომდინარეობს ლიუვილის განტოლებიდან. ეს მეთოდი ცნობილია, როგორც – ბბგკი-ის (ბოგოლუბოვი-ბორნი-გრინი-კირკუდი-ივონი) სახელწოდებით. ბბგკი-ის ჯაჭვი საბოლოოდ მთავრდება ბოლცმანის ტიპის განტოლების მიღებით. ამ მეთოდში გამოიყენება სივრცული კორელაციების შესუსტების პრინციპი, რომელიც მდგომარეობს იმაში, რომ ნაწილაკები რომლებიც საკმაოდ მანძილით არიან დაცილებული ერთმანეთისაგან სივრცეში, ასრულებენ არაკორელირებად მოძრაობას [4,34,64-65].

უნდა აღინიშნოს, რომ ფუნდამენტური მიღწევები ბოლცმანის ტიპის კინეტიკური განტოლების (როგორც კლასიკურის, ასევე კვანტურის) და ძირითადი კინეტიკური განტოლების გამოყვანაში, მიუძღვის ნ.ნ. ბოგოლუბოვს. ბოლცმანის სახის კვანტურ-კინეტიკური განტოლება მკაცრი სახით მიღებული იქნა ნ.ნ. ბოგოლუბოვის მიერ, რომელიც ეყრდნობოდა კორელაციების შესუსტების ჰიპოთეზას [36,66]. მის მიერ დამუშავებული იყო ფორმალური სქემები ზოგადად კინეტიკური განტოლებების მიღებისა და ფორმულირებული იყო მკაცრი მათემატიკური ფორმით ის დაშვებები, რომლებიც ავსებენ დამატებით ამ გამოყვანების მეთოდებს. კვანტური კინეტიკური განტოლების სხვა ფორმაც – ძირითადი კინეტიკური განტოლება (master equation), რომელიც პირველად შემოთავაზებული იყო პაულის მიერ – გამოყვანილი იყო ნ.ნ. ბოგოლუბოვის მიერ შფმ-ში, რომლის მიღების დროსაც გამოყენებული იყო შემფოთების ოპერატორის სპექტრალური თვისებები [36,66].

K-ტიპის დინამიური სისტემებისათვის (როგორც კლასიკურის, ასევე კვანტურისთვის), შესაძლებელია პაულის სახის კვანტური კინეტიკური განტოლე-

ბის მიღება შფმ-ის გამოყენების გარეშე. ასეთი სახის განტოლების მიღება დემონსტრირებული იყო [20] ნაშრომში, კვანტური არაწრფივი ოსცილატორის მაგალითზე, რომელზედაც მოქმედებდა გარეშე პერიოდული ძალა. მეთოდის ძირითადი იდეა, რომელიც გამოყენებული იყო [20] ნაშრომში მდგომარეობდა იმაში, რომ კვანტური K სისტემების ერგოდიულ თვისებებს კლასიკურ ზღვრულ შემთხვევაში მივყავართ სტატისტიკური ოპერატორის არადიაგონალური მატრიცული ელემენტების სწრაფ მიღევამდე. შედეგი მიღებული იყო კვაზიკლასიკურ მიახლოებაში, რომელსაც მივყავართ კვანტური დინამიური სისტემის შემოკლებული აღწერის შესაძლებლობაზე (ფაზურ სივრცეში) და როგორც შედეგი - ნაპოვნი იყო პაულის სახის კინეტიკური განტოლება.

უკანასკნელ წლებში, დინამიური სისტემების თეორიაში, ფართო განვითარება ჰპოვა მკაცრმა მეთოდებმა კვანტური დინამიური ქვესისტემის დინამიკის აღწერისა, რომელიც ურთიერთქმედებს დაკვანტულ ბოზონურ ველთან (თერმოსტატთან). ეს მეთოდები გამოირჩევა იმ თავისებურებით, რომ საშუალებას იძლევა, რათა მიღებული იქნას თანაფარდობები, რომლებიც აღწერენ ქვესისტემის დინამიკას, რომელიც სამართლიანია ბოზონურ ველთან ურთიერთქმედების (ბმის) მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობების დროს, ნებისმიერი ტემპერატურებისა და ნებისმიერი გარეშე მოქმედი ძალების შემთხვევაში. ამ მიდგომების დროს არ გამოიყენება დაშვება მთელი დინამიური სისტემის სტატისტიკური ოპერატორის გამარტივების შესახებ დიდი დროების შემთხვევაში: $t \gg \tau_0$ (სადაც: τ_0 - წარმოადგენს ქაოტიზაციის მახასიათებელ დროს), როდესაც ამ დაშვების თანახმად, მთელი კვანტური დინამიური სისტემის სტატისტიკური ოპერატორი ხდება ქვესისტემის დაყვანილი (რედუცირებული) სტატისტიკური ოპერატორის ფუნქციონალი.

პირველად ასეთი სახის ევოლუციური განტოლება ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორისათვის, როდესაც ქვესისტემა ურთიერთქმედებს ბოზონურ ველთან (ფონონებთან), რომლებიც იმყოფებიან სტატისტიკური წონასწორობის მდგომარეობაში T ტემპერატურით, მიღებული იყო [15-16] ნაშრომებში, ბოზონური ამპლიტუდების ზუსტი გამორიცხვით ამ ევოლუციური განტოლებიდან. ევოლუციური განტოლება შფმ-ის გამოყენებით ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის, რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან, მიღებული იყო [67-71] შრომებში, რომელიც განსხვავებით [5-6, 14-16] ნაშრომებში მიღებული განტოლებებისაგან არის ჩაკეტილი. სივრცული ერთგვაროვნების შემთხვევაში, ქვესისტემის (ელექტრონის) თერმოსტატთან სუსტი ურთიერთქმედების დროს

შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში ამ ევოლუციური განტოლებიდან გამომდინარეობს ბოლცმანის განტოლება ელექტრონისათვის [57,69-71]. განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებების მკაცრი გამოყვანა ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის შესრულებული იყო [6,14-15] შრომებში, სადაც განხილული იყო აგრეთვე ამ განტოლებების გამოყენება სხვადასხვა მოდელისთვის. შექმნილი იყო მეთოდი კინეტიკური განტოლებების მიღებისა, რომელიც ეყრდნობოდა განვითარებულ სპეციფიურ ტექნიკას – ველის კვანტური თეორიისა და T-ნამრავლთა ფორმალიზმის დახმარებით, – ბოზონური ამპლიტუდების გამორიცხვისა შესაბამისი კინეტიკური განტოლებებიდან [5-6]. შესაბამისი მიახლოებების შესრულებით, გამოყვანილი კინეტიკური განტოლებებიდან მიღებული იყო კონკრეტული ფიზიკური შედეგები, რომლებიც აღწერენ ელექტრონისა და პოლარონის კინეტიკას [27,29-31,38]. ამრიგად, ფუნდამენტური მიდგომა, რომელიც განვითარებული და გამოყენებული იყო [14-15] შრომებში, საშუალებას იძლეოდა შფმ-ში განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებების მიღებას სისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის, გამორიცხული ბოზონური ამპლიტუდებით.

უკანასკნელ პერიოდში, არაწონასწორული და შეუქცევადი პროცესების აღსაწერად და შესაბამისი ადეკვატური თეორიის შესაქმნელად, მყარი სხეულების ფიზიკაში ფართო გამოყენება და განვითარება ჰპოვა არაწონასწორული სტატისტიკური მექანიკის სხვადასხვა მეთოდებმა. არაწონასწორულ სისტემებში რელაქსაციური პროცესების შესასწავლად დიდი მნიშვნელობა ენიჭება კორელაციური და გრინის ფუნქციების მეთოდს [4,34,64-65,72-73]. უკანასკნელ წლებში, არაწონასწორული მოვლენების გამოსაკვლევეად ხშირად გამოიყენება აგრეთვე პროექციული ოპერატორის მეთოდი [74]. განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლება სტატისტიკური ოპერატორისათვის ქვესისტემისა, რომელიც ურთიერთქმედებს ბოზონურ თერმოსტატთან, შესაძლებელია მიღებულ იქნას ასევე არაწონასწორული სტატისტიკური ოპერატორის მეთოდის გამოყენებით [4,34].

[68] ნაშრომში, პროექციული ოპერატორისა და გრინის სუპეროპერატორის მეთოდი გამოიყენებოდა ჩაკეტილი ევოლუციური განტოლების მისაღებად ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორისათვის, რომელიც ურთიერთქმედებდა ბოზონურ ველთან, საიდანაც გამორიცხული იყო ბოზონური ოპერატორები. ამ ნაშრომში, ლიუვილის სუპეროპერატორული ფორმალიზმისა და პროექციული ოპერატორის მეთოდის დახმარებით, გამოყვანილი იყო მოძრაობის განზო-

გადიებული, კვანტური განტოლება გრინის დაგვიანებული სუპეროპერატორისთვის. გრინის სუპეროპერატორების მეთოდი გამოიყენებოდა აგრეთვე [75-76] ნაშრომებში, სადაც მიღებული იყო კვანტური ევოლუციური განტოლებები ქვესისტემის ოპერატორების დროის ორმოცდამეცხრე წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის. შესაბამისი მიახლოებების განხილვისას ქვესისტემის (ელექტრონის) დინამიკისთვის, ამ განტოლებებიდან მარტივად მიიღებოდა ცნობილი შედეგები ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის და, კერძოდ პოლარონის კინეტიკაში [29,77]; მაგრამ, მიუხედავად ამისა, ხაზი უნდა გაესვას იმ გარემოებას, რომ ყველა ზემოთ მოყვანილ ნაშრომში, ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის განზოგადებული კვანტური ევოლუციური განტოლების გამოყვანისას, და გრინის სუპეროპერატორებისთვის მოძრაობის განტოლებების მიღებისას, გამოიყენებოდა აპროქსიმაცია – შფმ, და ამიტომ ამ ნაშრომებში ყველა მიღებული განტოლება – როგორც ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის, ისე ქვესისტემის ოპერატორების წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის – არ არის ზუსტი.

როგორც ცნობილია, წრფივი გადატანის მოვლენების შესასწავლად მყარ სხეულებში, ერთ-ერთ ეფექტურ ხერხს წარმოადგენს მეთოდი, რომელიც დამყარებულია ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების გამოყენებაზე. გადატანის მოვლენების კვანტური თეორია, რომლის აღსაწერად გამოიყენება ბოლცმანის განტოლება, ფაქტიურად წარმოადგენს კვაზიკლასიკურ თეორიას, რომელიც დაფუძნებულია ადიაბატურ მიახლოებასა და შეშფოთების თეორიაზე. ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების კვანტურ თეორიაში ბოლცმანისეული მიდგომისას იგულისხმება, რომ გამტარობის ელექტრონები (ან პოლარონები) იმყოფებიან სტაციონარულ და თითქმის “თავისუფალ” მდგომარეობებში კვაზიიმიპულსების განსაზღვრული მნიშვნელობებით. კრისტალური მესრის პერიოდულობის დარღვევა განპირობებული, მაგალითად ფონონებით, იწვევს ელექტრონების მდგომარეობათა არასტაციონარობას. ელექტრონების ფონონებზე გაბნევისას იგულისხმება, რომ გაბნევის პროცესების აქტები კარგად არის განცალკევებული სივრცესა და დროში, და ამიტომ, ფაქტიურად, ადგილი არ აქვს ინტერფერენციის მოვლენას ელექტრონების ერთი მდგომარეობიდან მეორეში გადასვლის დროს. კრისტალზე მოდებული გარეშე ელექტრული ველი განიხილება როგორც სუსტი ინტენსივობისა (მცირე ამპლიტუდების მქონე) და მდორედ ცვლადი სივრცესა და დროში. როგორც შედეგი, ასეთი გარეშე ელექტრული ველის მოქმედება იწვევს მხოლოდ მუხტის მატარებელთა აჩქარებას და მათ გადასვლებს

სხვადასხვა მდგომარეობებში ისე, რომ არ ხდება თვით ამ მდგომარეობების არსებითი ცვლილება. ასეთ შემთხვევებში ელექტრონის გაბნევის კვეთები არ იღებენ დიდ მნიშვნელობებს. ამგვარად, ბოლცმანისეული აღწერა შეიძლება ჩაითვალოს როგორც კვაზიკლასიკური, სპეციფიური კვანტურ-მექანიკური ეფექტების გარეშე.

ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის ბოლცმანის განზოგადოებული განტოლება და პოლარონის ფროლიხის მოდელისათვის ბოლცმანის განტოლება მიღებული იყო სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში [14-15] ნაშრომებში. ბოლცმანის განტოლების მიღებისა და გამოყენების საფუძვლიანობა ელექტრონების დრეკადი გაბნევის შემთხვევაში მინარევულ ცენტრებზე, როდესაც ეს უკანასკნელნი განლაგებულნი არიან ქაოსურად სივრცეში, განხილული იყო [78-79] ნაშრომებში. როგორც უკვე აღვნიშნეთ, ბოლცმანის განტოლება შესაძლებელია მიღებული იქნას აგრეთვე ქვესისტემის (ელექტრონის) სიმკვრივის მატრიცის ზუსტი, ჩაკეტილი კინეტიკური განტოლებიდან, როდესაც ადგილი აქვს ელექტრონის სუსტ ურთიერთქმედებას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან, რომელიც განხილული იყო [67,69-71] ნაშრომებში. მაგრამ მიუხედავად ამისა უნდა აღინიშნოს, რომ გადატანის მოვლენების წრფივ თეორიაში, გადატანის მექანიკური კოეფიციენტების გამოსათვლელად ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების გამოყენების არე შეზღუდულია. ასე მაგალითად, ელექტრონ-ფონონური სისტემის შემთხვევაში, თუ ელექტრონების ფონონებზე გაბნევის სხვადასხვა აქტები ერთმანეთთან განიცდიან ინტერფერენციას, მაშინ ცხადია, რომ ბოლცმანის კინეტიკური განტოლება უკვე არ გამოიყენება [80].

გასული საუკუნის 70-იან წლებში, გადატანის არაწრფივი მოვლენების აღსაწერად და მექანიკური კოეფიციენტების (მაგ. ძვრადობა) გამოსათვლელად, ტორნბერგისა და ფეინმანის მიერ განვითარებული იყო ახალი მიდგომა, რომელიც თავისუფალი იყო იმ შეზღუდვებისაგან რასაც მოიცავდა გადატანის მოვლენების ბოლცმანისეული აღწერა. გამოყენებულ იქნა რა კონტინუალური ინტეგრების მეთოდი, ტორნბერგისა და ფეინმანის მიერ დადგენილი იყო არაწრფივი დამოკიდებულება კრისტალზე მოდებულ გარეშე ელექტრულ ველსა და მუხტის მატარებლის (ელექტრონის) დამყარებულ საშუალო სიჩქარეს შორის პოლარულ ნივთიერებებში [84]. ტორნბერგ-ფეინმანის თეორიის სქემაში ელექტრონ-ფონონური სისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის, რომელიც განისაზღვრებოდა ლიუვილ-ფონ ნეიმანის ევოლუციური განტოლებიდან, გამოყენებული იყო ძალიან რთული

მათემატიკური ფორმალიზმი დაფუძნებული ფეინმანის ინტეგრალზე ტრაექტორიების გასწვრივ [53,84]. უნდა აღინიშნოს, რომ ფეინმანის ტრაექტორიებით ინტეგრალების გამოთვლა არ ხერხდებოდა ზუსტად და ამიტომ ზემოთმითითებული ავტორები იყენებდნენ სხვადასხვა მიახლოებებს ფიზიკური შედეგების მისაღებად. ამ მიდგომის ფარგლებში, ელექტრონ-ფონონური სისტემის სიმკვრივის მატრიციდან ხდებოდა ფონონური ოპერატორების გამორიცხვა.

ამგვარად, ტორნბერგ-ფეინმანის მიდგომა და მეთოდი ამყარებდა არაწრფივ თანაფარდობას გარეშე სასრულ (ძლიერ) ელექტრულ ველებსა და ელექტრონის საშუალო სიჩქარეებს შორის პოლარულ კრისტალში, რაც ფაქტიურად საშუალებას იძლეოდა მყარ სხეულებში გადატანის არაწრფივი მოვლენების შესწავლის შესაძლებლობას [84-85]. ხაზი უნდა გაესვას იმ გარემოებას, რომ ტორნბერგ-ფეინმანის მიერ მიღებული ზემოთნახსენები შედეგები სამართლიანია როგორც ძლიერი, ასევე სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში. სამეცნიერო ლიტერატურაში ტორნბერგ-ფეინმანის მიდგომა ცნობილია როგორც ბალანსის განტოლების მეთოდი. აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ ბალანსის განტოლების მეთოდი აწყდება სიძნელეებს ელექტრონის (ან პოლარონის) ძვრადობის გამოთვლისას პოლარულ ნივთიერებებში ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროს. ამ მეთოდში მიხნეულია, რომ არც თუ ისე ძლიერი ელექტრული ველებისას მიიღწევა სტაციონარული მდგომარეობა, როდესაც ელექტრონი მოძრაობს მუდმივი სიჩქარით. [84] ნაშრომში დახატული ფიზიკური სურათი, ელექტრონის დამყარებული სიჩქარის დამოკიდებულებისა ძლიერ სტატიკურ ელექტრულ ველზე, პრინციპში სამართლიანია α , T და E -ს ნებისმიერი მნიშვნელობებისათვის, მაგრამ ავტორები აღნიშნავენ ორ ძირითად სირთულეს, რომელიც ჯერ კიდევ არ არის გადალახული დღევანდელ დღემდე:

1) იმპულსის ბალანსის განტოლებაზე დაყრდნობით მიღებული შედეგები არ ემთხვევა იმ შედეგებს, რომლებიც მიიღება ენერჯიის ბალანსის განტოლებიდან.

2) სუსტი ინტენსივობის ელექტრული ველების შემთხვევაში, ძვრადობა გამოთვლილი ბალანსის განტოლების დახმარებით არ ემთხვევა ძვრადობის იმ მნიშვნელობას, რომელიც მიიღება ბოლცმანის განტოლების ამოხსნით (განსხვავდება მისგან $\frac{3}{2} \frac{K_B T}{\hbar \omega_0}$ -ფაქტორით).

როგორც მოგვიანებით გაირკვა [15-16], ტორნბერგისა და ფეინმანის თეორიის შედეგი (მხოლოდ სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების ზღვრულ შემთხვევაში) შეიძლება მივიღოთ ბოლცმანის განტოლებიდან, თუ ვივარაუდებთ,

რომ მის სტაციონარულ ამოხსნას აქვს კვაზიმაქსველის განაწილების ფუნქციის სახე. მართლაც, ერთის მხრივ ელექტრონ-ფონონური სისტემის ქმედების აპროქსიმაციას კვადრატული ფუნქციონალით (ფეინმანის მეთოდში – ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ) ყოველთვის მიყვავართ კვაზიმაქსველის ტიპის იმპულსის განაწილების ფუნქციასთან [53,85] და ამავე დროს, მეორეს მხრივ ბოლცმანის განტოლების ამონახსნთა გამოკვლევები [86] და ელექტრონის დრეი-ფული სიჩქარის გამოთვლის ექსპერიმენტალური მონაცემები ძლიერ ელექტრულ ველებში დაბალი ტემპერატურებისას [87] ცხადად გვიჩვენებენ, რომ იმპულსის განაწილების ფუნქცია მკვეთრად განსხვავდება მაქსველისეულისაგან. თვისობრივად ეს დაკავშირებულია იმ ფაქტთან, რომ დაბალი ტემპერატურებისა და ძლიერი ველების შემთხვევაში, რელაქსაციის დომინირებულ მექანიზმად გვევლინება პოლარული ოპტიკური ფონონების გამოსხივება, რომელიც არის ძლიერ არადრეკადი და ანიზოტროპული ხასიათის პროცესი და რომელსაც მიყვავართ დენის მატარებლების სპეციფიურ ყოფაქცევამდე, რომელიც ცნობილია, როგორც “Streaming motion” მოვლენა. მიუხედავად ზემოთ აღნიშნული სირთულეებისა, [84-85] ნაშრომებში მოცემული თეორია წარმოადგენს ჯერჯერობით ერთადერთ მიკროსკოპულ თეორიას ელექტრონისა, ნებისმიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ძლიერ გარეშე ელექტრულ ველში.

იმისათვის, რომ დაეძლიათ ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების სიძნელეები ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში, რომლებიც დაფუძნებული იყო ბოლცმანის განტოლების გამოყენებაზე, და იმ მიზნით, რომ აეგოთ იმპენდანსის ერთიანი წრფივი თეორია პოლარონისთვის (ელექტრონისთვის) გარეშე ელექტრული ველის ნებისმიერი სიხშირეების, კრისტალის ნებისმიერი ტემპერატურებისა და ელექტრონ-ფონონური ბმის მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობის დროს, ფეინმანის, ხელვორსის, ილინგისა და პლატცმანის (ფხიპ) მიერ განვითარებული იყო მიდგომა, რომელიც დაფუძნებული იყო ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის არაწონასწორული სიმკვრივის მატრიცის გამოთვლაზე ფეინმანის მეთოდით – ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ. ფხიპ-ის მიერ მიღებული იყო წრფივი გამოძახილის ფუნქციის ზუსტი მნიშვნელობა ორმაგი კონტინუალური ინტეგრალის სახით ტრაექტორიების გასწვრივ, რომელიც შემდეგ აპროქსიმირებული იყო ფეინმანის ერთოსცილატორიანი მოდელის ფარგლებში [88]. ფხიპ-ის მიდგომამ შემდგომი განვითარება კპოვა [47,89-90] შრომებში. ფხიპ-ის მიერ მიღებული იმპენდანსის ზოგადი გამოსახულებიდან გამოყვანილი იყო პოლარონის ეფექტური მასისთვის ზოგადი ფორმულა, ნაპოვნი იყო პოლარონის ოპტიკური

შთანთქმის კოეფიციენტი და სხვ. მიღებული იყო აგრეთვე პოლარონის ძვრადობის ზოგადი ფორმულა ბმის მუდმივას ნებისმიერი მნიშვნელობისა და ნებისმიერი ტემპერატურის დროს. უნდა აღინიშნოს, რომ ფხიპ-ის მიერ მიღებული ყველა შედეგი სამართლიანია აგრეთვე ელექტრონისთვისაც, ბმის მუდმივას მცირე ($\alpha < 1$) მნიშვნელობებისას. მაგრამ მიუხედავად ფხიპ-ის მიდგომის უნივერსალობისა, ამ მიდგომასაც გააჩნია სირთულეები, რომლებიც დღემდე არ არის გადაწყვეტილი. ერთ-ერთი ძირითადი სირთულე მდგომარეობს იმაში, რომ ისევე როგორც ტორნბერგ-ფეინმანის თეორიაში, აქაც ნაპოვნი დრეიფული ძვრადობის მნიშვნელობა კრისტალის დაბალი ტემპერატურების დროს $\frac{3 K_B T}{2 \hbar \omega_0}$ -თანამამრავლით

განსხვავდება ძვრადობის იმ მნიშვნელობისაგან, რომელიც მიიღება ბოლცმანის განტოლების ამოხსნით დაბალი ტემპერატურებისას და ბმის მუდმივას როგორც მცირე, ასევე დიდი მნიშვნელობის დროს. არაწონასწორული სიმკვრივის მატრიცის მეთოდის სირთულე მდგომარეობს აგრეთვე იმაში, რომ არსებობს გარკვეული განუსაზღვრელობა იმპენდანსის მიახლოებითი მნიშვნელობის შერჩევაში, რომელიც აიღება მათემატიკურად არამკაცრი მოსაზრებებისა და ფიზიკის თვალსაზრისით გონივრული აპროქსიმაციის განხილვაში. საერთო ჯამში უნდა ითქვას, რომ ფხიპ-ის მიერ ნაპოვნი ელექტროგამტარობის ტენზორის გამოსახულება ძირითადად სწორად და ერთიანი თვალსაზრისით მისაღებად აღწერს პოლარონულ ეფექტებს ოპტიკაში, გალვანომანტიურ მოვლენებს და ციკლოტრონულ რეზონანს მყარი სხეულების ფიზიკაში და სხვ.

როგორც უკვე აღნიშნული იყო სადისერტაციო ნაშრომის შესავალში, ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების გამოსაკვლევად ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში, გარდა ბოლცმანის კინეტიკური განტოლებისა და ზემოთმოყვანილი მიდგომებისა და მეთოდებისა, შესაძლებელია გამოყენებული იქნას სრულიად განსხვავებული (ალტერნატიული) მიდგომა, რომელიც დაფუძნებულია კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიაზე [4,64,72-73]. ამ მიდგომის ფარგლებში არავითარი შეზღუდვა არ ედება ელექტრონის გაბნევის აქტებს (გაბნევის კვთებს) ფონონებზე, განსხვავებით ბოლცმანისეული აღწერისაგან. მაგრამ მიუხედავად ამისა, ელექტროგამტარობის გამოთვლისას კუბოს მეთოდით წარმოიშვება სირთულეები, რომლებიც დაკავშირებულია განშლადობებთან $\sigma(\omega)$ -ელექტროგამტარობის გაშლისას მწკრივად ელექტრონის ურთიერთქმედების ჰამილტონიანის მიხედვით ფონონებთან (გამბნევებთან), გარეშე ელექტრული ველის დაბალი $\omega \rightarrow 0$ – სიხშირეების შემთხვევაში. სუსტი ელექტრონ-

ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაშიც, $\sigma(\omega)$ -ელექტროგამტარობისთვის სწორი შედეგის მისაღებად, როდესაც $\omega \rightarrow 0$, აუცილებელია განშლადი წვერებისგან შედგენილი უსასრულო მწკრივის აჯამვა [80]. კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიამ – ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების აღსაწერად – შემდგომი განვითარება ჰპოვა [91,93-95] შრომებში. [91] ნაშრომში ლიუვილის განტოლებაზე დაყრდნობით და პროექციული ოპერატორის მეთოდის გამოყენებით, ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის მიღებული იყო ელექტროწინააღობის ზოგადი ფორმულა. შეშფოთების თეორიის გამოყენებითა და შესაბამისი მიახლოებების განხილვით (ე.წ. კენკრე-დრეზდენის აპროქსიმაცია) ამ ზოგადი გამოსახულებიდან ნაპოვნი იყო ელექტროწინააღობის (იმპენდანსის) მიახლოებითი ფორმულა. მოგვიანებით [101]-ნაშრომში ნაჩვენებია იყო, რომ კენკრე-დრეზდენის აპროქსიმაცია იმპენდანსისთვის და კუბოს ფორმულისთვის ეკვივალენტურია ფხიპის მიერ გამოყვანილი იმპენდანსის (ელექტროწინააღობის) მიახლოებითი მნიშვნელობისა სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში. კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორია და პროექციული ოპერატორის მეთოდი [94]-ნაშრომშიც გამოყენებული იყო ელექტროწინააღობის თეორიის ასაგებად. მიღებული იყო ზოგადი გამოსახულება ელექტროწინააღობისთვის და ნაჩვენებია იყო, რომ ისევე როგორც ელექტროგამტარობისთვის, ელექტროწინააღობის სწორი მნიშვნელობის მისაღებად აუცილებელია ცალკეული წვერებისგან შედგენილი უსასრულო მწკრივის აჯამვა. ზოგადი სახით დადგენილი იყო მარტივი კავშირი კომპლექსურ ელექტროგამტარობასა და იმპენდანს შორის. [95]-ნაშრომში კუბოს თეორიისა, ფონონების განტოლებისა და ცვანციგის ტიპის პროექციული ოპერატორის დახმარებით მიღებული იყო არაერთგვაროვანი ძირითადი კინეტიკური განტოლება, რომელიც საშუალებას იძლეოდა გამოძახილის ფუნქციის პოვნისა კუბოს ფორმალიზმში. გამოყვანილი იყო აგრეთვე ფორმულები განზოგადოებული ამთვისებლობისა და ელექტროგამტარობისთვის. ძირითადი კინეტიკური განტოლების დახმარებით ნაპოვნი იყო ბოლცმანის ტიპის განტოლება პირველი მომენტისთვის, რომელიც შეიცავდა როგორც დისიპაციურ, ასევე ნაკადისებრ წვერებს.

კუბოს ფორმალიზმი და გრინის ფუნქციათა მეთოდი [83], [93] ნაშრომში გამოყენებული იყო პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის გამოსათვლელად შეშფოთების თეორიის მეოთხე მიახლოებაში. ავტორთა მიერ ამ ნაშრომში, ელექტრონის სიჩქარის დროის ორმომენტიანი კორელაციური ფუნქცია გამოსახული იქნა გრინის ორნაწილაკოვანი ფუნქციის საშუალებით, ხოლო გრინის ორნაწილაკოვანი ფუნქცია წარმოდგენილი იქნა გრინის ერთნაწილაკოვანი

ფუნქციისა და ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების მიხედვით მწკრივის სახით. საბოლოოდ, მათ მიერ ნაპოვნი დაბალტემპერატურული ძვრადობის მნიშვნელობა იძლეოდა კარგ მიახლოებას [55]-ნაშრომში მიღებულ პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის სიდიდესთან, როდესაც $\alpha < 1$. გრინის ფუნქციათა მეთოდი და კუბოს წრფივი რეაქციის თეორია პოლარონის ძვრადობის გამოსათვლელად განხილული იყო აგრეთვე [96] ნაშრომში. ამ ნაშრომში კუბოს ფორმალიზმისა და ორნაწილაკოვანი ტემპერატურული გრინის ფუნქციის დახმარებით, შეშფოთების თეორიისა და ფეინმანის დიაგრამული ტექნიკის წესების გამოყენებით, ნაპოვნი იყო ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის მნიშვნელობა, ამ უკანასკნელის როგორც პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე, ასევე აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში. ავტორის მიერ, ელექტრონის დრეიფული ძვრადობის აღმწერ დაჯახებით ინტეგრალებში, ნაწილობრივ აჯამული იყო მნიშვნელოვანი წევრები შეშფოთების თეორიის მიახლოების ყველა რიგის მიხედვით ფეინმანის დიაგრამის წვეროსათვის (vertex terms, ladder diagrams). ნაჩვენები იყო, რომ ამ წევრთა წვლილი მნიშვნელოვანია ელექტრონის გაბნევისას აკუსტიკურ (პიეზოელექტრულ) ფონონებზე. დადგენილი იყო აგრეთვე, რომ ელექტრონის ძვრადობის გამოთვლისას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, ეს წევრები არ თამაშობენ მნიშვნელოვან როლს დაბალი ტემპერატურების დროს. [96]-ნაშრომში ფაქტიურად დადასტურებული იქნა [93]-ნაშრომი მიღებული შედეგების მართებულობა ელექტრონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის ყოფაქცევის შესახებ.

როგორც უკვე იყო აღნიშნული, მრავალი გამოკვლევა იქნა ჩატარებული ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების მიღებაზე პოლარონის ფეინმანის მოდელში და ამ განტოლებაზე დაყრდნობით პოლარონის დრეიფული ძვრადობის გამოთვლაზე. [97]- ნაშრომში ფეინმანის მოდელისთვის გამოყვანილი ბოლცმანის განტოლება გამოყენებული იყო პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის გამოსათვლელად. ბოლცმანის განტოლების დახმარებით პოლარონის დრეიფული ძვრადობა ფეინმანის მოდელში განხილული და გამოთვლილი იყო [51-52,98] შრომებშიც. [51]- ნაშრომში მიღებული იყო ბოლცმანის განტოლება, ნაპოვნი იყო სტატიკური და დინამური (სიხშირეზე დამოკიდებული) დრეიფული ძვრადობები და დადასტურებული იყო [97]- ნაშრომში მიღებული შედეგის სამართლიანობა პოლარონის დაბალტემპერატურული სტატიკური ძვრადობისთვის. [98]- ნაშრომში, ისევე როგორც [97]- ნაშრომში, ბოლცმანის განტოლების გამოყვანისას, განხილული და გაანალიზებული იყო პოლარონის დრეკადი გაბნევის პროცესი

ფონონებზე, ე.წ. პოლარონის რეზონანსული ურთიერთქმედება (გაბნევა) ფონონებთან, და ამ პროცესის გათვალისწინებითა და ბოლცმანის განტოლების ამოხსნით, ნაპოვნი იყო დაბალტემპერატურული ძვრადობის მნიშვნელობა პოლარონისთვის. [52]- ნაშრომში, პოლარონის ძვრადობა ფეინმანის მოდელში გამოთვლილი იყო სასრული ტემპერატურებისა და არასუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში. [52]- ნაშრომი ფაქტიურად წარმოადგენდა [51,55-56] შრომების (ოსაკას შედეგების) განზოგადობას – ოღონდ განსხვავებით ყველა სხვა ზემოთ მითითებული ნაშრომებისგან, ამ ნაშრომში ბოლცმანის განტოლება ამოხსნილი იყო ვარიაციული მეთოდის გამოყენებით (ზემოთაღნიშნულ შრომებში ბოლცმანის განტოლების ამოსახსნელად ძირითადად გამოიყენებოდა რელაქსაციის დროის მიახლოება, ან ამ მეთოდის ესა თუ ის მოდიფიცირებული ფორმა). რიცხვითი გამოთვლები ჩატარებული იყო TIBr-კრისტალების ნიმუშთა მონაცემების მიხედვით და კარგ თანხვედრაში იყო ექსპერიმენტის შედეგებთან. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ზემოთმოყვანილ ნაშრომებში და საერთოდ კინეტიკური განტოლების მეთოდში, ბოლცმანის განტოლების ამოხსნისას (საუბარია გაწრფივებულ განტოლებაზე) გამოიყენება სხვადასხვა სახის მიახლოებები (იხ. მაგ. [106]), და ამიტომ ელექტრონის და პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობებისთვის მიღებული მნიშვნელობები არ არის თანმიმდევრული და ზუსტი. ზოგადად ძალიან რთულია მკაფიოდ დადგინდეს ბოლცმანისეული მიდგომის გამოყენების საზღვრები საშუალო და ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევებში. მოსალოდნელია, რომ ეს მიდგომა სამართლიანი იქნება კრისტალის დაბალი ტემპერატურების დროს, როდესაც დაჯახებათა ხანგრძლივობის დრო (რომელიც არის $\hbar\beta = \hbar/K_B T$ -ს რიგის) ბევრად ნაკლებია τ -რელაქსაციის დროზე. ვარიაციული მეთოდი [106]- ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოსახსნელად პოლარონის ფროლიხის მოდელში განიხილებოდა აგრეთვე [99]- ნაშრომში. გამოთვლილი იყო ფროლიხის პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის სიდიდე, რომელიც ემთხვეოდა რელაქსაციის დროის მიახლოებაში ფროლიხის მიერ ნაპოვნი დაბალტემპერატურული სტატიკური ძვრადობის მნიშვნელობას პოლარონისთვის [43]. ამრიგად, როგორც ზემოთმოყვანილი ნაშრომების მიმოხილვა გვიჩვენებს, არსებობს არსებითი განსხვავება პოლარონის ძვრადობის მნიშვნელობებს შორის, რომელიც ერთის მხრივ მიიღება ბოლცმანის განტოლების ამოხსნისას რელაქსაციის დროის მიახლოებაში და მეორეს მხრივ ფეინმანის მეთოდის – ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ გამოყენებისას პოლარონის ფროლიხისა და ფეინმანის მოდელებში [100]. სუსტი გარეშე

ელექტრული ველებისა და სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში, პოლარონის ძვრადობის გამოთვლისას რელაქსაციის დროის მიახლოება შედარებით უფრო რეალური ჩანს, ვიდრე ბალანსის განტოლების მეთოდი [84-85,100]. [84,88] -ნაშრომებში პოლარონის ძვრადობა გამოთვლილი იყო ფეინმანის მეთოდით – ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ, ხოლო [15,85,101] შრომებში ძვრადობის გამოთვლისას გამოიყენებოდა ელექტრონის იმპულსების მიხედვით მაქსიმალური წანაცვლებული განაწილების ფუნქცია. [101] - ნაშრომში ნაჩვენებია იყო, რომ მეთოდები რომლებიც განვითარებული და გამოყენებული იყო [91-92,84,88] შრომებში, სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმისა და სუსტი გარეშე ელექტრული ველების შემთხვევაში, პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობისთვის იძლეოდნენ ფაქტიურად ერთნაირ მნიშვნელობებს; რაც შეეხება გამოთვლებს, რომლებიც დაფუძნებულია ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების გამოყენებაზე, ოპტიკური პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობისთვის მიყვავართ სხვა მნიშვნელობებთან. [97,100]. კრიტიკული ანალიზი, პოლარონის ძვრადობისთვის მიღებული სხვადასხვა მნიშვნელობების თანხვედრის შესახებ, ჩატარებული იყო [102,103]- შრომებში, და დადგენილი იყო, რომ ოპტიკური პოლარონის ძვრადობის სიდიდე დამოკიდებულია ზღვრული გადასვლების $\alpha \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$ ოპერაციების თანმიმდევრობაზე (ამ შრომებში ნაჩვენებია იყო, რომ ზღვრული გადასვლების სწორი თანმიმდევრობაა: $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0}$).

პოლარონის ფგმ-ში [57-58] –ბოლცმანის ტიპის კინეტიკური განტოლება ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ბმისა და კრისტალის დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში, მიღებული იყო [70-71]- შრომებში. ბოლცმანის განტოლების მიღებისას, ავტორები ეყრდნობოდნენ მათ მიერ [68-69]- ნაშრომებში გამოყვანილ ჩაკეტილ კინეტიკურ განტოლებას ქვესისტემის (პოლარონის) სტატისტიკური ოპერატორისათვის, რომელიც ნაპოვნი იყო შფმ-ში. განიხილებოდა მცირე სიჩქარით მოძრავი პოლარონი დაბალი ტემპერატურების დროს და მიღებული იყო კინეტიკური განტოლება ქვესისტემის სტატისტიკური ოპერატორის, როგორც დიაგონალური მატრიცული ელემენტისათვის (პოლარონის განაწილების ფუნქციისთვის, პოლარონის ძირითადი მდგომარეობისთვის), ასევე არადიაგონალური მატრიცული ელემენტებისათვის (პოლარონის აგზნებული, გადაგვარებული მდგომარეობებისთვის). რაც შეეხება თვით საკუთრივ პოლარონის ძვრადობას, იგი გამოთვლილი არ იყო ამ მოდელში. აქვე, ერთხელ კიდევ უნდა აღინიშნოს და ხაზი გაესვას იმ გარემოებას, რომ თვით ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების სხვადასხვა მეთოდებით გამოყვანისას და მისი ამოხსნისას გამო-

იყენება სხვადასხვა სახის მიახლოებები, და ამიტომ ელექტრონის და პოლარონის ძვრადობის თანმიმდევრული და კორექტული გამოთვლის პრობლემა სხვადასხვა მოდელში მოითხოვს შემდგომი დამატებითი გამოკვლევების ჩატარებას.

კოვალენტურ (არაიონურ) კრისტალებში, მაგალითად გერმანიუმისა და სილიციუმის ტიპის ნახევარგამტარებში, ელექტრონების ურთიერთქმედება ფონონებთან აღიწერება დეფორმაციის პოტენციალის მეთოდით, რომელიც მოქმედებს ზონურ ელექტრონზე და რომელიც წარმოადგენს ახლომქმედ შემფოთებას კრისტალის პერიოდული პოტენციალისთვის [39,42,107]. ელექტრონის მოძრაობის შემფოთება, გამოწვეული ამ ურთიერთქმედებით, წარმოადგენს კვაზინაწილაკის გაბნევას დეფორმაციის პოტენციალზე. თავისი ბუნებიდან გამომდინარე, ეს ურთიერთქმედება დამახასიათებელია ყველა ნახევარგამტარებისთვის და საერთოდ მყარი სხეულებისთვის. როგორც ცნობილია, ელექტრონის ურთიერთქმედება (გაბნევა) აკუსტიკურ ფონონებთან შესაძლებელია იყოს როგორც სუსტი, ასევე ძლიერი [41,104]. ელექტრონის სუსტი ურთიერთქმედებისას აკუსტიკურ ფონონებთან, ელექტრონის გადაადგილებას კოვალენტური კრისტალების გამტარობის ზონაში თან ახლავს კრისტალის ლოკალური დეფორმაციის გადანაცვლება, რომელიც აღიწერება შემფოთების თეორიის ენაზე, როგორც ელექტრონის მიერ ვირტუალური ფონონების გამოსხივებისა და შთანთქმის პროცესი; ხოლო კრისტალებში, რომლებსაც გააჩნიათ მცირე დრეკადობის მოდულები და გამტარობის ზონაში ელექტრონების დიდი ეფექტური მასები – ელექტრონის ურთიერთქმედება გრძივ აკუსტიკურ ფონონებთან არის ძლიერი, რასაც მიჰყვარათ კრისტალის ლოკალურ დეფორმაციასთან, რომელიც საკმარისია პოტენციალური ორმოს წარმოსაქმნელად და რომელშიაც ელექტრონი ასრულებს სტაციონარულ მოძრაობას დისკრეტული ენერგიით (ე.წ. აკუსტიკური პოლარონის მოდელი) [39,41-42,104-105]. აკუსტიკური პოლარონის მოდელთან, და საერთოდ კვაზინაწილაკის ლოკალიზაციის პრობლემასთან მყარ სხეულებში, მჭიდროდ არის დაკავშირებული საკითხი ელექტრონის ე.წ. თვითჩაჭერისა, რომელიც გამოწვეულია ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედებით [41-42,104-105]. აკუსტიკური პოლარონის მოდელი – ფეინმანის მეთოდით, ინტეგრალები ტრაექტორიების გასწვრივ – შესწავლილი იყო [41,104-105] შრომებში. დადგენილი იყო, რომ ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში ადგილი აქვს ელექტრონის თვითჩაჭერას, რომელიც განპირობებულია დეფორმაციის პოტენციალით გამოწვეული ახლომქმედი ურთიერთქმედებით. საერთოდ უნდა აღინიშნოს, რომ ელექტრონების თვითჩაჭერის ამოცანის შესწავლას დიდი მნიშვნელობა აქვს ელექტრონული

(პოლარონული) გადატანის მოვლენების აღსაწერად მყარ სხეულებში, ვინაიდან კრისტალური მესრის დეფორმაციის შედეგად თვითნაჭერილი კვაზინაწილაკი არ იძლევა წვლილს ელექტროგამტარობაში (ძვრადობაში).

სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში, ელექტრონული გადატანის მოვლენების შესასწავლად აკუსტიკური პოლარონის მოდელში კრისტალის დაბალი ტემპერატურების დროს, გამოიყენება კინეტიკური (ბოლცმანის) განტოლების მეთოდი. დაბალი ტემპერატურებისას ელექტრონის ძვრადობა ძირითადად განისაზღვრება მისი გაბნევით კრისტალში არსებულ მინარევებზე და აკუსტიკურ ფონონებზე. სუფთა კრისტალებში დაბალი ტემპერატურებისას – როდესაც ოპტიკური ფონონები სუსტად არიან აღგზნებული – დომინირებს ელექტრონის გაბნევა აკუსტიკურ ფონონებზე. ელექტრონის ურთიერთქმედების ენერგია გრძელტალღოვან გრძივ აკუსტიკურ ფონონებთან მცირე სიდიდისაა, ვიდრე მისი ურთიერთქმედების ენერგია პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან და, გარდა ამისა, ელექტრონის ენერგიის ცვლილება აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, წარმოადგენს მცირე სიდიდეს (კვაზიდრეკადი გაბნევა). ამის გამო, ელექტრონის გაბნევა აკუსტიკურ ფონონებზე შესაძლებელია განხილულ იქნას რელაქსაციის დროის მიახლოებაში [29,32-33,107]. ვინაიდან ამ შემთხვევაშიც ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოხსნისას გამოიყენება სხვადასხვა სახის მიახლოება (მაგალითად, შფმ), ელექტრონის ძვრადობის გამოთვლა მის აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, მოითხოვს დამატებითი გამოკვლევების ჩატარებას [29,108].

სადისერტაციო ნაშრომში განვითარებულია და გამოყენებულია მიდგომა, ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების გამოსაკვლევად კვანტური დინამიური სისტემების ზემოთმოყვანილი მოდელისთვის (რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ ველთან), რომელიც დამყარებულია კუბოს წრფივი გამოძახილისა და შეშფოთების თეორიაზე [109-122, 125].

მოწესრიგებულ ოპერატორთა ფორმალიზმი და პროექციული ოპერატორის მეთოდი, T-ნამრავლთა მეთოდი (ტექნიკა) და ფონონური (ბოზონური) ოპერატორების გამორიცხვის პროცედურა წონასწორული, დროითი კორელაციური ფუნქციებისათვის აღწერილი და გამოყენებული იქნება სადისერტაციო ნაშრომის II და III თავში. III თავში განხილულია ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების საკითხები კვანტურ დისიპაციურ სისტემებში – ელექტრონ-ფონონურ სისტემაში, პოლარონის ფროლიხის მოდელში, აკუსტიკური პოლარონის მოდელში, პოლარონის ფგმ-ში – დაფუძნებული კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიაზე; კერძოდ, III თავში გამოთვლილია ელექტრონული და პო-

ღარონული გადატანის მექანიკური (კინეტიკური) კოეფიციენტები (ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) ზემოთ მითითებულ მოდელებში, ზემოთ ნახსენებ ფორმალიზმსა და მეთოდზე, და კორელაციური ფუნქციებისათვის განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებზე დაყრდნობით.

**თავი II. განზოგადოებული კვანთური ევოლუციური განტოლებებიდან
ორმომენტური წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის
ფუნქციებისთვის დინამიური ქმნისტიმისა, რომელიც ურთიერთქმედებს
თერმოსტატთან (გოზონურ ველთან)**

**2.1. მოწესრიგებული ოპერატორთა ფორმალიზმი
და T-ნამრავლთა მეთოდი**

განვიხილოთ მცირე დინამიური ქვესისტემა s , რომელიც ურთიერთქმედებს ბოზონურ (ფონონურ) ველთან Σ . მთლიანი $(s + \Sigma)$ სისტემის ჰამილტონიანი ავიღოთ შემდეგი სახით:

$$H = H_s + H_\Sigma + H_{int.}, \quad (2.1)$$

სადაც H_s არის s ქვესისტემის საკუთარი ჰამილტონიანი; H_Σ - წარმოადგენს ბოზონური (ფონონური) ველის ჰამილტონიანს; ხოლო $H_{int.}$ - არის s ქვესისტემის ურთიერთქმედების ჰამილტონიანი - ბოზონურ ველთან.

$$H_\Sigma = \sum_k \hbar \omega(k) b_k^+ b_k; \quad H_{int.} = \sum_k [C_k(s) b_k + C_k^+(s) b_k^+], \quad (2.2)$$

$C_k(s)$ და $C_k^+(s)$ - წარმოადგენენ ოპერატორებს, რომლებიც მიეკუთვნებიან s ქვესისტემას. მთლიანი (2.1) - ჰამილტონიანი არ არის დამოკიდებული დროზე. A_s, B_s, \dots აღვნიშნოთ ოპერატორები შრედინგერის წარმოდგენაში, რომლებიც დამოკიდებული არიან მხოლოდ s ქვესისტემის დინამიურ ცვლადებზე და რომლებიც არ არიან დამოკიდებული დროზე. ოპერატორები, რომლებიც დამოკიდებული არიან მხოლოდ s -ის ან Σ -ს ცვლადებზე, კომუტირებენ ერთმანეთთან. ბოზონური (ფონონური) სისტემა Σ განიხილება როგორც თერმოსტატი. დაეუშვათ, რომ $A_s(t)$ და $B_s(t)$ - წარმოადგენენ s ქვესისტემის ოპერატორებს ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში:

$$A_s(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} A_s e^{-\frac{i}{\hbar} H t}; \quad B_s(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H \tau} B_s e^{-\frac{i}{\hbar} H \tau};$$

ამ ოპერატორების საწყისი მნიშვნელობებისათვის გვექნება

$$A_s = A_s(t)|_{t=0}, \quad B_s = B_s(\tau)|_{\tau=0}$$

დროის ორმომენტური წონასწორული კორელაციური ფუნქციები და გრინის ფუნქციები (დაგვიანებული, წინმსწრები და მიზეზობრივი) განისაზღვრებიან შემდეგი ტოლობებით (იხ. მაგ. [25,34,64]).

$$F_{A_s B_s}(t-\tau) = \langle A_s(t) B_s(\tau) \rangle.$$

$$G^r(t-\tau) = \theta(t-\tau) \langle [A_s(t)B_s(\tau)]_\eta \rangle; \quad G^a(t-\tau) = -\theta(\tau-t) \langle [A_s(t)B_s(\tau)]_\eta \rangle$$

$$G^c(t-\tau) = \frac{1}{i\hbar} \langle T_\eta \{A_s(t)B_s(\tau)\} \rangle, \quad (2.3)$$

სადაც: $\theta(x) = \begin{cases} 1; x > 0 \\ 0; x < 0 \end{cases}; [A_s(t)B_s(\tau)]_\eta = A_s(t)B_s(\tau) - \eta B_s(\tau)A_s(t);$

$$T_\eta \{A_s(t)B_s(\tau)\} = \theta(t-\tau)A_s(t)B_s(\tau) + \eta\theta(\tau-t)B_s(\tau)A_s(t).$$

$\eta = 1$ - ბოზე ოპერატორებისათვის და $\eta = -1$ ფერმი ოპერატორებისათვის, და

$$\langle \dots \rangle = Z^{-1}(\beta) SP_{s\Sigma}(e^{-\beta H} \dots); \quad \beta^{-1} = k_B T, \quad (2.4)$$

სადაც: $Z(\beta) = SP_{s\Sigma}(e^{-\beta H})$ - წარმოადგენს სტატჯამს მთელი $(s + \Sigma)$ სისტემისათვის; k_B - არის ბოლცმანის მუდმივა; T - აბსოლუტური ტემპერატურა, ხოლო \hbar - პლანკის მუდმივა; გასაშუალოება (2.4) ფორმულაში ხორციელდება გიბსის კანონიკური ანსამბლის წონასწორული სტატისტიკური ოპერატორის მიხედვით.

განიხილება შემდეგი სახის ზოგადი ამოცანა [109-113] – აგებული უნდა იქნას თეორია, რომლის საშუალებითაც შესაძლებელი იქნება მივიღოთ ზუსტი, განზოგადოებული (აღბათ არაჩაკეტილი), კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური და გრინის ფუნქციებისათვის A_s და B_s – ოპერატორებისათვის, s – დინამიური ქვესისტემისათვის, რომელიც ურთიერთქმედებს Σ სისტემასთან – ბოზონურ ველთან. ამ თეორიის აგებისას, გამოყენებული უნდა იქნას მოწესრიგებულ ოპერატორთა მეთოდი [5-6, 59-61], $(s + \Sigma)$ -სისტემის (2.1) ჰამილტონიანის ცხადი სახე და გიბსის კანონიკური ანსამბლის სტატისტიკური ოპერატორი. გამოვიყვანოთ ჯერ განზოგადოებული კვანტური, ევოლუციური განტოლება წონასწორული კორელაციური ფუნქციისათვის:

$$F_{B_s A_s}(t) = \langle B_s(t)A_s \rangle = \langle B_s A_s(-t) \rangle. \quad (2.5)$$

დასმული ამოცანის გადასაწვევად ჩავწეროთ (2.5) კორელაციური ფუნქცია შემდეგი სახით:

$$\langle B_s(t)A_s \rangle = Z^{-1}(\beta) SP_{s\Sigma} [e^{-\beta H} B_s(t)A_s] = Z^{-1}(\beta) SP [A_s G_{B_s}(t, \beta)] \quad (2.6)$$

(2.6) ფორმულაში, ჩვენ შემოვიღეთ დამხმარე ოპერატორი $G_{B_s}(t, \beta)$, რომელიც განისაზღვრება ტოლობით:

$$G_{B_s}(t, \beta) = SP_{s\Sigma} [e^{-\beta H} B_s(t)]. \quad (2.7)$$

თუ გავაწარმოებთ (2.5) – კორელაციურ ფუნქციას t -დროითი ცვლადის მიხედვით, მაშინ ჩვენ მივიღებთ განტოლებას, რომელიც განსაზღვრავს მის ევოლუციას დროში:

$$\frac{\partial}{\partial t} F_{B_s A_s}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, B_s(t)]_- \cdot A_s \rangle, \quad (2.8)$$

სადაც [...] – წარმოადგენს კომუტატორის აგებულს ორი ოპერატორისაგან.

განვსაზღვროთ, აგრეთვე ევოლუციის წრფივი ოპერატორები: $W^+(t, 0)$,

$W(t, 0)$, $W^+(\beta, 0)$, $W(\beta, 0)$ - შემდეგი თანაფარდობებით:

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar} H t} &= W^+(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}, & e^{-\frac{i}{\hbar} H t} &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} W(t, 0), \\ e^{-\beta H} &= W^+(\beta, 0) e^{-\beta H_0}, & e^{-\beta H} &= e^{-\beta H_0} W(\beta, 0) \end{aligned} \quad (2.9)$$

სადაც:

$$H_0 = H_s + H_\Sigma.$$

თუ შემოვიღებთ T-ნამრავლთა ცნებას [5-6], მაშინ ეს ოპერატორები ფორმალურად შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} W^+(t, 0) &= \begin{cases} T_a \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] & t > 0 \\ T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_t^0 d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] & t < 0 \end{cases} \\ W(t, 0) &= \begin{cases} T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] & t > 0 \\ T_a \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^0 d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] & t < 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.10)$$

სადაც: $\tilde{H}_{\text{int}}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} H_{\text{int}} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau}$ და:

$$\begin{aligned} W^+(\beta, 0) &= T_a \exp \left[-\int_0^\beta d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda) \right]; & \beta > 0 \\ \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda) &= e^{-\lambda H_0} H_{\text{int}} e^{\lambda H_0} \\ W(\beta, 0) &= T \exp \left[-\int_0^\beta d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda) \right]; & \beta > 0 \\ \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda) &= e^{\lambda H_0} H_{\text{int}} e^{-\lambda H_0} \end{aligned} \quad (2.11)$$

ამ ოპერატორების საწყისი მნიშვნელობებისათვის გვექნება:

$$W^+(t, 0)|_{t=0} = W(t, 0)|_{t=0} = 1; \quad W^+(\beta, 0)|_{\beta=0} = W(\beta, 0)|_{\beta=0} = 1.$$

შემოდებულ ოპერატორებს გააჩნიათ აგრეთვე ჯგუფური თვისებები:

$$W^+(t, 0) = W(0, t) = W^{-1}(t, 0); \quad W(t, \tau) W(\tau, 0) = W(t, 0) \quad (2.12)$$

$$\text{და } W^+(\beta, 0) = W(0, \beta) = W^{-1}(\beta, 0); \quad W(\beta, \lambda)W(\lambda, 0) = W(\beta, 0)$$

ნებისმიერი t, τ და β, λ ($\beta > 0, \lambda > 0$) მნიშვნელობებისათვის.

(2.10) ფორმულებში T - ქრონოლოგიურად მოწესრიგების სიმბოლოა (ოპერატორთა მოწესრიგება ხდება დროის მიხედვით მარჯვნიდან მარცხნივ დროის მომენტის ზრდასთან ერთად, როდესაც $t > 0$), ხოლო T_a - წარმოადგენს ანტიქრონოლოგიურად მოწესრიგების სიმბოლოს დროის მიხედვით (ოპერატორთა მოწესრიგება ხდება დროის მიხედვით მარცხნიდან მარჯვნივ დროის მომენტის ზრდასთან ერთად, როდესაც $t > 0$). ანალოგიურად, (2.11) ფორმულებში T და T_a წარმოადგენს ქრონოლოგიურად და ანტიქრონოლოგიურად მოწესრიგების სიმბოლოებს ოპერატორებისათვის λ ტემპერატურული ცვლადის მიხედვით. უნდა აღინიშნოს, რომ $W^+(t, 0), W(t, 0), W^+(\beta, 0), W(\beta, 0)$ ოპერატორებისათვის დროითი და ტემპერატურული ცვლადები $\tilde{H}_{int}(\tau)$ და $\tilde{H}_{int}(\lambda)$ ოპერატორებს ანიჭებენ არა მარტო რაღაც მნიშვნელობებს, არამედ განსაზღვრავენ აგრეთვე მათ მოწესრიგებულ თანმიმდევრობას T ნამრავლებში.

თუ გამოვიყენებთ $W(t, 0), W^+(t, 0)$ და $W(\beta, 0)$ ევოლუციის ოპერატორებს, მაშინ $G_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორი შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} G_{B_s}(t, \beta) &= SP_\Sigma \left[e^{-\beta H_0} W(\beta, 0) W(t, 0) B_{SH_s}(t) W(t, 0) \right] = \\ &= e^{-\beta H_s} SP_\Sigma \left[e^{-\beta H_s} W(\beta, 0) W^+(t, 0) B_{SH_s}(t) W(t, 0) \right] = \quad , \quad (2.13) \\ &= Z_\Sigma(\beta) e^{-\beta H_s} P_\Sigma(\beta) \left[W(\beta, 0) W^+(t, 0) B_{SH_s}(t) W(t, 0) \right] \end{aligned}$$

სადაც: $P_\Sigma(\beta) \dots = Z_\Sigma^{-1}(\beta) SP_\Sigma \left[e^{-\beta H_s} \dots \right]$ - წარმოადგენს ბოზონური ველის მდგომარეობების მიხედვით გასაშუალოების ოპერატორს (პროექციულ ოპერატორს); $Z_\Sigma(\beta)$ - ბოზონური ველის სტატჯამია და $B_{SH_s}(t)$ ოპერატორი განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

$$B_{SH_s}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_s t} B_s e^{-\frac{i}{\hbar} H_s t} . \quad (2.14)$$

ცხადია, რომ ადგილი აქვს თანაფარდობას:

$$B_{sH_0}(t) = B_{SH_s}(t), \text{ სადაც } B_{sH_0}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} B_s e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} .$$

შემოვიღოთ ახლა სპეციალური ოპერაცია, რომელიც აღინიშნება სიმბოლოთი $T_{F_s(t)}^{L,R,s}$ (იხ. მაგ. [5-6,109]). $T_{F_s(t)}^{L,R,s}$ ოპერაცია გარკვეული წესით აწესრიგებს ოპერატორთა ნამრავლს, რომელიც შედგება ერთი $F_s(t)$ - ოპერატორისაგან და მის

გვერდით მდგომი $A_j(t_j, s)$ და $A_k(\beta_k, s)$ ოპერატორებისაგან. t_1, t_2, \dots, t_n წარმოადგენენ $(0, t)$ -დროითი ინტერვალის სხვადასხვა წერტილებს. ($j=1, 2, \dots, n$), და $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ არიან $(0, \beta)$ – ტემპერატურული ინტერვალის სხვადასხვა წერტილები ($k=1, 2, \dots, m$).

ვთქვათ სიმბოლო აღნიშნავს ერთი $F_s(t)$ ოპერატორის ნამრავს სხვა $A_j(t_j, s)$ ($j=1, 2, \dots, n$) და $A_k(\beta_k, s)$ ($k=1, 2, \dots, m$) ოპერატორებზე, რომლებიც აღნიშნული (მონიშნული) არიან ინდექსებით: L (left) და R (right).

აღნიშნული ოპერატორების თანმიმდევრული განლაგება -ში ნებისმიერია.

$$t_j \in (0, t); j \in 1, 2, \dots, n; \beta_k \in (0, \beta); k \in 1, 2, \dots, m.$$

ოპერაცია $T_{F_s(t)}^{L,R,s}$ განისაზღვრება შემდეგნაირად: ყველა $A_j^L(\beta_j, s)$ – ოპერატორის მოვათავსებთ $F_s(t)$ – ოპერატორის მარცხნივ და განვალაგებთ ანტი-ქრონოლოგიურად დროითი მომენტების მიხედვით; ყველა $A_k^L(\beta_k, s)$ ოპერატორს მოვათავსებთ $A_j^L(t_j, s)$ ოპერატორთა მარცხნივ და განვალაგებთ ქრონოლოგიური წესის მიხედვით და ბოლოს ყველა $A_{j'}^R(t_{j'}, s)$ - ($j'=1, 2, \dots$) ოპერატორს მოვათავსებთ მარჯვნივ $F_s(t)$ ოპერატორიდან და განვალაგებთ ქრონოლოგიურად დროითი მომენტების მიხედვით. ამ პროცედურის შესრულების შემდეგ ჩამოვაცილებთ L და R ინდექსებს.

ამრიგად, ამ განსაზღვრის თანახმად ჩვენ გვექნება

$$T_{F_s(t)}^{L,R,s} = T \left[\prod_k A_k^L(\beta_k, s) \right] \times T_a \left[\prod_j A_j^L(t_j, s) \right] \times F_s(t) T \left[\prod_{j'} A_{j'}^R(t_{j'}, s) \right] \quad (2.15)$$

ცხადია, რომ $T_{F_s(t)}^{L,R,s}$ ოპერაციის ნიშნის ქვეშ, შემავალი ყველა ოპერატორი შეგვიძლია გადავანაცვლოთ ნებისმიერად ისე, რომ არ შევცვალოთ შედეგი – თითქოს ეს ოპერატორები წარმოადგენდნენ C სიდიდეებს – ვინაიდან თვით ეს ოპერაცია ავტომატურად ამყარებს წესრიგს საბოლოოდ ოპერატორთა განლაგებაში. ჩვენს მიერ შემოღებული ოპერაცია ბუნებრივად შეგვიძლია აგრეთვე განვაზოგადოდ ოპერატორებისაგან შედგენილ ტრანსცენდენტულ ფუნქციონალებზეც. უნდა აღინიშნოს, რომ ჩვენს მიერ შემოღებული სპეციალური ოპერაცია $T_{F_s(t)}^{L,R,s}$ წარმოადგენს ადრე შემოღებული $T_{s(L)s(R)}^F$ ოპერაციის ბუნებრივ განზოგადობას დროით და ტემპერატურულ ინტერვალებზე [5-6,109,111-113].

ახლა განვიხილოთ (2.13) ფორმულა და ჩავწეროთ ის შემდეგი სახით:

$$G_{B_s}(t, \beta) = Z_\Sigma(\beta) e^{-\beta H_s} \tilde{G}_{B_s}(t, \beta): \quad t > 0$$

სადაც:

$$\begin{aligned} G_{B_s}(t, \beta) &= P_\Sigma(\beta) [W(\beta, 0)W^+(t, 0)B_{sH_s}(t)W(t, 0)] = \\ &= P_\Sigma(\beta) \left\{ T \exp \left[-\int_0^\beta d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda) \right] \cdot T_a \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] \cdot B_{sH_s}(t) \times \right. \\ &\times T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}(\tau) \right] \left. \right\} = T_{B_{sH_s}}^{L,R,S}(t) \left\{ P_\Sigma(\beta) \left[T_\Sigma \exp \left[-\int_0^\beta d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] \times \right. \right. \\ &\times T_{a\Sigma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] \cdot B_{sH_s}(t) T_\Sigma \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right] \left. \right] \left. \right\}; \quad t > 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

(2.16) ფორმულაში $\tilde{H}_{\text{int}}(\lambda)$ და $\tilde{H}_{\text{int}}(\tau)$ ოპერატორები განსაზღვრულია (2.10-2.11) ტოლობებით: T_Σ და $T_{a\Sigma}$ სიმბოლოები აწესრიგებენ მხოლოდ იმ ოპერატორებს, რომლებიც მოქმედებენ ბოზონურ (ფონონურ) ველის ცვლადებზე. თუ გავითვალისწინებთ (2.10-2.11) ტოლობებს $\tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda)$ და $\tilde{H}_{\text{int}}^{L,R}(\tau)$ ოპერატორებისათვის გვექნება:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) &= \sum_k \left[\tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) b_{kH_0}(\lambda) + \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) b_{kH_0}^+(\lambda) \right] \\ \tilde{H}_{\text{int}}^{L,R}(\tau) &= \sum_k \left[\tilde{C}_{kH_0}^{L,R}(s, \tau) b_{kH_0}(\tau) + \tilde{C}_{kH_0}^{+L,R}(s, \tau) b_{kH_0}^+(\tau) \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$b_{kH_0}(\lambda) = e^{\lambda H_0} b_k e^{-\lambda H_0} = e^{-\lambda \hbar \omega(k)} b_k;$$

$$b_{kH_0}^+(\lambda) = e^{\lambda H_0} b_k^+ e^{-\lambda H_0} = e^{\lambda \hbar \omega(k)} b_k^+;$$

სადაც:

$$b_{kH_0}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} b_k e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} = e^{-i\omega(k)\tau} b_k; \quad (2.18)$$

$$b_{kH_0}^+(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} b_k^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} = e^{i\omega(k)\tau} b_k^+.$$

$$\tilde{C}_{kH_0}(s, \tau) = \tilde{C}_{kH_s}(s, \tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} C_k(s) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} = e^{\frac{i}{\hbar} H_s \tau} C_k(s) e^{-\frac{i}{\hbar} H_s \tau}$$

$$\tilde{C}_{kH_0}^+(s, \tau) = \tilde{C}_{kH_s}^+(s, \tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} C_k^+(s) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} = e^{\frac{i}{\hbar} H_s \tau} C_k^+(s) e^{-\frac{i}{\hbar} H_s \tau}.$$

გამოსახულება, რომელიც მოცემულია (2.16) ფორმულით $P_\Sigma(\beta)$

გასაშუალოების სიმბოლოს ქვეშ $\tilde{G}_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორისათვის, გამოითვლება დანართში მიღებულ ფორმულის დახმარებით (იხ. დანართი, (1.4) ფორმულა). ამ ყველაფრის გათვალისწინებით გვექნება:

$$\tilde{G}_{B_s}(t, \beta) = T_{B_s H_s}^{L, R, s}(t) \left\{ B_{s H_s}(t) \exp \left[\Phi_{L, R, S}(t, \beta) \right] \right\}, \quad t > 0, \quad (2.19)$$

სადაც $\Phi_{L, R, S}(t, \beta)$ ფუნქციონალური განისაზღვრება შემდეგი გამოსახულებით:

$$\begin{aligned} \Phi_{L, R, S}(t, \beta) = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\xi \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \xi) \times \right. \\ & \times \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \xi) \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) \left. \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \times \\ & \times \int_0^\tau d\xi \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \tau) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi) + N_k(\beta) \times \right. \\ & \times e^{i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \tau) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi) \left. \right] + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\xi \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) \times \right. \\ & \times e^{-i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \tau) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi) + N_k(\beta) e^{i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) \times \\ & \times \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi) \left. \right] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\beta d\lambda \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{\omega(k)(i\tau-\lambda\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \times \right. \\ & \times \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) + N_k(\beta) e^{-\omega(k)(i\tau-\lambda\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \tau) \left. \right] + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \times \\ & \times \int_0^\beta d\lambda \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{\omega(k)(i\tau-\lambda\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \tau) + N_k(\beta) \times \right. \\ & \times e^{-\omega(k)(i\tau-\lambda\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \tau) \left. \right] + \int_0^\beta d\gamma \int_0^\gamma d\lambda \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) \times \right. \\ & \times e^{-\hbar\omega(k)(\gamma-\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \gamma) \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) + N_k(\beta) e^{\hbar\omega(k)(\gamma-\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \gamma) \times \\ & \times \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \left. \right]; \quad t > 0. \end{aligned} \quad (2.20)$$

აქ: $N_k(\beta) = P_\Sigma(\beta)(b_k^+ b_k) = [e^{\beta\hbar\omega(k)} - 1]^{-1}$ წარმოადგენს ბოზონების (ფონონების) შევსების რიცხვების საშუალო მნიშვნელობას k მდგომარეობაში; (2.18) ფორმულების მსგავსად $\tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda)$ და $\tilde{C}_{kH_0}^+(s, \lambda)$ – ოპერატორებისათვის გვაქვს შემდეგი გამოსახულებები:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) &= \tilde{C}_{kH_s}^L(s, \lambda) = e^{\lambda H_0} C_k(s) e^{-\lambda H_0} = e^{\lambda H_s} C_k(s) e^{-\lambda H_s}; \\ \tilde{C}_{kH_0}^+(s, \lambda) &= \tilde{C}_{kH_s}^+(s, \lambda) = e^{\lambda H_0} C_k^+(s) e^{-\lambda H_0} = e^{\lambda H_s} C_k^+(s) e^{-\lambda H_s}. \end{aligned}$$

თუ გავაწარმოებთ (2.19) გამოსახულებას t დროითი ცვლადის მიხედვით და გამოვიყენებთ (2.16) ფორმულას, მაშინ მარტივად ვიპოვით $\tilde{G}_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორისათვის ევოლუციურ განტოლებას (მოძრაობის განტოლებას):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{B_s}(t, \beta) = \frac{i}{\hbar} T_{B_s H_s}^{L,R,S} \left\{ [H_s, B_{sH_s}(t)] \exp[\Phi_{L,R,S}(t, \beta)] \right\} + \\
& + T_{B_s H_s}^{L,R,S} \left\{ B_{sH_s}(t) \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{L,R,S}(t, \beta) \cdot \exp[\Phi_{L,R,S}(t, \beta)] \right\}; \quad t > 0 \\
& \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{B_s}(t, \beta) = \frac{i}{\hbar} P_{\Sigma}(\beta) [W(\beta, 0) W^+(t, 0) [H_s, B_{sH_s}(t)] W(t, 0)] + \\
& + \frac{i}{\hbar} P_{\Sigma}(\beta) [W(\beta, 0) W^+(t, 0) [\tilde{H}_{int}(t), B_{sH_s}(t)] W(t, 0)]; \quad t > 0
\end{aligned} \tag{2.21}$$

სოლო თვით $\Phi_{L,R,S}(t, \beta)$ ფუნქციონალის წარმოებულისათვის მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებას:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{L,R,S}(t, \beta) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) e^{i\omega(k)(t-\xi)} [\tilde{C}_{kH_0}^L(s, \xi) \times \right. \\
& \times \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, t) - \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \xi) \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, t)] + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)(t-\xi)} [\tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \xi) \times \\
& \times \tilde{C}_{kH_0}^R(s, t) - \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \xi) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, t)] \left. \right\} + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
& \times e^{-i\omega(k)(t-\xi)} [\tilde{C}_{kH_0}^L(s, t) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi) - \tilde{C}_{kH_0}^R(s, t) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi)] + N_k(\beta) \times \\
& \times e^{i\omega(k)(t-\xi)} [\tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, t) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi) - \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, t) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi)] \left. \right\} + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \times \\
& \times \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) e^{\omega(k)(t-h\lambda)} [\tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, t) - \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, t)] + \right. \\
& \left. + N_k(\beta) e^{-\omega(k)(t-h\lambda)} [\tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, t) - \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, t)] \right\}; \quad t > 0
\end{aligned} \tag{2.22}$$

თუ ვისარგებლებთ (2.16, 2.22) ფორმულებით, და აგრეთვე $W(t, 0)$, $W^+(t, 0)$, $W(\beta, 0)$ ევოლუციის წრფივი ოპერატორების (2.9) განსაზღვრებით და (2.12) ჯგუფური თვისებებით, მაშინ $G_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორისათვის ევოლუციური განტოლება შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით [109]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} G_{B_s}(t, \beta) &= \frac{i}{\hbar} SP_{\Sigma} \left\{ e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar} [H_s, B_s]} e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{i\omega(k)\xi} SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k(s, -\xi) C_k^+(s) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} B_s(t) \right] + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k^+(s, -\xi) C_k(s) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} B_s(t) \right] \left. \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} B_s(t) e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k(s) C_k^+(s, -\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \right] + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} B_s(t) e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k^+(s) C_k(s, -\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \right] \left. \right\} + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} C_k(s, t) B_s(t) e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k^+(s, -\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \right] + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} C_k^+(s, t) B_s(t) e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k(s, -\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \right] \left. \right\} + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\cdot e^{i\omega(k)\xi} SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} C_k(s_1 - \xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} B_s(t) C_k^+(s, t) \right] + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \times \\
&\times SP_{\Sigma} \left[e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar} Ht} C_k^+(s, -\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} B_s(t) C_k(s, t) \right] \left. \right\} - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{-\omega(k)(it+h\lambda)} SP_{\Sigma} \left[C_k^+(s, -\lambda) e^{-\beta H} C_k(s, t) B_s(t) \right] + N_k(\beta) e^{\omega(k)(it+h\lambda)} \times \\
&\times SP_{\Sigma} \left[C_k(s, -\lambda) e^{-\beta H} C_k^+(s, t) B_s(t) \right] \left. \right\} + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \sum_k \left\{ (1 + N_k(\beta)) e^{-\omega(k)(it+h\lambda)} \times \right. \\
&\times SP_{\Sigma} \left[C_k^+(s, -\lambda) e^{-\beta H} B_s(t) C_k(s, t) \right] + N_k(\beta) e^{\omega(k)(it+h\lambda)} SP_{\Sigma} \left[C_k(s, -\lambda) \times \right. \\
&\times \left. e^{-\beta H} B_s(t) C_k^+(s, t) \right] \left. \right\}; \quad t > 0
\end{aligned} \tag{2.23}$$

(2.23) განტოლებაში შემავალი: $C_k(s, \pm\xi)$, $C_k^+(s, \pm\xi)$, $C_k(s, -\lambda)$ და $C_k^+(s, -\lambda)$ ოპერატორები განისაზღვრებიან შემდეგი ტოლობებით:

$$\begin{aligned}
C_k(s, \pm\xi) &= e^{\pm \frac{i}{\hbar} H\xi} C_k(s) e^{\pm \frac{i}{\hbar} H\xi}; \quad C_k^+(s, \pm\xi) = e^{\pm \frac{i}{\hbar} H\xi} C_k^+(s) e^{\mp \frac{i}{\hbar} H\xi} \\
C_k(s, -\lambda) &= e^{-\lambda H} C_k(s) e^{\lambda H}; \quad C_k^+(s, -\lambda) = e^{-\lambda H} C_k^+(s) e^{\lambda H}.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

ამრიგად, როგორც ვხედავთ $G_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორისთვის (2.23) ევოლუციურ განტოლებაში ბოზონური ამპლიტუდები არ გვაქვს. ბოზონური ამპლიტუდების გამორიცხვა მოხერხდა $T_{B_s, H_s(t)}^{L, R, S}$ სპეციალური ოპერაციისა და ბოზონური ველით გასაშუალოების $P_{\Sigma}(\beta)$ ოპერატორის გამოყენების შედეგად (ნათელია, რომ ბოზონური ცვლადები (ამპლიტუდები) გვექნება $e^{\pm \frac{i}{\hbar} Ht}$ ევოლუციის ოპერატორებში

და $e^{-\beta H}$ გიბსის ფაქტორში). შემდეგ პარაგრაფში (2.23) ევოლუციური განტოლება $G_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორისათვის გამოყენებული იქნება ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებების მისაღებად $F_{B_s A_s}(t)$ კორელაციური ფუნქციისთვის და გრინის ფუნქციებისთვის [110].

2.2. ზუსტი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციებისთვის

გამოვიყენოთ ახლა ზუსტი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის. ამისთვის განვიხილოთ (2.6) ფორმულა $F_{B_s A_s}(t)$ კორელაციური ფუნქციისთვის და (2.5)-ის დახმარებით ჩავწეროთ ის შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} F_{B_s A_s}(t) &= \langle B_s(t) A_s \rangle = \langle B_s A_s(-t) \rangle = Z^{-1}(\beta) SP_s [A_s G_{B_s}(t, \beta)] = \\ &= Z^{-1}(\beta) SP_s [B_s G_{A_s}(-t, \beta)] \end{aligned} \quad (2.25)$$

სადაც: $G_{A_s}(-t, \beta)$ ოპერატორისთვის განსაზღვრის თანახმად გვაქვს შემდეგი გამოსახულება:

$$G_{A_s}(-t, \beta) = SP_\Sigma [A_s(-t) e^{-\beta H}]. \quad (2.26)$$

თუ გავაწარმოებთ (2.25) თანაფარდობას t -დროითი ცვლადის მიხედვით, მაშინ მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F_{B_s A_s}(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \langle B_s A_s(-t) \rangle = Z^{-1}(\beta) SP_s \left[A_s \frac{\partial}{\partial t} G_{B_s}(t, \beta) \right] = \\ &= Z^{-1}(\beta) SP_s \left[B_s \frac{\partial}{\partial t} G_{A_s}(-t, \beta) \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

თუ ჩავსვამთ (2.27) განტოლებაში $\frac{\partial}{\partial t} G_{B_s}(t, \beta)$ ოპერატორის გამოსახულებას (2.23) ფორმულიდან და ვისარგებლებთ $SP_{s, \Sigma}(\dots)$ ოპერაციის ქვეშ ოპერატორთა ციკლიური გადანაცვლების შესაძლებლობით, მაშინ მარტივი გამოთვლების შემდეგ ვიპოვით საძიებელ ზუსტ, განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებას $\langle B_s A_s(-t) \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის [110-111,113]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle B_s A_s(-t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H_s B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{i\omega(k)\xi} \langle C_k(s, -\xi) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \cdot \\
&\langle C_k^+(s, -\xi) \cdot [C_k(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{-i\omega(k)\xi} \cdot \langle [C_k(s), B_s]_- \cdot C_k^+(s_1 - \xi) \cdot A_s(-t) \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \cdot \\
&\langle [C_k^+(s), B_s]_- \cdot C_k(s, -\xi) \cdot A_s(-t) \rangle] - \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{-\theta\omega(k)} e^{i\omega(k)t} \langle C_k(s, -t - i\theta) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle + \\
&+ N_k(\beta) e^{\theta\omega(k)} e^{-i\omega(k)t} \langle C_k^+(s, -t - i\theta) \cdot [C_k(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle]; \quad t > 0.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

ანალოგიურად შესაძლებელია მივიღოთ ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლება $F_{A_s B_s}(-t) = \langle A_s B_s(t) \rangle = \langle A_s(-t) B_s \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის. ამ განტოლების გამოყვანა პრინციპულად არ განსხვავდება ზემოთმოყვანილი გამოთვლებისაგან და ამიტომ მოვიყვანო მხოლოდ საბოლოო შედეგს:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle A_s(-t) B_s \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle A_s(-t) \cdot [H_s B_s]_- \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{i\omega(k)\xi} \langle A_s(-t) \cdot C_k(s, -\xi) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- \rangle + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \cdot \\
&\langle A_s(-t) \cdot C_k^+(s, -\xi) \cdot [C_k(s), B_s]_- \rangle] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{-i\omega(k)\xi} \cdot \langle A_s(-t) \cdot [C_k(s), B_s]_- \cdot C_k^+(s, -\xi) \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \cdot \\
&\langle A_s(-t) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- \cdot C_k(s, -\xi) \rangle] - \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta [(1 + N_k(\beta)) \cdot \\
&\cdot e^{\theta\omega(k)} e^{i\omega(k)t} \langle A_s(-t) \cdot [C_k(s), B_s]_- C_k^+(s, -t + i\theta) \rangle + \\
&+ N_k(\beta) e^{\theta\omega(k)} e^{-i\omega(k)t} \langle A_s(-t) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- C_k(s, -t + i\theta) \rangle]; \quad t > 0.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

მარტივი შესამჩნევია, რომ (2.28) და (2.29) ევოლუციური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის არიან არაჩაკეტილი და მარკოვისეული. $t < 0$ შემთხვევაში განზოგადოებულ ევოლუციურ (კინეტიკურ) განტოლებებს კორელაციური ფუნქციებისთვის აქვთ იგივე სახე, როგორც (2.28) და (2.29) განტოლებებს. მაგრამ, უნდა აღინიშნოს, რომ $t > 0$ და $t < 0$ შემთხვევებისთვის $W(t, 0)$ და $W^+(t, 0)$ - ევოლუციის ოპერატორების წარმოდგენა იქნება სხვადასხვა თანახმად (2.10) განსაზღვრებისა. ამ განტოლებათა მიღება $t < 0$ შემთხვევაში არ განსხვავდება

ზემოთწარმოდგენილი გამოყვანისაგან და ამიტომაც აქ არ მოიყვანება. აღვნიშნავთ მხოლოდ იმას, რომ ამ განტოლებათა მიღებისას საჭიროა $T_{B_s A_s(t)}^{L,R,S}$ ოპერაციის ხელახალი განსაზღვრა $W(t,0)$ და $W^+(t,0)$ ოპერატორების (2.10) წარმოდგენის შესაბამისად. ($T_{B_s A_s(t)}^{L,R,S}$ ოპერაციის ხელახალი განსაზღვრა აუცილებელია აგრეთვე $F_{A_s B_s}(-t)$ კორელაციური ფუნქციისთვის ზუსტი, განზოგადოებული კინეტიკური განტოლების მისაღებადაც, როდესაც $t > 0$). ნათელია, რომ განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები $\langle B_s A_s(t) \rangle$ და $\langle A_s(t) B_s \rangle$ - კორელაციური ფუნქციებისთვის მიიღება (2.28) და (2.29) განტოლებებიდან t დროითი ცვლადის ფორმალური ცვლილებით: $t \rightarrow -t$. კინეტიკური განტოლებები: $\langle B_s A_s(t) \rangle$ და $\langle A_s(t) B_s \rangle$ კორელაციური ფუნქციებისთვის შესაძლებელია წარმოვადგინოთ აგრეთვე არამარკოვისეული სახით. თუ შევასრულებთ (2.28) და (2.29) განტოლებებში t სიდიდის ცვლილებას: $t \rightarrow -t$, ვისარგებლებთ ოპერატორული ტოლობით: $A_s(t) = e^{\frac{iH\xi}{\hbar}} A_s(t-\xi) e^{-\frac{iH\xi}{\hbar}}$; ($\xi \in [0, t]$), და $SP_{s\Sigma}(\dots)$ ოპერაციის ქვეშ ოპერატორთა ციკლიური გადანაცვლების შესაძლებლობით, მაშინ მივიღებთ შემდეგ ზუსტ, განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებს $\langle B_s A_s(t) \rangle$ და $\langle A_s(t) B_s \rangle$ კორელაციური ფუნქციებისთვის [110]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle B_s A_s(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle [H_s B_s] A_s(t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi \left[(1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} \langle C_k(s) \cdot [C_k^+(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- A_s(t-\xi) \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle C_k^+(s) [C_k(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- A_s(t-\xi) \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi \left[(1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{i\omega(k)\xi} \cdot \langle [C_k(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- C_k^+(s) A_s(t-\xi) \rangle + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle [C_k^+(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- \cdot C_k(s) A_s(t-\xi) \rangle \left. \right] + \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta \left[(1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{-\theta\omega(k)} e^{-i\omega(k)t} \langle C_k(s, t-i\theta) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- A_s(t) \rangle + N_k(\beta) e^{\theta\omega(k)} \times \\
&\times e^{i\omega(k)t} \langle C_k^+(s, t-i\theta) \cdot [C_k(s), B_s]_- \cdot A_s(t) \rangle \left. \right]; \tag{2.30}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle A_s(t) B_s \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle A_s(t) \cdot [H_s, B_s]_- \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \times \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} \langle A_s(t-\xi) \cdot C_k(s) [C_k^+(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle A_s(t-\xi) \cdot C_k^+(s) [C_k(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- \rangle + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \times \\
&\times e^{i\omega(k)\xi} \cdot \langle A_s(t-\xi) [C_k(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- C_k^+(s) \rangle + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle A_s(t-\xi) [C_k^+(s, -\xi), B_s(-\xi)]_- \cdot C_k(s) \rangle] + \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta [(1 + N_k(\beta)) \times \\
&\times e^{-\theta\omega(k)} e^{-i\omega(k)t} \langle A_s(t) [C_k(s), B_s]_- \cdot C_k^+(s, t + i\theta) \rangle + N_k(\beta) e^{\theta\omega(k)} \times \\
&\times e^{-i\omega(k)t} \langle A_s(t) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- \cdot C_k(s, t + i\theta) \rangle];
\end{aligned} \tag{2.31}$$

(2.28) და (2.29) განტოლებებისაგან განსხვავებით, (2.30) და (2.31) ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები არიან არაჩაკეტილი და არამარკოვისეული ფორმის. (2.3) გამოსახულებები და (2.28)-(2.29) ევოლუციური განტოლებები განსაზღვრავენ განტოლებებს გრინის ფუნქციებისთვის. ასე მაგალითად, განტოლებას დაგვიანებული გრინის ფუნქციისთვის: $G^r(t) = \theta(t) \langle [A_s(t), B_s]_\eta \rangle$ აქვს შემდეგი სახე:

$$\frac{\partial}{\partial t} G^r(t) = \delta(t) \langle [A_s, B_s]_\eta \rangle + \theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle [A_s(t), B_s]_\eta \rangle. \tag{2.32}$$

ამდაგვარად შესაძლებელია განისაზღვროს აგრეთვე ევოლუციური განტოლებები სხვა დანარჩენი გრინის ფუნქციებისთვის (წინმსწრებისა და მიზეზობრივისთვის). (2.30)–(2.31) ფორმულების დახმარებით ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლება $G^r(t)$ – გრინის დაგვიანებული ფუნქციისთვის შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით [110-111]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} G^r(t) &= \delta(t) \langle [A_s, B_s]_{\eta} \rangle - \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [A_s(t), [B_s, H_s]_{-}]_{\eta} \rangle + \\
&+ \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \theta(\xi) \theta(t-\xi) \left\{ (1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)\xi} \langle [A_s(t-\xi) C_k(s) \times \right. \\
&\times [B_s(-\xi) C_k^+(s, -\xi)]_{-}]_{\eta} \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \langle [A_s(t-\xi) C_k^+(s) \times \\
&\times [B_s(-\xi), C_k(s, -\xi)]_{-}]_{\eta} \rangle \left. \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \theta(\xi) \theta(t-\xi) \left\{ (1 + N_k(\beta)) \times \right. \\
&\times e^{i\omega(k)\xi} \langle [A_s(t-\xi) [B_s(-\xi), C_k^+(s, -\xi)]_{-} C_k^+(s)]_{\eta} \rangle + N_k(\beta) \times \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} \langle [A_s(t-\xi) [B_s(-\xi), C_k^+(s, -\xi)]_{-} C_k(s)]_{\eta} \rangle - \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta \times \\
&\times \left\{ (1 + N_k(\beta)) e^{-\theta\omega(k)} \theta(t) \left\{ e^{i\omega(k)t} \langle A_s(t) [B_s, C_k(s)]_{-} C_k^+(s, t + i\theta) \rangle - \right. \right. \\
&- \eta e^{-i\omega(k)t} \langle C_k(s, t - \theta) [B_s, C_k^+(s)]_{-} A_s(t) \rangle \left. \right\} + N_k(\beta) \cdot e^{\theta\omega(k)} \theta(t) \times \\
&\times \left\{ e^{-i\omega(k)t} \langle A_s(t) [B_s, C_k^+(s)]_{-} C_k(s, t + i\theta) \rangle - \eta e^{i\omega(k)t} \langle C_k^+(s, t - i\theta) \times \right. \\
&\times [B_s, C_k(s)]_{-} A_s(t) \rangle \left. \right\} \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{2.33}$$

მიღებული (2.28–2.31) და (2.33) კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები წარმოადგენენ ზუსტ, განზოგადოებულ განტოლებებს დროის ორ მომენტისა და წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციისთვის [25,34,64]. განსხვავებით კინეტიკური განტოლებებისაგან, რომლებიც მიღებულია [5-6,75-77] შრომებში, გამოყვანილი ევოლუციური განტოლებების დაჯახებითი ინტეგრალები შეიცავენ როგორც მაღალი რიგის კორელაციურ და გრინის ფუნქციებს, არამედ ასევე საწყისი კორელაციების ევოლუციის ამსახველ წევრებს (უკანასკნელი წევრები (2.28–2.31 და 2.33) განტოლებების მარჯვენა მხარეში). შევნიშნავთ აგრეთვე, რომ (2.28–2.31) განტოლებების მარჯვენა მხარეების პირველი წევრები აღწერენ კორელაციური ფუნქციების თავისუფალ (არადაჯახებით) დინამიკას.

2.3. მარკოვიანული მიახლოება ძველსახეობის დინამიკისთვის.

მიახლოებითი განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისთვის

დავუშვათ, რომ (2.2) ურთიერთქმედების ჰამილტონიანი s ქვესისტემასა და Σ ბოზონურ თერმოსტატს შორის შეიცავს მცირე პარამეტრს ($C_k(s)$ და $C_k^+(s)$) ურთიერთქმედების ოპერატორები შეიცავენ მცირე პარამეტრს). ასეთ შემთხვევაში,

s ქვესისტემასა და Σ ბოზონურ ველს შორის სუსტი ურთიერთქმედების გამო, ადგილი ექნება დროთა იერარქიას:

$$\tau_{ree} \gg t_0 = \max(t_s, t_\Sigma), \quad (2.34)$$

სადაც: τ_{ree} - წარმოადგენს s ქვესისტემის რელაქსაციის მახასიათებელ დროს, ხოლო $t_s \cdot \hbar\beta$ არის s ქვესისტემის დაჯახებითი (გაბნევის) დრო; $t_\Sigma \cdot \frac{1}{\bar{\omega}}$ - არის კორელაციების ფლუქტუაციების მიღვევის დრო თერმოსტატში ($\bar{\omega}$ - ბოზონების რხევების მახასიათებელი სიხშირეა). (2.34) უტოლობა საშუალებას იძლევა შემოვიფარგლოთ შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებით (H_{int} - ურთიერთქმედების ჰამილტონიანის მიხედვით) (2.28–2.31) ევოლუციურ განტოლებებში კორელაციური ფუნქციებისთვის. ასე მაგალითად, თუ შევასრულებთ (2.28) ევოლუციურ განტოლებაში შემდეგი სახის მიახლოებებს:

$$\begin{aligned} C_k(s, -\xi) &\Rightarrow C_{kH_0}(s, -\xi); & C_k^+(s, -\xi) &\Rightarrow C_{kH_0}^+(s, -\xi); \\ C_k(s, -t - i\theta) &\Rightarrow C_{kH_0}(s, -t - i\theta); & C_k^+(s, -t - i\theta) &\Rightarrow C_{kH_0}^+(s, -t - i\theta). \end{aligned} \quad (2.35)$$

მაშინ მივიღებთ, დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციისთვის: $\langle B_s A_s(-t) \rangle$ - განზოგადოებულ, მარკოვისეულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებას შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში [110-111]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle B_s A_s(-t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H_s B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \times \\ &\times e^{i\omega(k)\xi} \langle C_{kH_0}(s, -\xi) \cdot [C_k^+(s), B_s]_- A_s(-t) \rangle + N_k(\beta) e^{-i\omega(k)\xi} \times \\ &\times \langle C_{kH_0}^+(s, -\xi) \cdot [C_k(s), B_s]_- A_s(-t) \rangle] + \frac{1}{\hbar^2} \sum_k \int_0^t d\xi [(1 + N_k(\beta)) \times \\ &\times e^{-i\omega(k)\xi} \cdot \langle [C_k(s), B_s]_- C_{kH_0}^+(s, -\xi) A_s(-t) \rangle + N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\ &\times \langle [C_k^+(s), B_s]_- \cdot C_{kH_0}(s, -\xi) A_s(-t) \rangle] - \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \int_0^{\hbar\beta} d\theta [(1 + N_k(\beta)) \times \\ &\times e^{-\theta\omega(k)} e^{i\omega(k)t} \langle C_{kH_0}(s, -t - i\theta) [C_k^+(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle + N_k(\beta) e^{\theta\omega(k)} \times \\ &\times e^{-i\omega(k)t} \langle C_{kH_0}^+(s, -t - i\theta) \cdot [C_k(s), B_s]_- \cdot A_s(-t) \rangle]. \end{aligned} \quad (2.36)$$

ანალოგიურად მიიღება ევოლუციური განტოლებები სხვა კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციისთვის (იხ. (2.29), (2.30–2.31) და (2.33) ფორმულები).

როგორც ცნობილია, ხელსაყრელ და ეფექტურ მეთოდს სუსტადარაწონასწორული მდგომარეობებისა, რელაქსაციური პროცესებისა და კინეტიკური მოვლენების შესწავლისა – რომლებიც მიმდინარეობენ მცირე დინამიურ ქვესისტემაში,

რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან და გარეშე ველთან, - წარმოადგენს კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციის მეთოდი.

დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციები და გრინის ფუნქციები წარმოადგენენ ძირითად სიდიდეებს კუბოს წრფივი გამოძახილის (რეაქციის) თეორიაში [4,34,64,72-73]. (2.28–2.29) განტოლებები განსხვავდებიან მსგავსი განტოლებებისაგან, რომლებიც გამოყვანილი იყვნენ შემთხვევითი ფაზების მიახლოებაში [5-6,68,75-77], უკანასკნელი წევრებით განტოლებების მარჯვენა მხარეებში, რომლებიც აღწერენ საწყისი კორელაციების ევოლუციას და გაველენას დაჯახებით პროცესებზე გაბნევის (დაჯახებით) ინტეგრალებში (იხ. აგრეთვე (2.36) განტოლება). უნდა აღინიშნოს აგრეთვე ის გარემოება, რომ საწყისი კორელაციების ევოლუცია დროში მოიცემა მარკოვისეული ფორმით ((2.28–2.29), (2.30–2.31)) კინეტიკურ განტოლებებში კორელაციური ფუნქციებისთვის, და ისინი არ შეიცავენ მახსოვრობის ეფექტებს. შფმ-ში, როდესაც $t=0$ დროის საწყის მომენტში მთელი $(s+\Sigma)$ სისტემის წონასწორული სტატისტიკური ოპერატორი (გიბსის კანონიკური განაწილება) აიღება ფაქტორიზებული სახით:

$$\rho_{eq}(\beta) = Z^{-1}(\beta) \cdot e^{-\beta H} \Rightarrow \rho_s(\beta) \rho_\Sigma(\beta): \rho_s(\beta) = Z_s^{-1}(\beta) \cdot e^{-\beta H_s} \quad (2.37)$$

$$\rho_\Sigma(\beta) = Z_\Sigma^{-1}(\beta) \cdot e^{-\beta H_\Sigma}.$$

სადაც: $Z_s(\beta) = SP_s[e^{-\beta H_s}]$ და $Z_\Sigma(\beta) = SP_\Sigma[e^{-\beta H_\Sigma}]$ – წარმოადგენენ სტატჯამებს s -ქვესისტემისა და Σ ბოზონური ველისა, შესაბამისად; (ანუ უგულებელყოფთ H_{int} ურთიერთქმედების ჰამილტონიანს $e^{-\beta H}$ გიბსის ფაქტორში და $Z(\beta)$ სტატჯამში, მაგრამ ვინარჩუნებთ $e^{\pm \frac{i}{\hbar} H t}$ - ოპერატორებში, რის გამოც $W(\beta, 0) = W^+(\beta, 0) = 1$ (იხ. (2.9); (2.11) ფორმულები)); – საწყისი კორელაციების ევოლუციის წევრები (2.28)–(2.29) და (2.30)–(2.31); (2.36) განტოლებებში ხდება ნულის ტოლი და, როგორც შედეგი ამ მიახლოებაში ვლუბულობთ განზოგადოებულ კვანტურ-კინეტიკურ განტოლებებს კორელაციური ფუნქციებისთვის, რომლებიც მიღებული იყო [6,68,75-77] შრომებში.

საწყისი კორელაციების შესუსტების პრინციპის (პოსტულატის) თანახმად “ხელოვნურად” შექმნილი საწყისი კორელაციები, რომლებიც განპირობებულია $t=0$ დროის საწყისი მომენტისთვის s -ქვესისტემის ურთიერთქმედებით Σ თერმოსტატთან, უნდა მიიღიონ დროის მიხედვით, როდესაც $t \rightarrow \infty$, თუ ისინი არ მიეკუთვნებიან შენახვად სიდიდეებს, და უნდა მოხდეს დაჯახებითი (ნამდვილი) კორელაციების აღდგენა, რომლებიც აღიწერებიან მაღალი რიგის კორელაციური ფუნქციებითა და

გრინის ფუნქციებით (2.28), (2.29), (2.30), (2.31), (2.36) – განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალში.

ამრიგად, $\rho_{eq}(\beta) = Z^{-1}(\beta) \cdot e^{-\beta H}$ - საწყისი წონასწორული განაწილების “დეტალები” თითქოს არ უნდა იყოს არსებითი [4]; მაგრამ, მიუხედავად ამისა ცხადია, რომ პრინციპში საწყისი კორელაციების ევოლუციის წვევრების არსებობა განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებში კორელაციური ფუნქციებისა და გრინის ფუნქციებისთვის გავლენას ახდენენ ევოლუციურ პროცესზე, რომელიც მიმდინარეობს s ქვესისტემაში. s ქვესისტემის და Σ თერმოსტატის (ბოზონური ველის) სუსტი ურთიერთქმედების შემთხვევაშიც, საწყისი კორელაციების ევოლუციური წვევრები კორელაციური ფუნქციებისთვის კინეტიკურ განტოლებებში არ მიიღვიან ნულისაკენ დიდი დროების ასიმპტოტურ არეში, როდესაც ($t \sim \tau_{rel} \gg t_0; t \rightarrow \infty$) და იძლევიან თავიანთ წვლილს გადატანის კინეტიკურ (მექანიკურ) კოეფიციენტებში (ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) s ქვესისტემისთვის (იხ. III თავი). კინეტიკური კოეფიციენტების [34], გამოძახილის ფუნქციის (იმპედანსი, ადმიტანსი) [72-73] და დინამიური ამთვისებლობის [4] გამოთვლისას; გარდა ამისა, რელაქსაციური პროცესების შესწავლისას, რომლებიც მიმდინარეობენ ღია მოდელურ სისტემებში, და მყარი სხეულების ფიზიკის კვანტური დისიპაციური სისტემების განხილვისას, განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებებში საწყისი კორელაციების ევოლუციური წვევრების გათვალისწინებას აქვს პრინციპული მნიშვნელობა და მათი უგულვებელყოფა არ შეიძლება. მიუხედავად ამისა უნდა აღინიშნოს, რომ კინეტიკური მოვლენების შესწავლისას ამ სისტემებში “ნამდვილი” (დაჯახებითი) კორელაციები თამაშობენ დომინირებულ როლს საწყის კორელაციებთან შედარებით [4].

ახლა განვიხილოთ განსხვავებული მიდგომა იგივე ამოცანისადმი, რომელიც ეყრდნობა ლიუვილის სუპეროპერატორულ ფორმალიზმსა და პროექციული ოპერატორის მეთოდს [114-122].

2.4. განზოგადოებული კვანთური ევოლუციური განტოლებები კორელაციური

ფუნქციებისთვის უფრო-ის გამოყენების გარეშე.

პროექციული ოპერატორის მეთოდი

განვიხილოთ დროის ორმოქმენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქცია $\langle A_s(t)B_s \rangle$ და წარმოვადგინოთ ის შემდეგი სახით:

$$\langle A_s(t)B_s \rangle = Z^{-1}(\beta)SP_{\Sigma} [B_s e^{-\beta H} e^{iLt} A_s] \quad (2.38)$$

(2.38) ფორმულაში ჩვენ შემოვიღეთ ლიუვილის სუპეროპერატორის (L) ცნება, რომელიც მოქმედებს ნებისმიერ D -ოპერატორზე შემდეგი წესით:

$$LD = \frac{1}{\hbar} [H, D]_- : e^{\pm iLt} D = e^{\pm \frac{i}{\hbar} Ht} D e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}, \text{ ანუ } e^{\pm iLt} D = D(\pm t) \text{ და } D = D(t)|_{t=0}.$$

ლიუვილის სრული L სუპეროპერატორი ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$L = L_s + L_{\Sigma} + L_i, \text{ სადაც } L_s \dots = \frac{1}{\hbar} [H_s, \dots], \quad L_{\Sigma} \dots = \frac{1}{\hbar} [H_{\Sigma}, \dots] \text{ და } L_i \dots = \frac{1}{\hbar} [H_{int}, \dots]_-; \quad (2.1)-(2.2)$$

ჰამილტონიანის თითოეული წევრის შესაბამისად. (2.38) ფორმულიდან გამომდინარე ცხადია, რომ კორელაციური ფუნქციების დინამიკა ხელსაყრელია განვიხილოთ შემდეგი სუპეროპერატორების დახმარებით, რომლებიც მოქმედებენ D -ოპერატორზე შემდეგი წესით:

$$\begin{aligned} R(t)D &= Z^{-1}(\beta)SP_{\Sigma} [e^{-\beta H} e^{iLt} PD] \\ I(t)D &= Z^{-1}(\beta)SP_{\Sigma} [e^{-\beta H} e^{iLt} QD], \end{aligned} \quad (2.39)$$

სადაც: P წარმოადგენს თერმოსტატის (ბოზონური ველის) მდგომარეობების მიხედვით გასაშუალების პროექციულ ოპერატორს:

$$\begin{aligned} P^2 &= P; \quad P = P_{\Sigma}(\beta); \quad PD = SP_{\Sigma}(\rho_{\Sigma} D) = \langle D \rangle_{\Sigma}; \quad \rho_{\Sigma} = Z_{\Sigma}^{-1}(\beta) e^{-\beta H_{\Sigma}} \\ Z_{\Sigma}(\beta) &= SP_{\Sigma}(e^{-\beta H_{\Sigma}}); \quad Q = Q_{\Sigma}(\beta) = 1 - P. \end{aligned} \quad (2.40)$$

(2.38) გამოსახულება $\langle A_s(t)B_s \rangle$ კორელაციური ფუნქციისათვის ჩავწეროთ შემდეგი ფორმით:

$$\langle A_s(t)B_s \rangle = \langle A_s B_s(-t) \rangle = SP_s [B_s R(t) A_s]. \quad (2.41)$$

P და Q - პროექციული ოპერატორების დახმარებით მარტივად მივიღებთ შემდეგ ზუსტ მოძრაობის განტოლებებს $R(t)$ და $I(t)$ სუპეროპერატორებისათვის:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R(t) &= iR(t)PLP + iI(t)QLP; \\ \frac{\partial}{\partial t} I(t) &= iI(t)QLQ + iR(t)PLQ. \end{aligned} \quad (2.42)$$

თუ ჩავატარებთ (2.42) განტოლების ინტეგრებას $I(t)$ სუპეროპერატორისათვის, მაშინ ჩვენ მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებას:

$$I(t) = I(0)M_\rho(t) + i \int_0^t d\tau R(\tau) PLQM_\rho(t-\tau), \quad (2.43)$$

სადაც:

$$I(0) = Z^{-1}(\beta) SP_\Sigma e^{-\beta H} Q \quad (2.44)$$

არის $I(t)$ -სუპეროპერატორის საწყისი მნიშვნელობა და $M_\rho(t) = \exp[iQLQt]$ წარმოადგენს “მასურ” სუპეროპერატორს.

თუ ჩავსვამთ $I(t)$ -სუპეროპერატორის (2.43) გამოსახულებას (2.42) ფორმულის პირველ განტოლებაში, მაშინ ჩვენ ვიპოვით ზუსტ, არაერთგვაროვან ევოლუციურ განტოლებას $R(t)$ -სუპეროპერატორისათვის:

$$\frac{\partial}{\partial t} R(t) = iR(t)PLP + iI(0)M_\rho(t)QLP - \int_0^t d\tau R(t)PLQM_\rho(t-\tau)QLP. \quad (2.45)$$

მიღებული განტოლება განსაზღვრავს ევოლუციურ განტოლებას (2.41) კორელაციური ფუნქციისათვის. მართლაც, თუ ვისარგებლებთ (2.39) განსაზღვრებითა და $SP_{s,\Sigma}$ ოპერაციის ქვეშ ოპერატორთა ციკლიური გადანაცვლების შესაძლებლობითა და (2.41)–(2.45) ფორმულებით, მაშინ მარტივად ვიპოვით შემდეგ ევოლუციურ განტოლებას კორელაციური ფუნქციისთვის [119]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(-t) \rangle = & i \langle [PLPA_s] B_s(-t) \rangle + i \langle [QM_\rho(t)QLPA_s] B_s \rangle - \\ & - \int_0^t d\tau \langle [PLQM_\rho(t-\tau)QLPA_s] B_s(-\tau) \rangle. \end{aligned} \quad (2.46)$$

(2.45) და (2.46) განტოლებები წარმოადგენენ ზუსტ, არამარკოვისეულ ევოლუციურ განტოლებებს $R(t)$ სუპეროპერატორისა და $\langle A_s B_s(-t) \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის. ამ განტოლებათა არაერთგვაროვანი წევრები (მეორე წევრები (2.45), (2.46) განტოლებათა მარჯვენა ნაწილში) აღწერენ საწყისი კორელაციების ევოლუციას დროის მიხედვით, რომლებიც განაპირობებულია s ქვესისტემის ურთიერთქმედებით Σ თერმოსტატთან (ბოზონურ ველთან) დროის საწყის მომენტში: $t=0$. ამის გამო, საწყისი ამოცანის (კოშის ამოცანა) ამოხსნისას (2.45) განტოლებისათვის (და კორელაციური ფუნქციის პოვნისათვის) საჭიროა ცოდნა არა მარტო სუპეროპერატორისა – $R(0)$, არამედ აგრეთვე $I(0)$ სიდიდისა. თუ მახსოვრობა საწყისი კორელაციებისა დროის მიხედვით მიიღევა, მაშინ ევოლუციის პროცესში დომინირებს დაჯახებათა გავლენა. მაგრამ, მიუხედავად ამისა, პრინციპში საწყისი

კორელაციების წვევრების არსებობა ევოლუციურ განტოლებებში, რომელიც განაპირობებულია $I(0)$ -ის არსებობით, გავლენას მოახდენს რელაქსაციურ პროცესზე, რომელიც აღიწერება კორელაციური ფუნქციით, ქვესისტემის სუსტი ურთიერთქმედების შემთხვევაშიაც თერმოსტატთან. მოგვიანებით ჩვენ ვაჩვენებთ, რომ საწყის კორელაციებს შეაქვთ თავიანთი წვლილი s ქვესისტემის (მაგ. ელექტრონის) გადატანის კინეტიკურ კოეფიციენტში (ელექტროგამტარობა) [115-122].

ბევრად უფრო ეფექტური და ხელსაყრელია, თუ ჩვენ განვიხილავთ ევოლუციის ზუსტ და ერთგვაროვან განტოლებას, რომელშიაც საწყისი კორელაციები მოიცემა არაცხადი სახით. იმისათვის, რომ ვიპოვოთ ასეთი სახის განტოლება, ვისარგებლოთ ცნობილი ინტეგრალური ოპერატორული იგივეობით:

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\lambda e^{-\beta H} e^{\lambda H} H_{\text{int}} e^{-\lambda H_0}, \quad (2.47)$$

სადაც H_0 მოიცემა (2.9) ფორმულით. ამ იგივეობის გამოყენებით, ადვილია იმის ჩვენება, რომ ადგილი აქვს შემდეგ განტოლებათა სისტემას $I(t)$ და $I(0)$ -სუპეროპერატორებისათვის, რომლებიც გამომდინარეობენ (2.43) და ქვემოთ მოყვანილი განტოლებიდან:

$$I(0) = -R(t) \mathfrak{Z}_\rho(t, \beta) - I(t) \mathfrak{Z}_\rho(t, \beta) \quad (2.48)$$

და რომელიც მიიღება (2.47) გამოსახულებისა და $I(t)$ -სუპეროპერატორისთვის (2.44) საწყისი პირობიდან. (2.48) განტოლებაში ჩვენ შემოვიღეთ ინტეგრალური სუპეროპერატორი, რომელიც განისაზღვრება შემდეგი ტოლობით:

$$\mathfrak{Z}_\rho(t, \beta) = \int_0^\beta d\lambda e^{-i\lambda t} e^{\lambda H} H_{\text{int}} e^{-\lambda H} Q. \quad (2.49)$$

თუ ამოვხსნით (2.43) და (2.48) განტოლებებს $I(0)$ -ის მიმართ და ჩავსვამთ (2.45) განტოლებაში, მაშინ ჩვენ მივიღებთ საძიებელ ზუსტ, ერთგვაროვან ჩაკეტილ განტოლებას $R(t)$ -სუპეროპერატორისათვის:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R(t) = & iR(t)PLP - iR(t)P\mathfrak{Z}_\rho(t, \beta)[1 + M_\rho(t)\mathfrak{Z}_\rho(t, \beta)]^{-1} \times \\ & \times M_\rho(t)QLP + \int_0^t d\tau R(\tau)PLQM_\rho(t-\tau)\mathfrak{Z}_\rho(t, \beta)[1 + M_\rho(t) \times \\ & \times \mathfrak{Z}_\rho(t, \beta)]^{-1} M_\rho(t)QLP - \int_0^t d\tau R(\tau)PLQM_\rho(t-\tau)QLP. \end{aligned} \quad (2.50)$$

უნდა აღვნიშნოთ, რომ მიღებული განტოლებები შესაძლებელია გაგამარტივოთ, თუ ვისარგებლებთ შემდეგი თანაფარდობებით:

$$L_2P = 0; \quad PL_sQ = QL_sP = 0; \quad PL_tP = 0. \quad (2.51)$$

დაბოლოს, თუ გამოვიყენებთ (2.50)–(2.51) ფორმულებს, (2.46) განტოლების ნაცვლად მივიღებთ შემდეგ ზუსტ კვანტურ ევოლუციურ (კინეტიკურ) განტოლებას კორელაციური ფუნქციისთვის [119]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(-t) \rangle &= i \langle [PL_s P A_s] B_s(-t) \rangle - i \langle \{P \mathfrak{T}_\rho(t, \beta) \times \\ &\times [1 + M_\rho(t) \mathfrak{T}_\rho(t, \beta)]^{-1} M_\rho Q L_i P A_s \} B_s(-t) \rangle + \int_0^t d\tau \times \\ &\times \langle \{PL_i Q M_\rho(t-\tau) \mathfrak{T}_\rho(t, \beta) [1 + M_\rho(t) \mathfrak{T}_\rho(t, \beta)]^{-1} \times \\ &\times M_\rho(t) Q L_i P A_s \} B_s(-\tau) \rangle - \int_0^t d\tau \langle [PL_i Q M_\rho(t-\tau) Q \times \\ &\times L_i P A_s] B_s(-\tau) \rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

(2.50)–(2.52) ევოლუციურ განტოლებებს გააჩნიათ საკმარისად რთული ოპერატორული სტრუქტურა. საწყისი კორელაციების ევოლუცია დროში აღიწერება (2.49) ინტეგრალური სუპეროპერატორით; იგი შედის ევოლუციურ განტოლებებში როგორც მარკოვისეული, ისე არამარკოვისეული ფორმით (მეორე და მესამე წევრები (2.50) და (2.52) განტოლებების მარჯვენა ნაწილში). შფმ-ის დროს, როდესაც (2.38) კორელაციური ფუნქციის განსაზღვრებაში ჩვენ ვიღებთ $e^{-\beta H_0}$ – ოპერატორს, ნაცვლად $e^{\beta H}$ -გების სტატისტიკური ოპერატორისა, ვღებულობთ, რომ $I(0)=0$, როგორც ეს ნათლად ჩანს (2.39) და (2.40) ფორმულებიდან (ვინაიდან $PQ=0$). ამ გარემოებას მივყავართ იმ შედეგამდე, რომ ინტეგრალური სუპეროპერატორი ხდება ნულის ტოლი ($\mathfrak{T}_\rho(t, \beta) \equiv 0$), რაც თავის მხრივ იწვევს საწყისი კორელაციების ევოლუციის ამსახველი წევრების გაქრობას (ისინი ხდებიან ნულის ტოლი) (2.50) და (2.52) ევოლუციურ განტოლებებში. როგორც შედეგი და კერძო შემთხვევა ჩვენ ვღებულობთ ევოლუციურ განტოლებას კორელაციური ფუნქციისთვის, რომელიც გამოყვანილია [75-77] შრომებში.

ევოლუციური განტოლებები (2.3)-გრინის ფუნქციებისთვის გამომდინარეობენ (2.52)-განტოლებიდან. ასე მაგალითად, გრინის დაგვიანებული ფუნქციისთვის გვექნება განტოლება:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G^r(t) &= \delta(t) \langle [A_s B_s]_\eta \rangle + \theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(-t) \rangle - \\ &- \eta \theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle B_s A_s(t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

ნათელია, რომ ევოლუციური განტოლება $\langle A_s B_s(t) \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის მიიღება (2.52) განტოლებიდან, თუ გამოვიყენებთ ჩასმას $t \rightarrow -t$ [119, 121-122].

**2.5. თერმოსტატის ბოზონური ამპლიტუდების გამორიცხვა ევოლუციური
განტოლებიდან კორელაციური ფუნქციისათვის. მარკოვისეული მიახლოება
ქვესისტემის დინამიკისთვის**

განვიხილოთ ახლა უფრო დეტალურად (2.52) ევოლუციური განტოლება კორელაციური ფუნქციისთვის. ადვილი მისახვედრია, რომ (2.52) განტოლება შეიცავს თერმოსტატის (ბოზონური ველის) ამპლიტუდებს, რომლებიც არ არიან გამორიცხული ამ განტოლებიდან. დაგუშვათ, რომ ჰამილტონიანი H_{int} (ლიუვილიანი L_i) შეიცავს მცირე პარამეტრს (სუსტი ურთიერთქმედების შემთხვევა ქვესისტემასა და თერმოსტატს შორის); მაშინ (2.52)-განტოლებიდან პრინციპში შესაძლებელია ბოზონური ამპლიტუდების გამორიცხვა. ამ ამოცანის გადასაწყვეტად გავშალოთ მწკრივებად სუპეროპერატორები, რომლებიც ფიგურირებენ (2.52)-განტოლებაში $L_i(H_{\text{int}})$ ლიუვილიანის (ჰამილტონიანის) მიხედვით. გვექნება:

$$\begin{aligned}
 [1 + M_Q(t) \mathfrak{Z}_Q(t, \beta)]^{-1} &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k [M_Q(t) \mathfrak{Z}_Q(t, \beta)]^k \\
 M_Q(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} M_Q^{(k)}(t); \quad M_Q^{(0)}(t) = e^{iL_0 t} \\
 M_Q^{(n)}(t) &= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n e^{iL_0(t-t_1)} iQL_i e^{iL_0(t_1-t_2)} iQL_i \dots \times \\
 &\quad \times e^{iL_0(t_{n-1}-t_n)} iQL_i e^{iL_0 t_n}; \quad (n=1, 2, \dots) \\
 e^{-iLt} &= e^{-iL_0 t} T \exp \left[-i \int_0^t L_i(\xi) d\xi \right] \\
 e^{\lambda H} &= e^{\lambda H_0} T' \exp \left[\int_0^\lambda H_{\text{int}}(\gamma) d\gamma \right] \\
 L_i(\xi) &= e^{iL_0 \xi} L_i e^{-iL_0 \xi}; \quad H_{\text{int}}(\gamma) = e^{-\gamma H_0} H_{\text{int}} e^{\gamma H_0} \\
 L_0 &= L_s + L_\Sigma,
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

სადაც T და T' სიმბოლოები აღნიშნავენ ოპერატორთა მოწესრიგებას შესაბამისად ξ და γ ცვლადების მიხედვით.

s ქვესისტემის Σ თერმოსტატთან სუსტი ურთიერთქმედების შემთხვევაში (2.54) გაშლები ფორმალურად შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც შეშფოთების თეორიის მწკრივები და გამოვთვალოთ წევრები (2.50)–(2.52) განტოლებების მარჯვენა ნაწილებში მოცემული სიზუსტით. მარტივი საჩვენებელია, რომ ასეთი გაშლებისას ურთიერთქმედების მიხედვით იმ შემთხვევაში, როდესაც H_Σ და H_{int} აქვთ (2.2) სახე, ნულისგან განსხვავებული იქნებიან მხოლოდ ისეთი საშუალო

სიდიდეები – $\langle \dots \rangle_{\Sigma}$, რომლებიც შეიცავენ ბოზონების დაბადებისა და გაქრობის ოპერატორების ერთნაირ რაოდენობას. ამიტომ ასეთი სახის საშუალოები ტოლი იქნება სიდიდეების, რომლებიც პროპორციული იქნებიან ბოზონების შევსების საშუალო რიცხვების ნამრავლების. ამრიგად, ბოზონური (ფონონური) ოპერატორები (ამპლიტუდები) მთლიანად გამოირიცხება (2.52) ევოლუციური განტოლებიდან წონასწორული კორელაციური ფუნქციისათვის.

დაუშვათ, რომ სუსტი ურთიერთქმედების გამო, რომელსაც ადგილი აქვს s ქვესისტემასა და Σ თერმოსტატს შორის, გვაქვს დროთა იერარქია მთელ $(s+\Sigma)$ სისტემაში, რომელიც აღიწერება (2.34) უტოლობით. (2.34) უტოლობის სამართლიანობა გვრთავს ნებას ჩავატაროთ მარკოვისეული მიახლოება (2.50)–(2.52) განტოლებებში; თუ შემოვისაზღვრებით შემოფოტების თეორიის მეორე მიახლოებით ურთიერთქმედების $H_{\text{int}}(L_i)$ ჰამილტონიანის (ლიუვილიანის) მიხედვით, ვისარგებლებთ (2.54) გაშლებით და შევასრულებთ შემდეგ მიახლოებებს:

$$\begin{aligned} [1 + M_{\mathcal{O}}(t) \mathfrak{Z}_{\mathcal{O}}(t, \beta)]^{-1} &\Rightarrow 1 \\ M_{\mathcal{O}}(t) &\Rightarrow M_{\mathcal{O}}^{(0)}(t) = e^{iL_0 t} \\ \mathfrak{Z}_{\mathcal{O}}(t, \beta) &\Rightarrow \mathfrak{Z}_{\mathcal{O}}^0(t, \beta) = \int_0^{\beta} d\lambda e^{-iL_0 t} e^{\lambda H_0} H_{\text{int}} e^{-\lambda H_0} \mathcal{O} \\ B_s(-\tau) &\Rightarrow e^{iL_0(t-\tau)} B_s(-t). \end{aligned} \quad (2.55)$$

მაშინ (2.52) ევოლუციური განტოლება მარტივდება და იგი იღებს სახეს მარკოვისეული, განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური (ევოლუციური) განტოლებისა წონასწორული კორელაციური ფუნქციისთვის $\langle A_s B_s(-t) \rangle$ [119]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(-t) \rangle &= i \langle [L_s A_s] B_s(-t) \rangle - i \int_0^{\beta} d\lambda \langle [P e^{-iL_0 t} e^{\lambda H_0} \times \\ &\times H_{\text{int}} e^{-\lambda H_0} e^{iL_0 t} L_i A_s] B_s(-t) \rangle - \int_0^t d\tau \langle [P L_i e^{iL_0(t-\tau)} L_i A_s] \times \\ &\times e^{iL_0(t-\tau)} B_s(-t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.56)$$

მიღებული (2.56) განტოლება კორელაციური ფუნქციისთვის ჯერ კიდევ შეიცავს გამოურიცხავ ბოზონურ ამპლიტუდებს. თუ ვისარგებლებთ H_{Σ} და H_{int} ჰამილტონიანების – (2.2) ცხადი სახით და გამოვრიცხავთ ბოზონურ ოპერატორებს ზემოთ აღწერილი პროცედურის დახმარებით, მაშინ (2.56) ევოლუციური განტოლება კორელაციური ფუნქციისთვის ჩაიწერება შემდეგი საბოლოო სახით [119]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(-t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \langle [A_s, H_s]_- B_s(-t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k \{ N_k(\beta) e^{i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle [[A_s, C_k^+(s)]_- \cdot C_k(s, -\xi)]_{-\omega(k)} B_s(-t) \rangle + (1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)\xi} \times \\
&\times \langle [[A_s, C_k(s)]_- \cdot C_k^+(s, -\xi)]_{\omega(k)} B_s(-t) \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\lambda \sum_k \{ N_k(\beta) e^{-i\omega(k)(t+i\hbar\lambda)} \times \\
&\times \langle C_k^+(s, -t-i\hbar\lambda) \cdot [A_s, C_k(s)]_- B_s(-t) \rangle + (1 + N_k(\beta)) e^{i\omega(k)(t+i\hbar\lambda)} \times \\
&\times \langle C_k(s, -t-i\hbar\lambda) \cdot [A_s, C_k^+(s)]_- B_s(-t) \rangle \},
\end{aligned} \tag{2.57}$$

სადაც: $N_k(\beta) = [e^{\beta\hbar\omega(k)} - 1]^{-1}$ - წარმოადგენს ბოზონების (ფონონების) შევსების საშუალო რიცხვს, და

$$\begin{aligned}
C_k(s_1 \pm Z) &= e^{\pm iL_s Z} C_k(s); \quad C_k^+(s_1 \pm Z) = e^{\pm iL_s Z} C_k^+(s) \\
\text{ხოლო } [E, D]_{\pm\omega(k)} &= ED - e^{\mp\beta\hbar\omega(k)} DE.
\end{aligned} \tag{2.58}$$

ნებისმიერი E და D ოპერატორებისათვის.

(2.57) განტოლების გამოყვანისას, ჩვენ ვისარგებლეთ აგრეთვე შემდეგი თანაფარდობებით:

$$\begin{aligned}
e^{\pm iL_s t} b_k &= e^{\mp i\omega(k)t} b_k; \quad e^{\pm iL_s t} b_k^+ = e^{\pm i\omega(k)t} b_k^+ \\
P(b_k^+, b_{k'}) &= N_k(\beta) \delta_{k,k'}; \quad P(b_k, b_{k'}) = (1 + N_k(\beta)) \delta_{k,k'} \\
P(b_k, b_{k'}) &= P(b_k^+, b_{k'}) = 0.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

თუ შევასრულებთ $t \rightarrow -t$ ჩასმას (2.57) ევოლუციურ განტოლებაში, მაშინ მარტივად მივიღებთ განზოგადოებულ კვანტურ კინეტიკურ განტოლებას $\langle A_s B_s(t) \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle A_s B_s(t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [A_s, H_s]_- B_s(t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \cdot \sum_k \{ N_k(\beta) \times \\
&\times e^{-i\omega(k)\xi} \langle [[A_s, C_k^+(s)]_- \cdot C_k(s, \xi)]_{-\omega(k)} B_s(t) \rangle + (1 + N_k(\beta)) \times \\
&\times e^{i\omega(k)\xi} \langle [[A_s, C_k(s)]_- \cdot C_k^+(s, \xi)]_{\omega(k)} B_s(t) \rangle \} - \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\lambda \times \\
&\times \sum_k \{ N_k(\beta) e^{i\omega(k)(t-i\hbar\lambda)} \langle C_k^+(s, t-i\hbar\lambda) \cdot [A_s, C_k(s)]_- B_s(t) \rangle + \\
&+ (1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)(t-i\hbar\lambda)} \langle C_k(s, t-i\hbar\lambda) \cdot [A_s, C_k^+(s)]_- B_s(t) \rangle \}.
\end{aligned} \tag{2.60}$$

(2.57)–(2.60) განტოლებები განსხვავდება შფმ-ში მიღებული განტოლებებისაგან [75-77]. მესამე წევრების არსებობით განტოლებათა მარჯვენა ნაწილში, რომლებიც აღწერენ საწყისი კორელაციების ევოლუციას [114, 119, 121-122].

დაბოლოს, უნდა აღინიშნოს ერთი პრინციპული საკითხი, რომელიც ეხება საწყისი კორელაციების ევოლუციის წვევრების გათვალისწინებას განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალებში, წონასწორული კორელაციური და გრინის ფუნქციებისთვის. შფმ – მთელი ($s + \Sigma$)-კვანტური დინამიური სისტემის სტატისტიკური ოპერატორისთვის – დაფუძნებულია იმ დაშვებაზე და აღწერს ისეთ სიტუაციას, როდესაც დროის საწყისი $t = 0$ მომენტისთვის ადგილი არ აქვს კორელაციებს s -კვანტური დინამიური ქვესისტემისა და Σ -თერმოსტატის მდგომარეობებს შორის, და დროის ამ მომენტისთვის ხდება “ჩართვა” ურთიერთქმედებისა, როგორც ქვესისტემასა და თერმოსტატს შორის, ასევე ქვესისტემასა და გარეშე ველებს შორის. ცხადია, რომ ასეთ შემთხვევაში მთლიანი ($s + \Sigma$)-კვანტური დინამიური სისტემის საწყისი სტატისტიკური განაწილება (სტატისტიკური ოპერატორი დროის საწყის მომენტში) აიღება ფაქტორიზებული სახით (იხ. (2.37) ფორმულა). ამიტომ, როგორც უკვე იყო აღნიშნული, როგორც შედეგი ვლუბობთ განზოგადოებულ კინეტიკურ განტოლებებს კორელაციური და გრინის ფუნქციებისთვის, რომელთა დაჯახებითი ინტეგრალები არ შეიცავენ საწყისი კორელაციების ევოლუციის წვევრებს [75-77].

ყველა იმ რეალურ მოდელებში ფიზიკური სისტემებისა (კვანტური დისიპაციური სისტემები, ღია არაწონასწორული მოდელები სისტემები და სხვ.), რომლებსაც განიხილავს სტატისტიკური ფიზიკა (მექანიკა) და თერმოდინამიკა, ფიზიკური კინეტიკა და ა.შ., ქვესისტემის ურთიერთქმედების გამო თერმოსტატთან, s დინამიური ქვესისტემაც და Σ თერმოსტატიც ერთად შეადგენენ განუყოფელ ნაწილებს ერთიანი მთლიანი დინამიური სისტემისა - ($s + \Sigma$) (ქვესისტემა პლუს თერმოსტატი). უფრო მეტიც, შეიძლება ითქვას, რომ ქვესისტემასა და თერმოსტატს შორის ურთიერთქმედების გამო, ექსპერიმენტებზე ფაქტიურად შეუძლებელია მათი ერთმანეთისაგან განცალკევება. ასეთ სიტუაციაში, კინეტიკური მოვლენების სრულ და ადეკვატურ აღწერასა და გამოკვლევას, რომლებიც მიმდინარეობენ მცირე კვანტურ დინამიურ ქვესისტემაში, შეესაბამება – მთელი ($s + \Sigma$) დინამიური სისტემის სტატისტიკური ოპერატორის საწყისი მნიშვნელობა – არა შფმ-ის ტიპის, არამედ ისეთი სახის საწყისი მნიშვნელობები მთელი სისტემის სტატისტიკური ოპერატორისა, რომლებიც ითვალისწინებენ კორელაციებს კვანტური დინამიური ქვესისტემისა და თერმოსტატის მდგომარეობებს შორის დროის საწყისი მომენტისათვის ($t = 0$) (არაფაქტორიზებული საწყისი სტატისტიკური განაწილებები მთელი ($s + \Sigma$)-სისტემისა) [19,21].

ჩვენს მიერ დასმული ამოცანის თანახმად, მთელი $(s + \Sigma)$ დინამიური სისტემა დროის საწყისი $t = 0$ მომენტისათვის იმყოფება სტატისტიკური წონასწორობის მდგომარეობაში, რომელიც აღიწერება გიბსის კვანტური კანონიკური (ან დიდი კანონიკური) განაწილებით მთელი $(s + \Sigma)$ სისტემისთვის: $\rho_{eq}(\beta) = Z^{-1}(\beta)e^{-\beta H}$, და დროის ამავე $t = 0$ მომენტში ხდება ურთიერთქმედების “ჩართვა” მთელ $(s + \Sigma)$ სისტემასა და გარეშე წყაროებს (ველებს) შორის. ამის გამო, კინეტიკური პროცესების მკაცრად, ზუსტად და კორექტულად აღსაწერად და შესასწავლად, რომლებიც მიმდინარეობენ მცირე კვანტურ დინამიურ ქვესისტემაში, რომელიც ურთიერთქმედებს თერმოსტატთან (მაგ. ბოზონურ (ფონონურ) ველთან), საწყისი კორელაციებისა და საწყისი კორელაციების ევოლუციის წევრების გათვალისწინებას - განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალებში, წონასწორული კორელაციური და გრინის ფუნქციებისთვის s -ქვესისტემის დინამიური სიდიდეებისათვის – აქვს პრინციპული მნიშვნელობა, და მათი აპრიორი უგულებელყოფა (იგნორირება) დაუშვებელია [19, 21, 110, 114-115, 119-122].

მიღებული განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის, სადისერტაციო ნაშრომის III თავში გამოყენებული იქნება ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების გამოსაკვლევად მყარ სხეულებში – ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში [114-118, 120-122, 125].

თავი III. ნახევარბამტარებსა და იონური კრისტალებში ელექტრონული და პოლარონული ბამტარობისა და დაბალტემპერატურული ძვრადობის კვანტური თეორია დაფუძნებული კუბოს წრფივი ბამოქაზილის თეორიაზე

როგორც უკვე აღნიშნული იყო შესავალსა და ლიტერატურის მიმოხილვაში, მყარ სხეულებში გადატანის წრფივი მოვლენების შესასწავლად და დენის მატარებლების გადატანის კინეტიკური (მექანიკური) კოეფიციენტების გამოსათვლელად, შესაძლებელია გამოყენებული იქნას ორი განსხვავებული მიდგომა: 1) დაფუძნებული კუბოს წრფივი ბამოქაზილის (რეაქციის) თეორიაზე, და 2) დამყარებული კინეტიკურ განტოლებაზე დენის გადამტანების განაწილების ფუნქციისთვის, რომელიც ცნობილია როგორც ბოლცმანის განტოლება.

როგორც უკვე არაერთხელ იყო ხაზგასმული, ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების თეორიის შესწავლა მყარ სხეულებში და მათი კინეტიკური მახასიათებლების გამოთვლა, წარმოადგენს ერთ-ერთ აქტუალურ ამოცანას ელექტრონისა და დიდი რადიუსის მქონე პოლარონის კინეტიკის თანამედროვე თეორიაში [29-30,37-38]. გამოვიყენოთ ახლა წინა თავში გამოყვანილი განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მოვლენების შესასწავლად ნახევარბამტარებსა და იონურ კრისტალებში; კერძოდ – განვიხილოთ კონკრეტული მაგალითები კვანტური დინამიური ქვესისტემებისა, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ ველთან: ელექტრონ-ფონონური სისტემა (ელექტრონის ურთიერთქმედება (გაბნევა) პოლარულ ოპტიკურ და აკუსტიკურ ფონონებთან), პოლარონის ლატინჯერ-ლუს (ფგ) მოდელი და მათზე დაყრდნობით ავაგოთ დენის გადამტანებისთვის ელექტროგამტარობისა და ძვრადობის წრფივი კვანტური თეორია და გამოვთვალოთ კინეტიკური მახასიათებლები (კორელაციური ფუნქციების მიღების დეკორემენტები, რელაქსაციის დროები (სიხშირეები) და სხვ.) და გადატანის მექანიკური კოეფიციენტები (კუთრი ელექტროგამტარობა, დაბალტემპერატურული ძვრადობა, და სხვ.) კვანტური დისიპაციური (ქვე) სისტემების ამ კერძო მოდელისთვის. განვიხილება მიდგომა, რომელიც ეყრდნობა კუბოს წრფივი რეაქციისა და შეშფოთების თეორიას.

3.1. ელექტრონ-ფონონური სისტემა. ელექტრონის დაბალსიხშირული
 ელექტროგამტარობისა და დაბალტემპერატურული კვარტის გამომავალი სუსტი
 ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში

განვიხილოთ შემთხვევა ნაწილაკის (ელექტრონის) ურთიერთქმედებისა დაკვანტულ ფონონურ ველთან (ელექტრონ-ფონონური სისტემა), როდესაც მთელი სისტემის ჰამილტონიანი მოიცემა (1.13) ფორმულით და ელექტრონის ენერჯიას გამტარობის ზონიდან აქვს შემდეგი ზოგადი სახე: $H_s = T(\bar{P})$.

როგორც ცნობილია, კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიის თანახმად სისტემაზე მოქმედი სუსტი ინტენსივობისა და ω -სიხშირის მქონე გარეშე ელექტრული ველის შემთხვევაში, ელექტროგამტარობის ტენზორი შესაძლებელია გამოვსახოთ “დენი-დენზე” კორელაციური ფუნქციის საშუალებით. კუბოს ფორმულის თანახმად ელექტროგამტარობის ტენზორი ჩაიწერება შემდეგი სახით [4,25,64,72,83]:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{i}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\left(th \frac{1}{2} \beta \hbar \Omega \right)}{\Omega} I\{\mu, \nu\}(\Omega) \frac{1}{\Omega - \omega - i\varepsilon} \quad (3.1)$$

$$\varepsilon > 0; \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (\mu, \nu = x, y, z),$$

სადაც: $I\{\mu, \nu\}(\Omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\Omega t} [\langle j_\nu(0) J_\mu(t) \rangle + \langle j_\mu(t) J_\nu(0) \rangle]$.

(3.1) ფორმულის თანახმად ელექტროგამტარობის ტენზორის დისიპაციური ნაწილისთვის გვექნება:

$$\text{Re } \sigma_{\mu\nu}^s(\omega) \equiv \frac{2th(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega)}{\hbar \omega} \int_0^\infty dt \cos(\omega t) \Psi_{\mu\nu}^s(t), \quad (3.2)$$

სადაც: $\sigma_{\mu\nu}^s(\omega)$ და $\Psi_{\mu\nu}^s(t)$ წარმოადგენენ გამტარობის $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ ტენზორისა და $\Psi_{\mu\nu}(t)$ კორელაციური ფუნქციის სიმეტრიულ ნაწილებს:

$$\sigma_{\mu\nu}^s(\omega) = \frac{1}{2} [\sigma_{\mu\nu}(\omega) + \sigma_{\nu\mu}(\omega)];$$

$$\Psi_{\mu\nu}^s(t) = \frac{1}{2} [\Psi_{\mu\nu}(t) + \Psi_{\nu\mu}(t)] = \frac{1}{2} [\Psi_{\mu\nu}(t) + \Psi_{\mu\nu}(-t)]; \quad (3.3)$$

$$\Psi_{\mu\nu}(t) = \frac{1}{2} [\langle j_\nu(0) j_\mu(t) \rangle + \langle j_\mu(t) j_\nu(0) \rangle] = \frac{1}{2} [\langle j_\nu(0) j_\mu(t) \rangle + \langle j_\mu(0) j_\nu(-t) \rangle]$$

და $j_\mu(t) = e^{iL t} j_\mu(0)$ არის \vec{j} -ელექტრული დენის ოპერატორის μ კომპონენტი ჰაიზენბერგის წარმოდგენაში. ამრიგად, ელექტროგამტარობის გამოსათვლელად

საჭიროა ვიპოვოთ: $\Psi_{\mu\nu}(t) = \frac{e^2}{2} [\langle V_\nu(0)V_\mu(t) \rangle + \langle V_\mu(0)V_\nu(-t) \rangle]$ კორელაციური ფუნქციის მნიშვნელობა. \vec{V} წარმოადგენს ელექტრონის სიჩქარის ოპერატორს გამტარობის ზონაში. იმისათვის, რომ ვიპოვოთ $\Psi_{\mu\nu}(t)$ კორელაციური ფუნქციის სიდიდე, გამოვიყენოთ ნაშრომის II-თავში მიღებული (2.57) და (2.60) მიახლოებითი ევოლუციური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის, და ვისარგებლოთ მთელი სისტემის ჰამილტონიანის (1.13) გამოსახულებით. მიახლოებით ევოლუციურ (კინეტიკურ) განტოლებას ელექტრონის დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციისთვის “სიჩქარე-სიჩქარე” ექნება შემდეგი სახე ($H_s = T(\bar{P}); A_s = V_\nu; B_s = V_\mu$). [120-122]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle V_\nu(0)V_\mu(t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [V_\nu, T(\bar{P})]_- V_\mu(t) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ [e^{-i\omega(\vec{k})\xi} N_k(\beta) + \right. \\ &+ e^{i\omega(\vec{k})\xi} (1 + N_k(\beta))] \langle [V_\nu, e^{i\vec{k}\vec{r}}]_- e^{-i\vec{k}\vec{r}(\xi)} V_\mu(t) \rangle - [e^{i\omega(\vec{k})\xi} N_k(\beta) + e^{-i\omega(\vec{k})\xi} \times \\ &\times (1 + N_k(\beta))] \langle e^{-i\vec{k}\vec{r}(\xi)} [V_\nu, e^{i\vec{k}\vec{r}}]_- V_\mu(t) \rangle \left. \right\} - \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\lambda \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 [e^{i\omega(\vec{k})(t-i\hbar\lambda)} N_k(\beta) + \\ &+ e^{-i\omega(\vec{k})(t-i\hbar\lambda)} (1 + N_k(\beta))] \langle e^{-i\vec{k}\vec{r}(t-i\hbar\lambda)} [V_\nu, e^{i\vec{k}\vec{r}}]_- V_\mu(t) \rangle, \end{aligned} \quad (3.4)$$

სადაც: $V_\mu(t) = e^{iLt} V_\mu(0)$, $\vec{r}(\xi) = e^{\frac{i}{\hbar} T(\bar{P})\xi} \vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar} T(\bar{P})\xi} \equiv e^{iL_s \xi} \vec{r}$ და $\vec{r}(\xi)$ არის ელექტრონის თავისუფალი მოძრაობის “ტრაექტორია”. ანალოგიურად ჩაიწერება კინეტიკური განტოლება $\langle V_\mu(0)V_\nu(-t) \rangle$ კორელაციური ფუნქციისთვის. (3.4) განტოლების გამოყვანისას ჩვენ ვისარგებლებთ აგრეთვე შემდეგი თანაფარდობებით: $\omega(-\vec{k}) = \omega(\vec{k})$; $V_{-\vec{k}} = V_{\vec{k}}$.

ჩვენ შემოვიფარგლებით მხოლოდ ერთი ზონის მიახლოებით ელექტრონისთვის, როდესაც ელექტრონის სიჩქარის ოპერატორი დიაგონალურია იმპულსურ (კვაზიიმპულსის) წარმოდგენაში და ამიტომ ადგილი აქვს შემდეგ ტოლობებს:

$$V_\mu(\bar{P}) = \frac{\partial}{\partial P_\mu} T(\bar{P}); [V_\mu(\bar{P}), T(\bar{P})]_- = 0, (\mu = x, y, z).$$

ჩვენ ვიყენებთ აგრეთვე აღნიშვნას $V_\mu(\bar{P})$ ელექტრონის სიჩქარის ოპერატორის მატრიცული ელემენტისთვის $\langle \bar{P} | V_\mu | \bar{P} \rangle$, რომელიც გამოითვლება ელექტრონის კვაზიიმპულსის ოპერატორის საკუთარი ფუნქციების $|\bar{P}\rangle$ მეშვეობით.

თუ შემოვიღებთ შემდეგ რელევანტურ (დამხმარე) ოპერატორს (შედა-
რებისთვის იხ. (2.39)) $G_\mu(t, \beta)$; საწყისი მნიშვნელობით, როდესაც $t=0$;
 $G_\mu(\beta) = G_\mu(t, \beta)|_{t=0}$ და განვსაზღვრავთ ტოლობებით:

$$G_\mu(t, \beta) = Z^{-1}(\beta) SP_\Sigma [V_\mu(t) e^{-\beta H}]; G_\mu(\beta) = V_\mu \frac{Z^s(\beta)}{SP_s [Z^s(\beta)]}, \quad (3.5)$$

სადაც: $Z^s(\beta) = SP_\Sigma [e^{-\beta H}]$ - დაყვანილი (რედუცირებული) სტატჯამია ელექტრონ-
ფონონური სისტემისთვის; მაშინ შემოღებული (3.5) ოპერატორის დახმარებით
შესაძლებელია $\langle V_\nu(0) V_\mu(\pm t) \rangle$ - კორელაციური ფუნქციები და მათი შესაბამისი
კინეტიკური განტოლებები გამოვსახოთ შემდეგი ფორმით:

$$\begin{aligned} \langle V_\nu(0) V_\mu(\pm t) \rangle &= SP_s [V_\nu(0) G_\mu(\pm t, \beta)] \\ \frac{\partial}{\partial t} \langle V_\nu(0) V_\mu(\pm t) \rangle &\equiv SP_s \left[V_\nu(0) \frac{\partial}{\partial t} G_\mu(\pm t, \beta) \right] = \pm SP_s [V_\nu(0) \Gamma_\nu(\pm t, \beta) G_\mu(\pm t, \beta)], \end{aligned} \quad (3.6)$$

სადაც: ოპერატორი $\Gamma_\nu(t, \beta)$ უშუალოდ განისაზღვრება (3.4) განტოლებიდან და აქვს
შემდეგი სახე:

$$\begin{aligned} \Gamma_\nu(t, \beta) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\xi \sum_k |V_{\bar{k}}|^2 \left\{ \left[e^{-i\omega(\bar{k})\xi} N_{\bar{k}}(\beta) + e^{i\omega(\bar{k})\xi} (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \right] V_\nu^{-1} \times \right. \\ &\times [V_\nu, e^{i\bar{k}r}]_- e^{-i\bar{k}r(\xi)} - \left[e^{i\omega(\bar{k})\xi} N_{\bar{k}}(\beta) + e^{-i\omega(\bar{k})\xi} (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \right] V_\nu^{-1} e^{-i\bar{k}r(\xi)} \times \\ &\times [V_\nu, e^{i\bar{k}r}]_- \left. \right\} - \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta d\lambda \sum_k |V_{\bar{k}}|^2 \left[e^{i\omega(\bar{k})(t-i\hbar\lambda)} N_{\bar{k}}(\beta) + e^{-i\omega(\bar{k})(t-i\hbar\lambda)} (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \right] \times \\ &\times V_\nu^{-1} e^{-i\bar{k}r(t-i\hbar\lambda)} [V_\nu, e^{i\bar{k}r}]_-, \end{aligned} \quad (3.7)$$

სადაც: $V_\nu^{-1} \cdot V_\nu = V_\nu \cdot V_\nu^{-1} = 1$.

(3.6) კინეტიკურ განტოლებებში კვალი ელექტრონის (ქვესისტემის) მდგო-
მარეობების მიხედვით გამოვთვალოთ ელექტრონის კვაზიიმპულსის ოპერატორის
 $|\bar{P}\rangle$ საკუთარი ფუნქციების საშუალებით. ამის გათვალისწინებით (4.6)
თანაფარდობები შესაძლებელია ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} \langle V_\nu(0) V_\mu(\pm t) \rangle &= \int d\bar{P} V_\nu(\bar{P}) G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}) \\ \int d\bar{P} V_\nu(\bar{P}) \frac{\partial}{\partial t} G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}) &= \pm \int d\bar{P} V_\nu(\bar{P}) \Gamma_\nu(\pm t, \beta, \bar{P}) G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

(3.8) განტოლებების მიღებისას ჩვენ გავითვალისწინეთ, რომ ელექტრონის
სიჩქარის ოპერატორი დიაგონალურია კვაზიიმპულსის წარმოდგენაში და, ვინაიდან
განიხილება სივრცულად ერთგვაროვანი სისტემა, ამიტომ მხოლოდ დიაგონალური

მატრიცული ელემენტები - $\langle \bar{P} | \Gamma_v(t, \beta) | \bar{P} \rangle \equiv \Gamma_v(t, \beta, \bar{P})$; $\Gamma_v(t, \beta)$ - ოპერატორის არის განსხვავებული ნულისაგან. თუ ვისარგებლებთ შემდეგი თანაფარდობებით:

$$\begin{aligned} \langle \bar{P}_1 | e^{\pm i\bar{k}\bar{r}} | \bar{P}_2 \rangle &= \delta(\bar{P}_2 \pm \hbar\bar{k} - \bar{P}_1); \\ e^{\pm i\bar{k}\bar{r}} f(\bar{P}) &= f(\bar{P} \mp \hbar\bar{k}) e^{\pm i\bar{k}\bar{r}}; \\ f(\bar{P}) e^{\pm i\bar{k}\bar{r}} &= e^{\pm i\bar{k}\bar{r}} f(\bar{P} \pm \hbar\bar{k}), \end{aligned}$$

სადაც: $f(\bar{P})$ წარმოადგენს \bar{P} კვაზიმპულსის (იმპულსის) ნებისმიერ ფუნქციას და ვისარგებლებთ (3.7) განტოლებით, მაშინ $\Gamma_v(t, \beta)$ ოპერატორის $\Gamma_v(t, \beta, \bar{P})$ მატრიცული ელემენტისათვის მივიღებთ შემდეგ განტოლებას [120]:

$$\begin{aligned} \Gamma_v(t, \beta, \bar{P}) &= \frac{2}{\hbar} \sum_{\bar{k}} |V_{\bar{k}}|^2 \frac{V_v(\bar{P} + \hbar\bar{k}) - V_v(\bar{P})}{V_v(\bar{P})} \left\{ N_{\bar{k}}(\beta) \frac{\sin\left[\frac{t}{\hbar} \Delta^-(\bar{k}, \bar{P})\right]}{\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})} + \right. \\ &+ (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \frac{\sin\left[\frac{t}{\hbar} \Delta^+(\bar{k}, \bar{P})\right]}{\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})} + \frac{i}{2} \left[N_{\bar{k}}(\beta) e^{-\frac{i}{\hbar} t \Delta^-(\bar{k}, \bar{P})} \frac{e^{-\beta \Delta^-(\bar{k}, \bar{P})} - 1}{\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})} + \right. \\ &\left. \left. + (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) e^{-\frac{i}{\hbar} t \Delta^+(\bar{k}, \bar{P})} \frac{e^{-\beta \Delta^+(\bar{k}, \bar{P})} - 1}{\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

სადაც: $\Delta^\pm(\bar{k}, \bar{P}) = T(\bar{P} + \hbar\bar{k}) - T(\bar{P}) \pm \hbar\omega(\bar{k})$.

განვიხილოთ ახლა იზოტროპული შემთხვევა, როდესაც ელექტროგამტარობის ტენზორს და სიმეტრიზებულ კორელაციურ ფუნქციას აქვთ შემდეგნაირი სახე:

$$\sigma_{\mu\nu}^s(\omega) = \sigma^s(\omega) \delta_{\mu\nu}; \quad \Psi_{\mu\nu}^s(t) = \Psi^s(t) \delta_{\mu\nu}$$

და ვისარგებლოთ მიახლოებითი განტოლებით, რომელიც გამომდინარეობს (3.8) განტოლებიდან:

$$\frac{\partial}{\partial t} G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}) = \pm \Gamma_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}) G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}). \quad (3.10)$$

ცხადია, რომ (3.10) კინეტიკური განტოლება წარმოადგენს რელაქსაციის დროის მიახლოების (რდმ) სახის აპროქსიმაციას. ნათელია, რომ (3.10) მიახლოებითი განტოლება ხდება ზუსტი, როდესაც $\Gamma_\mu(\pm t, \beta, \bar{P})$ ფუნქცია არ არის დამოკიდებული \bar{P} კვაზიმპულსზე. მაგალითად, ასეთ შემთხვევას აქვს ადგილი ფროლიხის პოლარონისთვის დაბალი ტემპერატურების არეში [116-118, 120].

თუ ჩავატარებთ (3.10) განტოლების ინტეგრაციას და გავითვალისწინებთ (3.5) საწყის პირობებს, მაშინ ჩვენ მივიღებთ:

$$G_\mu(\pm t, \beta, \bar{P}) = \exp[\tilde{\Gamma}_\mu(\pm t, \beta, \bar{P})] G_\mu(\beta, \bar{P}); \quad \tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P}) = \int_0^t d\tau \Gamma_\mu(\tau, \beta, \bar{P});$$

$$G_\mu(\beta, \bar{P}) = \langle \bar{P} | G_\mu(\beta) | \bar{P} \rangle = \frac{V_\mu(\bar{P}) Z^s(\beta, \bar{P})}{\int d\bar{P} Z^s(\beta, \bar{P})}; \quad Z^s(\beta, \bar{P}) = \langle \bar{P} | Z^s(\beta) | \bar{P} \rangle. \quad (3.11)$$

თუ ჩავსვამთ $\Gamma_\mu(t, \beta, \bar{P})$ -ს (3.9) მნიშვნელობას (3.11) ფორმულაში, მაშინ ინტეგრაციის შედეგად $\tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P})$ -თვის ჩვენ მივიღებთ გამოსახულებას:

$$\tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P}) = \text{Re} \tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P}) + i \text{Im} \tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P});$$

$$\text{Re} \tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P}) = \sum_{\bar{k}} |V_{\bar{k}}|^2 \frac{V_\mu(\bar{P} + \hbar \bar{k}) - V_\mu(\bar{P})}{V_\mu(\bar{P})} \left\{ N_{\bar{k}}(\beta) \left[1 + e^{-\beta \Delta^-(\bar{k}, \bar{P})} \right] \times \right.$$

$$\left. \times \frac{1 - \cos \left[\frac{t}{\hbar} \Delta^-(\bar{k}, \bar{P}) \right]}{[\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})]^2} + (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \left[1 + e^{-\beta \Delta^+(\bar{k}, \bar{P})} \right] \frac{1 - \cos \left[\frac{t}{\hbar} \Delta^+(\bar{k}, \bar{P}) \right]}{[\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})]^2} \right\}; \quad (3.12)$$

$$\text{Im} \tilde{\Gamma}_\mu(t, \beta, \bar{P}) = - \sum_{\bar{k}} |V_{\bar{k}}|^2 \frac{V_\mu(\bar{P} + \hbar \bar{k}) - V_\mu(\bar{P})}{V_\mu(\bar{P})} \left\{ N_{\bar{k}}(\beta) \frac{1 - e^{-\beta \Delta^-(\bar{k}, \bar{P})}}{[\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})]^2} \times \right.$$

$$\left. \times \sin \left[\frac{t}{\hbar} \Delta^-(\bar{k}, \bar{P}) \right] + (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \frac{1 - e^{-\beta \Delta^+(\bar{k}, \bar{P})}}{[\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})]^2} \sin \left[\frac{t}{\hbar} \Delta^+(\bar{k}, \bar{P}) \right] \right\}.$$

(3.11) და (3.12) გამოსახულებები ასახავენ (3.6) კორელაციური ფუნქციების დროზე დამოკიდებულებას და პრინციპში საშუალებას იძლევიან, რომ გამოთვლილ იქნეს ელექტროგამტარობის ტენზორი (3.2)-(3.3) ფორმულების დახმარებით. ვინაიდან ჩვენ შემოვიფარგლებით შეშფოთების თეორიის მხოლოდ მეორე მიახლოებით (3.4) კინეტიკურ განტოლებაში ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების $H_i(V_{\bar{k}})$ ჰამილტონიანის მიხედვით, ამიტომ თანმიმდევრობის დაცვის მიზნით შევასრულოთ მიახლოება: $e^{-\beta H} \Rightarrow e^{-\beta H_0} = e^{-\beta H_s} e^{-\beta H_z}$ - კორელაციური ფუნქციების (3.5)-(3.11) - საწყისი მნიშვნელობებისათვის. ამრიგად ჩვენ გვაქვს:

$$G_\mu(\beta) = \frac{e^{-\beta H_s}}{\text{SP}_s[e^{-\beta H_s}]} V_\mu; \quad G_\mu(\beta, \bar{P}) = \frac{e^{-\beta \Gamma(\bar{P})}}{\int d\bar{P} e^{-\beta \Gamma(\bar{P})}} V_\mu(\bar{P}). \quad (3.13)$$

(3.8), (3.11) და (3.13) განტოლებებს მივყავართ შემდეგ გამოსახულებამდე $\Psi_{\mu\nu}(t)$ კორელაციური ფუნქციისათვის:

$$\Psi_{\mu\nu}(t) = \frac{e^2}{2} \frac{\int d\bar{P} e^{-\beta \Gamma(\bar{P})} V_\nu(\bar{P}) V_\mu(\bar{P}) \left\{ \exp[\tilde{\Gamma}_\nu(t, \beta, \bar{P})] + \exp[\tilde{\Gamma}_\mu(-t, \beta, \bar{P})] \right\}}{\int d\bar{P} e^{-\beta \Gamma(\bar{P})}}, \quad (3.14)$$

სადაც: $\tilde{\Gamma}_\nu(t, \beta, \bar{P})$ და $\tilde{\Gamma}_\mu(-t, \beta, \bar{P})$ განისაზღვრებიან (3.12) ფორმულებით.

(3.12) და (3.14) ტოლობების თანახმად, ელექტრონის (ქვესისტემის) კორელაციური ფუნქციები მიიღვებიან ოსცილაციებით იმის გამო, რომ რელაქსაციის $\tilde{\Gamma}_\nu(t, \beta, \bar{P})$ -ფაქტორი წარმოადგენს კომპლექსურ სიდიდეს, და როგორც ჩვენ მოგვიანებით ვაჩვენებთ, ეს ოსცილაციები “სიცოცხლის უნარიანი” არიან დიდი დროების ასიმპტოტურ არეში $t \gg t_0$ და იძლევიან წვლილს გადატანის კინეტიკურ კოეფიციენტებში (ელექტროგამტარობა, ძვრადობა) [117-118, 120-122]. ეს დასკვნა გამომდინარეობს იმ მარტივი გარემოებიდან, რომ წონასწორული დროითი კორელაციური ფუნქციების განსაზღვრებაში (იხ. მაგ. (2.6) ფორმულა) ფიგურირებს გიბსის განაწილება, რომელიც შეიცავს საწყისი კორელაციების წევრს (H_{int}) და რომლის ზუსტი გათვალისწინებაც ხდება ევოლუციურ (კინეტიკურ) განტოლებებში ამ ფუნქციებისთვის. შფმ-ში $\Gamma_\nu(t, \beta, \bar{P})$ – რელაქსაციის ფაქტორის წარმოსახვითი ნაწილი ნულის ტოლია, და, ამიტომ ზემოთ მითითებულ ოსცილაციებს ადგილი არ ექნება [75,77]. უნდა აღინიშნოს, რომ განხილული მსჯელობა სამართლიანია იმ შემთხვევაში, როდესაც ადგილი აქვს დროთა იერარქიას (იხ. (2.34) ფორმულა); როგორც (3.12) ფორმულიდან ნათლად ჩანს, იმ შემთხვევაში, როდესაც განიხილება ელექტრონის ურთიერთქმედება ფონონებთან: $t_s \sim \hbar\beta$ და $t_\Sigma \sim \frac{1}{\omega}$, სადაც $\bar{\omega}$ - წარმოადგენს ფონონთა მახასიათებელ სიხშირეს. უფრო მეტიც, (3.12) გამოსახულებიდან გამომდინარეობს, რომ ენერჯის შენახვის კანონი ელექტრონის ფონონებთან გაბნევის პროცესის დროს სამართლიანია დიდი დროების შემთხვევაში: $t \gg t_0$, $t_0 = \max(t_s, t_\Sigma)$; თუ განვიხილავთ დროთა დიდ ინტერვალს $t \gg t_0$, მაშინ ჩვენ შეგვიძლია შევასრულოთ ზღვრული გადასვლა $t \rightarrow \infty$ (3.12) გამოსახულებაში და, როგორც შედეგი მივიღებთ [120]:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Re} \tilde{\Gamma}_\nu(t, \beta, \bar{P}) &= -\Gamma_\nu^{rel}(\beta, \bar{P})|t| = -\frac{1}{\tau^{rel}(\beta, \bar{P})}|t|; \\ \Gamma_\nu^{rel}(\beta, \bar{P}) &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\bar{k}} |V_{\bar{k}}|^2 \frac{V_\nu(\bar{P} + \hbar\bar{k}) - V_\nu(\bar{P})}{V_\nu(\bar{P})} \{N_{\bar{k}}(\beta) \delta[\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})] + \\ &+ (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \delta[\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})]\}; \\ \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \tilde{\Gamma}_\nu(t, \beta, \bar{P}) &= -\beta\pi \sum_{\bar{k}} |V_{\bar{k}}|^2 \frac{V_\nu(\bar{P} + \hbar\bar{k}) - V_\nu(\bar{P})}{V_\nu(\bar{P})} \{N_{\bar{k}}(\beta) \delta[\Delta^-(\bar{k}, \bar{P})] + \\ &+ (1 + N_{\bar{k}}(\beta)) \delta[\Delta^+(\bar{k}, \bar{P})]\} \text{Sign}t. \end{aligned} \tag{3.15}$$

(3.15) ფორმულების გამოყვანისას ჩვენ ვისარგებლეთ თანაფარდობებით:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1 - \cos(\omega t)}{\omega^2} = \pi |t| \delta(\omega); \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin(\omega t)}{\omega} = \pi \delta(\omega) \text{Sign}t.$$

აღვნიშნავთ, რომ (3.15) გამოსახულებებში $\lim_{t \rightarrow \infty}$ ზღვრულ გადასვლამდე უნდა შესრულდეს თერმოდინამიკური ზღვრული გადასვლა (T-ზღვარი):

$$\sum_k (...) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\bar{k} (...).$$

ცხადია, რომ ძალიან დიდი დროების ასიმპტოტურ არეში, როდესაც ($t \gg t_0, t \rightarrow \infty$) (3.15) თანაფარდობები ჩვენ გვაძლევს შემდეგ ტოლობას:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{Im} \tilde{\Gamma}_v(t, \beta, \bar{P}) = \frac{1}{2} \beta \hbar \Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P}) \text{Sign}t. \quad (3.16)$$

ამრიგად, $\Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})$ - სიდიდე, რომელიც ფაქტიურად წარმოადგენს ელექტრონის “სიჩქარე-სიჩქარე” - კორელაციური ფუნქციის მიღების დეკრემენტს - შესაძლებელია განხილულ იქნას როგორც ელექტრონის $V_v(\bar{P})$ სიჩქარის v - კომპონენტის რელაქსაციის სიხშირე ($\tau_v^{rel}(\beta, \bar{P})$ - წარმოადგენს შესაბამის რელაქსაციის დროს).

დაბოლოს, თუ ვისარგებლებთ (3.2)-(3.3) და (3.14)-(3.15) თანაფარდობებით, საბოლოოდ ვპოულობთ გამოსახულებას კუთრი ელექტროგამტარობის დისიპაციური ნაწილისთვის [120]:

$$\begin{aligned} \text{Re} \sigma_{\mu\nu}^s = n e^2 \frac{th\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega\right)}{\hbar \omega} \int d\bar{P} \rho_s(\beta, \bar{P}) V_v(\bar{P}) V_\mu(\bar{P}) \left\{ \cos\left[\frac{\beta \hbar}{2} \Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})\right] \times \right. \\ \left. \times \frac{\Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})}{\omega^2 + [\Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})]^2} + \cos\left[\frac{\beta \hbar}{2} \Gamma_\mu^{rel}(\beta, \bar{P})\right] \frac{\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \bar{P})}{\omega^2 + [\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \bar{P})]^2} \right\}, \quad (3.17) \end{aligned}$$

სადაც: n - წარმოადგენს ელექტრონების კონცენტრაციას გამტარობის ზონაში, ხოლო $\rho_s(\beta, \bar{P}) = e^{-\beta \Gamma(\bar{P})} / \int d\bar{P} e^{-\beta \Gamma(\bar{P})}$.

ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობა, რომელიც დამოკიდებულია გარეშე ელექტრული ველის ω სიხშირეზე (ac-mobility), შესაძლებელია წარმოდგენილი იქნას შემდეგი სახით (საუბარია დრეიფულ ძვრადობაზე):

$$\mu(\omega) = \mu_0(\omega) - \Delta\mu(\omega),$$

სადაც:

$$\mu_0(\omega) = \frac{eth\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega\right)}{\hbar \omega} \int d\bar{P} \rho_s(\beta, \bar{P}) V_v(\bar{P}) V_\mu(\bar{P}) \left\{ \frac{\Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})}{\omega^2 + [\Gamma_v^{rel}(\beta, \bar{P})]^2} + \frac{\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \bar{P})}{\omega^2 + [\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \bar{P})]^2} \right\};$$

$$\Delta\mu(\omega) = \frac{2eth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{\hbar\omega} \int d\vec{P} \rho_s(\beta, \vec{P}) V_v(\vec{P}) V_\mu(\vec{P}) \times \quad (3.18)$$

$$\times \left\{ \sin^2 \left[\frac{\beta\hbar}{4} \Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P}) \right] \frac{\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P})}{\omega^2 + [\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P})]^2} + \sin^2 \left[\frac{\beta\hbar}{4} \Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P}) \right] \frac{\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P})}{\omega^2 + [\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P})]^2} \right\}; (\omega \ll t_0^{-1}).$$

როგორც ნათლად ჩანს (3.17) და (3.18) გამოსახულებებიდან, საწყისი კორელაციები, რომლებიც გამოწვეულია ელექტრონის ურთიერთქმედებით ფონონებთან, ფიგურირებენ ამ ფორმულებში $\cos\left[\frac{\beta\hbar}{2}\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P})\right]$ და $\sin^2\left[\frac{\beta\hbar}{4}\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P})\right]$ თანამამრავლების სახით; მაგრამ, ვინაიდან ადგილი აქვს დროთა იერარქიას (იხ. (2.34)), ამიტომ $\beta\hbar\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P}) \ll 1; (\tau^{rel}(\beta, \vec{P}), \sim 1/\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P}), t_s \sim \beta\hbar)$. უნდა აღინიშნოს, რომ საწყისი კორელაციები არ ახდენენ გავლენას $\tau_v^{rel}(\beta, \vec{p})$ რელაქსაციის დროზე. $\Delta\mu(\omega)$ -სიდიდე წარმოადგენს ტემპერატურულ შესწორებას ელექტრონის $\mu_0(\omega)$ დაბალტემპერატურულ და სისშირულ ძვრადობაზე, რომელიც გამოწვეულია საწყისი კორელაციების არსებობით ელექტრონის ურთიერთქმედებისას ფონონებთან არსებულ სისტემაში [120].

შემ-ში დროითი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის ჩვენ უგულებელვყოფთ H_{int} ურთიერთქმედებას $e^{-\beta H}$ გიბსის ფაქტორში [75-77], მაგრამ ვინარჩუნებთ ამ ურთიერთქმედებას $e^{\pm \frac{i}{\hbar} H t}$ ევოლუციის ოპერატორებში, რის შედეგადაც ასეთ მიახლოებას მიყვავართ შემდეგი აპროქსიმაციების შესრულება მდე (3.17)-(3.18) გამოსახულებებში: $\cos\left[\frac{\beta\hbar}{2}\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P})\right] \Rightarrow 1; \cos\left[\frac{\beta\hbar}{2}\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P})\right] \Rightarrow 1$. ანუ $\beta\hbar\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P}) \Rightarrow 0; \beta\hbar\Gamma_v^{rel}(\beta, \vec{P}) \Rightarrow 0$; ამგვარად, შემ-ში შესწორება ძვრადობაზე $\Delta\mu(\omega) \Rightarrow 0$.

ამრიგად, ჩვენს მიერ ნაპოვნი გამოსახულებები კუთრი ელექტროგამტარობისთვის, დაბალტემპერატურული ძვრადობისა და ელექტრონის “სინქარე-სინქარე” კორელაციური ფუნქციებისთვის წარმოადგენენ ყველაზე უფრო ზოგადს განხილული მოდელის ჩარჩოებში და შესრულებული მიახლოებების ფარგლებში [112-113,120].

3.2. ელექტრონის კვრადობა ფროლიხის პოლარონის მოდელში

(“ $\frac{3}{2\beta\hbar\omega_0}$ პროლევა” პოლარონის დაბალტემპერატურული
კვრადობის თეორიაში)

განვიხილოთ ახლა ელექტრონი, რომელიც მოძრაობს პოლარულ ნახევარ-გამტარში ან იონურ კრისტალში, რომლის მოძრაობა აღიწერება (1.13)-(1.18) ჰამილტონიანით და რომელიც სუსტად ურთიერთქმედებს პოლარულ ოპტიკურ ფონონებთან: ($\alpha < 1$) (ე.წ. ფროლიხის პოლარონის მოდელი) [29-30]. განვიხილება ელექტრონის ურთიერთქმედება დისპერსიის არმქონე ოპტიკურ ფონონებთან, როდესაც $\omega(\vec{k}) \equiv \omega_0$. ვინაიდან ელექტრონის ენერგიისთვის გამტარობის ზონიდან გვაქვს გამოსახულება $T(\vec{P}) = \frac{\vec{P}^2}{2m}$, ამიტომ ელექტრონის სიჩქარის μ -კომპონენტისთვის გვექნება შემდეგი ფორმულა:

$$V_\mu(\vec{P}) = \frac{P_\mu}{m} \quad (3.19)$$

როგორც (3.14), (3.15) და (3.17) გამოსახულებებიდან ჩანს, საკითხი დაიყვანება ელექტრონის რელაქსაციის სიხშირის: $\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P})$ - გამოთვლაზე, რომელიც ზოგად შემთხვევაში დამოკიდებულია ელექტრონის \vec{P} იმპულსზე.

დაუშვათ, რომ ელექტრული ველი მიმართულია z ღერძის დადებითი მიმართულების გასწვრივ, და, განსაზღვრულობისათვის განვიხილოთ $\Gamma_z^{rel}(\beta, \vec{P})$. თუ შევასრულებთ თერმოდინამიკურ ზღვრულ გადასვლას და ჩავატარებთ ინტეგრაციას $|\vec{k}|$ ცვლადის მიხედვით, მაშინ (1.18) და (3.15) გამოსახულებებიდან მივიღებთ:

$$\Gamma_0^{rel}(\beta, \vec{P}) = \frac{\alpha\omega_0}{2\pi} \frac{1}{\tilde{P}_z} \left\{ N_0(\gamma) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta \frac{\tilde{P} \cos\Phi}{\sqrt{\tilde{P}^2 \cos^2\Phi + 1}} + \right. \\ \left. + (1 + N_0(\gamma)) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta \frac{\tilde{P} \cos\Phi}{\sqrt{\tilde{P}^2 \cos^2\Phi - 1}} \right\} (\tilde{P}^2 \cos^2\Phi \geq 1). \quad (3.20)$$

აქ ჩვენ შემოვიღეთ ელექტრონის უგანზომილებო იმპულსი:

$$\tilde{P}_i = \frac{P_i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}; i = (x, y, z) \text{ და } N_0(\gamma) = [e^\gamma - 1]^{-1}; \gamma = \beta\hbar\omega_0.$$

Φ - წარმოადგენს კუთხეს \vec{k} და \tilde{P} ვექტორებს შორის, რომელიც დაკავშირებულია θ და φ კუთხეებთან (θ და φ კუთხეები განსაზღვრავენ \vec{k} ვექტორის მიმართულებას) შემდეგი თანაფარდობით:

$$\tilde{P} \cos \varphi = \sin \theta \cos \varphi \tilde{P}_x + \sin \theta \sin \varphi \tilde{P}_y + \cos \theta \tilde{P}_z.$$

(3.20) გამოსახულების გამოსათვლელად შემოვიყენოთ დაბალი ტემპერატურების შემთხვევით, როდესაც

$$\gamma \gg 1 \quad (3.21)$$

და (3.14) კორელაციური ფუნქციები განსაზღვრულია ელექტრონის იმპულსის მცირე მნიშვნელობებით:

$$\tilde{P}^2 \ll 1. \quad (3.22)$$

ამ შემთხვევაში, ელექტრონი მოძრაობს “მცირე” სიჩქარით და მას არ შეუძლია გამოასხივოს ფონონები, ვინაიდან არ ექნება ადგილი ენერჯისა და იმპულსის შენახვის კანონებს ელექტრონის გაბნევისას ფონონებზე (იხ. (3.15) და (3.20)). ამგვარად, როდესაც სრულდება (3.21) და (3.22) პირობები, (3.20) გამოსახულების მეორე წევრი მის მარჯვენა ნაწილში ხდება ნულის ტოლი. თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\tilde{P}^2 \cos^2 \Phi \ll 1$, მაშინ (3.20) გამოსახულება შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\Gamma_z^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \equiv \Gamma_0^{rel}(\gamma) = \frac{2}{3} \alpha \omega_0 N_0(\gamma); (\tilde{P}^2 \ll 1). \quad (3.23)$$

ამრიგად, “მცირე” სიჩქარეებით მოძრავი ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე (დრო) არ არის დამოკიდებული ელექტრონის იმპულსზე და განპირობებულია მხოლოდ იმ პროცესებით, რომლის დროსაც ხდება ფონონების შთანთქმა მის მიერ. თუ გავითვალისწინებთ (3.23) თანაფარდობას, მაშინ (3.14)-დან ჩვენ მივიღებთ:

$$\langle V_z(0) V_z(\pm t) \rangle = \frac{\hbar \omega_0}{m \gamma} \exp[-\Gamma_0^{rel}(\gamma)|t|] \exp\left[\pm \frac{i \gamma}{2 \omega_0} \Gamma_0^{rel}(\gamma)\right] \\ (\gamma \gg 1, t \gg \frac{\gamma}{\omega_0}). \quad (3.24)$$

(3.24) გამოსახულების გამოთვლისას ჩვენ ვისარგებლეთ შემდეგი ფორმულებით:

$$\int d\tilde{P} e^{-\gamma \tilde{P}^2} \tilde{P}_z^2 = \frac{1}{2\gamma} \left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{\frac{3}{2}}; \quad \int d\tilde{P} e^{-\gamma \tilde{P}^2} = \left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.25)$$

ამრიგად, როგორც (3.24) გამოსახულებიდან ჩანს, ელექტრონის “სიჩქარე-სიჩქარე” კორელაციური ფუნქციები ექსპონენციალურად მიიღევიან დროის მიხედვით დაბალი ტემპერატურების განხილულ შემთხვევაში. (3.24)-ის თანახმად რელაქსაციის დროისთვის გვექნება შემდეგი გამოსახულება: $\tau^{rel}(\gamma) = [\Gamma_0^{rel}(\gamma)]^{-1}$.

ცხადია, რომ ჩვენს მიერ მიღებული რეზულტატი ნაპოვნია შფმ-ის გამოყენების გარეშე [120]. (3.24) გამოსახულება განსხვავდება შედეგისაგან, რომელიც ნაპოვნია შფმ-ში [77] ექსპონენციალური ფაქტორით $\exp\left[\pm\frac{i\gamma}{2\omega_0}\Gamma_0^{rel}(\gamma)\right]$.

გამოვთვალოთ ახლა ელექტროგამტარობა და დაბალტემპერატურული ძვრადობა ელექტრონისთვის ფროლიხის პოლარონის მოდელში სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების დროს: ($\alpha < 1$). თუ გავითვალისწინებთ (3.19) და (3.23)–(3.25) გამოსახულებებს, (3.17) ფორმულიდან კუთრი ელექტროგამტარობისთვის მივიღებთ [120]:

$$\text{Re}\sigma(\tilde{\omega}) = \frac{ne^2}{m\omega_0} \frac{2}{\gamma\tilde{\omega}} \text{th}\left(\frac{1}{2}\gamma\tilde{\omega}\right) \left[1 - 2\sin^2\left(\frac{\gamma}{2}\Gamma_0(\gamma)\right)\right] \frac{\Gamma_0(\gamma)}{\tilde{\omega}^2 + \Gamma_0^2(\gamma)}; \quad (3.26)$$

($\alpha < 1, \gamma \gg 1, \tilde{\omega}\gamma \ll 1$),

სადაც: $\sigma(\tilde{\omega}) = \sigma_{xx}(\tilde{\omega}) = \sigma_{yy}(\tilde{\omega}) = \sigma_{zz}(\tilde{\omega})$; $\tilde{\omega} = \frac{\omega}{\omega_0}$; $\Gamma_0(\gamma) = \omega_0^{-1}\Gamma_0^{rel}(\gamma) = \frac{2}{3}\alpha N_0(\gamma)$ ხოლო

დაბალტემპერატურული და დაბალსიხშირული ძვრადობისათვის შესაბამისად გვექნება:

$$\mu_0(\tilde{\omega}) = \frac{e}{m\omega_0} \frac{2}{\gamma\tilde{\omega}} \text{th}\left(\frac{1}{2}\gamma\tilde{\omega}\right) \frac{\Gamma_0(\gamma)}{\tilde{\omega}^2 + \Gamma_0^2(\gamma)}; \quad (3.27)$$

$$\Delta\mu(\tilde{\omega}) = \frac{e}{m\omega_0} \frac{4}{\gamma\tilde{\omega}} \text{th}\left(\frac{1}{2}\gamma\tilde{\omega}\right) \sin^2\left(\frac{\gamma}{2}\Gamma_0(\gamma)\right) \frac{\Gamma_0(\gamma)}{\tilde{\omega}^2 + \Gamma_0^2(\gamma)}$$

($\alpha < 1, \gamma \gg 1, \tilde{\omega}\gamma \ll 1$).

(3.26) და (3.27) გამოსახულებები წარმოადგენენ ოსაკას შედეგის განზოგადოებას [55-56] სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში; (3.26) გამოსახულება ფაქტიურად წარმოადგენს დრუდეს ფორმულას დაბალტემპერატურული და დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობისთვის, რომელიც შეიცავს ტემპერატურულ შესწორებას, რომელიც განპირობებულია ელექტრონის ფონონებთან არსებული საწყისი კორელაციებით (მეორე წევრი (3.26) ფორმულაში. ძვრადობაზე შესწორება – $\Delta\mu(\tilde{\omega})$ მოიცემა (3.27) ფორმულით). პირველი წევრი (3.26) ფორმულაში და $\mu_0(\omega)$ -ს გამოსახულება შეესაბამება შფმ-ს ვინაიდან $\tilde{\omega}\gamma \ll 1$ (რომელიც გამომდინარეობს $t \gg t_0$ პირობიდან) და $\gamma\Gamma_0(\gamma) \ll 1$

(იხ. (2.34) პირობა), ჩვენ შეგვიძლია გავშალოთ $\frac{2}{\gamma\tilde{\omega}} \text{th}\left(\frac{1}{2}\gamma\tilde{\omega}\right)$ და $\sin^2\left(\frac{\gamma}{2}\Gamma_0(\gamma)\right)$

წევრები მწკრივებად (3.26) და (3.27) გამოსახულებებში. ნათელია, რომ შესწორებები, რომლებიც განპირობებულია საწყისი კორელაციებით, წარმოადგენენ

მცირე სიდიდეებს ($\gamma \gg 1$). (3.27) გამოსახულებებიდან ელექტრონის დაბალტემპერატურული სტატიკური ძვრადობისთვის (dc-mobility) ფროლიხის პოლარონის მოდელში გვექნება [120]:

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \frac{e}{m\omega_0} \Gamma_0^{-1}(\gamma) = \frac{e}{m\omega_0} \frac{3}{2\alpha} e^{-\gamma}; \\ \Delta\mu &= \frac{2e}{m\omega_0} \sin^2 \left[\frac{\gamma}{2} \Gamma_0(\gamma) \right] \Gamma_0^{-1}(\gamma) = \frac{e}{m\omega_0} \frac{1}{3} \alpha \gamma^2 e^{-\gamma}; \\ &(\gamma \gg 1, \alpha < 1). \end{aligned} \quad (3.28)$$

ნაპოვნი (3.28) გამოსახულებები წარმოადგენს თანამიმდევრულ და სწორ რეზულტატს ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობისა, ფროლიხის პოლარონის მოდელში, მცირე ტემპერატურული შესწორებით სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში [114-118,120].

განვიხილოთ ახლა ელექტრონის გამტარობა და ძვრადობა პოლარონის ფროლიხის მოდელში ელექტრული ველის მაღალი სიხშირეების შემთხვევაში, როდესაც ადგილი აქვს შემდეგ თანაფარდობას:

$$\Gamma_\mu^{rel}(\beta, \vec{P}) \ll \omega \ll t_0^{-1}. \quad (3.29)$$

იზოტროპულ შემთხვევაში, (3.17) ფორმულის თანახმად გვექნება (იხ. აგრეთვე (3.18)):

$$\begin{aligned} \omega^2 \text{Re} \sigma_{0z}^s(\omega) &= n e^2 \frac{th(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega)}{\hbar \omega} \int d\vec{P} \rho_s(\beta, \vec{P}) V_z^2(\vec{P}) \Gamma_z^{rel}(\beta, \vec{P}); \\ \omega^2 \text{Re} \Delta \sigma_z^s(\omega) &= 2 n e^2 \frac{th(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega)}{\hbar \omega} \int d\vec{P} \rho_s(\beta, \vec{P}) V_z^2(\vec{P}) \Gamma_z^{rel}(\beta, \vec{P}) \times \\ &\times \sin^2 \left[\frac{\beta \hbar}{2} \Gamma_z^{rel}(\beta, \vec{P}) \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

სადაც: $\rho_s(\beta, \vec{P})$ მოიცემა შემდეგი გამოსახულებით:

$$\rho_s(\beta, \vec{P}) = e^{-\frac{\beta \vec{P}^2}{2m}} / \int d\vec{P} e^{-\frac{\beta \vec{P}^2}{2m}}. \quad (3.31)$$

იზოტროპულობის გამო, ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე $\Gamma^{rel}(\beta, \vec{P})$ წარმოადგენს სკალარულ სიდიდეს და ის შესაძლებელია წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით (იხ. შედარებისთვის (3.15) ფორმულა):

$$\begin{aligned} \Gamma^{rel}(\beta, \vec{P}) &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 \frac{(\vec{k} \cdot \vec{P})}{\vec{P}^2} \{ (1 + N_0(\beta)) \delta[\Delta^+(\vec{k}, \vec{P})] + \\ &+ N_0(\beta) \delta[\Delta^-(\vec{k}, \vec{P})] \}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

გამოვთვალოთ ახლა (3.32)-ის დახმარებით ელექტრონების კუთრი ელექტროგამტარობა და ძვრადობა ელექტრული ველის მაღალი $\tilde{\omega}$ -სიხშირეების შემთხვევაში. ვიპოვოთ ჯერ $\sigma_0(\tilde{\omega})$ -კუთრი ელექტროგამტარობის მნიშვნელობა. თუ ჩავსვამთ $\Gamma^{rel}(\beta, \tilde{P})$ -ს (3.32) გამოსახულებას (3.30)-ის პირველ ფორმულაში, ჩავატარებთ მარტივ გარდაქმნებს და გამოვიყენებთ (3.19) და (3.31) ფორმულებს, მაშინ \tilde{P} -იმპულსური ცვლადით ინტეგრაციისა და თერმოდინამიკური ზღვრული გადასვლის შემდეგ, $\sigma_0(\tilde{\omega})$ -ელექტროგამტარობისთვის მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებას:

$$\begin{aligned} \sigma_0(\tilde{\omega}) &= \frac{ne^2}{m\omega_0} \tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega}); \\ \tilde{\omega}^2 \tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega}) &= \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} th\left(\frac{1}{2}\gamma \tilde{\omega}\right) \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{3/2} N_0(\gamma) \int_0^\infty dk \left[e^\gamma \left(k + \frac{1}{k}\right) \times \right. \\ &\times \left. e^{-\frac{\gamma}{4}\left(k + \frac{1}{k}\right)^2} + \left(k - \frac{1}{k}\right) e^{-\frac{\gamma}{4}\left(k - \frac{1}{k}\right)^2} \right]; \quad \text{Re } \sigma_0(\tilde{\omega}) \equiv \sigma_0(\tilde{\omega}), \end{aligned} \quad (3.33)$$

სადაც: $\tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega})$ წარმოადგენს უგანზომილებო დინამიურ (სიხშირეზე დამოკიდებულ) გამტარობას, ხოლო უგანზომილებო პარამეტრები: γ , $\tilde{\omega}$ და $N_0(\gamma)$ მოიცემა (3.20) და (3.26) ფორმულებით. შევნიშნოთ, რომ სიხშირეზე დამოკიდებულ ელექტრონის ძვრადობისათვის (3.33)-ის მსგავსად გვექნება: $\mu_0(\tilde{\omega}) = \frac{e}{m\omega_0} \tilde{\mu}_0(\tilde{\omega})$ და $\tilde{\mu}_0(\tilde{\omega}) \equiv \tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega})$.

ელექტრონის დინამიური გამტარობისთვის მიღებული (3.33) გამოსახულება ფროლიხის პოლარონის მოდელში შესაძლებელია ჩავწეროთ კომპაქტური ფორმით, თუ ჩავატარებთ ინტეგრაციას k -ცვლადით (3.33) გამოსახულებაში. გვექნება:

$$\tilde{\omega}^2 \tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega}) = \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} th\left(\frac{1}{2}\gamma \tilde{\omega}\right) \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{3/2} e^{\frac{\gamma}{2}} N_0(\gamma) K_1\left(\frac{1}{2}\gamma\right), \quad (3.34)$$

სადაც: $K_1(z)$ წარმოადგენს პირველი გვარის მაკდონალდის ფუნქციას.

(3.32) ფორმულა საშუალებას იძლევა, რომ გამოთვლილი იქნას ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე, \tilde{k} -ცვლადით ინტეგრაციის შემდეგ. (3.32) გამოსახულება: $\Gamma^{rel}(\beta, \tilde{P})$ -სიდიდისთვის მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\Gamma_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) = \omega_0 \alpha \frac{1}{\tilde{P}^2} \left\{ (1 + N_0(\gamma) \theta(\tilde{P} - 1)) \left[\sqrt{\tilde{P}^2 - 1} + \frac{1}{\tilde{P}} \text{arcch } \tilde{P} \right] + N_0(\gamma) \left[\sqrt{\tilde{P}^2 + 1} - \frac{1}{\tilde{P}} \text{arcsh } \tilde{P} \right] \right\} \quad (3.35)$$

ცხადია, რომ ელექტრონის იმპულსის მცირე მნიშვნელობებისათვის, როდესაც: $\tilde{P} \ll 1, \tilde{P} \rightarrow 0$. (3.35) ფორმულიდან ავტომატურად მივიღებთ (3.23) გამოსახულებას ელექტრონის იმპულსის (სიხქარის) რელაქსაციის სიხშირისათვის. ელექტროგამტარობის (3.34) გამოსახულება სამართლიანია (3.29) პირობების დაცვით. (3.29) უტოლობებს უგანზომილებო სიდიდეების სახით ჩაწერილს, ექნება შემდეგი სახე:

$$\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \tilde{\omega} \ll \min\left(\frac{1}{\gamma}; 1\right), \quad (3.36)$$

სადაც: $\Gamma_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) = \omega_0 \tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P})$ და $\Gamma_0^{rel}(\gamma, \tilde{P})$ არის უგანზომილებო, ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე. უნდა აღინიშნოს, რომ დინამიური გამტარობის (3.34) გამოსახულება სამართლიანია კრისტალის, როგორც დაბალი, ასევე მაღალი ტემპერატურების მნიშვნელობებისათვის. გამოვიკვლიოთ ახლა $\tilde{\sigma}_0(\tilde{\omega})$ ელექტროგამტარობის $\tilde{\omega}$ სიხშირესა და T-ტემპერატურაზე დამოკიდებულება ამ სიდიდეების სხვადასხვა მნიშვნელობების დროს.

I) დაბალი ტემპერატურების შემთხვევა, როდესაც $\Gamma_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \frac{1}{\gamma} \ll 1$ (3.36)

უტოლობის თანახმად ჩვენ გვაქვს: $\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{\gamma} \ll 1$. ვინაიდან $\gamma \tilde{\omega} \ll 1$ და

$N_0(\gamma) \Rightarrow e^{-\gamma}; \quad \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} \text{th}\left(\frac{1}{2} \gamma \tilde{\omega}\right) \Rightarrow 1; \quad K_1\left(\frac{1}{2} \gamma\right) \Rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} e^{-\frac{\gamma}{2}}, (\gamma \gg 1);$ ამიტომ ელექტრონის

გამტარობისათვის (ძვრადობისთვის) გვექნება ყოფაქცევა:

$$\tilde{\omega}^2 \text{Re} \tilde{\sigma}(\tilde{\omega}) = \tilde{\omega}^2 \tilde{\mu}_0(\tilde{\omega}) \approx \frac{4}{3} \alpha \gamma e^{-\gamma} \quad (3.37)$$

$$\gamma \rightarrow \infty.$$

ამრიგად კრისტალის დაბალი ტემპერატურების არეში ელექტრონის ძვრადობა უკუპროპორციულია სიხშირის კვადრატისა შედარებით მაღალი სიხშირეების შემთხვევაში და ექსპონენციალურად მცირდება ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად. განვიხილოთ ახლა კრისტალის შედარებით მაღალი ტემპერატურების შემთხვევა.

II) მაღალ ტემპერატურათა არე, როდესაც $\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll 1 \ll \frac{1}{\gamma}$ კრისტალის ტემპერატურათა ამ არეში გამოიყოფა $\tilde{\omega}$ -სიხშირეთა ორი არე, განვიხილოთ

თითოეული მათგანი ცალ-ცალკე.

1). შედარებით დაბალ სიხშირული არე, როდესაც:

$\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \tilde{\omega} \ll 1 \ll \frac{1}{\gamma}; \gamma \rightarrow 0$. ასეთ შემთხვევაში ჩვენ გვექნება შემდეგი თანაფარ-

დობები (უტოლობები): $\gamma\tilde{\omega} \ll 1; \frac{2}{\gamma\tilde{\omega}} th\left(\frac{1}{2}\gamma\tilde{\omega}\right) \Rightarrow 1; K_1\left(\frac{1}{2}\gamma\right) \Rightarrow \frac{2}{\gamma}, (\gamma \ll 1)$ ამიტომ

ელექტრონის ძვრადობისთვის გვექნება შემდეგნაირი ყოფაქცევა T-ტემპერატურისა და $\tilde{\omega}$ სიხშირის მიხედვით:

$$\tilde{\omega}^2 \tilde{\mu}_0(\tilde{\omega}) \approx \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{-1/2}; (\gamma \rightarrow 0). \quad (3.38)$$

2). შედარებით მაღალსიხშირული არე, როდესაც: $\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll 1 \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{\gamma}$

ნათელია, რომ შედარებით მაღალსიხშირულ არეში ელექტრონის ძვრადობისთვის გვექნება ისეთივე ყოფაქცევა, როგორც შედარებით დაბალსიხშირულ არეში, რომელიც მოიცემა (3.38) გამოსახულებით. (3.30)- გამოსახულების დახმარებით მარტივად გამოითვლება ტემპერატურული შესწორება ელექტრონის ძვრადობაზე მაღალსიხშირულ არეში და კრისტალის დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში:

$$\frac{\Delta\tilde{\mu}(\tilde{\omega})}{\tilde{\mu}_0(\tilde{\omega})} = 2 \sin^2 \left[\frac{\gamma}{2} \tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma) \right]; \quad \frac{\Delta\tilde{\mu}(\tilde{\omega})}{\tilde{\mu}_0(\tilde{\omega})} \approx \frac{2}{9} \alpha^2 \gamma^2 e^{-2\gamma};$$

$$(\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma) \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{\gamma} \ll 1; \alpha < 1) \quad (3.39)$$

როგორც (3.39) ფორმულიდან ჩანს ტემპერატურული შესწორება ელექტრონის ძვრადობაზე წარმოადგენს ძალიან მცირე სიდიდეს.

განვიხილოთ " $\frac{3 K_B T}{2 \hbar \omega_0}$ პრობლემა" ფროლიხის პოლარონის (ელექტრონის)

დაბალტემპერატურული ძვრადობის თეორიაში [114-116,120,123-124]. ფხიპის მიერ მიღებული შედეგი ელექტრონის იმპედანსისთვის (კომპლექსური ელექტრო-წინააღობისათვის და გამტარობისთვის) შესაძლებელია წარმოვადგინოთ იქნას შემდეგი სახით [47, 88-90, 101-103]:

$$\tilde{\sigma}(\tilde{\omega}) = \frac{i}{\tilde{\omega}} + i \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \frac{1}{\tilde{\omega}^3} \int_0^\infty dt (1 - e^{i\tilde{\omega}t}) \text{Im}[S(t)];$$

$$\tilde{Z}(\tilde{\omega}) = \frac{1}{\tilde{\sigma}(\tilde{\omega})} \approx -i\tilde{\omega} + i \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \frac{1}{\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt (1 - e^{i\tilde{\omega}t}) \text{Im}[S(t)] \quad (3.40)$$

სადაც: $S(t)$ -“მახსოვრობის” ფუნქციას აქვს შემდეგი სახე:

$$S(t) = D^{-\frac{3}{2}}(t) \left[(1 + N_0(\gamma)) e^{it} + N_0(\gamma) e^{-it} \right] \text{ და } D(t) = \frac{t^2}{\gamma} - it; \quad (3.41)$$

ფხიპ-ის თეორიაში (მიახლოებაში) ელექტრონის დრეიფული ძვრადობა მოიცემა (განისაზღვრება) შემდეგი თანაფარდობით:

$$\frac{1}{\tilde{\mu}_{FXIP}} = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow 0} \tilde{\omega}^2 \operatorname{Re} \tilde{\sigma}(\tilde{\omega}) = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow 0} \operatorname{Re} \tilde{Z}(\tilde{\omega}); \quad (3.42)$$

სადაც: (3.40)-ფორმულის თანახმად, ელექტრონის იმპენდანსის რეალური ნაწილი განისაზღვრება შემდეგი ტოლობით:

$$\operatorname{Re} \tilde{Z}(\tilde{\omega}) = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt \frac{\sin(\tilde{\omega}t)}{\tilde{\omega}} \operatorname{Im}[S(t)] = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{2}\gamma} N_0(\gamma) K_1\left(\frac{1}{2}\gamma\right). \quad (\tilde{\omega} \rightarrow 0) \quad (3.43)$$

(3.43)-გამოსახულებიდან მარტივად მიიღება ელექტრონის დაბალტემპერატურული სტატიკური ($\omega = 0$) დრეიფული ძვრადობის მნიშვნელობა (იხ. შედარებისათვის (3.37)-ფორმულა) ფხიპ-ის მიახლოებაში:

$$\mu_{FXIP} = \frac{3}{2\gamma} \frac{1}{2\alpha} e^{\gamma}; \quad (\gamma \gg 1, \gamma \rightarrow \infty) \quad (3.44)$$

ბალანსის განტოლების მეთოდზე დაყრდნობით ტორნბერგ-ფეინმანის მიერ მიღებული ელექტრონის სტატიკური დრეიფული ძვრადობის მნიშვნელობა მოიცემა შემდეგი გამოსახულებით: [53, 84-85, 101-103];

$$\frac{1}{\tilde{\mu}_{TF}} = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt \cdot t \cdot \operatorname{Im}[S(t)] = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{2}\gamma} N_0(\gamma) K_1\left(\frac{1}{2}\gamma\right) \quad (3.45)$$

რომელიც ემთხვევა ფხიპ-ის მიერ მიღებულ დრეიფული ძვრადობის (3.43)-მნიშვნელობას. ამიტომ ცხადია, რომ ფროლიხის პოლარონის (ელექტრონის) დაბალტემპერატურული ძვრადობისთვის გვაქვს იგივე სახის გამოსახულება, როგორც ფხიპ-ის თეორიაში:

$$\tilde{\mu}_{TF} = \frac{3}{2\gamma} \frac{1}{2\alpha} e^{\gamma}; \quad (\gamma \gg 1, \gamma \rightarrow \infty) \quad (3.46)$$

[15] - ნაშრომში გამოკვლეული და ნახვენები იყო, რომ ტორნბერგ-ფეინმანის მიდგომაში ელექტრონის დრეიფული ძვრადობის გამოთვლისას გამოიყენებოდა მაქსველის წანაცვლებული განაწილების ფუნქცია ელექტრონისათვის; ხოლო ფხიპ-ის თეორიაში ელექტრონის ძვრადობის გამოსათვლელად გამოიყენება ელექტროგამტარობის (ელექტროწინააღობის) მნიშვნელობა შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში. (α -ბმის მუდმივას რიგის მიხედვით).

როგორც აღნიშნული იყო ლიტერატურის მიმოხილვაში, ფროლიხის პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის გამოსათვლელად მრავალი გამოკვლევა

იქნა ჩატარებული ბოლცმანის კინეტიკურ განტოლებაზე დაყრდნობით [55, 91, 93, 98]. აღნიშნული გამოკვლევების შედეგად მიღებული დაბალტემპერატურული ძვრადობის მნიშვნელობა მოიცემა შემდეგი გამოსახულებით:

$$\tilde{\mu}_B = \frac{1}{2\alpha} e^\gamma; \quad (\tilde{\omega} = 0, \gamma \gg 1; \gamma \rightarrow \infty) \quad (3.47)$$

(3.47)- ფორმულის მიღების დროს, ბოლცმანის გაწრფივებული (გარეშე ელექტრული ველის მიხედვით) კინეტიკური განტოლების ამოხსნისას გამოიყენებოდა რელაქსაციის დროის მიახლოება და თანაც დაჯახებით ინტეგრალებში გადასვლის სიხშირეების და თვით ინტეგრალების გამოთვლისას გათვალისწინებული იყო მხოლოდ “დანაკლისის” წევრები. ამ მიახლოებების ფარგლებში - ელექტრონის განაწილების ფუნქციის რელაქსაციის სიხშირისათვის (დროისთვის) მიიღებოდა შემდეგი სახის გამოსახულება:

$$\Gamma_B^{rel}(\beta, \vec{p}) = \frac{1}{\tau_B^{rel}(\beta, \vec{p})} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_K |V_{\vec{k}}|^2 \{ (1 + N_0(\beta)) \delta[\Delta^+(\vec{k}, \vec{p})] + N_0(\beta) \delta[\Delta^-(\vec{k}, \vec{p})] \} \quad (3.48)$$

(შედარებისთვის იხ. (3.31) ფორმულა).

საიდანაც, მცირე სიხქარეებით მოძრავი ელექტრონისათვის $\tilde{P}^2 \ll 1$, დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში ($\gamma \gg 1$), თუ ჩავატარებთ მარტივ გამოთვლებს დგინდება, რომ რელაქსაციის სიხშირე $\Gamma_B^{rel}(\gamma, \tilde{P})$ - წარმოიდგინება შემდეგი ფორმით:

$$\Gamma_B^{rel}(\gamma, \tilde{P}) = \Gamma_{0B}(\gamma) = 2\alpha N_0(\gamma); \quad (\gamma \gg 1, \tilde{P}^2 \ll 1). \quad (3.49)$$

(იხ. შედარებისთვის (3.26)-ფორმულა). (3.49)-გამოსახულებიდან უკვე მარტივად მიიღება ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობის (3.47)- მნიშვნელობა. როგორც (3.44), (3.46) და (3.47) – ფორმულებიდან ჩანს, ფხიპისა და ტორნბერგ-ფეინმანის შედეგი $\frac{3}{2\gamma}$ მამრავლით განსხვავდება დაბალტემპერატურული ძვრადობის (3.47)- მნიშვნელობისაგან, რომელიც მიიღება ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოხსნით (ე.წ. ” $\frac{3}{2} \frac{K_B T}{\hbar \omega_0}$ - პრობლემა”). როგორც არაერთგზის იყო

აღნიშნული სამეცნიერო ლიტერატურაში [31,101-103], ფხიპის მიერ $\tilde{Z}(\tilde{\omega})$ - იმპედანსის და ძვრადობის გამოთვლისას, როდესაც $\tilde{\omega} \rightarrow 0$ - გამოიყენება არაკორექტული მათემატიკური პროცედურა. ავტორის მიერ ნაშრომში მიღებული ელექტროგამტარობის (3.34)- ფორმულა, რომელიც ფაქტიურად წარმოადგენს ფხიპის მიახლოებას ადებს პირობას ფხიპის თეორიის გამოყენების (სამართლიანობის)

საზღვრებს: $\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \tilde{\omega} \ll \min(\frac{1}{\gamma}; 1)$. ამის გამო ელექტროგამტარობის (3.34)-

გამოსახულება, ანუ რაც იგივეა ფხიპ-ის თეორია (მიახლოება) სამართლიანია $\tilde{\omega}$ -
მაღალი სიხშირეების შემთხვევაში და $\tilde{\omega} \rightarrow 0$ -ზღვრული გადასვლა (3.42) –
ფორმულაში არ არის კორექტული. გარდა ამისა, $\tilde{\sigma}(\tilde{\omega})$ - ელექტროგამტარობის

გაშლისას მწკრივად და $\tilde{Z}(\tilde{\omega})$ - იმპედანსის მნიშვნელობის გამოთვლისას, არ
გაითვალისწინება მაღალი რიგის წევრები α -ბმის მუდმივას რიგის მიხედვით.
(უნდა აღინიშნოს, რომ ფხიპ-ის მიახლოება სამართლიანია აგრეთვე

მაღალტემპერატურულ არეში, როდესაც: $(\tilde{\Gamma}_0^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll 1 \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{\gamma})$. რაც შეეხება

ტორნბერგ-ფეინმანის მიდგომას, ამ თეორიაში ბოლცმანის კინეტიკური
განტოლების სტაციონარულ შემთხვევაში ამოხსნისას და ელექტრონის
დაბალტემპერატურული ძვრადობის გამოთვლისას გამოიყენება მაქსველის სახის
წანაცვლებული განაწილების ფუნქცია ელექტრონისათვის, რომელიც
არაადეკვატურად ასახავს ელექტრონის ყოფაქცევას კრისტალის დაბალი
ტემპერატურებისა და ძლიერი ელექტრული ველების შემთხვევაში (იხ.
ლიტერატურის მიმოხილვა) და ამიტომაც არ არის მოულოდნელი, რომ მიღებული
შედეგი $\frac{3}{2\gamma}$ თანამამრავლით განსხვავდება ელექტრონის “ბოლცმანისეული” (3.47)-
დაბალტემპერატურული ძვრადობისაგან.

სადისერტაციო ნაშრომში, ავტორის მიერ მიღებული შედეგი ფროლიხის
პოლარონის (ელექტრონის) დაბალტემპერატურული ძვრადობისათვის (იხ.(3.28) –
ფორმულა) წარმოადგენს “ $\frac{3}{2\gamma}$ პრობლემის” ნაწილობრივ გადაწყვეტას [116,120]. ის
3-ჯერ აღემატება “ბოლცმანისეულ” (3.47)- დაბალტემპერატურულ ძვრადობას და
 $\frac{1}{2\gamma}$ - მამრავლით განსხვავდება ფხიპ-ისა და ტორნბერგ-ფეინმანის შედეგისაგან.

მამრავლი 3-იანის წარმოშობა განპირობებულია იმ ფაქტით, რომ: $\Gamma_0(\gamma)/\Gamma_{0B}(\gamma) = \frac{1}{3}$;
და თვით $\Gamma_0(\gamma)$ - ელექტრონის სიჩქარის (იმპულსის) რელაქსაციის სიხშირის
გამოთვლისას, კორელაციური ფუნქციებისათვის კინეტიკური განტოლებების
დაჯახებითი ინტეგრალები და $\Gamma_v^{rel}(\beta, \tilde{p})$ სიხშირე შეიცავენ თანამამრავლს:

$$\frac{V_v(\vec{p} + \hbar\vec{k}) - V_v(\vec{p})}{V_v(\vec{p})} \quad (\text{იხ. (3.9), (3.12), (3.15)), \text{ რომელიც აღწერს ელექტრონის სიჩქარის ცვლილებას მისი გაბნევისას ფონონებზე, მაშინ როდესაც ელექტრონის განაწილების ფუნქციის რელაქსაციის სიხშირე: } \Gamma_B^{rel}(\beta, \vec{p}) \text{ (იხ. (3.48))-ასეთი სახის თანამამრავლს არ შეიცავს. სწორედ ეს ფაქტორი განაპირობებს ამ დამატებითი მამრავლის წარმოქმნას [120]. რაც შეეხება ფხიპ-ისა და ტორნბერგ-ფეინმანის შედეგების თანხვედრას } \tilde{\mu}_{FXIP} = \mu_{TF} = \frac{1}{2\gamma} \frac{3}{2\alpha} e^\gamma; \quad (\gamma \gg 1) \text{ და } \frac{1}{2\gamma} -$$

მამრავლს, მათი წარმოშობის ბუნება დღევანდელ დღემდე ბოლომდე გარკვეული არ არის.

3.3. ელექტრონის კვრადობა აკუსტიკური პოლარონის

მოდელი სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში

განვიხილოთ ელექტრონი, რომელიც მოძრაობს კოვალენტურ (არაიონურ) კრისტალში ან ნახევარგამტარში, რომლის მოძრაობა აღიწერება (1.13)-(1.14) ჰამილტონიანით. დავუშვათ, რომ ელექტრონი სუსტად ურთიერთქმედებს აკუსტიკურ ფონონებთან;

$$\alpha = \frac{D^2 m^2}{8\pi\rho\hbar^3 V_s} < 1. \quad \text{ამ შემთხვევაში ადგილი აქვს ელექტრონის ურთიერთქმედებას დისპერსიის მქონე აკუსტიკურ ფონონებთან: } \omega(\vec{k}) = V_s \cdot k; \quad k \equiv |\vec{k}|.$$

ელექტრონის ენერჯისათვის გამტარობის ზონიდან გვაქვს დისპერსიის სტანდარტული პარაბოლური კანონი და ელექტრონის სიჩქარის μ -კომპონენტი მოიცემა (3.19) ფორმულით. ელექტრონის ძვრადობის გამოსათვლელად აკუსტიკური პოლარონის მოდელში ვისარგებლოთ (3.17)-(3.18) ფორმულებით, ხოლო $\Gamma_{vac}^{rel}(\beta, \vec{p})$ - რელაქსაციის სიხშირის გამოსათვლელად კი – (3.15) გამოსახულებით. თუ გამოვიყენებთ (1.14) და (3.15) – ფორმულებს, მივმართავთ ელექტრულ ველს Z -ღერძის დადებითი მიმართულების გასწვრივ, შევასრულებთ თერმოდინამიკურ ზღვრულ გადასვლას და ჩავატარებთ ინტეგრებას K -ცვლადით, მაშინ $\Gamma_{zac}^{rel}(\gamma, \vec{P})$ – რელაქსაციის სიხშირისათვის მივიღებთ გამოსახულებას:

$$\Gamma_{zac}^{rel}(\gamma, \vec{P}) = -\frac{mV_s^2}{\hbar} \frac{16\alpha}{\tilde{P}_z} \int d\Omega_{\vec{k}} \cos\theta (1 - \tilde{P} \cos\Phi)^3 \frac{1}{\exp[4\gamma(1 - \tilde{P} \cos\Phi)] - 1} - \frac{mV_s^2}{\hbar} \frac{16\alpha}{\tilde{P}_z} \int d\Omega_{\vec{k}} \cos\theta (1 + \tilde{P} \cos\Phi)^3 \frac{1}{\exp[4\gamma(1 + \tilde{P} \cos\Phi)] - 1}; \quad (3.50)$$

($\alpha < 1$.)

სადაც: $\gamma = \frac{mV_s^2}{2K_B T}$ - წარმოადგენს მოლეკლის მასასიათებელ უგანზომილებო ფი-

ზიკურ პარამეტრს, \tilde{P} - უგანზომილებო იმპულსია: $\tilde{P} = \vec{P} / mV_s$

$$d\Omega_{\vec{k}} = \sin\theta d\theta d\varphi; \quad \tilde{P} \cos\Phi = \sin\theta \cos\varphi \tilde{P}_x + \sin\theta \sin\varphi \tilde{P}_y + \cos\theta \tilde{P}_z,$$

სადაც θ და φ - სფერული კუთხეებია, ხოლო Φ - წარმოადგენს კუთხეს

\vec{K} და \vec{P} ვექტორებს შორის. გამოეთვალათ (3.50) - ფორმულის დახმარებით ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სისშირე კრისტალის დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში, როდესაც $\gamma \gg 1$. ამისათვის განვიხილოთ “მცირე“ სიჩქარით მოძრავი ელექტრონი: $\tilde{P} \ll 1$ ($P \ll mV_s$). ასეთ შემთხვევაში ელექტრონს არ შესწევს უნარი გამოასხივოს ფონონები, ვინაიდან ადგილი არ ექნება ენერჯისა და იმპულსის შენახვის კანონებს მისი გაბნევისას ფონონებზე (იხ. (3.15)-ფორმულა). ამის გამო, (3.50)-გამოსახულება მარტივდება და შესაძლებელია ჩაწერილი იქნას შემდეგი სახით:

$$\Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma) = \tau_{Ac}^{-1rel}(\gamma) = \frac{mV_s^2}{\hbar} 64\alpha [e^{4\gamma} - 1]^{-1} \quad (3.51)$$

$$(\tilde{P} \ll 1; \quad \gamma \gg 1; \quad \alpha < 1).$$

ამრიგად, მცირე სიჩქარით მოძრავი ელექტრონისთვის, როდესაც ელექტრონის სიჩქარე გაცილებით ნაკლებია კრისტალში ბგერის გავრცელების სიჩქარეზე ($(P/m \ll V_s)$), ელექტრონის სიჩქარის (იმპულსის) რელაქსაციის სისშირე (დრო) განპირობებულია მხოლოდ ელექტრონის მიერ ფონონების შთანთქმის პროცესით და არ არის დამოკიდებული ელექტრონის \tilde{P} -იმპულსზე. ცხადია, რომ ასეთ შემთხვევას ადგილი აქვს კრისტალის ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროს ($\gamma \gg 1$). მიღებული (3.51) - ფორმულის დახმარებით ელექტრონის “სიჩქარე-სიჩქარეზე“- კორელაციური ფუნქციები წარმოიდგინება შემდეგი ფორმით. (იხ. შედარებისათვის (3.14) და (3.24) - ფორმულები):

$$\langle V_z(0)V_z(\pm t) \rangle = \frac{V_s^2}{2\gamma} \exp[-\Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)|t|] \exp\left[\pm i \frac{\hbar\gamma}{mV_s^2} \Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)\right]; \quad (3.52)$$

$$(\alpha < 1; \gamma \gg 1; t \geq \tau_{Ac}^{rel})$$

(3.52)-კორელაციური ფუნქციების ასიმპტოტური გამოსახულებების გამოყვანისას ჩვენ ვისარგებლეთ (3.25) - თანაფარდობებით.

ამგვარად, როგორც (3.52) -ფორმულებიდან ჩანს, “სიჩქარე - სიჩქარეზე” - კორელაციური ფუნქციები ექსპონენციალურად მიიღევიან დროის მიხედვით

დაბალი ტემპერატურების დროს ($\gamma \gg 1$), $\Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)$ – მილევის დეკრემენტით. ნათქვამია, რომ მიღებული შედეგი ნაპოვანია შფმ-ის გამოყენების გარეშე, და განსხვავდება შედეგისაგან, რომელიც მიიღება შფმ-ში ექსპონენციალური თანა-მამრავლით:

$$\exp\left[\pm \frac{i\hbar\gamma}{mV_s^2} \Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)\right]. [121-122].$$

ვიპოვოთ ახლა ელექტროგამტარობა და დაბალტემპერატურული ძვრადობა ელექტრონისთვის ერთზონიან მიახლოებაში და იზოტროპულ შემთხვევაში აკუსტიკური პოლარონის მოდელში სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის დროს. თუ ვისარგებლებთ (3.17), (3.19) და (3.25) – ფორმულებით, მაშინ კუთრი ელექტროგატარობისათვის მივიღებთ გამოსახულებას [121-122]:

$$\text{Re}\sigma_{Ac}(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)}{\omega^2 + \Gamma_{Ac}^{2rel}(\gamma)} \cos\left[\frac{\hbar\gamma}{mV_s^2} \Gamma_{Ac}^{rel}(\gamma)\right] \quad (3.53)$$

$$(\alpha < 1; \gamma \gg 1; \omega \ll \frac{mV_s^2}{\hbar\gamma}).$$

სადაც: n -წარმოადგენს ელექტრონების კონცენტრაციას; ხოლო დაბალტემპერატურული სტატიკური ($\omega = 0$) ძვრადობისათვის შესაბამისად გვექნება:

$$\mu_{Ac} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Re}\sigma_{Ac}(\omega)}{ne} = \mu_{oAc} - \Delta\mu_{Ac}$$

$$\mu_{oAc} = \frac{\hbar e}{m^2 V_s^2} \frac{1}{64\alpha} e^{4\gamma}$$

$$\Delta\mu_{Ac} = \frac{\hbar e}{m^2 V_s^2} \frac{1}{32\alpha} e^{4\gamma} \sin^2[32\alpha\gamma e^{-4\gamma}]; \quad (\alpha < 1; \gamma \gg 1) \quad (3.54)$$

როგორც (3.54) – ფორმულებიდან ჩანს, ტემპერატურული შესწორება ელექტრონის დაბალტემპერატურულ, დრეიფულ, სტატიკურ (dc)–ძვრადობაზე, რომელიც განპირობებულია საწყისი კორელაციების გათვალისწინებით ამ მოდელში წარმოადგენს ძალიან მცირე სიდიდეს:

$$\Delta\mu_{Ac} \approx \frac{\hbar e}{m^2 V_s^2} 32\alpha\gamma^2 e^{-4\gamma}; \quad \frac{\Delta\mu_{Ac}}{\mu_{Ac}} \approx 2048 \cdot \alpha^2 \gamma^2 e^{-8\gamma}; \quad (3.55)$$

$$(\alpha < 1; \gamma \gg 1)$$

მიღებული (3.54- 3.55)–ფორმულები წარმოადგენენ თანმიმდევრულ და კორექტულ შედეგს ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობისა აკუსტიკური პოლარონის მოდელში სუსტი ელექტრონ – ფონონური ბმის შემთხვევაში [121-122].

გამოვთვალოთ ახლა ელექტროგამტარობა და დრეიფული ძვრადობა აკუსტიკური პოლარონის მოდელში ელექტრული ველის მაღალი სიხშირეების

შემთხვევაში, როდესაც სრულდება (3.29)–თანაფარდობა რომელიც აკუსტიკური პოლარონის მოდელში მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P}) \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{2\gamma}; \quad \text{სადაც:} \quad \tilde{\omega} = \frac{\hbar}{mV_s^2} \omega; \quad \text{და} \quad \Gamma_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P}) = \frac{mV_s^2}{\hbar} \tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P}); \quad (3.56)$$

($\tilde{\omega}$ და $\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P})$) – უგანზომილებო სიხშირეებია). თუ გავითვალისწინებთ (3.17) – ფორმულას, იზოტროპულ შემთხვევაში გვექნება თანაფარდობა: (იხ. აგრეთვე (3.18) და (3.30) – ფორმულები):

$$\tilde{\omega}^2 \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{AC}(\tilde{\omega}) = \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} \operatorname{th}\left(\frac{1}{2}\gamma \tilde{\omega}\right) \frac{128}{3\sqrt{\pi}} \alpha \gamma^{3/2} \int_{-1}^{\infty} dK (K+1)^4 \frac{e^{-\gamma K^2}}{e^{4\gamma(K+1)} - 1} \quad (3.57)$$

$$\sigma_{AC}(\omega) = \frac{ne^2 \hbar}{m^2 V_s^2} \tilde{\sigma}_{AC}(\omega).$$

და რელაქსაციის (უგანზომილებო) სიხშირე $\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P})$ ამ მოდელში წარმოიდგინება შემდეგი სახით:

$$\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{P}) = \frac{16\alpha}{\pi} \int d\vec{K} \cdot K \frac{(\vec{K} \cdot \tilde{P})}{\tilde{P}^2} \left\{ [1 + N(4\gamma K)] \delta(K^2 + \vec{K} \cdot \tilde{P} + K) + N(4\gamma K) \delta(K^2 + \vec{K} \cdot \tilde{P} - K) \right\};$$

$$N(4\gamma K) = [e^{4\gamma K} - 1]^{-1}; \quad (\alpha < 1). \quad (3.58)$$

(3.57) და (3.58) – გამოსახულებების მიღებისას გათვალისწინებული იყო ფონონების დისპერსიის კანონი, შესრულებული იყო თერმოდინამიკური ზღვრული გადასვლები (3.17) და (3.15) – ფორმულებში და ჩატარებული იყო ინტეგრაცია \tilde{P} –იმპულსური ცვლადით (3.17)–ში (3.31)–გამოსახულების გამოყენებით. ნათელია, რომ ელექტრონის იმპულსის მცირე მნიშვნელობებისათვის: $\tilde{P} \ll 1$; $\tilde{P} \rightarrow 0$ (3.58) – ფორმულიდან მარტივად მივიღებთ (3.51)–გამოსახულებას ელექტრონის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირისათვის.

დინამიური გამტარობის (3.57) ფორმულა პრინციპში სამართლიანია კრისტალის ნებისმიერი ტემპერატურის დროს ამ მოდელში იმ პირობით, რომ დაცულია (3.56) უტოლობა. განვიხილოთ ახლა ელექტროგამტარობის (ძვრა-დობის) $\tilde{\omega}$ სიხშირესა და T-ტემპერატურაზე დამოკიდებულება ამ პარამეტრების სხვადასხვა მნიშვნელობების დროს.

1) დაბალ ტემპერატურათა არე, როდესაც $\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{p}) \ll \frac{1}{2\gamma} \ll 1$. ასეთ შემთხვევაში,

(3.56) უტოლობის გათვალისწინებით გვექნება: $\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{p}) \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{2\gamma} \ll 1$. ვინაიდან

$\gamma \gg 1; \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} \text{th}(\frac{1}{2} \gamma \tilde{\omega}) \Rightarrow 1$. ამიტომ (3.57) ფორმულიდან გამომდინარე (თუ ჩავატარებთ მარტივ გარდაქმნებსა და გამოთვლებს) დინამიური გამტარობისთვის გვექნება შემდეგნაირი (ასიმპტოტური) ყოფაქცევა:

$$\tilde{\omega}^2 \text{Re } \tilde{\sigma}_{oAC}(\tilde{\omega}) \approx \frac{128}{3} \alpha \gamma e^{-4\gamma}; \quad (\gamma \gg 1, \gamma \rightarrow \infty); \alpha < 1 \quad (3.59)$$

ამრიგად, ამ არეში ელექტროგამტარობა უკუპროპორციულია სიხშირის კვადრატისა (მაღალი სიხშირეების შემთხვევაში) და მიიღევა ექსპონენციალურად T ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად.

II) მაღალ ტემპერატურათა არე, როდესაც $\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{p}) \ll 1 \ll \frac{1}{2\gamma}$; კრისტალის ტემპერატურათა ამ არეში გამოიყოფა $\tilde{\omega}$ -სიხშირეთა ორი დიაპაზონი: 1)

$$\tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{p}) \ll \tilde{\omega} \ll 1 \ll \frac{1}{2\gamma}; \quad \text{და} \quad 2) \quad \tilde{\Gamma}_{AC}^{rel}(\gamma, \tilde{p}) \ll 1 \ll \tilde{\omega} \ll \frac{1}{2\gamma};$$

ნათელია, რომ მაღალი ტემპერატურების შემთხვევაში $\tilde{\omega}$ -სიხშირეთა ამ ორივე დიაპაზონში დინამიური გამტარობისთვის გვექნება ერთნაირი ყოფაქცევა. რადგან

$\gamma \ll 1, \gamma \tilde{\omega} \ll 1, \frac{2}{\gamma \tilde{\omega}} \text{th}(\frac{1}{2} \gamma \tilde{\omega}) \Rightarrow 1$; ამიტომ (3.57) ფორმულიდან გამომდინარე მარტივი გამოთვლებით დავადგენთ, რომ მაღალი ტემპერატურების შემთხვევაში გამტარობისათვის გვექნება შემდეგი სახის ყოფაქცევა:

$$\tilde{\omega}^2 \text{Re } \tilde{\sigma}_{oAC}(\tilde{\omega}) \Rightarrow \frac{32}{3} \alpha; \quad (\gamma \ll 1, \gamma \rightarrow 0); \alpha < 1. \quad (3.60)$$

ცხადია, რომ ელექტრონის სიხშირეზე დამოკიდებული ძვრადობისთვის - $\tilde{\mu}_{oAC}(\tilde{\omega})$ შფმ-ში, როგორც დაბალი ასევე მაღალი ტემპერატურების შემთხვევაში გვაქვს ისეთივე სახის ყოფაქცევის სურათი, როგორც დინამიური გამტარობისთვის ვინაიდან $\text{Re } \tilde{\sigma}_{oAC}(\tilde{\omega}) \equiv \tilde{\mu}_{oAC}(\tilde{\omega})$. ამგვარად, (3.60)-ის თანახმად მაღალ ტემპერატურათა არეში დინამიური გამტარობა (ელექტრონის ძვრადობა) არ არის დამოკიდებული კრისტალის ტემპერატურაზე.

როგორც (3.53) და (3.55) ფორმულებიდან ჩანს ტემპერატურული შესწორება ელექტრონის ძვრადობაზე, რომელიც განპირობებულია ელექტრონის ფონონებთან არსებული საწყისი კორელაციების გათვალისწინებით, მაღალსიხშირულ არეშიც და კრისტალის დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში მოიცემა (3.55) თანაფარდობების აღმწერი მეორე ფორმულის საშუალებით.

როგორც უკვე აღნიშნული იყო ნაშრომის I თავში, ელექტრონის დაბალ-ტემპერატურული ძვრადობის გამოსათვლელად აკუსტიკური პოლარონის მოდელში სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში ($\alpha < 1$), გამოიყენება კინეტიკური (ბოლცმანის) განტოლების მეთოდი [99,108]. გარეშე ელექტრული ველის მიხედვით გაწრფივებული ბოლცმანის განტოლების ამოხსნისას რელაქსაციის დროის მიახლოებაში, დაჯახებით ინტეგრალებში გადასვლის სიხშირეებისა და თვით ამ ინტეგრალების გამოთვლისას, გაითვალისწინება მხოლოდ „დანაკლისის“ წევრები. ასეთი სახის მიახლოების შესრულება (არაფერი რომ არ ვთქვათ შფმ-ზე) წარმოადგენს საკმაოდ უხეშს და ზოგადად არასრულყოფილად ასახავს ელექტრონული გადატანის მოვლენებს ელექტრონ-ფონონურ სისტემაში. წარმოდგენილ მოდელში, ზემოთ თქმული მიახლოებების ფარგლებში, ელექტრონის განაწილების ფუნქციის რელაქსაციის სიხშირეს აქვს შემდეგი სახე:

$$\Gamma_{BAC}^{rel}(\beta, \vec{p}) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 [N_{\vec{k}}(\beta) \delta\left(\frac{\hbar\vec{k}^2}{2m} + \frac{\vec{k}\vec{p}}{m} - V_s k\right) + (1 + N_{\vec{k}}(\beta)) \times \delta\left(\frac{\hbar\vec{k}^2}{2m} + \frac{\vec{k}\vec{p}}{m} + V_s k\right)]; \Gamma_{BAC}^{rel}(\gamma, \vec{p}) = \frac{mV_s^2}{\hbar} \tilde{\Gamma}_{BAC}^{rel}(\gamma, \vec{p}); \quad (3.61)$$

$$\tilde{\Gamma}_{BAC}^{rel}(\gamma, \vec{p}) = \frac{8\alpha}{\pi} \int d\vec{K} K \left[(1 + N(4\gamma K)) \delta(\vec{K}^2 + \vec{K}\vec{p} + \vec{K}) + N(4\gamma K) \delta(\vec{K}^2 + \vec{K}\vec{p} - K) \right]$$

სადაც: უგანზომილებო ტალღური ვექტორი \vec{K} (ისევე როგორც (3.57) და(3.58) ფორმულებში) განისაზღვრება თანაფარდობით: $\vec{K} = \frac{\hbar}{2mV_s} \cdot \vec{k}$;

მარტივად დგინდება, რომ დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში ($\gamma \gg 1$) და „მცირე“ სიხარით მოძრავი ელექტრონისთვის ($\vec{P}^2 \ll 1$), (3.61) ფორმულები გვაძლევენ ელექტრონის ალბათობის განაწილების ფუნქციის რელაქსაციის სიხშირისათვის შემდეგ მნიშვნელობას:

$$\Gamma_{BAC}^{rel}(\gamma, \vec{p}) = \Gamma_{0BAC}^{rel}(\gamma) = \frac{mV_s^2}{\hbar} 32\alpha [e^{4\gamma} - 1]^{-1} \quad (3.62)$$

$$(\vec{P} \ll 1, \gamma \gg 1, \alpha < 1)$$

(3.62)-ის დახმარებით კი მარტივად ვპოულობთ ელექტრონის დაბალტემპერატურულ ძვრადობას (შფმ-ში) აკუსტიკური პოლარონის მოდელში:

$$\mu_{0BAC} = \frac{\hbar e}{m^2 V_s^2} \cdot \frac{1}{32\alpha} e^{4\gamma}; (\gamma \gg 1, \alpha < 1). \quad (3.63)$$

ამრიგად, სადისერტაციო ნაშრომში ავტორის მიერ მიღებული შედეგი აკუსტიკური პოლარონის მოდელში ელექტრონის დაბალტემპერატურული (სტატიკური) დრეიფული ძვრადობისთვის (იხ. (3.54) ფორმულა) შფმ-ში 1/2-ჯერ ნაკლებია ელექტრონის „ბოლცმანისეულ“ დაბალტემპერატურულ დრეიფულ ძვრადობაზე (იხ. 3.63)). მამრავლი 1/2-ის წარმოშობა განპირობებულია იმ გარემოებით, რომ $\Gamma_{AC}^{rel}(\gamma)/\Gamma_{0BAC}^{rel}(\gamma)=2$, და თვით ელექტრონის სიჩქარის (იმპულსის) რელაქსაციის სიხშირის (3.58)-გამოსახულების ინტეგრალქვეშა წევრები შეიცავენ $(\vec{K} \cdot \vec{P})/\vec{P}^2$ -თანამამრავლს, მაშინ როდესაც (3.61) რელაქსაციის სიხშირის გამოსახულების ინტეგრალქვეშა წევრები ასეთ თანამამრავლს არ შეიცავენ; ხოლო თვით ამ თანამამრავლის წარმოშობა განპირობებულია კორელაციური ფუნქციებისთვის კინეტიკური განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალებში ელექტრონის სიჩქარის ცვლილების წევრის არსებობით მისი გაბნევისას ფონონებზე (იხ. (3.9), (3.12), (3.15) და 3.2 პარაგრაფი)). სწორედ ამ გარემოების გამო მიიღება ელექტრონის დაბალტემპერატურული ძვრადობისთვის 2-ჯერ ნაკლები მნიშვნელობა ამ მოდელში, რომელიც წარმოადგენს თანამიმდევრულ და სწორ შედეგს განსხვავებით კინეტიკური განტოლების გამოყენებით მიღებული შედეგისაგან („ბოლცმანისეული“ მიდგომისაგან) [121-122].

რაც შეეხება ელექტრონის დაბალტემპერატურულ (სტატიკურ) ძვრადობებს ამ მოდელში რომლებიც მიიღებიან ფხიპ-ის თეორიისა (მიახლოებისა) და ბალანსის განტოლების მეთოდის (ტორნბერგ-ფეინმანის თეორიის) გამოყენებით, ავტორის მიერ ჩატარებული გამოკვლევების საფუძველზე ნაპოვანია ამ დაბალტემპერატურული ძვრადობების მნიშვნელობები და დადგენილია, რომ ისინი ემთხვევიან ერთმანეთს:

$$\tilde{\mu}_{AC}^{FXIP} = \tilde{\mu}_{AC}^{TF} = \frac{3}{4\gamma} \cdot \frac{1}{64\alpha} e^{4\gamma}; \quad (\gamma \gg 1, \alpha < 1) \quad (3.64)$$

ისევე როგორც პოლარონის ფროლიხის მოდელში, ამ მოდელშიც $\frac{3}{4\gamma}$ -მამრავლის წარმოშობის ღრმა მიზეზი (ბუნება) ჯერ-ჯერობით დადგენილი არ არის.

ამრიგად სადისერტაციო ნაშრომის ამ თავის (3.1–3.3) პარაგრაფებში ავტორის მიერ განხილულ მოდელზე დაყრდნობით მიღებული შედეგები (გამოყვანილი ფორმულები: როგორც ზოგადი, ასევე მიახლოებითი) შესაძლებლობას იძლევა გადაუგვარებელ, ფართოზონიან, ერთგვაროვან (პოლარული) ნახევარგამტარებში, იონურ და კოვალენტურ კრისტალებში ელექტრონული გადატანის მექანიკური კოე-

ფიციენტების (დრეიფული ძვრადობა, დინამიური გამტარობა) გამოთვლისა ერთი ზონის მიახლოებაში კვაზინაწილაკების (ელექტრონების) დისპერსიის როგორც ზოგადი, ასევე პარაბოლური კანონის დროს, ფონონების დისპერსიის იზოტროპული კანონისა და სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში.

3.4 პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრადობა ფინანსის განზომილობის მოდელი

პოლარონული გადატანის მექანიკური კოეფიციენტების (დრეიფული ძვრადობა, ელექტროგამტარობა) გამოსათვლელად პოლარულ ნახევარგამტარებსა ან იონურ კრისტალებში შემოვიფარგლოთ პოლარონის ფგმ-ით, რომელიც აღწერილი იყო ნაშრომის I თავის 1.3.3 პარაგრაფში და რომლის მოდელური ჰამილტონიანი H_{GF}^s მოიცემა (1.52)-ტოლობით. პოლარონის დრეიფული ძვრადობის საპონელად ვისარგებლოთ კუბოს წრფივი გამოძახილის თეორიით და გამოთვლების გასამარტივებლად შემოვიფარგლოთ 1.3.3 პარაგრაფში წარმოდგენილ ერთეულთა სისტემით: ($\hbar = m = \omega_0 = 1$). ჩავთვალოთ, რომ დენი რომელიც ფიგურირებს (3.2)-ფორმულაში, განპირობებულია ელექტრონისა, და ფიქტიური ნაწილაკის (პოლარონის) მასათა ცენტრის გადაადგილებით, ვინაიდან ისინი დაკავშირებული არიან ერთმანეთთან. ამგვარად, განიხილება სისტემა, რომელიც აღიწერება ჰამილტონიანით [57-58,125]:

$$H_{GF} = H_{GF}^s + H_{\Sigma} + H_{int} \quad (3.65)$$

სადაც: H_{Σ} -ფონონური ველის ჰამილტონიანია, ხოლო H_{int} ურთიერთქმედების ჰამილტონიანი განისაზღვრება (1.2), (1.18) და (1.20)-ტოლობებით. ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება განიხილება როგორც მცირე შემფოთება. ნათელია, რომ ელექტრონის \vec{r} -კოორდინატი დაკავშირებულია ახალ კანონი-კურ ცვლადებთან თანაფარდობით (იხ. 1.3.3. პარაგრაფი):

$$\vec{r} = \vec{R} + \mu_e \vec{\xi}; \quad \mu_e = \frac{M_{GF}}{M_{GF} + 1}, \quad \mu \equiv \mu_e \quad (3.66)$$

შემოვიფარგლოთ ერთი ზონის მიახლოებით და იზოტროპული შემთხვევით და განვიხილოთ, მაგალითად პოლარონის „იმპულსი-იმპულსზე“-კორელაციური ფუნქციის z-კომპონენტი.

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_z \hat{P}_z(t) \rangle_{GF} &= Z_{GF}^{-1}(\beta) SP_{GF\Sigma} \left[e^{-\beta H_{GF}} \hat{P}_z e^{\frac{i}{\hbar} H_{GF} t} \hat{P}_z e^{-\frac{i}{\hbar} H_{GF} t} \right] = \\ SP_{GF}^s [\hat{P}_z G_z^{GF}(t, \beta)]; G_z^{GF}(t, \beta) &= Z_{GF}^{-1}(\beta) SP_{GF\Sigma} \left[(e^{i L_{GF} t} \hat{P}_z) e^{-\beta H_{GF}} \right] \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$Z_{GF}(\beta) = SP_{GF\Sigma} (e^{-\beta H_{GF}}) \hat{P}_z \equiv \mathcal{J}$$

სადაც: ჩვენ შემოვიღეთ დამხმარე (რელევანტური) ოპერატორი $G_z^{GF}(t, \beta)$. მსგავსი გამოსახულება გვექნება აგრეთვე კორელაციური ფუნქციისთვის:

$\langle \hat{P}_z(t) \hat{P}(t) \rangle_{GF}$. როგორც (3.67)-ტოლობებიდან ჩანს კვალი კორელაციური ფუნქციის გამოთვლისას აიღება $|\hat{P}\rangle |n\rangle -$. ორთონორმირებულ საკუთარ ფუნქციებზე შრედინგერის (1.54) და (1.55)-განტოლებებისა;

$$|n\rangle \equiv u_n(\xi); SP_{GF}^s [\hat{P}_z G_z^{GF}(t)] = \sum_h \int d\vec{P} \hat{P}_z G_z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta)$$

$$\text{და } G_z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta) = \langle \vec{P} | \langle n | G_z^{GF}(t, \beta) | n \rangle | \vec{P} \rangle \quad (3.68)$$

მარტივად შესაძლებელია ნახვენები იქნას, რომ კორელაციური ფუნქცია $\langle \hat{P}_z(t) \hat{P}(t) \rangle$ და $G_z^{GF}(t, \beta)$ -ოპერატორი აკმაყოფილებენ შემდეგი სახის კინეტიკურ განტოლებას (იხ. შედარებისათვის (3.4)-განტოლება):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{P}_z \hat{P}_z(t) \rangle &= SP_{GF}^s \left[\hat{P}_z \frac{\partial}{\partial t} G_z^{GF}(t, \beta) \right] = \frac{i}{\hbar} SP_{GF}^s \left\{ \left[\hat{P}_z, H_{GF}^s \right] G_z^{GF}(t, \beta) \right\} - \\ - \int_0^t d\tau \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 & \left[e^{-i\tau} N_0(\beta) + e^{i\tau} (1 + N_0(\beta)) \right] SP_{GF}^s \left\{ \left[\hat{P}_z, e^{i\vec{k}\vec{r}} \right] \cdot e^{-i\vec{k}\vec{r}(\tau)} G_z^{GF}(t, \beta) \right\} + \\ + \int_0^{t-i\beta} dz \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 & \left[e^{iz} N_0(\beta) + e^{-iz} (1 + N_0(\beta)) \right] \cdot SP_{GF}^s \left\{ e^{-i\vec{k}\vec{r}(z)} \left[\hat{P}_z, e^{i\vec{k}\vec{r}} \right] \cdot G_z^{GF}(t, \beta) \right\} \end{aligned} \quad (3.69)$$

სადაც: \vec{r} - განისაზღვრება (3.66) - ტოლობით და $\vec{r}(t) = e^{iH_{GF}^s t} \vec{r} e^{-iH_{GF}^s t}$ წარმოადგენს პოლარონის თავისუფალი მოძრაობის “ტრაექტორიას” ფგმ-ში. ანალოგიურად ჩაიწერება კინეტიკური განტოლება $\langle \hat{P}_z(t) \hat{P}_z \rangle_{GF} = \langle \hat{P}_z \hat{P}_z(-t) \rangle_{GF}$ კორელაციური ფუნქციისათვის. თუ გავითვალისწინებთ (3.66) - ტოლობას, ჩავატარებთ ინტეგრებას τ და z - ცვლადებით, მაშინ მარტივი გარდაქმნებისა და გამოთვლების შემდეგ მივიღებთ კინეტიკურ (მოძრაობის) განტოლებას $G_z^{GF}(t, \beta)$ - ოპერატორის დიაგონალური მატრიცული ელემენტებისათვის- $G_z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} G_z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta) = i \sum_{\vec{k}, n_1, n_2} |V_{\vec{k}}|^2 \frac{K_Z}{P_z} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ N_0(\beta) \frac{1 - \exp[it\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n_2)]}{\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n_2)} + (1 + N_0(\beta)) \frac{1 - \exp[it\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n_2)]}{\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n_2)} \right\} \times \\
& \langle n | e^{i\mu\vec{k}\vec{\xi}} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-i\mu\vec{k}\vec{\xi}} | n_2 \rangle G_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta) - i \sum_{\vec{k}, n_1, n_2} |V_{\vec{k}}|^2 \frac{k_Z}{\vec{P}_Z} \times \\
& \times \left\{ N_0(\beta) \frac{1 - \exp[-i(t - i\beta)\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} + (1 + N_0(\beta)) \frac{1 - \exp[-i(t - i\beta)\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right\} \\
& \times \langle n | e^{-i\mu\vec{k}\vec{\xi}} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{i\mu\vec{k}\vec{\xi}} | n_2 \rangle G_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta) \tag{3.70}.
\end{aligned}$$

აქ $\Delta^\pm(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n_2) = \frac{\vec{k}^2}{2M} + \frac{\vec{k}\vec{P}}{M} \pm 1 + \varepsilon_{n_1} - \varepsilon_{n_2}$ - სიდიდე წარმოადგენს ფონონებზე გაბნევისას პოლარონის ენერჯის ცვლილებას მისი ერთი ადგზნებული ენერგეტიკული მდგომარეობიდან მეორე ადგზნებულ მდგომარეობაში გადასვლის დროს; $M \equiv M_{GF} + 1$ - კი პოლარონის მასაა. თუ (3.70) - განტოლებაში შევასრულებთ ჩასმას $t \rightarrow -t$ მარტივად ვპოულობთ განტოლებას $G_Z^{GF}(\vec{P}, n, -t, \beta)$ სიდიდისათვის. ცხადია, რომ (3.70)- კინეტიკური განტოლება არ წარმოადგენს ბოლცმანის ტიპის განტოლებას, ვინაიდან ამ განტოლების დაჯახებითი ინტეგრალები შეიცავენ არადიაგონალურ მატრიცულ ელემენტებს $G_Z^{GF}(t, \beta)$ ოპერატორისა: $G_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta) = \langle \vec{P} | \langle n_2 | G_Z^{GF}(t, \beta) | n \rangle | \vec{P} \rangle$. ნათელია, რომ აჯამვა (3.70) - განტოლების მარჯვენა მხარეში ხორციელდება შრედინგერის (1.54)-განტოლების ყველა $|n \rangle \equiv u_n(\vec{\xi})$ - ორთონორმირებული ძირითადი და ადგზნებული (ზოგადად გადაგვარებული) მდგომარეობების მიხედვით. (ჩვენ ვთვლით, რომ ძირითადი მდგომარეობის $|0 \rangle$ - ენერგეტიკული დონე ε_0 - არ არის გადაგვარებული).

ბოლცმანის ტიპის კინეტიკური განტოლების მისაღებად $G_Z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta)$ სიდიდისათვის წარმოვადგინოთ $G_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta)$ - არადიაგონალური მატრიცული ელემენტები შემდეგი ფორმით:

$$G_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta) = G_Z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta) \delta_{n_2 n} + \exp[it(\varepsilon_{n_2} - \varepsilon_n)] \tilde{G}_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta) [1 - \delta_{n_2 n}]. \tag{3.71}$$

სადაც $\delta_{n_2 n}$ - წარმოადგენს კრონეკერის სიმბოლოს და შემოღებული სიდიდე

$\tilde{G}_Z^{GF}(\vec{P}, n_2, n, t, \beta)$ - შედარებით მდორედ იცვლება t -დიდი დროების ასიმპტოტურ არეში ($t \geq \tau_{rel}$). განვიხილოთ დიდ დროთა მნიშვნელობები, როდესაც

$$t \gg |\varepsilon_{n_i} - \varepsilon_{n_j}|^{-1}; (n_i, n_j = 0, 1, 2, \dots) \tag{3.72}$$

თუ ჩავსვამთ (3.71)–ტოლობას (3.70)–კინეტიკური განტოლების მარჯვენა მხარეში და გავითვალისწინებთ (3.72)–უტოლობას, მაშინ მივიღებთ ბოლცმანის სახის კინეტიკურ განტოლებას $G_Z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta)$ –სიდიდისათვის. (ჩვენ უგულებელყავით დაჯახებითი ინტეგრალები არადიაგონალური მატრიცული ელემენტებით, ვინაიდან ისინი წარმოადგენენ სწრაფად ოსცილირებად ფუნქციებს დიდი დროების შემთხვევაში) [125]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G_Z^{GF}(\vec{P}, \vec{n}, t, \beta) = & i \sum_{\vec{k}, n_1} |V_{\vec{k}}|^2 \frac{k_Z}{\vec{P}_Z} \left\{ N_0(\beta) \frac{1 - \exp[it\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} + (1 + N_0(\beta)) \frac{1 - \exp[it\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right\} \times \\ & \times \langle n | e^{i\mu \vec{k} \vec{\xi}} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-i\mu \vec{k} \vec{\xi}} | n \rangle \cdot G_Z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta) - i \sum_{\vec{k}, n_1} |V_{\vec{k}}|^2 \frac{k_Z}{\vec{P}_Z} \times \\ & \times \left\{ N_0(\beta) \frac{1 - \exp[-i(t - i\beta)\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} + (1 + N_0(\beta)) \frac{1 - \exp[-i(t - i\beta)\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right\} \times \\ & \times \langle n | e^{-i\mu \vec{k} \vec{\xi}} | n_1 \rangle \times \langle n_1 | e^{i\mu \vec{k} \vec{\xi}} | n \rangle G_Z^{GF}(\vec{P}, n, t, \beta); \quad t \gg |\varepsilon_{n_i} - \varepsilon_{n_j}|^{-1} \end{aligned} \quad (3.73)$$

(3.73) განტოლებაში აჯამვა n_1 –სიმბოლოთი მოიცავს აგრეთვე ყველა იმ მდგომარეობებს, რომელთათვისაც $\varepsilon_{n_2} = \varepsilon_{n_1}$, ვინაიდან ზოგადად აღზნებული $|n\rangle$ –მდგომარეობების ენერგეტიკული სპექტრი გადაგვარებულია. მსგავსი სახის განტოლებები გვექნება აგრეთვე $G_Z^{GF}(\vec{P}, n, -t, \beta)$ და $G_Z^{GF}(\vec{P}, 0, t, \beta)$ –ძირითადი მდგომარეობის ($\varepsilon_0, |0\rangle$) მატრიცული ელემენტებისათვის. თუ ჩავატარებთ (3.73)–განტოლებისა და მისი მსგავსი განტოლების $G_Z^{GF}(\vec{P}, n, -t, \beta)$ –სიდიდისათვის ინტეგრებას t –დროითი ცვლადის მიხედვით, გავითვალისწინებთ $G_Z^{GF}(\pm t, \beta)$ –ოპერატორებისათვის საწყის პირობებს $t=0$ –დროის მომენტი-სათვის: $G_Z^{GF}(0, \beta) = Z^{-1}_{GF}(\beta) \vec{P}_Z S P_Z (e^{-\beta H_{GF}}); \langle \vec{P}_Z \vec{P}_Z(t) \rangle_{GF}$ და $\langle \vec{P}_Z \vec{P}_Z(-t) \rangle_{GF}$ კორელაციური ფუნქციებისთვის (3.68) ფორმულებს, მაშინ ამ კორელაციური ფუნქციებისთვის მივიღებთ შემდეგი სახის გამოსახულებებს:

$$\begin{aligned} \langle \vec{P}_Z \vec{P}_Z(\pm t) \rangle_{GF} = & \frac{(\frac{\beta}{2\pi M})^{3/2}}{\sum_n e^{-\beta \varepsilon_n}} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \int d\vec{P} P_Z^2 \exp\left[-\frac{\beta \vec{P}^2}{2M}\right] \times \\ & \times \exp[\operatorname{Re} \Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n)] \exp[\pm i \operatorname{Im} \Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n)]; \end{aligned} \quad (3.74).$$

სადაც,
$$\operatorname{Re}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n) = -\sum_{\vec{k}, n_1} \frac{k_z}{\vec{P}_z} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ N_0(\beta) \frac{1 - \cos[t\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^{2-}(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \left[1 + e^{-\beta\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right] + (1 + N_0(\beta)) \frac{1 - \cos[t\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^{2+}(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \times \left[1 + e^{-\beta\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right] \right\} \langle n | e^{i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n \rangle$$

და
$$\operatorname{Im}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n) = \sum_{\vec{k}, n_1} \frac{k_z}{\vec{P}_z} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ N_0(\beta) \frac{\sin[t\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^{2-}(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \times \left[1 - e^{-\beta\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right] + (1 + N_0(\beta)) \frac{\sin[t\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)]}{\Delta^{2+}(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \left[1 - e^{-\beta\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)} \right] \right\} \langle n | e^{i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n_1 \rangle \times \langle n_1 | e^{-i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n \rangle \quad (3.75)$$

ხოლო, თვით კორელაციური ფუნქციების მიღების დეკრემენტისათვის (პოლარონის იმპულსის Z -კომპონენტის რელაქსაციის სიხშირისთვის) და ოსცილირებადი ფაქტორისათვის გვექნება შემდეგი თანაფარდობები:

$$((t \gg |\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_n|^{-1}); \Gamma_{Zrel}^{GF}(\beta, \vec{P}, n) = \lim_{|t| \rightarrow \infty} \frac{\operatorname{Re}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n)}{|t|} = -2\pi \sum_{\vec{k}, n_1} \frac{k_z}{\vec{P}_z} |V_{\vec{k}}|^2 \times \left\{ N_0(\beta) \cdot \delta[\Delta^-(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)] + (1 + N_0(\beta)) \delta[\Delta^+(\vec{k}, \vec{P}, n_1, n)] \right\} \langle n | e^{i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{-i\mu_{\vec{k}}\vec{k}\vec{\xi}} | n \rangle; \quad (3.76)$$

$$\operatorname{Im}\Gamma_Z^{GF}(\beta, \vec{P}, n) = \lim_{|t| \rightarrow \infty} \operatorname{Im}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n) = \frac{\beta}{2} \Gamma_{Zrel}^{GF}(\beta, \vec{P}, n) \operatorname{Sign}t$$

ნაპოვნი (3.74) ფორმულისა და (3.2)–(3.3) თანაფარდობების დახმარებით მარტივად ვღებულობთ პოლარონისთვის ელექტროგამტარობის ტენზორის დისიპაციური ნაწილის მნიშვნელობას განხილულ იზოტროპულ შემთხვევაში [125]:

$$\operatorname{Re}\sigma_{zz}^{GFS}(\omega) = \frac{Ne^2}{M^2} \frac{2th(\frac{1}{2}\beta\omega)}{\omega} \int_0^\infty dt \cos(\omega t) \frac{(\frac{\beta}{2})^2}{\sum_n e^{-\beta\varepsilon_n}} \cdot \sum_n e^{-\beta\varepsilon_n} \int d\vec{P}\vec{P}_z^2 \cdot \exp\left[-\frac{\beta\vec{P}^2}{2M}\right] \times \exp\left[\operatorname{Re}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n)\right] \cos\left[\operatorname{Im}\Gamma_Z^{GF}(t, \beta, \vec{P}, n)\right] \quad (3.77)$$

სადაც: N – წარმოადგენს პოლარონების კონცენტრაციას გამტარობის ზონაში.

პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის გამოსათვლელად ფგმ-ში განვიხილოთ კრისტალის ძალიან დაბალი ტემპერატურების ზღვრული შემთხვევა, როდესაც:

$$\beta \gg 1; \beta^{-1} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0| \quad (3.78)$$

სადაც $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ – წარმოადგენს პოლარონის პირველი აღზნებული მდგომარეობის ენერჯიას; (3.78) – პირობების დაცვის შემთხვევაში ძირითად წვლილს (3.67)-(3.74) კორელაციურ ფუნქციებში (იხ. აგრეთვე (3.77)) იძლევიან პოლარონის მდგომარეობები, რომელთათვისაც: $E_{\vec{p},n}^{GF} \approx \beta^{-1} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$; დაუშვათ, აგრეთვე, რომ $\omega_0 = 1 \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$. აღნიშნული პირობების გათვალისწინების დროს (3.74), (3.75), (3.76) და (3.77) – გამოსახულებების გამოთვლისას არსებითი წვლილი შეაქვს პოლარონის იმპულსის მნიშვნელობებს, რომლებიც აკმაყოფილებენ პირობას:

$\frac{\vec{p}^2}{2M} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$; თუ მხედველობაში მივიღებთ ყველა ზემოთაღნიშნულ პირობას და აგრეთვე თანაფარდობას: $t \gg |\varepsilon_{n_i} - \varepsilon_{n_j}|^{-1}$, მაშინ (3.74), (3.76) ფორმულები მარტივდება და წარმოიდგინება შემდეგი ფორმით:

$$\langle \hat{P}_z \hat{P}_z(\pm t) \rangle_{GF} = \left(\frac{\beta}{2\pi M} \right)^{3/2} \int d\vec{P} \vec{P}_z^2 \exp\left[-\frac{\beta \vec{P}^2}{2M}\right] \cdot \exp\left[-\Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P}) |t|\right] \times \exp\left[\pm i \frac{\beta}{2} \Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P})\right] \quad (3.79)$$

$$\Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P}) = -2\pi \sum_{\vec{k}} \frac{k_z}{\vec{P}_z} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ N_0(\beta) \delta[\Delta^-(\vec{k}, \vec{P})] + (1 + N_0(\beta)) \delta[\Delta^+(\vec{k}, \vec{P})] \right\} \times$$

$$\times | \langle 0 | e^{i\mu_{\vec{k}} \vec{k} \cdot \vec{z}} | 0 \rangle |^2; \quad \text{Im} \cdot \Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P}) = \frac{\beta}{2} \Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P})$$

$$\text{სადაც: } \Delta^\pm(\vec{k}, \vec{P}) = \frac{\vec{k}^2}{2M} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{P}}{M} \pm 1.$$

$$(\beta \gg 1; \beta^{-1} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|; \frac{\vec{p}^2}{2M} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|)$$

დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში ($\beta \gg 1, \beta^{-1} \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$), (3.79) კორელაციური ფუნქციების სიდიდე ძირითადად განისაზღვრება პოლარონის იმპულსების იმ მნიშვნელობებით, რომელთათვისაც $\frac{\vec{p}^2}{2M} \ll 1$. დაბალი ტემპერატურების დროს პოლარონის იმპულსის Z-კომპონენტის რელაქსაციის სიხშირე $\Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P})$ – მარტივად გამოითვლება “იმპულსთა სფერულ კოორდინატთა სისტემაში.” \vec{k} – ცვლადით ინტეგრებისას (3.79) ფორმულიდან მარტივად დგინდება, რომ კრისტალის დაბალი ტემპერატურების დროს, “მცირე სიხპართ” მოძრავი ($\frac{\vec{p}^2}{2M} \ll 1$) პოლარონის $\Gamma_{zrel}^{GF}(\beta, \vec{P})$ – იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე არ არის და-

მოკიდებული თვით პოლარონის \bar{P} -იმპულსის სიდიდეზე და განისაზღვრება შემდეგი თანაფარდობით:

$$\Gamma_{rel}^{GF}(\beta, \bar{P}) \equiv \Gamma_{0rel}^{GF}(\beta) = \frac{2}{3} \alpha N_0(\beta) \sqrt{M} f(\sqrt{2M}) \quad (3.80)$$

$$(\beta \gg 1, \bar{P}^2 / 2M \ll 1)$$

სადაც: $f(\sqrt{2M}) = f(k)|_{k=\sqrt{2M}}$; $f(k) = |\langle 0 | e^{i\mu k \bar{z}} | 0 \rangle|^2$ (3.81)

$$N_0(\beta) = [e^\beta - 1]^{-1}$$

პოლარონის დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობისა და დაბალტემპერატურული ძვრადობის საპოვნელად ფგმ-ში ვისარგებლოთ (3.77), (3.79) და (3.80) – ფორმულებით. მარტივი გამოთვლების შესრულების შემდეგ ჩვენ ვღებულობთ შემდეგი სახის გამოსახულებებს პოლარონის კუთრი ელექტროგამტარობისა და ძვრადობისთვის [125]:

$$\text{Re } \sigma^{GF}(\omega) = N e^2 \beta^{-1} M \frac{2th(\frac{1}{2} \beta \omega)}{\omega} \frac{\Gamma_{0rel}^{GF}(\beta)}{\omega^2 + \Gamma_{0rel}^{2GF}(\beta)} \cos \left[\frac{\beta}{2} \Gamma_{0rel}^{GF}(\beta) \right] \quad (3.82)$$

$$(\omega \ll \Gamma_{0rel}^{GF}(\beta) \ll \beta^{-1} \ll 1);$$

$$\mu_0^{GF} = \frac{3}{2} e \frac{\exp(\beta)}{\alpha} \frac{\sqrt{M}}{f(\sqrt{2M})}; \quad \mu^{GF} = \mu_0^{GF} - \Delta\mu^{GF}$$

$$\Delta\mu^{GF} = 3e \frac{\exp(\beta)}{\alpha} \cdot \frac{\sqrt{M}}{f(\sqrt{2M})} \sin^2 \left[\frac{1}{6} \alpha \beta N_0(\beta) \sqrt{M} \cdot f(\sqrt{2M}) \right]. \quad (3.83)$$

$$(\omega = 0; \quad \Gamma_{0rel}^{GF}(\beta) \ll \beta^{-1} \ll 1)$$

როგორც (3.83) ფორმულიდან ჩანს, $\Delta\mu^{GF}$ – სიდიდე წარმოადგენს ტემპერატურულ შესწორებას პოლარონის μ_0^{GF} -დაბალტემპერატურულ ძვრადობაზე ფგმ-ში რომელიც განპირობებულია არსებული საწყისი კორელაციებით პოლარონისა ფონონებთან. ნათელია, რომ ტემპერატურული შესწორება ძვრადობაზე წარმოადგენს μ_0^{GF} – ძვრადობასთან შედარებით მცირე სიდიდეს.

გამოვიკვლიოთ და დავადგინოთ კავშირი პოლარონის დაბალტემპერატურულ ძვრადობებს შორის ფგმ-ში და პეკარის ნახევრად კლასიკურ თეორიაში. ამ პროგრამის განსახორციელებლად პირველყოვლისა ვიპოვოთ მატრიცული ელემენტის მნიშვნელობა $e^{i\mu k \bar{z}}$ – ექსპონენციალურ ფაქტორზე პეკარის სახის ტალღური ფუნქციების მეშვეობით. მარტივი გამოთვლების ჩატარების შემდეგ ვღებულობთ შემდეგი სახის გამოსახულებას:

$$f(k) \equiv \langle 0 | e^{i\mu_k \bar{\xi}} | 0 \rangle^2 = \frac{F_1(k)}{F_2(k)}; \text{ სადაც } F_2(k) = B_0^2(a)(k^2 + 4b^2)^{12};$$

$$\begin{aligned} \text{და } F_1(k) = & 16384b^8 [b^4 B_1^2(a)k^{12} + 2b^6 B_1(a)B_2(a)k^{10} + b^8 (B_2^2(a) + 2B_1(a)B_3(a))k^8 + \\ & + 2b^{10} (B_1(a)B_4(a) + B_2(a)B_3(a))k^6 + b^{12} (B_3^2(a) + 2B_2(a)B_4(a))k^4 + \\ & + 2b^{14} B_3(a)B_4(a)k^2 + b^{16} B_4^2(a)] \end{aligned} \quad (3.84)$$

$$\text{აქ: } B_0(a) = 14 + 42a + 45a^2; \quad B_1(a) = 1 - 3a; \quad B_2(a) = 36 - 132a + 90a^2$$

$$B_3(a) = 240 - 144a - 1200a^2; \quad B_4(a) = 448 + 1344a + 1440a^2 = 32B_0(a)$$

ხოლო, a და b - სიდიდეები (მუდმივები) წარმოადგენენ ვარიაციულ პარამეტრებს ფგმ-ში. განვიხილოთ პოლარონის ფგმ-ის ზღვრული შემთხვევები:

I. ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება:

ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ბმის ზღვრულ შემთხვევაში, როდესაც

$$\alpha \gg 1, \quad M_{GF} \gg 1; \quad (M_{GF} \rightarrow \infty, C \rightarrow \infty), \mu_e \rightarrow 1 \quad (\text{იხ. 1.33 - პარაგრაფი})$$

ტალღური ფუნქცია გადადის პეკარის ტალღურ ფუნქციაში:

$$u_0(\xi) \Rightarrow N_{\Pi} [1 + b_{\Pi} \xi + a_{\Pi} b_{\Pi}^2 \xi^2] e^{-b_{\Pi} \xi}; \quad \alpha' = b_{\Pi}; \quad \beta \equiv \beta_{\Pi} = a_{\Pi} b_{\Pi}^2;$$

და მანორმირებელი მამრავლი ტოლია: $N_{\Pi} = \frac{2b_{\Pi}^3}{\pi(14 + 42a_{\Pi} + 45a_{\Pi}^2)}$ - სიდიდის,

ხოლო a_{Π} და b_{Π} - პეკარის ვარიაციული პარამეტრებია, რომლებიც შერჩეულ ერთეულთა სისტემაში მოიცემიან შემდეგი სახით: $b_{\Pi} = 0,6585\sqrt{2}\alpha$; $a_{\Pi} = 0,4516$. (იხ. 1.3.1 პარაგრაფი). ვინაიდან f - ფუნქცია წარმოადგენს ორი მრავალწევრის შეფარდებას და ფგმ-ში და $M = M_{GF} + 1$ - არის პოლარონის ეფექტური მასა, ამიტომ თუ შევინარჩუნებთ წამყვან წევრს α - ს რიგის მიხედვით f - ფუნქციაში, მაშინ ჩვენ მივიღებთ:

$$f(\sqrt{2M}) \approx \frac{16384b_{\Pi}^{12} B_1^2(a_{\Pi})k^{12}}{(k^2 + 4b_{\Pi}^2)^{12}}; \quad k = \sqrt{2M}; \quad (\alpha \gg 1) \quad (3.85).$$

ვინაიდან პეკარის თეორიაში $M_{\Pi} \approx \alpha^4$ და $M = M_{GF} + 1 \rightarrow M_{\Pi}$, ამიტომ ხარისხთა რიგის გამოთვლა გვიჩვენებს, რომ: $f(\sqrt{2M}) \approx \alpha^{-12}; (\alpha \gg 1)$. ამრიგად, დაბალტემპერატურული ძვრადობისთვის პოლარონის ფგმ-ში ვღებულობთ შემდეგი სახის ყოფაქცევას α - ბმის მუდმივას ხარისხის რიგის მიხედვით [125]:

$$\mu_{o\Pi}^{GF} = \frac{3e}{2\alpha} \exp(\beta) \frac{\sqrt{M}}{f(\sqrt{2M})} \approx \frac{3e}{2} \exp(\beta) \alpha^{13}; \quad (\alpha \gg 1, \beta \gg 1) \quad (3.86)$$

მაშინ როდესაც პოლარონის პეკარის თეორიაში (იხ. 1.3.1- პარაგრაფი) დაბალტემპერატურული ძვრადობის ყოფაქცევა α -ბმის მუდმივას ხარისხის რიგის მიხედვით მოიცემა შემდეგი დამოკიდებულებით:

$\mu_0 \equiv \mu_{0II} \approx \alpha^5; (\alpha \gg 1, \beta \gg 1)$ (შევნიშნავთ, რომ ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში ($\alpha \gg 1$) პოლარონის ფგმ-ი გადადის პოლარონის პეკარის მოდელში).

II. სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედება:

სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის ზღვრულ შემთხვევაში, როდესაც

$$\alpha < 1, M_{GF} \ll 1, (M_{GF} \rightarrow 0, c \rightarrow 0), \quad \mu_e = \frac{M_{GF}}{M_{GF} + 1} \Rightarrow 0 \quad (\text{იხ.1.3.3-პარაგრაფი}),$$

$M = M_{GF} + 1 \Rightarrow 1$, და $f(k) \Rightarrow 1$. (იხ.3.81- ფორმულა). (სუსტი ელექტრონ-ფონონური ბმის შემთხვევაში, ($\alpha < 1$); პოლარონის ფგმ გადადის პოლარონის ფროლიხის მოდელში). ამ შემთხვევაში (3.83) და (3.28) ფორმულებიდან გამო-მდინარე მარტივად ვპოულობთ [125]:

$$\mu_0^{GF} \Rightarrow \mu_0 = \frac{3e}{2\alpha} e^\beta; \quad \Delta\mu^{GF} \Rightarrow \Delta\mu = \frac{1}{3} e\alpha\beta^2 e^{-\beta}; (\alpha < 1, \beta \gg 1) \quad (3.87)$$

ამრიგად, პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობისთვის ვღებულობთ ისეთივე მნიშვნელობას, როგორც ნაპოვნია პოლარონის ფროლიხის მოდელში.

დაბოლოს უნდა აღინიშნოს, რომ სადისერტაციო ნაშრომში ავტორის მიერ განვითარებული ფორმალიზმი (მეთოდები) და მიღებული განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები კორელაციური ფუნქციებისათვის შესაძლებელია გამოყენებული იქნას წრფივი ელექტრონული და პოლარონული გადატანის მექანიკური კოეფიციენტების (დრეიფული ძვრადობა, დინამიური გამტარობა) გამოსათვლელად ურთიერთქმედების რიგის მიხედვით შემფოტების თეორიის მაღალ მიახლოებებში ზემოთგანხილული მოდულებსთვის, და მყარი სხეულების ფიზიკის ((პოლარული) ნახევარგამტარები, იონური და კოვალენტური კრისტალები და სხვა). კვანტურ დინამიური სისტემების სხვა მოდელთათვისაც, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონებთან (ელექტრონების გაბნევა არაპოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე, პიეზოელექტრული გაბნევა, პოლარონის ფეინმანის მოდელი და სხვა).

დასკვნა

1. სხვადასხვა მიდგომების-მოწესრიგებულ ოპერატორთა და ლიუვილის სუპეროპერატორული ფორმალიზმისა და პროექციული ოპერატორის მეთოდის გამოყენებით, საწყისი კორელაციების გათვალისწინებით- გამოყვანილია ახალი, ზუსტი, განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური (კინეტიკური) განტოლებები დროის ორმოქმენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის, დინამიური ქვესისტემისთვის რომელიც ურთიერთქმედებს ბოზონურ ველთან (თერმოსტატთან). მიღებულ განტოლებათა დაჯახებითი ინტეგრალები შეიცავენ როგორც წევრებს, რომლებიც აღწერენ ნამდვილი კორელაციების ევოლუციას დროში, ასევე საწყისი კორელაციების ევოლუციურ წევრებს, რომლებიც განპირობებულია ქვესისტემის ურთიერთქმედებით ბოზონურ თერმოსტატთან დროის საწყის მომენტში.

2. შემფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში – ქვესისტემის თერმოსტატთან ურთიერთქმედების ჰამილტონიანის მიხედვით – ნაპოვანია განზოგადოებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები გამორიცხული ბოზონური ამპლიტუდებით კორელაციური ფუნქციებისთვის, როგორც მარკოვისეული, ისე არამარკოვისეული სახით, რომლებიც შეიცავენ ცხადად გამოყოფილ საწყისი კორელაციების ევოლუციურ წევრებს.

3. განვითარებული მიდგომა და ფორმალიზმი გამოყენებულია გადაუგვარებელ ფართოზონიან, ერთგვაროვან ნახევარგამტარებსა და იონურ კრისტალებში ელექტრონული და პოლარონული გამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის წრფივი კვანტური თეორიის ასაგებად. განხილულ კვანტურ დინამიურ ქვესისტემების მოდელთათვის, რომლებიც ურთიერთქმედებენ ფონონურ ველთან - ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის, ფროლიხისა და აკუსტიკური პოლარონის მოდელთათვის, პოლარონის ფგმ-სთვის გამოყვანილია განზოგადოებული კვანტური ევოლუციური განტოლებები წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის – “დენი-დენზე” (“სიჩქარე-სიჩქარეზე”) – ელექტრონისა და პოლარონისთვის შფმ-ის გამოყენების გარეშე.

4. ელექტრონ-ფონონური სისტემისთვის, ფროლიხისა და აკუსტიკური პოლარონის მოდელთათვის, შემფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში, სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში და ერთი ზონის მიახლოებაში ელექტრონისათვის გამოყვანილია და გამოკვლეულია მარკოვის სახის კინეტიკური განტოლებები ელექტრონის სიჩქარის ოპერატორის კომპონენტების საშუალო მნიშვნელობების დიაგონალური მატრიცული ელემენტებისათვის, რომლებიც წარმოადგენენ ბოლცმანის ტიპის განტოლებებს, საიდანაც გამორიცხულია ფონონური ამპლიტუდები. განხილულია ელექტრონის არადრეკადი გაბნევის პროცესები ფონონებზე და დადგენილია, რომ განხილულ მოდელში ადგილი აქვს რელაქსაციურ პროცესს კორელაციური ფუნქციების ოსცილაციებით. ნაპოვანია ელექტრონის იმპულსის (სიჩქარის) რელაქსაციის სიხშირეების ანალიზური გამოსახულებები კრისტალის დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში. გამოთვლილია ელექტრონის “სიჩქარე-სიჩქარეზე” კორელაციური ფუნქციების მიღვის დეკრემენტები და ოსცილირებადი ფაქტორები.

5. გამოკვლეულია და დადგენილია, რომ ელექტრონის სიჩქარის (იმპულსის) მცირე მნიშვნელობებისათვის, სიჩქარის რელაქსაციის დროები (სიხშირეები) განხილულ მოდელში არ არის დამოკიდებული იმპულსის სიდიდეზე. მცირე სიჩქარეებით მოძრავი ელექტრონებისთვის ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროს ნაპოვანია დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობისა და ელექტრონის დრეიფული ძვრადობის გამოსათვლელი ფორმულები.

6. ფროლიხის პოლარონის მოდელში მიღებული გამოსახულებები ელექტრონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობისა და დინამიური გამტარობისთვის წარმოადგენს ოსაკას მიერ ნაპოვანი შედეგის განზოგადობას მცირე ინტენსივობის მქონე დაბალსიხშირულ გარეშე ელექტრულ ველში, რაც

ფაქტიურად შესაძლებელია განხილული იქნას, როგორც დრუდეს ფორმულა კუთრი ელექტროგამტარობისთვის. ნაპოვნია აგრეთვე სტატიკური ($\omega = 0$) ელექტროგამტარობისა და დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრა-დობის ანალიზური გამოსახულებები, როგორც ფროლიხის, ასევე აკუსტიკური პოლარონის მოდელებში.

7. როგორც გამოთვლები გვიჩვენებს, ელექტრონების გაბნევისას პოლარულ ოპტიკურ ფონონებზე, დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრა-დობისთვის (dc-mobility; $\omega = 0$) მიღებული მნიშვნელობა 3-ჯერ აღემატება ძვრა-დობის იმ მნიშვნელობას, რომელიც მიიღება ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების გამოყენებით და ამოხსნით რელაქსაციის დროის მიახლოებაში. მიღებული შედეგი წარმოადგენს – “ $\frac{3 K_B T}{2 \hbar \omega_0}$ პრობლემის” – ნაწილობრივ გადაწყვეტას ფროლიხის

პოლარონის დაბალტემპერატურული ძვრა-დობის თეორიაში.

8. ელექტრონების გაბნევისას აკუსტიკურ ფონონებზე (აკუსტიკური პოლარონის მოდელი) მიღებული დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრა-დობის ($\omega = 0$) მნიშვნელობა 2-ჯერ ნაკლებია ძვრა-დობის იმ მნიშვნელობაზე, რომელიც ასევე მიიღება ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოხსნისას რელაქსაციის დროის მიახლოებაში.

9. განხილულ მოდელებში ნაპოვნია აგრეთვე ელექტრონის დრეიფულ ძვრა-დობაზე ტემპერატურული შესწორებები, რომლებიც განპირობებულია საწყისი კორელაციების ევოლუციური წევრების არსებობით გამოყვანილი კინეტიკური განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალებში და ნაჩვენებია, რომ ეს შესწორებები წარმოადგენენ მცირე სიდიდეებს განხილული თეორიის ფარგლებში.

10. პოლარონის ფგმ-სთვის მიღებული კვანტური კინეტიკური განტოლებები ელექტრული დენის ოპერატორის კომპონენტების (პოლარონის იმპულსის) დროის ორმომენტიანი წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის გამოყენებულია პოლარონის დრეიფული ძვრა-დობისა და ელექტროგამტარობის ტენზორის გამოსათვლელად. განხილულ ერთზონიან იზოტროპულ შემთხვევაში, მარკოვისეულ მიახლოებაში პოლარონის დინამიკისთვის, ნაპოვნია მიახლოებითი გამოსახულებები კორელაციური ფუნქციებისთვის.

11. კრისტალის ძალიან დაბალი ტემპერატურების შემთხვევაში გამოყვანილია ბოლცმანის ტიპის კინეტიკური განტოლება კორელაციური ფუნქციის დიაგონალური მატრიცული ელემენტისთვის, რომელიც შეესაბამება პოლარონის ძირითად მდგომარეობას. გამოკვლეულია პოლარონის არადრეკადი გაბნევის პროცესები ფონონებზე. ნაპოვნია იმპულსის რელაქსაციის სიხშირის (დროის) ანალიზური გამოსახულება და დადგენილია, რომ მცირე სიჩქარით მოძრავი პოლარონისთვის იმპულსის რელაქსაციის სიხშირე (დრო) არ არის დამოკიდებული იმპულსის სიდიდეზე.

12. კუბოს წრფივი რეაქციის თეორიის გამოყენებით მიღებულია დაბალსიხშირული ელექტროგამტარობის ტენზორის ანალიზური გამოსახულება ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის ერთზონიან მიახლოებაში და ფონონების დისპერსიის ზოგადი (იზოტროპული) კანონის შემთხვევაში. გამოთვლილია პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრა-დობა ფგმ-ში. ამ მოდელში ნაპოვნია აგრეთვე ტემპერატურული შესწორება პოლარონის დრეიფულ ძვრა-დობაზე, რომელიც განპირობებულია საწყისი კორელაციების ევოლუციური წევრების არსებობით მიღებული კინეტიკური განტოლებების დაჯახებით ინტეგრალებში, და დასაბუთებულია, რომ ეს ტემპერატურული შესწორება წარმოადგენს მცირე სიდიდეს.

13. განხილულია და გაანალიზებულია პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრა-დობის ყოფაქცევა სუსტი ($\alpha < 1$) და ძლიერი ($\alpha \gg 1$) ელექტრონ-

ფონონური ურთიერთქმედების ზღვრულ შემთხვევაში. სუსტი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($M_{GF} \rightarrow 0$), როდესაც პოლარონის ფგმ გადადის პოლარონის ფროლიხის მოდელში, პოლარონის დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობისთვის ($\gamma \gg 1$; $\omega = 0$) ვლბულობთ ისეთივე მიშვნელობას, როგორიც ნაპონია პოლარონის ფროლიხის მოდელში. ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($M_{GF} \rightarrow \infty$), როდესაც პოლარონის ფგმ ადადგენს პოლარონის პეკარის ნახევრადკლასიკურ თეორიას, დაბალტემპერატურული დრეიფული ძვრადობის ყოფაქცევა მოიცემა შემდეგი თანაფარდობით: $\mu_{GF} \sim \frac{3}{2} e \cdot \exp(\gamma) \alpha^{13}$; ($\hbar = m = \omega_0 = 1$; $\gamma = \beta \gg 1$; $\omega = 0$); ანუ პოლარონის

დაბალტემპერატურული ძვრადობა ძლიერი ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შემთხვევაში ($\alpha \gg 1$) იზრდება α -ბმის მუდმივას მეცამეტე რიგის პროპორციულად ამ მუდმივას დიდი მნიშვნელობების დროს, მაშინ როდესაც პოლარონის პეკარის თეორიაში დაბალტემპერატურული ძვრადობა იზრდება მისი მეხუთე რიგის პროპორციულად: $\mu_{II} \sim \alpha^5$; როდესაც $\alpha \gg 1$; ($\hbar = m = \omega_0 = 1$; $\beta \gg 1$; $\omega = 0$).

14. სადისერტაციო ნაშრომში ჩატარებული გამოკვლევები გვიჩვენებს, რომ განვითარებულ მეთოდებს, რომლებიც დაფუძნებულია კინეტიკური განტოლებების მიღებაზე წონასწორული კორელაციური ფუნქციებისთვის და მათ გამოთვლაზე, განსხვავებით სხვა მიდგომებისგან, არ მიყვარათ განშლადი წევრებისაგან შედგენილი უსასრულო მწკრივების აჯამების აუცილებლობასთან კვაზინაწილაკის (ელექტრონის, პოლარონის) ურთიერთქმედების მიხედვით ფონონებთან, კრისტალზე მოდებული გარეშე ელექტრული ველის დაბალი ($\omega \rightarrow 0$) სიხშირეების შემთხვევაში.

ნაშრომში დასაბუთებულია, რომ არსებული საწყისი კორელაციების ევოლუცია და კორელაციური ფუნქციების ოსცილაციები დროის მიხედვით, რომლებიც განპირობებულია კვაზინაწილაკის (ზოგად შემთხვევაში კვანტური დინამიური ქვესისტემის) ურთიერთქმედებით ფონონურ (ბოზონურ) ველთან დროის საწყის მომენტში, გავლენას არ ახდენენ რელაქსაციურ პროცესებზე და ისინი წარმოადგენენ ძვრადობებზე ტემპერატურული შესწორებების ძირითად მიზეზს (წყაროს) განხილულ მოდელში.

ბამოყენებულო ლიტერატურა

1. Davies. E.B. Quantum theory of Open Systems. London, Academic press, 1976, 325 p.
2. Li Ke-Hsueh. Physics of Open Systems. Physics Reports. 1985, 134, №1, pp. 1-85.
3. Bogolubov N.N. On the Stochastic Processes in the Dynamical Systems. Preprint E 17-10514. JINR, Dubna, 1977, 130 p.
4. Рёпке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990, 320 с.
5. Боголюбов Н.Н. (мл.). Кинетическое уравнение динамической системы, взаимодействующей с фононным полем. ТМФ, 1979, т.40, №1, с. 77-94.
6. Балабанян Г.О. Построение методом упорядоченных операторов кинетического уравнения для квантовой динамической системы, взаимодействующей с фононным полем. ТМФ, 1981, т.48, №1, с. 89-105.
7. Балабанян Г.О. Применение метода упорядоченных операторов в теории лазерных систем. Вывод асимптотических точных уравнений для излучения I. ТМФ, 1983, т.54, №1, с. 130-146.
8. Балабанян Г.О. Применение метода упорядоченных операторов в теории лазерных систем. Построение теории лазерного излучения для моделей Дикке II. ТМФ, 1983, т.54, №2, с. 277-288.
9. Балабанян Г.О. Применение метода упорядоченных операторов в теории жидких металлов. ТМФ, 1984, т.59, №1, с. 276-292.
10. Боголюбов Н.Н. (мл.), Казарян А.Р., Курбатов А.М., Нескоромный Ф.Н. Функции Грина в модели Дикке. I. Эволюционное уравнение. ТМФ, 1983, т.54, №1, с. 147-153.
11. Боголюбов Н.Н. (мл.), Казарян А.Р., Курбатов А.М., Нескоромный Ф.Н. Функции Грина в модели Дикке. II. Сверхизлучающее состояние. ТМФ, 1984, т.59, №2, с. 249-261.
12. Балабанян Г.О. Вывод асимптотически точных уравнений для излучения в модельных системах типа Дикке. ТМФ, 1983, т.56, №3, с. 418-431.
13. Казарян А.Р. К кинетическим уравнениям электрон-фононных систем. ДАН СССР, 1981, т.258, №2, с. 336-340.
14. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.). Обобщённое кинетическое уравнение для динамической системы, взаимодействующей с фононным полем. ТМФ, 1980, т.43, №1, с. 3-17.
15. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.). Кинетическое уравнение для динамической системы, взаимодействующей с фононным полем. ФЭЧАЯ, 1980, т.11, вып.2, с. 245-299.
16. Bogolubov N.N. Kinetic Equations for Electron-Phonon Systems. Preprint E 17-11922, JINR, Dubna, 1978, 122 p.
17. Hakim V., Ambegaokar V. Quantum theory of a free particle interacting with a linearly dissipative environment. Phys.Rev.A, 1985, v.32, №1, pp. 423-434.

18. Sarker S.K. Quantum transport theory for high electric field. *Phys. Rev. B* 1985, v. 32, № 3, pp. 743-749.
19. Chen Y.C., Lebowitz I.L., Liverani C. Dissipative quantum dynamics in a boson bath. *Phys. Rev. B*, 1989, v.40, №7, pp. 4664-4682.
20. Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем. Современные проблемы физики. М.: Наука, 1984, 272 с.
21. Grabert, Schramm P., Ingold G.L. Quantum Brownian Motion: Functional Integral Approach. *Physics reports*, 1988, v.168, №3, pp. 115-207.
22. Ting C.S., Lei X.L. Theory of nonlinear transport for electron-impurity systems in a strong electric field. *Solid State Communication*, 1984, v.51, № 3, pp. 53-556.
23. Алексеев В.А., Андреев А.А., Прохоренко. Электрические свойства жидких металлов и полупроводников. *УФН*, 1972, т.106, вып.3, с. 393-429.
24. Башкиров Е.К., Боголюбов Н.Н. (мл.), Шумовский А.С. Об оценке времени конверсии в макроскопических двухуровневых системах. *ТМФ*, 1983, т. 56, №3, с. 395-404.
25. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975, 527 с.
26. Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971, 456 с.
27. Кривоглаз М.А. Флуктуонные состояния электронов. *УФН*, 1973, т.111, вып.4, с. 617-654.
28. Нагаев Э.Л. Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979, 432 с.
29. Поляроны. Сборник под ред. Ю.А. Фирсова, Дж. Аппель. Поляроны, часть I. М.: Наука, 1975, с. 13-92.
30. Пекар С.И. Исследование по электронной теории кристаллов. М.-Л.: Гостехиздат, 1951, 256 с.
31. Родригес К., Федянин В.К. Метод континуального интегрирования в проблеме полярона. *ФЭЧАЯ*, 1984, т.15, вып.4, с. 870-934.
32. Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках. М.: Наука, 1985, 320 с.
33. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984, 325 с.
34. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М. Наука, 1971, 416 с.
35. Боголюбов Н.Н. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задачах о взаимодействии частицы с квантовым полем. *УМЖ*, 1950, 2, с. 3-31.
36. Боголюбов Н.Н. Избранные труды. 1970. Киев: Наукова Думка, т.2, с. 5, 77
37. Александров А.С., Кребс А.Б. Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках. *УФН*, 1992, т.162, №5, с. 1-85.
38. Клингер М.И. Автолокализованные состояния электронов и дырок. *УФН*, 1985, т. 146, вып.1, с. 105-142.
39. Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976, 640 с.

40. Кочетов Е.А., Кулешов С.П., Смондырев М.А. Функционально вариационный подход к исследованию моделей полярного типа. ФЭЧАЯ, 1982, т. 13, вып.3, с. 635-662.
41. Sumi A., Toyozawa Y. Discontinuity in the Polaron Ground State. Journal of the Physical Society of Japan, 1973, v.35, №1, pp. 137-145.
42. Харрисон У. Теория твердого тела. М.: Мир, 1965, 384 с.
43. Frohlich H. Electrons in lattice field. Advance in Physics, 1954, v 3 № 11, pp. 325-344. □
44. Feynman R.P. Slow Electrons in a Polar Crystals. Phys.Rev., 1955, v.97, № 3, pp. 660-665.
45. Попов В.Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. Москва. Атомиздат. 1976, 256 с.
46. Фейнман Р. Статистическая механика. Москва. Мир. 1975, 408 с.
47. Peeters F.M., Devreese I.T. Theory of Polaron Mobility. Solid State Physics, 1984, v. 38, pp. 82-133.
48. Osaka Y. Polaron State at a Finite Temperature. Progress of Theoretical Physics, 1959, v. 22, № 3, pp. 437-446.
49. Peeters F.M., Devreese I.T. On the Existence of a Phase Transition for the Fröhlich Polaron. Phys. Stat.Solidi(b), 1982, 112, pp. 219-229.
50. Kadanoff L.P., Revzen M. Green Function Formulation of the Feynman Model of the Polaron. Nuovo Cimento, 1964, v. XXXIII, № 2, pp. 397-412.
51. Osaka Y. Note on the Boltzmann Equation for Polarons. Journal of the Physical Society of Japan, 1973, v. 35, pp. 381-389.
52. Ken'iehi Okamoto and Shigeo Takeda. Polaron Mobility at Finite Temperature in the Case of Finite Coupling. Journal of the Physical Society of Japan. 1974, v. 37, № 2, pp. 333-339.
53. Thornber K.K. Linear and Nonlinear Electronic Transport in Electron-Phonon Systems: Self-Consistent Approach the Path-Integral Formalism. Phys. Rev., 1971, v.3, № 6, pp. 1929-1940.
54. Devreese I.T., Evrard R. and Kartheuser E. Self-Consistent equation-of-motion approach for Polarons. Phys.Rev.B, 1975, v. 12, №8, pp. 3353-3367.
55. Osaka Y. Theory of Polaron Mobility. Progress of Theoretical Physics, 1961, v. 25, №4, pp. 517-536.
56. Osaka Y. Polaron Mobility at Finite Temperature. Journal of the Physical Society of Japan, 1966, v. 21, № 3, pp. 423-433.
57. Luttinger I. H., Lu Chin-Yuan. Generalized path-integral formalism of the polaron problem and its second-order semi-invariant correction to the groundstate energy. Phys.Rev.B, 1980, v. 21, №2, pp. 4251-4263.
58. Lu Chin-Yuan, Chen Chin-Kuang. Ground-State energy of the optical polarons. Phys.Rev.B, 1982, v. 26, №8, pp. 4707-4710.
59. Feynman R.P. An operators calculus having application in quantum electrodynamics. Phys.Rev.84, 1951, №2, pp. 108-128

60. Маслов В.П. Применение метода упорядоченных операторов для получения точных решений. ТМФ, 1977, т.33, №2, с. 185-209.
61. Маслов В.П. Операторные методы. М.: Наука, 1973, 544 с.
62. Боголюбов Н.Н. (мл.), Киреев А.Н., Курбатов А.М. Метод Т-произведений в теории полярона. ТМФ, 1986, т. 67, №1, с. 115-128.
63. Заславский Г.М. Статистическая необратимость в нелинейных системах. М.: Наука, 1977, 144 с.
64. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984, 380 с.
65. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977, 368 с.
66. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.-Л.: Гостехиздат, 1946, 114 с.
67. Боголюбов Н.Н. (мл.), Киреев А.Н., Курбатов А.Н. Обобщенное уравнение движения для статистического оператора динамической подсистемы и уравнение Больцмана в теории полярона. Болг. физ. журнал, 1984, т.11, №1, с. 3-10.
68. Лось В.Ф. О квантовом уравнении Лиувилля для незамкнутой системы. ДАН СССР, 1978, т.48, №5, с.1078-1081.
69. Лось В.Ф., Мартыненко А.Г. Замкнутое кинетическое уравнение для матрицы плотности подсистемы, взаимодействующей с фононами. ТМФ, 1989, т.55, №2, с. 313-320.
70. Лось В.Ф., Мартыненко А.Г. Кинетика электронов, взаимодействующих с бозонами. Препринт института металлофизики АН УССР, 1985, 7.85, 28 с.
71. Los' V.F., Martynenko A.G. On the kinetics of subsystems interacting with bosons. Physica, 1986, 138A, pp. 518-536.
72. Исихара А. Статистическая физика. М.: Мир, 1975, 408 с.
73. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика, т. 2. М.: Мир, 1978, 400 с.
74. Zwanzig K.I. On the Identity of three Generalized Master Equations. Physica 30, 1964, pp. 1109-1113.
75. Лось В.Ф. О динамике подсистемы, взаимодействующей с термостатом. ТМФ, 1979, т.39, №3, с. 393-401.
76. Лось В.Ф. Метод гриновских супероператоров в теории малых подсистем, взаимодействующих с термостатом. II Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 25-29 август 1981. Препринт ОИМИ, D-17-81-758, с. 489-507.
77. Лось В.Ф. К теории проводимости кристаллов. ТМФ, 1984, т.60, №1, с. 107-119.
78. Kohn W., Luttinger J.M. Quantum theory of the electrical transport phenomena I. Phys.Rev., 1957, v.108, №3, pp. 590-612.

79. Luttinger J.M., Kohn W. Quantum theory of the electrical transport phenomena II. Phys.Rev., 1958, v.109, №6, pp. 1892-1909.
80. Huberman H., Chester G.V. Exact formulae for the electrical resistivity. Materials Science Center and Laboratory of atomic and Solid State Physics. Cornell University, Ithaca, New York 14853, USA, 1975, pp. 489-514.
81. Magnus H. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. Communication Pure and Applied Mathematics, 1954, 7, №4, pp. 649-673.
82. Wilcox R.M. Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics. Journal Mathematical physics, 1964, 8, №4, pp. 962-982.
83. Зубарев Д.Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике. УФН, 1960, т. LXXI, вып.1, с. 71-116.
84. Thornber K.K., Feynman R.P. Velocity Acquired by an Electron in a Finite Electric Field in a Polar Crystal. Phys.Rev.B, 1970, v.1, №10, pp. 4099-4114.
85. Peeters P.M., Devreese J.T. Nonlinear conductivity in polar semiconductors: Alternative derivation of the Thornber-Feynman theory. Phys.Rev.B., v. 23, №4, pp. 1936-1946.
86. Devreese J.T., Evrard R. On the Momentum Distribution of Electrons in Polar Semiconductors for High Electric Field. Phys. Stat.Solidi(b). 1976, 78, pp. 85-92.
87. Komiayma S., Masumi T., Kajita K. Streaming motion and population inversion of hot electrons in silver halides at crossed electric and magnetic field. Phys. Rev. B 1979, v 20, №12, pp. 5192-5216.
88. Feynman R.P., Hellwarth R.W., Iddings C.K., Platzman P.M. Mobility of Slow Electrons in a Polar Crystal. Phys. Rev., 1962, v. 127, №4, pp. 1004-1017.
89. Горшков С.Н., Родригес К., Федянин В.К. Метод континуального интегрирования в задаче об электропроводности полярона. ТМФ, 1983, т.56, №3, с. 467-475.
90. Peeters F.M., Devreese J.T. Impedance function of large polarons: An alternative derivation of the Feynman-Hellwarth-Iddings-Platzman theory. Phys. Rev. B., 1983, v. 28, №10, pp. 6051-6060.
91. Kenkre V.M., Dresden M. Theory of Electrical Resistivity. Phys.Rev.A, 1972, v.6, №2, pp. 769-775.
92. Frochlich H., Paranjape B.V. Dielectric Breakdown in Solids. Department of Theoretical Physics, University of Liverpool, 1959, pp. 21-32.
93. Langreth D.C., Kadanoff L.P. Perturbation Theoretic Calculation of Polaron Mobility, Phys. Rev., 1964, v.133, №4A, pp. 1070-1075.
94. Argyres P.N., Sigel I.L. Discussion of a new theory of electrical resistivity. Phys.Rev.B, 1974, v.9, №8, pp. 3197-3206.
95. Van Vliet K.M. Linear theory revisited. II. The master equation approach. Journal Mathematical Physics, 1979, v.20, №12, pp. 2573-2595.
96. Mahan G.D. Mobility of Polarons. Phys. Rev., 1966, v.142, №2, pp. 366-371.

97. Kadanoff L.P. Boltzmann Equation for Polarons. *Phys.Rev.*, 1963, v.130, №4, pp. 1364-1369.
98. Schultz T.D. Slow Electrons in Polar Crystals: Self-Energy, Mass and Mobility. *Phys.Rev.*, 1959, v.116, №3, pp. 526-534.
99. Garcia-Moliner F. Magnetoconductivity and Polar Scattering in Moderately Ionic Crystals. *Phys.Rev.*, 1963, v.130, №6, pp. 2290-2301.
100. Devreese J.T., Brosens F. Momentum Distribution Function of Polarons in the Ohmic Regime. *Physica Status Solidi (b)*, 1981, 108, pp. K29-K32.
101. Van Royen I., Belezny F., Devreese J.T. On the Equivalence of Different Approximations in Linear Electron Transport Theory. *Phys.Stat.Sol.(b)*, 1981, 107, 335, pp. 335-345.
102. Devreese J.T. Some Recent Developments in the Theory of Polarons. *Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals*. Ed. by J.T. Devreese and F. Peeters. New-York and London: Plenum Press, 1984, pp. 165-183.
103. Peeters F.M., Devreese J.T. The $\frac{3}{2}kT$ problem in the low-temperature polaron mobility theories. *Phys. Stat.Sol.(b)*, 1983, 115, pp. 539-543.
104. Toyozawa Y. Self-trapping of an electron by the acoustical mode of lattice vibration. *Progr. Theor.Phys.*, 1961, v.26, №29, pp. 1127-1142.
105. Peeters F.M., Devreese J.T. Acoustical polaron in three dimensions: The ground-state energy and the self-trapping transition. *Phys.Rev.B*, 1985, v.32, №6, pp. 3515-3521.
106. Займан Дж. Электроны и фононы. М.: Мир, 1962, 488 с.
107. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986, 304 с.
108. Конуэлл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М.: Мир, 1970, 384 с.
109. Котия Б. А. О кинетике квантовых динамических систем, взаимодействующих с бозонным полем. Часть 1. Формализм упорядоченных операторов и методика исключения бозонных амплитуд. *Georgian Engineering News*, 2005, N4, стр. 7-17.
110. Котия Б. А. О кинетике квантовых динамических систем, взаимодействующих с бозонным полем. Часть II. Эволюционные уравнения для корреляционных функций и функций Грина. *Georgian Engineering News*, 2006, N1, стр. 7-17.
111. Kotiya B. A., Los' V. F. To the theory of transport phenomena in open systems. The Norwegian Academy of Technological Sciences. The Lars Onsager symposium. Coupled Transport processes and phase Transitions, June 2-4, 1993, Trondheim, Norway, Abstracts, p.89.
112. კოტია ბ. გადატანის მოვლენების თეორია ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის პროფესორ-მასწავლებელთა სამეცნიერო-ტექნიკური კონფერენცია. პროგრამა, 16-19 ნოემბერი, თბილისი, 1993. I - თეორიული ფიზიკა, გვ.32.
113. Kotiya B. A., Los' V. F., Gigilashvili T. G., On the theory of transport phenomena in electron- phonons' systems. The 20th IUPAP International Conference on Statistical

- Physics. Paris, UNESCO, Sorbonne. July 20-25, 1998. Book of Abstracts, Nonequilibrium systems, p.7.
114. Kotiya B. A. Los' V.F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. Application in Polaron mobility. Proceedings in Nonlinear Science. Polarons and Applications. Ed. Lakhno V. D. (John Wiley and Sons, Chichester, 1994), pp. 407-418.
 115. Kotiya B. A. Los' V. F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. Application in Polaron mobility. International Workfshop "Polarons and Applications", May 23-31, 1992, Puschino, Russia, Abstracts, p.18.
 116. Котия Б. А. Лось В. Ф. К теории кинетики полярона. Всесоюзная конференция: Современные проблемы статистической физики. Харьков, 14-17 мая 1991 г. Сборник аннотации, стр. 1-140. Тезисы докладов, стр. 83.
 117. Kotiya B. A., Los' V.F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. The 18th IUPAP International Conference on Statistical Physics. Berlin, 2-8 August, 1992, Programme and Abstracts, Exact and Rigorous Results, p.133.
 118. Kotiya B. A. , Los' V. F. Exact Equations for correlation Functions and Density Matrix of a Subsystem Interacting with a Heat Bath and their Application in the Polaron Mobility. European Physical Society. Eps9. Trends in Physics. Firenze. Italy. September 14-17, 1993. Abstracts. Symposium 29. Statistical Mechanics: Rigorous Results. ED. Systems, p.130.
 119. Kotiya B.A. On the theory of exact equations for correlation functions of the system interacting with a thermostat. Georgian Engineering News, 2005, №1, pp. 7-13.
 120. Kotiya B.A. On the theory of low- temperature electron mobility in the electron-phonon system and Frohlich's model of the polaron. Georgian Engineering News, 2005, №2, pp.11-21.
 121. Kotiya B.A., Los' V.F. Low- Temperature Electron Mobility of Acoustical Polaron. In Perspectives of Polarons. Editors: G.N. Chuev and V.D. Lakhno. Russian Academy of Sciences. World Scientific Singapore. New Jersey. London. Hong Kong. 1996. pp. 216-222. □
 122. Котия Б.А., Лось В.Ф. К теории низкотемпературной подвижности электрона в модели акустического полярона. Российская Академия Наук. Известия Академии Наук. Серия физическая, т.59, №8, 1995г.:Материалы Всесоюзного Рабочего Совещания « Автлокализованные состояния в упорядоченных и неупорядоченных системах». Пущино. Август 1995г.,стр. 133-138.
 123. კოტია ბ., ლოსი ვ. პოლარონის ძვრადობის თეორიისთვის. საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის მოამბე. ტ.149, №1, 1994 წ., თბილისი, ფიზიკა, გვ. 61-68.
 124. Kotiya B.A., Los' V.F. On the theory of transport phenomena in the polaron's systems. The 19th IUPAP International Conference on Statistical Physics. Xiamen 31 July-4 August, 1995. Programme and Abstracts. Transport and Relaxation, p.42.
 125. Лось В. Ф., Котия Б.А. Подвижность полярона в обобщённой модели Фейнмана при низких температурах. 24-е Всесоюзное совещание по физике низких температур. Тезисы докладов: часть II:Электронные явления при низких температурах. Тбилиси, 8-10 сентября, 1986 г., стр. 201-202.

ბოზონური (ფონონური) ამპლიტუდების გამორიცხვა ქრონოლოგიურ და ანტიქრონოლოგიურ T-ნამრავლთა დახმარებით

განვიხილოთ ახლა უფრო დაწვრილებით ბოზონური (ფონონური) ცვლადების გამორიცხვის მეთოდი (ტექნიკა) ქრონოლოგიურ და ანტიქრონოლოგიურ T-ნამრავლთა დახმარებით ჩვენს მიერ წარმოდგენილი იმ კლასის სისტემებისათვის, რომლებიც აღიწერებიან (2.1), (2.2) სახის ჰამილტონიანით [109].

ფონონური ცვლადების (ამპლიტუდების) გამორიცხვა ჩავატაროთ H_{int} ჰამილტონიანისთვის, რომელიც წარმოადგენს წრფივ ფორმას ბოზე-ამპლიტუდებისგან. ცხადია, რომ კომუტატორები: $[\tilde{H}_{\text{int}}(\xi), \tilde{H}_{\text{int}}(\tau)]_-$, $[\tilde{H}_{\text{int}}(\xi), \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda)]_-$, $[\tilde{H}_{\text{int}}(\gamma), \tilde{H}_{\text{int}}(\lambda)]_-$ - წარმოადგენენ C სიდიდეებს (რიცხვებს) ბოზონური (ფონონური) ველის მიმართ.

თუ გამოვიყენებთ მაგნუსის ფორმულას [6,81] და ვეილის იგივეობას [6,82] ჩვენ გვექნება:

$$\begin{aligned}
 T_{\Sigma} \exp \left[- \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] &= \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\gamma \int_0^{\gamma} d\lambda [\tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda)]_- \right] \times \\
 &\quad \times \exp \left[- \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right]; \\
 T_{a\Sigma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] &= \exp \left[\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\xi \int_0^{\xi} d\tau [\tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau)]_- \right] \times \\
 &\quad \times \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right]; \\
 T_{\Sigma} \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right] &= \exp \left[\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\xi \int_0^{\xi} d\tau [\tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau), \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi)]_- \right] \times \\
 &\quad \times \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right].
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

განვიხილოთ ახლა შემდეგი გამოსახულება:

$$\begin{aligned}
& P_{\Sigma}(\beta) \left[T_{\Sigma} \exp \left[- \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] \cdot T_{a\Sigma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] \times \right. \\
& \times T_{\Sigma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] \left. \right] = \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\gamma \int_0^{\gamma} d\lambda \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right]_- \right] \times \\
& \times \exp \left[\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\gamma \int_0^{\xi} d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right]_- \right] \cdot \exp \left[\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\xi \int_0^{\xi} d\tau \times \right. \\
& \times \left. \left[\tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau), \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \right]_- \right] \cdot I(t, \beta),
\end{aligned} \tag{12}$$

სადაც, განსაზღვრის თანახმად, $I(t, \beta)$ ფუნქციონალისთვის გვაქვს შემდეგი მნიშვნელობა:

$$\begin{aligned}
I(t, \beta) = P_{\Sigma}(\beta) \{ & \exp \left[- \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] \cdot \\
& \cdot \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right] \}.
\end{aligned}$$

და ბოლოს, თუ გამოვიყენებთ თანაფარდობებს:

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\gamma \int_0^{\gamma} d\lambda \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right]_- \right] + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\beta} d\gamma \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma) = \\
& = \int_0^{\beta} d\gamma \int_0^{\gamma} d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda); \\
& \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\xi \int_0^{\xi} d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right]_- - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi) = \\
& = - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau); \\
& \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\xi \int_0^{\xi} d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau), \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \right]_- - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) = \\
& = - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi); \\
& \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\xi \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau), \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \right]_- + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) + \\
& + \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} d\xi \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi); \\
& - \frac{i}{2\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^t d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda), \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right]_- - \frac{i}{2\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) - \\
& - \frac{i}{2\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) = - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{i}{2\hbar_0} \int_0^\beta d\lambda \int_0^t d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda), \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right]_- + \frac{i}{2\hbar_0} \int_0^\beta d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) + \\ & + \frac{i}{2\hbar_0} \int_0^\beta d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) = \frac{i}{\hbar_0} \int_0^\beta d\lambda \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau). \end{aligned}$$

და შევასრულებთ გასაშუალოებას ბოზონური (ფონონური) ველის მდგომარეობების მიხედვით, ჩვენ მივიღებთ [109]:

$$\begin{aligned} P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\gamma) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{-\hbar\omega(k)(\gamma-\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \gamma) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) + N_k(\beta) e^{\hbar\omega(k)(\gamma-\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \gamma) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \left. \right]; \\ P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\xi) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)(\xi-\tau)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \xi) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) + N_k(\beta) e^{i\omega(k)(\xi-\tau)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \xi) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \tau) \left. \right]; \\ P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \tau) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi) + N_k(\beta) e^{i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \tau) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi) \left. \right]; \\ P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\xi) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{-i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \tau) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \xi) + N_k(\beta) e^{i\omega(k)(\tau-\xi)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \xi) \left. \right]; \\ P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{\omega(k)(i\tau-\hbar\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \tau) + N_k(\beta) e^{-\omega(k)(i\tau-\hbar\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \tau) \left. \right]; \\ P_\Sigma(\beta) \left[\tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right] &= \sum_k \left[(1 + N_k(\beta)) e^{\omega(k)(i\tau-\hbar\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^L(s, \lambda) \times \right. \\ &\times \tilde{C}_{kH_0}^{+R}(s, \tau) + N_k(\beta) e^{-\omega(k)(i\tau-\hbar\lambda)} \tilde{C}_{kH_0}^{+L}(s, \lambda) \tilde{C}_{kH_0}^R(s, \tau) \left. \right]. \end{aligned} \tag{1.3}$$

მარტივი გამოთვლების ჩატარების შემდეგ ადვილად ვიპოვით $\exp[\Phi_{L,R,S}(t, \beta)]$ ფუნქციონალის საბოლოო გამოსახულებას [109]:

$$\begin{aligned} P_\Sigma(\beta) \left[T_\Sigma \exp \left[- \int_0^\beta d\lambda \tilde{H}_{\text{int}}^L(\lambda) \right] \cdot T_{a\Sigma} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^L(\tau) \right] \times \right. \\ \left. \times T_\Sigma \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{\text{int}}^R(\tau) \right] \right] = \exp[\Phi_{L,R,S}(t, \beta)]; \quad t > 0, \quad \beta > 0 \end{aligned} \tag{1.4}$$

და (1.4) ფორმულით გამოხატული $\Phi_{L,R,S}(t, \beta)$ ფუნქციონალის მნიშვნელობა განისაზღვრება (2.20) გამოსახულებით.

დისერტაციის თემატიკის დაკავშირებით გამოქვეყნებული

შემდეგი ნაშრომები:

1. Лось В.Ф., Котия Б.А. Подвижность полярона в обобщенной модели Фейнмана при низких температурах. 24-е Всесоюзное Совещание по физике низких температур. Тезисы докладов: часть II: Электронные явления при низких температурах. Тбилиси, 8-10 сентября, 1986 г., стр. 201-202.
2. Котия Б.А., Лось В.Ф. К теории кинетики полярона. Всесоюзная конференция: Современные проблемы статистической физики. Харьков, 14-17 мая 1991 г. Сборник аннотации, стр. 1-140. Тезисы докладов, стр. 83.
3. Kotiya B.A., Los' V.F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. The 18th IUPAP International Conference on Statistical Physics. Berlin, 2-8 August, 1992, Programme and Abstracts. Exact and Rigorous Results, p. 133.
4. Kotiya B.A., Los' V.F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. Application in Polaron mobility. International Workshop "Polarons and Applications", May 23-31, 1992, Puschino, Russia. Abstracts, p. 18.
5. Kotiya B.A., Los' V.F. Exact equations for subsystem correlation functions and density matrix. Application in Polaron mobility. Proceedings in Nonlinear Science. Polarons and Applications. Ed. Lakhno V.D. (John Wiley and Sons, Chichester, 1994), pp. 407-418 (იმპაქტ. დატვირთვის მქონე).
6. Kotiya B.A., Los' V.F. To the theory of transport Phenomena in open systems. The Norwegian Academy of Technological Sciences. The Lars Onsager Symposium. Coupled Transport Processes and Phase Transitions. June 2-4, 1993, Trondheim, Norway. Abstracts, p. 89.
7. Kotiya B.A., Los' V.F. Exact Equations for Correlation Functions and Density Matrix of a Subsystem Interacting with a Heat Bath and their Application in the Polaron Mobility. European physical Society. Eps9. Trends in Physics. Firenze. Italy. September 14-17, 1993. Abstracts. Symposium 29. Statistical Mechanics: Rigorous Results. ED. Systems, p. 130.
8. კოტია ბ. გადატანის მოვლენების თეორია ელექტრონ-ფონონური სისტემისათვის. საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის პროფესორ-მასწავლებელთა სამეცნიერო-ტექნიკური კონფერენცია. პროგრამა, 16-19 ნოემბერი, თბილისი, 1993 წ. I-თეორიული ფიზიკა, გვ. 32.
9. კოტია ბ., ლოსი ვ. პოლარონის ძვრადობის თეორიისთვის. საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის მოამბე. ტ. 149, №1, 1994 წ., თბილისი, ფიზიკა, გვ. 61-68.
10. Котия Б.А., Лось В.Ф. К теории низкотемпературной подвижности электрона в модели акустического полярона. Российская Академия Наук. Известия Академии Наук. Серия физическая, т. 59, №8, 1995 г.: Материалы Всесоюзного рабочего совещания «Автолокализованные состояния в упорядоченных и неупорядоченных системах». Пущино. Август 1995 г., стр.133-138 (იმპაქტ. დატვირთვის მქონე).
11. Kotiya B.A., Los' V.F. Low-Temperature Electron Mobility of Acoustical Polaron. In Perspectives of Polarons. Editors: G.N. Chuev and V.D. Lakhno. Russian Academy of Sciences. World Scientific Singapore. New Jersey. London. Hong Kong. 1996, p 216-222 (იმპაქტ. დატვირთვის მქონე).

12. Kotiya B.A., Los' V.F. On the theory on Transport phenomena in the Polaron's Systems. The 19th IUPAP International Conference on Statistical Physics. Xiamen 31 July-4 August, 1995. Programme and Abstracts. Transport and Relaxation, p. 42.
13. Kotiya B.A., Los' V.F. Gigilashvili T.G. On the theory of transport phenomena in. electron-phonons'systems. The 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics. Paris, UNESCO, Sorbonne. July 20-25, 1998. Book of Abstracts, Nonequilibrium systems, p. 7.
14. Kotiya B.A. On the theory of exact equations for correlation functions of the system Interacting with a thermostat. Georgian Engineering News, 2005, №1, pp. 7-13.
15. Kotiya B.A. On the theory of low-temperature electron mobility in the electron-phonon system and Frohlich's model of the Polaron. Georgian Engineering News, 2005, №2, pp. 11-21.
16. Котия Б.А. О кинетике квантовых динамических систем, взаимодействующих с бозонным полем. Часть I. Формализм упорядоченных операторов и методика исключения бозонных амплитуд. Georgian Engineering News, 2005, №4, стр. 7-17.
17. Котия Б.А. О кинетике квантовых динамических систем, взаимодействующих с бозонным полем. Часть II. Эволюционные уравнения для корреляционных функций и функции Грина. Georgian Engineering News, 2006, №1, стр. 7-17.