1984 г. Ноябрь Том 144, вып. 3

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

538.911

КАК ВЫГЛЯДИТ ИНТЕГРАЛ СТОЛКНОВЕНИЙ ДЛЯ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ

Б. И. Стурман

Система электронов или фононов, упруго рассеивающихся на случайно расположенных статических дефектах кристалла, представляет один из простейших объектов кинетики. Однако, как это ни парадоксально, в подавляющем большинстве учебников и монографий (например в [1-10]) описание этого объекта не вполне правильно. Исторически сложилось убеждение, что интеграл столкновений кинетического уравнения

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt}=I_{\mathbf{k}}, \tag{1}$$

описывающий упругое рассеяние, имеет вид

$$I_{\mathbf{k}}=\sum_{\mathbf{k}'}\left[W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}n_{\mathbf{k}'}(1\mp n_{\mathbf{k}})-W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}}(1\mp n_{\mathbf{k}'})\right], \tag{2}$$

где $n_{\mathbf{k}}$ — функция распределения, а $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ характеристика центров рассеяния — вероятность перехода в единицу времени из состояния с импульсом $\mathbf{k}'$ в состояние с импульсом $\mathbf{k}$. Верхний знак относится к фермионам, нижний к бозонам; для определенности мы будем говорить о первых как об электронах, а о вторых как о фононах. Считается, что (2) выражает баланс приходов и уходов с учетом типа статистики частиц. Написав (2), значительная часть авторов [1-6] делает следующий шаг — апеллирует к принципу детального равновесия (ПДР)

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}=W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \tag{3}$$

и приводит интеграл столкновений к виду

$$I_{\mathbf{k}}=\sum_{\mathbf{k}'}W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(n_{\mathbf{k}'}-n_{\mathbf{k}}). \tag{4}$$

При этом утверждается, что (3) является универсальным законом, вытекающим из принципа микрообратимости (т. е. из инвариантности уравнений движения к обращению времени). В качестве дополнительного аргумента часто используют рассуждение о том, что (3) обеспечивает обращение в нуль интеграла столкновений на равновесном распределении частиц.

В настоящей заметке, во-первых, мы хотим обратить внимание на то, что ПДР не имеет приписываемого ему общего характера и выполняется лишь при частных предположениях о свойствах среды. Вторая и основная наша цель — убедить читателей, что в отсутствие детального равновесия выражение (2) ошибочно, обосновать правильное выражение для интеграла столкновений и исследовать его основные свойства.

Вопрос о области применимости соотношения (3), вообще говоря, обсуждался в литературе [11-13]. Как из квантовой, так и из классической механики известно, что инвариантность уравнений движения к обращению времени приводит не к соотношению (3), а к равенству

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{-\mathbf{k}',\,-\mathbf{k}}, \tag{5}$$

называемому часто теоремой взаимности [14]. Детальное равновесие имеет место в том случае, когда (5) дополняется весьма частным предположением о наличии инвариантности к пространственной инверсии, $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{-\mathbf{k},\,-\mathbf{k}'}$. Для кристаллов без центра симметрии это предположение не выполняется, и ПДР не справедлив *). Нарушение ПДР и выполнение соотношения (5) легко понять из наглядных соображений (рис. 1).

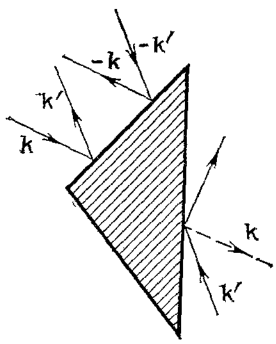

Рис. 1.

Вероятность упругого рассеяния $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ удовлетворяет интегральному соотношению

$$\sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}, \tag{6}$$

установленному Штюкельбергом и вытекающему из унитарности S-матрицы [16]. Этого условия достаточно для доказательства обращения $I_{\mathbf{k}}$ в нуль в термодинамическом равновесии.

Уже сегодня известны наблюдаемые явления, связанные с отсутствием детального равновесия. Это фотогальванический эффект [15], аномальный эффект Холла [17], кинетика газов с вращательными степенями свободы [18]. Поэтому вопрос о виде кинетического уравнения в отсутствие детального равновесия представляет не только академический, но и практический интерес **).

На ошибочность соотношения (2) прямо указывает нефизический характер его следствий. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим случай классического волнового поля, т. е. случай бозе-статистики в пределе $n \gg 1$. В классическом пределе (2) дает

$$I_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} W^a_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'}, \quad W^a_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \tag{7}$$

Вопреки здравому смыслу рассеяние оказывается полностью асимметричным и нелинейным. Фактически (7) допускает, что из линейных по амплитудам волн классических уравнений движения можно получить нелинейное уравнение для интенсивностей. Как легко убедиться, столкновения, описываемые (7), не увеличивают энтропию системы волн; они должны были бы приводить к образованию сингулярностей в распределении волн в $\mathbf{k}$-пространстве, к резким аномалиям оптических и тепловых свойств кристаллов.

Ошибка, допускаемая при написании (2), состоит в неправомерном обобщении результатов, полученных в первом борновском приближении, на высшие порядки теории возмущений по потенциалу дефекта. В первом борновском приближении, независимо от свойств симметрии рассеивающего центра, $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ [12, 14], так что нелинейные вклады в (2) автоматически сокращаются. В высших порядках теории возмущений для $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, когда проявляется отсутствие детального равновесия, возникают суммирования по промежуточным состояниям. Так, во втором борновском приближении

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 2\pi N_0 \delta(\omega-\omega') \left(|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 + 2\,\mathrm{Re} \sum_{\mathbf{k}''} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{\omega-\omega''+i0} \right), \tag{8}$$

*) Отсутствие детального равновесия может быть связано и с магнитными эффектами, нарушающими соотношение (5) [15].

**) В известном учебнике [19] рассмотрены лишь те физические ситуации, в которых $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$.

где N_0 — концентрация дефектов, $V_{\mathbf{kk}'} = V^*_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ — матричный элемент возмущения для отдельного центра, $\omega_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсии (энергия) квазичастиц *). Борновский ряд для $W_{\mathbf{kk}'}$ не содержит чисел заполнения промежуточных состояний. Однако вполне ясно, что при исследовании кинетических свойств многочастичной системы их учет столь же необходим, как и учет заполнения начальных и конечных состояний. Следовательно, использование выражения (2) вне рамок первого борновского приближения некорректно. Для получения интеграла столкновений в отсутствие детального равновесия необходимо применять последовательную процедуру вывода кинетического уравнения, явно опирающуюся на аппарат вторичного квантования.

Замечательно, что конечный результат оказывается универсальным и простым. Как для электронов, так и для фононов интеграл столкновений имеет вид (4), где $W_{\mathbf{kk}'} \neq W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ — точная вероятность рассеяния. Он совпадает с интегралом столкновений классического газа частиц или невырожденного электронного газа. Можно сказать, что сокращение нелинейных по $n_{\mathbf{k}}$ вкладов в $I_{\mathbf{k}}$, связанных с «приходом» и «уходом», происходит не только в первом борновском приближении, но и в высших порядках теории возмущений. Учитывая (6), кинетическое уравнение для упругого рассеяния можно окончательно записать в виде

$$\frac{dn_{\mathbf{k}}}{dt} = \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{kk}'} n_{\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}). \tag{9}$$

К правильному выражению для интеграла столкновений по-видимому впервые пришли Кон и Латтинжер [20]. Их способ вывода был весьма громоздок. Фактически же конечный результат (9) лежит на поверхности; его можно усмотреть уже из вида исходных динамических уравнений движения. Рассмотрим гамильтониан взаимодействия, ответственный за упругое рассеяние. В представлении вторичного квантования

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} a^+_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}, \tag{10}$$

где $a^+_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения частиц. Легко убедиться, что независимо от типа статистики частиц (т. е. от типа перестановочных соотношений для a^+ и a) коммутатор

$$[\hat{V},\ a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}] = \sum_{\mathbf{k}_1} (V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}'} - V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1}). \tag{11}$$

Таким образом, в соответствии с правилами квантовой механики [14], уравнения движения средних $\langle a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} \rangle$ оказываются одинаковыми для электронов и фононов и линейными:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + i(\omega_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{k}})\right] \langle a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} \rangle = i \sum_{\mathbf{k}_1} (V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}} \langle a^+_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}'} \rangle - V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1} \langle a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}_1} \rangle). \tag{12}$$

Соотношение (12) описывает также эволюцию классического волнового поля, если под $a_{\mathbf{k}}$ понимать нормальную амплитуду волны, подчиняющуюся гамильтоновскому уравнению движения [21]

$$\frac{\partial a_{\mathbf{k}}}{\partial t} + i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} = -i \frac{\delta V\{a^*, a\}}{\delta a^*_{\mathbf{k}}} \tag{13}$$

(знак $\langle \ldots \rangle$ при этом означает усреднения по ансамблю волн).

Дальнейшая процедура получения из (12) кинетического уравнения для функции распределения $n_{\mathbf{k}} = \langle a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle$ вообще не содержит элементов, зависящих от типа статистики частиц [22], она вполне аналогична использованной

*) Мы пользуемся системой единиц, в которой $\hbar = 1$.

в [19] схеме получения классического кинетического уравнения. Мы должны написать боголюбовскую цепочку уравнений для средних (в классическом случае средних по ансамблю). Первое уравнение этой цепочки связывает $n_{\mathbf{k}}$ со средним $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}\langle a^{+}_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}_1}\rangle$, второе выражает это среднее через величину более высокого порядка по V и т. д. На последнем шаге, номер которого зависит от требуемой точности учета взаимодействия, мы размыкаем цепочку, пренебрегая корреляциями и полагая $\langle a^{+}_{\mathbf{k}_i}a_{\mathbf{k}_j}\rangle = \delta_{\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j}n_{\mathbf{k}_i}$. Из (12) заведомо ясно, что получающееся кинетическое уравнение должно быть линейным по $n_{\mathbf{k}}$; следовательно, оно совпадает с уравнением (9), справедливость которого для описания кинетических свойств невырожденного газа частиц очевидна. Вероятность $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ представляет обычный борновский ряд по степеням $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Критерием применимости кинетического уравнения служит обычное неравенство $\omega_{\mathbf{k}} \gg \gamma_{\mathbf{k}}$, где $\gamma_{\mathbf{k}}$ частота электрон-примесных или фонон-примесных столкновений.

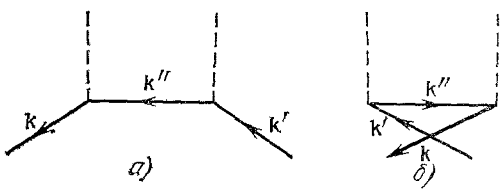

Рис. 2.

Следует сказать, что во втором борновском приближении к уравнению (9) нетрудно прийти традиционным способом, основанным на представлении интеграла столкновений в виде разности скоростей прихода частиц в состояние $|\mathbf{k}\rangle$ и ухода из него *). Представляет интерес проследить, каким образом при этом осуществляется сокращение нелинейных слагаемых. Для простоты мы ограничимся случаем статистики Бозе. Вклад в $I_{\mathbf{k}}$, связанный с процессами прихода, с точностью до членов порядка V^3 записывается как

$$I^{\text{пр}}_{\mathbf{k}} = 2\pi N_0 \sum_{\mathbf{k}'} \delta(\omega-\omega') \Big| \langle n'-1,\ n+1|V|n',\ n\rangle + \sum_{s} \frac{\langle n'-1,\ n+1|V|s\rangle\langle s|V|n',\ n\rangle}{E-E_s+i0} \Big|^2. \qquad (14)$$

Эта формула имеет строгое обоснование в теории рассеяния [23], согласно которой вероятность перехода в единицу времени из состояния a в состояние b выражается через квадрат модуля матричного элемента $\hat{T}$-оператора, представимого в виде ряда по степеням $\hat{V}$:

$$\begin{gathered} W_{ba} = 2\pi N_0 |\hat{T}_{ba}|^2\, \delta(E_a - E_b), \\ \hat{T} = \hat{V} + \hat{V}(E - H_0 + i0)^{-1}\hat{V} + \ldots; \end{gathered} \qquad (15)$$

здесь $H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a^{+}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}$ — невозмущенный гамильтониан системы.

Возможны два типа промежуточных состояний $|s\rangle$. Состояния первого типа, $|s\rangle = |n''+1,\ n'-1\rangle$, отвечают графику $а$) на рис. 2. Для них $E - E_s = \omega - \omega''$. Состояниям второго типа, $|s\rangle = |n''-1,\ n+1\rangle$, отвечает график $б$) на рис. 2 и разность энергий $E - E_s = \omega'' - \omega$. Используя явное выражение (10) для $\hat{V}$, преобразуем квадрат модуля, входящий в (14), к виду

$$n'(n+1)\left\{|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 + 2\,\mathrm{Re}\sum_{k''}\left[\frac{n''}{\omega''-\omega+i0} + \frac{n''+1}{\omega-\omega''+i0}\right] V_{\mathbf{k}\mathbf{k}''}V_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'}V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\right\}. \qquad (16)$$

Учитывая далее эрмитовость $\hat{V}$ и известное тождество $(x + i0)^{-1} = (P/x) - i\pi\delta(x)$, где P — символ главного значения, легко убедиться в сокраще-

*) А также с помощью диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов [19].

нии кубичных по $n_{\mathbf{k}}$ вкладов в $I_{\mathbf{k}}^{\text{пр}}$. Окончательно получим

$$I_{\mathbf{k}}^{\text{пр}} = \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} (1 + n_{\mathbf{k}}) W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \tag{17}$$

где $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ задается формулой (8).

Скорость ухода частиц $I_{\mathbf{k}}^{\text{ух}}$ рассчитывается аналогично. Она, как вполне очевидно, описывается формулой (14), если во входящем в нее квадрате модуля (16) переставить индексы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$. Окончательное выражение для $I_{\mathbf{k}}^{\text{ух}}$ следующее:

$$I_{\mathbf{k}}^{\text{ух}} = \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}} (1 + n_{\mathbf{k}'}) W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}; \tag{18}$$

оно не совпадает с выражением для $I_{\mathbf{k}}^{\text{ух}}$, даваемым формулой (2).

В итоге сокращаются и квадратичные по $n_{\mathbf{k}}$ слагаемые, и мы вновь приходим к уравнениям (4), (9). То обстоятельство, что в $I_{\mathbf{k}}^{\text{ух}}$ входит вероятность $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, а не $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, связано с наличием в фигурной скобке (16) вкладов, содержащих $\delta(\omega - \omega'')$. С одной стороны, эти вклады определяют антисимметричную вероятности рассеяния, $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{a}$ [13]; с другой стороны, они меняют знак при замене $\mathbf{k} \rightleftarrows \mathbf{k}'$. При наличии центра симметрии $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ и эти вклады обращаются в нуль.

Полезно отметить, что разделение интеграла столкновений (9) на уходный и приходный члены (17), (18) носит при $n_{\mathbf{k}} \gtrsim 1$ весьма условный характер, нелинейность величин $I_{\mathbf{k}}^{\text{пр, ух}}$ по числам заполнения не может проявляться ни в одном кинетическом эффекте.

Сделаем два обобщения. При учете неупругости рассеяния (рассеяние электронов на фононах) вывод об отсутствии в $I_{\mathbf{k}}$ нелинейных по $n_{\mathbf{k}}$ слагаемых теряет силу. Однако и в этом случае формула (2) остается справедливой только в первом борновском приближении. В высших порядках теории возмущений в $I_{\mathbf{k}}$ появятся вклады, содержащие n^3, n^4 и т. д. Аналогичное заключение можно сделать и при парном взаимодействии частиц, описываемом гамильтонианом вида $a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} a_3 a_4$; и здесь известное выражение для интеграла столкновений

$$I_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} [(1 \mp n)(1 \mp n') n_1 n_2 - (1 \mp n_1)(1 \mp n_2) n n'],$$

справедливо, вообще говоря, лишь в первом борновском приближении, когда $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = W_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2;\mathbf{k}\mathbf{k}'}$.

Рассмотрим некоторые общие свойства кинетического уравнения (9). Используя соотношение (6), нетрудно убедиться, что оно обеспечивает эволюцию электронной функции распределения $n_{\mathbf{k}}$, согласующуюся с принципом Паули — *если при $t = 0$ выполнено неравенство $n_{\mathbf{k}} \leqslant 1$, то оно остается справедливым и во все последующие моменты времени*.

Докажем для уравнения (9) H-теорему Больцмана о возрастании энтропии системы электронов и фононов. Энтропия неравновесных ферми- и бозе-газов определяется формулами [24]

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{F}} &= -\sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}} \ln n_{\mathbf{k}} + (1 - n_{\mathbf{k}}) \ln (1 - n_{\mathbf{k}})], \\ S_{\mathrm{B}} &= -\sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}} \ln n_{\mathbf{k}} - (1 + n_{\mathbf{k}}) \ln (1 + n_{\mathbf{k}})]. \end{aligned} \tag{19}$$

В классическом пределе, т. е. при $n_{\mathbf{k}} \ll 1$ для электронов и при $n_{\mathbf{k}} \gg 1$ для фононов, эти выражения переходят в

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{F}}^{0} &= -\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \ln n_{\mathbf{k}}, \\ S_{\mathrm{B}}^{0} &= \sum_{\mathbf{k}} \ln n_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \tag{20}$$

Покажем, что (9) обеспечивает такую эволюцию системы, при которой $\dot{S} \geqslant 0$, причем равенство имеет место только по достижению равновесного распределения $n(\omega_{\mathbf{k}}) = \overline{n_{\mathbf{k}}}(t = 0)$; черта означает усреднение по поверхности равной частоты. Доказательство начнем со случая невырожденного электронного газа. Согласно (9), (20),

$$\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} - W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'}) \ln \frac{n_{\mathbf{k}}}{n_{\mathbf{k}'}}. \tag{21}$$

В отсутствие детального равновесия часть из членов этой суммы может быть отрицательной, поэтому H-теорема не является очевидной. Совершим в (21) замену

$$n_{\mathbf{k}} = \overline{n}(\omega_{\mathbf{k}})\, e^{x_{\mathbf{k}}}. \tag{22}$$

Поскольку $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \propto \delta(\omega - \omega')$, то равновесию отвечает $x_{\mathbf{k}} = 0$. Учитывая (6), убедимся прежде всего, что $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(\mathrm{x} = 0) = 0$, а при малых отклонениях от равновесия ($|x_{\mathbf{k}}| \ll 1$) $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} > 0$. Далее убедимся в существовании тождества

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}}{\partial x_{\mathbf{k}}} = \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}. \tag{23}$$

Из него следует, что экстремумы $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(x_{\mathbf{k}})$ могут достигаться лишь в тех точках, где $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} = 0$. Если же допустить смену знака функции $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(\mathrm{x})$, то из положительности ее в окрестности нуля следует существование экстремальной (седловой) точки, в которой $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} > 0$. Мы пришли к противоречию. Следовательно, $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} > 0$ при любых отклонениях от равновесия.

Как видно из (9), (19), (20), величину $\dot{S}_{\mathrm{F}}$ можно записать как $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(n_{\mathbf{k}}) + \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(1 - n_{\mathbf{k}})$. Поскольку выше мы доказали неотрицательность $\dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}$ формально при любом $n_{\mathbf{k}}$, то справедливость H-теоремы для ферми-частиц становится очевидной.

Перейдем к бозе-частицам. Рассмотрим

$$\dot{S}_{\mathrm{B}}^{0} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (e^{x_{\mathbf{k}} - x_{\mathbf{k}'}} - 1). \tag{24}$$

Справедливость H-теоремы при малых отклонениях от равновесия вновь проверяется непосредственно. Для доказательства ее при конечных отклонениях учтем тождество

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \dot{S}_{\mathrm{B}}^{0}}{\partial x_{\mathbf{k}}} = 0. \tag{25}$$

Введем функцию $R(\mathrm{x}) = \dot{S}_{\mathrm{B}}^{0} - \lambda \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}$, где $\lambda < 1$ — положительный параметр. При $x_{\mathbf{k}} = 0$ $R = 0$, а при $|x_{\mathbf{k}}| \ll 1$ $R > 0$. Учитывая (23) (25), имеем

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial R}{\partial x_{\mathbf{k}}} = -\lambda \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0} \leqslant 0. \tag{26}$$

Следовательно, $R(\mathrm{x})$ не имеет экстремальных точек, кроме минимума в нуле, и есть неотрицательная величина. Отсюда вытекает положительность $\dot{S}_{\mathrm{B}}^{0}(\mathrm{x})$.

При произвольных числах заполнения $\dot{S}_{\mathrm{B}}(n_{\mathbf{k}})$ формально можно представить в виде

$$\dot{S}_{\mathrm{B}}(n_{\mathbf{k}}) = \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(n_{\mathbf{k}}) - \dot{S}_{\mathrm{F}}^{0}(1 + n_{\mathbf{k}}). \tag{27}$$

Учитывая тождество

$$\frac{d}{d\xi}\dot{S}_F^0(n_k+\xi) = -\dot{S}_B^0(n_k+\xi), \tag{28}$$

в котором ξ — произвольный параметр, имеем $\dot{S}_B^0(n_k) \geqslant 0$. Таким образом, H-теорема доказана для всех случаев упругого рассеяния.

Автор признателен В. И. Белиничеру, В. Л. Гуревичу и Л. П. Питаевскому за обсуждения и полезные замечания.

Институт автоматики и электрометрии
СО АН СССР, Новосибирск

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Займан Дж. Электроны и фононы. — М.: ИЛ, 1962. — С. 246.
2. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. — М.: Наука, 1978. — С. 464.
3. Маделунг О. Теория твердого тела. — М.: Наука, 1980. — С. 212.
4. Блатт Ф. Физика электронов проводимости в твердых телах. — М.: Мир, 1979. — С. 129.
5. Исихара А. Статистическая физика. — М.: Мир, 1973. — С. 352.
6. Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. — М.: Наука, 1977. — С. 496.
7. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках. — Л.: Наука, 1970. — С. 62.
8. Гуревич В. Л. Кинетика фононных систем. — М.: Наука, 1980. — С. 87.
9. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М.: Наука, 1977. — С. 411.
10. Киреев П. С. Физика полупроводников. — М.: Высшая школа, 1969. — С. 223.
11. Блохинцев Д. И. — ЖЭТФ, 1947, т. 17, с. 924.
12. Давыдов А. С. Квантовая механика. — М.: Физматгиз. — С. 481.
13. Белиничер В. И., Стурман Б. И. — УФН, 1980, т. 130, с. 415.
14. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
15. Белиничер В. И., Стурман Б. И. — ЖЭТФ, 1979, т. 77, с. 2431.
16. Stukelberg E. C. G. — Helv. Phys. Acta, 1952, v. 25, p. 577.
17. Каган Ю., Максимов Л. А. — ФТТ, 1965, т. 7, с. 530.
Гуревич А. Э., Яссиевич И. Н. — ФТТ, 1965, т. 7, с. 582.
18. Каган Ю., Максимов Л. А. — ЖЭТФ, 1970, т. 59, с. 2059.
19. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
20. Кон У., Люттингер Дж.-М. — В кн. Вопросы квантовой теории необратимых процессов. — М.: ИЛ, 1961.
21. Захаров В. Е., Львов В. С., Стеробинец С. С. — УФН, 1974, т. 114, с. 609.
22. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. — М.: Наука, 1977.
23. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 2. — М.: Наука, 1979.
24. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. — М.: Наука, 1976.