

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ

**ФИЗИКА
КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД**

Научно-образовательная серия

Основана в 2009 году



РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ

Главный редактор

Академик РАН В. В. Устинов

Члены редакционной коллегии

Академик РАН	Ю. А. Изюмов
Академик РАН	В. М. Счастливцев
Член-корреспондент РАН	Б. Н. Гощицкий
Член-корреспондент РАН	Е. П. Романов
Член-корреспондент РАН	В. Е. Щербинин

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД
Том 1

Х. М. Биккин
И. И. Ляпилин

НЕРАВНОВЕСНАЯ
ТЕРМОДИНАМИКА
И ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Екатеринбург
2009

УДК 536.75
Б 603

*Рекомендовано к изданию ученым советом
Института физики металлов и ИИСО УрО РАН*

Биккин Х. М., Ляпилин И. И.

Б 603 Неравновесная термодинамика и физическая кинетика /
Х. М. Биккин, И. И. Ляпилин. – Екатеринбург : УрО РАН, 2009.
– 500 с. – (Научно-образовательная серия «Физика конденсиро-
ванных сред»; т. 1).

ISBN 978–5–7691–2034–3

В основу книги положен курс лекций, который авторы читали в течение ряда лет студентам старших курсов физического факультета Уральского государственного университета им. А. М. Горького и физико-технического факультета Уральского государственного технического университета – УПИ.

Рассмотрены основные принципы и методы описания неравновесных систем в рамках неравновесной термодинамики и неравновесной статистической механики. Результаты теории иллюстрируются примерами вычисления кинетических коэффициентов в проводящих кристаллах. Изложение сопровождается большим числом задач, которые позволяют значительно лучше усвоить теоретический материал.

Адресовано студентам, аспирантам, специализирующимся в области теоретической и математической физики, а также специалистам, интересующимся проблемами неравновесной статистической механики.

УДК 536.75

Н а у ч н ы й р е д а к т о р

доктор физико-математических наук В. В. Меньшенин

Р е ц е н з е н т

доктор физико-математических наук Н. Г. Бебенин

© Институт физики металлов
УрО РАН, 2009

© Биккин Х. М., Ляпилин И. И., 2009

© Устинова Ю. В., художественное
оформление серии, 2009

ISBN 978–5–7691–2034–3

ПРЕДИСЛОВИЕ К СЕРИИ

За несколько последних десятилетий наш мир фантастически изменился. Все процессы в нем развиваются динамично, и явления и события, на первый взгляд из самых разных областей человеческой деятельности, оказываются взаимосвязанными. Решение отдельной технической проблемы может иметь самые серьезные последствия глобального масштаба и не только в становлении новых промышленных производств и модернизации старых технологий, но и в развитии экономических и даже общественных отношений. Цена решений всюду, в том числе и в науке, неизмеримо возросла.

Чтобы разобраться в сложном клубке взаимосвязанных проблем, нужны профессионалы своего дела — специалисты высокого уровня. Главные центры их подготовки — это, разумеется, высшие учебные заведения: университеты, институты, академии. Основная цель вузов — дать базовые знания, которые позволят начинающему исследователю пойти по любой из многочисленных дорог в науке по выбранной специальности. Но сейчас — и это одна из важных примет нашего нового времени — мало времени на раскачку. Для успеха необходимо как можно быстрее и основательнее научиться применять полученные базовые знания при решении задач, которые ставятся перед начинающим исследователем.

Получить новые знания при современном уровне коммуникаций не очень сложно. Но какая именно новая информация нужна? Какие подводные камни могут встретиться? Какие «точки роста» в выбранной области науки могут появиться? На такие вопросы трудно ответить даже опытному исследователю, начинающему работать в новой для него (пусть даже смежной) области.

Ответы могут дать в первую очередь те, кто уже активно работает над подобными задачами. По этой причине естественно, на наш взгляд, появление специальной литературы, в которой активно работающие ученые, обладающие к тому же и опытом преподавания, рассказывают не только об основах избранного

раздела науки, но и его переднем крае, о «горячих» точках, обещающих появление новых направлений исследований.

В Институте физики металлов Уральского отделения Российской академии наук над вопросами физики конденсированного состояния вещества работают высококвалифицированные специалисты самого разного профиля. Нам представляется, что их опыт и знания весьма значимы и интересны, а потому должны быть использованы в целях развития академического образования. По этой причине и начато издание научно-образовательной серии «Физика конденсированных сред». Надеемся, что книги этой серии, каждая из которых посвящена отдельному разделу физики твердого тела, будут полезны широкому кругу читателей, в первую очередь студентам, бакалаврам и магистрам, начинающим свой научный путь, а также и состоявшимся ученым, меняющим тематику своих исследований. Необходимо отметить, что книги этой серии — не из разряда «для пешеходов», это не «элементарные учебники» по отдельным главам физики твердого тела. Скорее, их содержание отвечает учебным курсам повышенной сложности. Чтение этих книг — серьезная работа, в которой обучение читателя органично перерастает в его научную работу, работу над предметом книги и над собой. На этой дороге читатель наверняка встретит не один «потенциальный барьер» в понимании материала. Однако редакционная коллегия уверена в том, что суммарной интеллектуальной энергии авторов первого и последующих томов серии и энергии читателя окажется достаточно, чтобы преодолеть эти барьеры. Дорогу осилит идущий!

Главный редактор серии
«Физика конденсированных сред»,
академик РАН *В. В. Устинов*

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ

Предлагаемая вниманию читателей книга написана в значительной мере по материалам лекций, которые авторы читали на протяжении многих лет на физическом факультете Уральского государственного университета и физико-техническом факультете Уральского государственного технического университета.

Основная цель, преследуемая авторами при написании этой книги, – систематическое и последовательное изложение основ неравновесной термодинамики и физической кинетики в форме, прежде всего доступной как студентам и магистрантам, начинающим изучать теоретическую физику, так и аспирантам и научным сотрудникам с опытом, начинающим работать в новой области исследований.

Отметим принципы, которыми авторы руководствовались при отборе материала. Физическая кинетика, или теория явлений переноса, представляет собой весьма обширную, активно развивающуюся область физики. По этой тематике имеется достаточное число как учебных, так и монографических работ, в которых рассмотрены различные аспекты кинетической теории. Однако большая часть публикаций рассчитана на читателя, имеющего более солидную научную подготовку, нежели та, которой обладают студенты университетов к четвертому курсу. Поэтому ощущается острый недостаток в литературе для «начинающих», в которой бы соблюдался естественный баланс между общими положениями теории и простыми примерами практической их реализации.

Другой принцип состоит в том, что авторы по возможности старались избегать таких оборотов, как «очевидно» и «легко показать». Не секрет, что очень часто за этими словами скрываются громоздкие и трудоемкие вычисления. Мы старались написать текст так, чтобы вернуть этим словосочетаниям их исходный смысл, хотя, вероятно не всегда это удалось.

Наконец, мы постарались изложить различные методики описания неравновесных систем и схемы построения теории кинетических явлений, а не сосредоточили свое внимание на проблематике вычисления кинетических коэффициентов для различных модельных систем. Такой подход позволил рассмотреть наряду с «классическими» разделами кинетики и современные, только развивающиеся направления неравновесной статистической механики.

Условно в книге можно выделить четыре раздела.

Первый посвящен методам описания неравновесных систем и феноменологической неравновесной термодинамике.

Второй – обоснованию и применению метода кинетических уравнений в неравновесной статистической механике. В качестве примера рассмотрены кинетические уравнения для электронов и фононов в проводящих кристаллах.

Третий раздел посвящен теории линейного отклика системы на внешнее механическое возмущение.

Четвертый раздел, который можно назвать «современные методы неравновесной статистической механики», содержит изложение метода неравновесного статистического оператора и основного кинетического уравнения («master equation»).

Остановимся подробнее на содержании.

В главе 1 на примере системы электронов в проводящих кристаллах обсуждаются принципы построения термодинамики неравновесных систем в линейном приближении по внешним силам. Рассмотрены обобщенные кинетические коэффициенты и соотношения симметрии Онсагера. Дана классификация кинетических эффектов в проводящих кристаллах. Также рассмотрены способы описания и принципы построения термодинамики сильнонеравновесных систем, и образование диссипативных структур в таких системах. Подробно обсуждаются чрезвычайно важные для неравновесной статистической механики вопросы орбитальной, структурной и асимптотической устойчивости решения уравнений, описывающих динамику неравновесных параметров.

В главе 2 рассматриваются роль и влияние случайных сил на характер движения броуновской частицы. Получено уравнение Фоккера – Планка для броуновской частицы, проанализировано его решение. На этом простом примере показано, как может

быть введено огрубленное (за счет усреднения по времени) описание динамики неравновесной системы.

Глава 3 посвящена методу кинетических уравнений в неравновесной статистической механике. Дано обоснование квазиклассических кинетических уравнений на основе цепочки уравнений Боголюбова для s -частичных функций распределения. Сформулированы кинетические уравнения Власова и Больцмана. Рассмотрены различные методы решения уравнения Больцмана.

В главе 4 рассмотрено кинетическое уравнение для электронов и фононов в проводящих кристаллах в приближении времени релаксации и дана методика вычисления кинетических коэффициентов, описывающих термоэлектрические, термомагнитные и гальваномагнитные явления в металлах и полупроводниках. Рассмотрен эффект увлечения электронов фононами.

Изложение метода линейной реакции неравновесной системы на внешнее механическое возмущение составляет содержание главы 5. Здесь же рассмотрено применение метода функций Грина и метода массового оператора для вычисления кинетических коэффициентов. На базе этой методики вычислена электропроводность (в том числе и в квантующем магнитном поле) и высокочастотная магнитная восприимчивость электронного газа.

Глава 6 посвящена методу неравновесного статистического оператора (НСО). С помощью этого метода могут быть получены как уравнения движения для неравновесной функции распределения, так и уравнения движения для эффективных параметров (аналог уравнений Чепмена – Энскога). Кроме того, метод НСО можно рассматривать как квантово-статистический метод построения термодинамики неравновесных систем. В книге обсуждаются только принципы построения неравновесной термодинамики с помощью НСО и методы построения уравнений баланса для параметров, описывающих неравновесное распределение. Получены линейные релаксационные уравнения, позволяющие найти спектр коллективных возбуждений неравновесной системы. Подробно изложен метод операторов проектирования Мори для построения уравнений движения гидродинамических квазиинтегралов движения и описано применение этой методики для вычисления кинетических коэффициентов.

В главах 7 и 8 рассмотрены отклик сильнонеравновесной системы на слабое механическое возмущение и метод основного кинетического уравнения. В качестве примера в обоих случаях приведена методика вычисления статической электропроводности сильнонеравновесной системы. Материал, изложенный в этих главах, выходит за рамки классических учебных курсов по физической кинетике, но он включен в книгу, чтобы продемонстрировать возможные «точки роста» теории кинетических явлений.

В каждой главе для иллюстрации рассматриваемых положений теории приведены примеры, которые оформлены в виде задач. Большая часть их предлагалась студентам для самостоятельного решения в течение семестра или на контрольных мероприятиях в период экзаменационных сессий. Хотя мы понимаем, что примеры решения конкретных задач физической кинетики чрезвычайно полезны для практического освоения курса, большая часть из тех задач, которые использовались на практике, не вошли в книгу, поскольку это привело бы к непомерному увеличению ее объема.

Следует отметить, что многие обсуждаемые вопросы чрезвычайно сложны и не всегда рассмотрены с необходимой степенью строгости. Тем не менее мы старались по мере возможности достаточно полно и последовательно обсуждать условия применимости сделанных приближений и отмечать те «подводные камни», с которыми можно столкнуться при практической реализации рассматриваемых методов.

Стоит сказать несколько слов о ссылках на литературные источники. В силу специфики изложенного материала мы не стремились привести ссылки на оригинальные научные работы или дать исчерпывающую библиографию по рассматриваемым вопросам. Даны лишь ссылки на те работы, которые, с одной стороны, легко доступны, а с другой, содержат достаточно полный материал по затронутой проблематике.

Мы надеемся, что наша книга позволит как студентам, так и аспирантам достаточно полно познакомиться с «кухней» современной теории явлений переноса и подготовит их к самостоятельной научной работе в области квантово-статистической теории явлений переноса.

Глава 1

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

1.1. Основные положения неравновесной термодинамики

§ 1. Термодинамическое описание равновесных и неравновесных систем

Термодинамическое описание системы многих частиц в равновесной термодинамике основано на предположении, что существует небольшое число макроскопических параметров, характеризующих всю систему в целом, задание которых достаточно для определения состояния системы. В качестве таких параметров обычно выбирают усредненные значения физических величин, характеризующих систему: например среднюю энергию или средний импульс частиц, составляющих систему, компоненты вектора электрической поляризации или магнитной индукции единицы объема и т. д.

Аналитические методы описания термодинамических систем основаны на двух взаимосвязанных методах – методе уравнений состояния и методе термодинамических потенциалов. В случае идеального газа, например, система термодинамических уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}TdS &= dE + pdV, \\ E &= C_v T, \\ pV &= \nu RT.\end{aligned}\tag{1.1}$$

Первое уравнение системы (1.1) представляет собой основное уравнение термодинамики. В этом уравнении S – энтропия,

T – температура, E – внутренняя энергия, p – давление, V – объем идеального газа. Второе уравнение представляет собой калорическое уравнение состояния идеального газа, которое определяет взаимосвязь внутренней энергии с объемом и температурой. Третье уравнение системы (1.1) – это так называемое термическое уравнение состояния, которое позволяет найти давление газа p как функцию объема и температуры; ν – число молей идеального газа.

Система уравнений (1.1) содержит три уравнения и пять неизвестных (S, E, V, p, T). Как известно [1, 2], состояние системы в равновесной термодинамике задается внешними параметрами и температурой. Для идеального газа достаточно задать лишь один внешний параметр – объем. Таким образом, в этом простейшем случае, задав два параметра (температуру и объем например), с помощью системы (1.1) можно найти все величины, характеризующие идеальный газ.

Для описания более сложной однофазной термодинамической системы, состояние которой задается n внешними параметрами x_1, x_2, \dots, x_n и температурой, уравнения (1.1) должны быть модифицированы. Эта модификация сводится просто к тому, что необходимо учесть работу системы при изменении всех обобщенных термодинамических координат x_1, x_2, \dots, x_n , а не только объема, и для замыкания системы уравнений термодинамики записать n термических уравнений состояния, выражающих взаимосвязь обобщенных термодинамических сил F_i с обобщенными термодинамическими координатами и температурой:

$$\begin{aligned} TdS &= dE + \sum_{i=1}^n F_i dx_i, \\ E &= E(x_1, x_2, \dots, x_n, T), \\ F_i &= F_i(x_1, x_2, \dots, x_n, T), \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Термические и калорическое уравнения состояния должны быть найдены из эксперимента или получены в рамках равновесной статистической механики на основе анализа некоторых модельных представлений.

Другой альтернативный метод аналитического описания системы многих частиц в равновесной термодинамике связан с

методом термодинамических потенциалов (функций состояния) [3]. В этом случае с использованием методов равновесной статистической механики должна быть найдена одна из возможных функций состояния.

Если задан хотя бы один термодинамический потенциал как функция своих естественных переменных, то термодинамические свойства системы определены полностью, поскольку все термодинамические величины, характеризующие данную систему, могут быть найдены как частные производные термодинамического потенциала. Для анализа многокомпонентных систем с постоянным числом частиц чаще других используются свободная энергия Φ как функция температуры T , объема V и числа частиц N_i i -го сорта:

$$d\Phi = -SdT - pdV + \sum_{i=1}^k \zeta_i dN_i \quad (1.3)$$

или термодинамический потенциал Гиббса G как функция температуры, давления и числа частиц

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^k \zeta_i dN_i. \quad (1.4)$$

В уравнениях (1.3), (1.4) величина ζ_i представляет собой химический потенциал частиц i -го сорта.

Таким образом, в равновесной термодинамике существуют достаточно простые универсальные методы аналитического описания многочастичных систем. Следует особо отметить, что уравнения (1.1) – (1.4) позволяют анализировать и термодинамические процессы, которые удовлетворяют условиям квазистатичности. Чтобы пояснить сказанное, рассмотрим простую систему, состоящую из газа в цилиндрическом сосуде, имеющем характерный размер l , верхнее основание которого является подвижным поршнем. При движении поршня давление в сосуде будет меняться. За характерное время установления равновесного давления можно принять время распространения звуковой волны $\tau_p \simeq l/v_s$, где v_s – скорость звука в газе. Поэтому, если

$$\frac{dp}{dt} \tau_p \ll \Delta p,$$

где Δp – допустимая точность измерения давления, то можно считать, что при движении поршня во всей системе давление будет одинаковым (равновесным).

Следует проанализировать и процессы установления равновесных значений других макропараметров, поскольку заранее не очевидно, какой из процессов установления равновесия окажется самым медленным (лимитирующим).

В любом случае всегда можно найти условия применимости термодинамического описания для явлений в системе многих частиц. Если эти условия не выполняются, то следует более детально проанализировать процессы, протекающие при установлении равновесия.

§ 2. Принцип локального равновесия

Естественным шагом в этом направлении является обобщение результатов равновесной термодинамики на неравновесный случай с помощью введения концепции локально-равновесного описания. Как отмечалось выше, термодинамические параметры по существу представляют собой физические величины, характеризующие многочастичную систему.

Если произвести усреднение физических величин не по всей системе, а по достаточно малым, но макроскопическим ее областям, то тоже получим макроскопические параметры, значения которых будут, однако, зависеть от расположения выбранного для усреднения объема (координат) и от времени. Что касается временной зависимости, то она двоякая. Одна часть зависимости от времени обусловлена естественной флуктуацией физических величин в достаточно малых объемах. Временной масштаб этих флуктуаций сравним с атомным временным масштабом.

Другая часть временной зависимости локальных средних имеет совершенно другой масштаб и связана с более медленными релаксационными процессами в макроскопической системе. Характерный временной масштаб этих изменений близок по порядку величины к $\tau_p \simeq l/v_s = 10^{-5}$ с. Производя дополнительное усреднение локальных макропараметров по времени, можно исключить флуктуационную составляющую их временной зависимости, оставив лишь ту часть, которая описывает медленное изменение параметров за счет процессов релаксации.

Таким образом, для неравновесной системы можно ввести локально-равновесные термодинамические параметры, которые будут характеризовать некоторый достаточно малый объем макроскопической системы. Эти параметры зависят от координат и времени. Если считать, что при переходе от одного физически малого объема к другому локально-равновесные параметры меняются незначительно, то можно полагать их непрерывными функциями координат и времени.

На первый взгляд, условие квазиравновесности не накладывает существенных ограничений на применимость термодинамического подхода для описания неравновесных явлений, поскольку объем, по которому производится усреднение, можно сделать сколь угодно малым. В действительности это не так. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим образец полупроводникового материала или металла, помещенного в поле температурного градиента. Если в качестве термодинамической системы выбрать подсистему электронов проводимости, то в этом случае длина свободного пробега электронов l задает характерный пространственный масштаб, определяющий физически малый объем, по которому производится усреднение. Переход к локально-равновесному описанию возможен, если выполняется неравенство

$$\left| \frac{l}{T} \frac{dT}{dx} \right| \ll 1,$$

которое обеспечивает условие малого изменения температуры на длине свободного пробега электронов.

В этой главе мы будем применять основные положения термодинамики необратимых процессов к системе электронов проводимости металла или полупроводника, отклонение от равновесия которой обусловлено действием внешнего электрического поля и градиента температуры.

§ 3. Уравнение баланса энтропии и законы сохранения

Предполагая справедливым использование локально-равновесного подхода, запишем основное уравнение термодинамики для физически малых объемов системы:

$$dE(\vec{r}, t) = T(\vec{r}) dS(\vec{r}, t) + [\zeta(\vec{r}) + e\varphi(\vec{r})] dn(\vec{r}, t), \quad (1.5)$$

где $E(\vec{r}, t)$, $S(\vec{r}, t)$, $n(\vec{r}, t)$ – плотности внутренней энергии, энтропии и числа частиц системы в точке с координатой \vec{r} в момент времени t . $T(\vec{r})$, $\zeta(\vec{r})$ – локальные температура и химический потенциал системы электронов; $\varphi(\vec{r})$ – потенциал электростатического поля; e – заряд электрона. Найдем выражение для производства энтропии $dS(\vec{r}, t)/dt$, считая, что локально-равновесное состояние изучаемой системы является стационарным:

$$\frac{dS(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{1}{T(\vec{r})} \frac{dE(\vec{r}, t)}{dt} - \frac{\zeta(\vec{r}) + e\varphi(\vec{r})}{T(\vec{r})} \frac{dn(\vec{r}, t)}{dt}. \quad (1.6)$$

Плотность числа частиц $n(\vec{r}, t)$ и плотность внутренней энергии $E(\vec{r}, t)$ удовлетворяют законам сохранения, имеющим вид уравнений неразрывности:

$$\begin{aligned} \frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{J}_n &= 0, \\ \frac{dE(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{J}_E &= 0, \end{aligned} \quad (1.7)$$

где \vec{J}_n , \vec{J}_E – плотности потока частиц и энергии соответственно.

Задача 1.1

Используя определение плотности числа частиц

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^n \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)),$$

где $\vec{r}_i(t)$ – координата i -й частицы, получить первое уравнение неразрывности (1.7).

Решение

Рассмотрим изменение числа частиц в малом элементе объема v , внутри которого выполняются условия локальной равновесности. Тогда

$$\begin{aligned} \int dv \frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} &= \int dv \sum_{i=1}^n \frac{d}{d\vec{r}_i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \\ &= - \int dv \sum_{i=1}^n \frac{d}{d\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \vec{v}_i = - \int dv \operatorname{div} \vec{J}_n. \end{aligned} \quad (1.8)$$

При записи последнего выражения мы воспользовались определением плотности потока числа частиц

$$\vec{J}_n = \int dv \sum_{i=1}^n \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)). \quad (1.9)$$

Таким образом, плотность числа частиц действительно удовлетворяет уравнению неразрывности

$$\frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{J}_n = 0.$$

Аналогично выводится и второе уравнение неразрывности в формуле (1.7).

Возвращаемся к преобразованию уравнения (1.6) для производства энтропии. Подставляя уравнения неразрывности (1.7) в уравнение для производства энтропии (1.6), после несложных преобразований получаем два эквивалентных представления

$$\frac{dQ}{dt} = -\operatorname{div} \vec{J}_Q + \vec{J} \vec{\varepsilon}, \quad (1.10)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\operatorname{div} \vec{J}_S - \vec{J}_Q \frac{\vec{\nabla} T}{T^2} + \vec{J} \frac{\vec{\varepsilon}}{T}, \quad (1.11)$$

где поток тепла \vec{J}_Q и поток энтропии \vec{J}_S определены соотношениями

$$\vec{J}_Q = \vec{J}_E - \left(\frac{1}{e} \zeta + \varphi \right) \vec{J}, \quad (1.12)$$

$$\vec{J}_S = \frac{\vec{J}_Q}{T}, \quad \vec{J} = e \vec{J}_n. \quad (1.13)$$

Для сокращения записи в формулах (1.10), (1.11) мы ввели величину $\vec{\varepsilon}$, которая имеет смысл градиента электрохимического потенциала:

$$\vec{\varepsilon} = -\vec{\nabla} \left(\varphi + \frac{1}{e} \zeta \right). \quad (1.14)$$

Здесь и в дальнейшем будем опускать зависимость термодинамических функций от координат и времени, если это не будет

приводить к недоразумениям. Уравнение (1.10) имеет смысл закона сохранения тепла. Этот факт становится особенно очевидным, если произвести интегрирование левой и правой частей уравнения (1.10) по малому замкнутому объему. Тогда, используя теорему Остроградского – Гаусса, получаем, что изменение количества теплоты в замкнутом объеме за единицу времени равно объемной генерации тепла за вычетом количества теплоты, прошедшей за единицу времени через поверхность, ограничивающую объем. Аналогично уравнение (1.11), которое для неравновесной термодинамики является ключевым (аналог основного уравнения термодинамики для неравновесных систем), имеет смысл локального уравнения баланса энтропии.

Характерная особенность термодинамики необратимых процессов состоит в появлении термодинамических потоков \vec{J}_S , \vec{J} , \vec{J}_Q , которые в нашем случае вызваны действием внешних термодинамических сил $(\vec{\nabla}T, \vec{\varepsilon})$. По этой причине уравнения типа (1.10), (1.11) не являются замкнутыми. Действительно, даже если предположить, что термодинамические силы $\vec{\varepsilon}/T$ и $\vec{\nabla}T/T^2$ являются внешними параметрами по отношению к системе и заданы, все равно уравнение (1.11), например, содержит три неизвестные термодинамические величины (S, \vec{J}_Q, \vec{J}) . Напомним, что аналогичная ситуация имеется и в равновесной термодинамике, где основное уравнение термодинамики нуждается в дополнении термическими и калорическим уравнениями состояния для замыкания системы уравнений равновесной термодинамики. Как уже указывалось, эти уравнения не могут быть получены в рамках термодинамики, а должны определяться в рамках статистической молекулярно-кинетической теории или опытным путем.

В неравновесном случае уравнения типа (1.10), (1.11) также должны быть дополнены уравнениями, связывающими термодинамические потоки и термодинамические силы. Причем в полной аналогии с равновесным случаем эти уравнения могут быть найдены в результате обобщения опытных данных либо получены методами неравновесной статистической механики.

Для замыкания уравнения (1.11) воспользуемся разложением термодинамических потоков в ряд по термодинамическим

силам и, полагая неравновесность слабой, ограничимся линейными членами разложения. В результате получаем два векторных уравнения

$$\begin{aligned}\vec{J} &= \hat{\sigma} \vec{\varepsilon} - \hat{\beta} \vec{\nabla} T, \\ \vec{J}_Q &= \hat{\chi} \vec{\varepsilon} - \hat{\kappa} \vec{\nabla} T,\end{aligned}\tag{1.15}$$

задающих линейную связь между термодинамическими потоками и термодинамическими силами. Нулевые по термодинамическим силам члены разложения в уравнениях (1.15) отсутствуют, поскольку, если нет термодинамических сил, то нет и потоков. Коэффициенты пропорциональности $\hat{\sigma}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\chi}$, $\hat{\kappa}$ носят названия коэффициентов переноса, или кинетических коэффициентов, и в нашем случае линейной связи являются тензорами второго ранга. Кинетические коэффициенты, входящие в качестве параметров в феноменологическую теорию явлений переноса, должны определяться в рамках микроскопической теории явлений переноса, изложению методов которой посвящена большая часть этой книги.

§ 4. Обобщенные потоки и обобщенные термодинамические силы

В предыдущих параграфах мы сформулировали основные идеи термодинамики необратимых процессов и ввели на основании принципа локального равновесия основное уравнение термодинамики необратимых процессов (1.11) и уравнения, связывающие термодинамические потоки и термодинамические силы (1.15).

Анализируя эти выражения, легко заметить, что существует определенный произвол в выборе термодинамических потоков и термодинамических сил. Хотя в рамках феноменологической неравновесной термодинамики полностью избавиться от этого произвола не удастся, можно сделать ряд существенных уточнений в случае линейной связи между потоками и термодинамическими силами (Онсагер, 1931).

Рассмотрим систему, неравновесное состояние которой задается набором макропараметров $a_1, a_2, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_m$.

Будем полагать, что параметры a_i являются четными относительно операции обращения времени ($\vec{r} \rightarrow \vec{r}$, $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, $\vec{s} \rightarrow -\vec{s}$, где \vec{p} , \vec{s} – векторы импульса и спина), а переменные b_i – нечетные относительно этой операции. Пусть в равновесном состоянии система характеризуется равновесными значениями этих параметров a_i^0 и b_i^0 . Введем малые отклонения неравновесных параметров от равновесных: $\alpha_i = a_i - a_i^0$, и $\beta_i = b_i - b_i^0$, и разложим выражение для энтропии системы в ряд по малым отклонениям макропараметров α_i и β_i . Учитывая инвариантность энтропии по отношению к операции обращения времени и оставляя лишь первые члены разложения для энтропии неравновесной системы S , получаем

$$S = S^0 - \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^n A_{ik} \alpha_i \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^m B_{ik} \beta_i \beta_k, \quad (1.16)$$

где S^0 – энтропия равновесной системы, A_{ik} и B_{ik} – некоторые симметричные матрицы положительно определенных коэффициентов:

$$A_{ik} = - \left. \frac{d^2 S}{d\alpha_i d\alpha_k} \right|_{\substack{\alpha_i=0 \\ \beta_j=0}}, \quad B_{jl} = - \left. \frac{d^2 S}{d\beta_j d\beta_l} \right|_{\substack{\alpha_i=0 \\ \beta_j=0}}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

Положительная определенность матриц A_{ik} , B_{jl} следует из экстремальности энтропии в равновесном состоянии (энтропия является выпуклой вверх функцией своих параметров α и β и имеет максимум в точке $\alpha = \beta = 0$).

Определим обобщенные термодинамические силы X_i^α и X_i^β и обобщенные термодинамические потоки I_i^α и I_i^β следующими соотношениями:

$$X_i^\alpha = \frac{dS}{d\alpha_i} = - \sum_{k=1}^n A_{ik} \alpha_k, \quad X_i^\beta = \frac{dS}{d\beta_i} = - \sum_{k=1}^m B_{ik} \beta_k, \quad (1.17)$$

$$I_i^\alpha = \frac{d\alpha_i}{dt}, \quad I_i^\beta = \frac{d\beta_i}{dt}. \quad (1.18)$$

В силу определения (1.17), (1.18), при операции обращения времени $X_i^\alpha \rightarrow X_i^\alpha$, $X_i^\beta \rightarrow -X_i^\beta$, $I_i^\alpha \rightarrow -I_i^\alpha$, $I_i^\beta \rightarrow I_i^\beta$.

Рассмотрим обобщенные потоки I_i^α и I_i^β . Поскольку мы полагаем, что введенные параметры $\alpha_i(t)$ и $\beta_i(t)$ полностью характеризуют неравновесное состояние системы, то, очевидно, и обобщенные потоки I_i^α и I_i^β являются функциями этих параметров:

$$I_i^\lambda = I_i^\lambda(\{\alpha_k\}, \{\beta_l\}), \quad \lambda = \alpha, \beta,$$

где $\{\alpha_k\}$ и $\{\beta_l\}$ – полные наборы параметров α_k и β_l .

Тогда, разложив потоки по степеням α_i и β_j с точностью до линейных членов, выразим их через отклонения термодинамических параметров от состояния равновесия:

$$\begin{aligned} I_i^\alpha &= \sum_{k=1}^n \lambda_{ik}^{(\alpha\alpha)} \alpha_k + \sum_{k=1}^m \lambda_{ik}^{(\alpha\beta)} \beta_k, \\ I_i^\beta &= \sum_{k=1}^n \lambda_{ik}^{(\beta\alpha)} \alpha_k + \sum_{k=1}^m \lambda_{ik}^{(\beta\beta)} \beta_k. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Пользуясь определением термодинамических сил (1.17), можно выразить в формулах (1.19) параметры α_k и β_k через термодинамические силы X_i^α и X_i^β , поскольку эта операция сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Таким образом, при сделанных допущениях о слабой неравновесности всегда можно записать линейные соотношения между обобщенными термодинамическими потоками I_i^γ и обобщенными термодинамическими силами X_k^δ , вводя обобщенные кинетические коэффициенты $L_{ik}^{(\gamma\delta)}$:

$$\begin{aligned} I_i^\alpha &= \sum_{k=1}^n L_{ik}^{(\alpha\alpha)} X_k^\alpha + \sum_{k=1}^m L_{ik}^{(\alpha\beta)} X_k^\beta, \\ I_i^\beta &= \sum_{k=1}^n L_{ik}^{(\beta\alpha)} X_k^\alpha + \sum_{k=1}^m L_{ik}^{(\beta\beta)} X_k^\beta. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Определения (1.17), (1.18) позволяют получить полезное выражение для производства энтропии. Действительно, если

отсутствует поток энтропии через границу объема, то дифференцирование по времени выражения (1.16) для энтропии системы с использованием определения термодинамических потоков (1.18) и термодинамических сил (1.17) дает простое соотношение

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{i,\lambda} I_i^\lambda X_i^\lambda. \quad (1.21)$$

Термодинамические потоки и термодинамические силы, удовлетворяющие соотношению (1.21), часто называют сопряженными потоками и силами.

§ 5. Обобщенные кинетические коэффициенты и соотношения симметрии Онсагера

Коэффициенты линейной связи $L_{ik}^{(\gamma\delta)}$ между обобщенными термодинамическими потоками и обобщенными термодинамическими силами часто называют также коэффициентами Онсагера. В рамках феноменологической неравновесной термодинамики явный вид этих коэффициентов не раскрывается. Их физический смысл и явное выражение для различных систем можно найти только в рамках молекулярно-кинетической теории. Обратим внимание читателей на то, что в рамкой линейной неравновесной термодинамики коэффициенты Онсагера вычисляются усреднением по равновесному состоянию системы. Поэтому с помощью этих же коэффициентов должны описываться процессы рассасывания крупномасштабных равновесных флуктуаций, что облегчает анализ свойств кинетических коэффициентов, поскольку при анализе флуктуаций в равновесной системе можно воспользоваться свойствами, вытекающими из ее симметрии.

Свойства симметрии коэффициентов $L_{ik}^{(\gamma\delta)}$ были впервые установлены Онсагером [4]. Приведем эти соотношения симметрии при наличии внешнего магнитного поля \vec{H} без доказательства, которое мы приведем позднее (см. главу 5):

$$L_{ik}^{(\lambda\gamma)}(\vec{H}) = \varepsilon_\lambda \varepsilon_\gamma L_{ki}^{(\gamma\lambda)}(-\vec{H}),$$

$$\lambda = \alpha, \beta, \quad \gamma = \alpha, \beta, \quad \varepsilon_\alpha = 1, \quad \varepsilon_\beta = -1. \quad (1.22)$$

В дальнейшем будем иметь возможность убедиться в том, что соотношения симметрии Онсагера (1.22) действительно выполняются, если кинетические коэффициенты определены правильно.

В качестве примера использования уравнений (1.22) установим соотношения симметрии для кинетических коэффициентов, входящих в уравнение (1.15). В рассмотренном здесь случае термодинамические силы $\vec{\varepsilon}$ и $\vec{\nabla}T$ являются четными по отношению к операции обращения времени, а потоки \vec{J} и \vec{J}_Q – нечетными, и поэтому в формуле (1.22) следует положить $\lambda = \gamma = \alpha$. Тогда, вводя обозначение $L_{ik}^{\alpha\alpha} = L_{ik}$ вместо (1.22), получаем

$$L_{ik}(\vec{H}) = L_{ki}(-\vec{H}). \quad (1.23)$$

В формулы (1.15) входят два векторных потока, поэтому система уравнений (1.20) для этого случая может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \vec{I}_1 &= L_{11} \vec{X}_1 + L_{12} \vec{X}_2, \\ \vec{I}_2 &= L_{21} \vec{X}_1 + L_{22} \vec{X}_2. \end{aligned} \quad (1.24)$$

В выражении (1.24) коэффициенты L_{ij} являются тензорами второго ранга.

Определим обобщенные потоки и обобщенные термодинамические силы таким образом, чтобы соотношение (1.21) для производства энтропии совпадало с выражением (1.11) при условии отсутствия потока энтропии через поверхность, ограничивающую объем. Сравнивая (1.11) и (1.21), принимаем следующую систему определений:

$$\vec{I}_1 = \vec{J}, \quad \vec{I}_2 = \vec{J}_Q, \quad \vec{X}_1 = \frac{\vec{\varepsilon}}{T}, \quad \vec{X}_2 = -\frac{\vec{\nabla}T}{T^2}. \quad (1.25)$$

Очевидно, что обобщенные потоки и обобщенные термодинамические силы можно определить и другим способом, поскольку выражение для производства энтропии (1.21) содержит только бинарные комбинации обобщенных потоков и обобщенных сил. После того как определены обобщенные потоки и

обобщенные термодинамические силы, пользуясь соотношениями (1.15), (1.24), определим и коэффициенты Онсагера:

$$L_{11} = \hat{\sigma}T, \quad L_{12} = \hat{\beta}T^2, \quad L_{21} = \hat{\chi}T, \quad L_{22} = \hat{\kappa}T^2. \quad (1.26)$$

В изотропном случае, когда кинетические коэффициенты являются скалярными величинами, из соотношений (1.26) следует практически важное соотношение $\chi = \beta T$. Для анизотропных систем, вводя дополнительные тензорные индексы для кинетических коэффициентов

$$\begin{aligned} L_{11}^{ik} &= \sigma_{ik} T, & L_{12}^{ik} &= \beta_{ik} T^2, \\ L_{21}^{ik} &= \chi_{ik} T, & L_{22}^{ik} &= \kappa_{ik} T^2, \quad i, k = x, y, z, \end{aligned} \quad (1.27)$$

на основе формулы (1.22) получаем следующие следствия принципа симметрии кинетических коэффициентов Онсагера:

$$\begin{aligned} \sigma_{ik}(\vec{H}) &= \sigma_{ki}(-\vec{H}), & \beta_{ik}(\vec{H}) &= \beta_{ki}(-\vec{H}), & \chi_{ik}(\vec{H}) &= \chi_{ki}(-\vec{H}), \\ \kappa_{ik}(\vec{H}) &= \kappa_{ki}(-\vec{H}), & \chi_{ik}(\vec{H}) &= T \beta_{ki}(-\vec{H}). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Другие применения принципа симметрии кинетических коэффициентов Онсагера можно найти в небольшой по объему, но прекрасно написанной книге К. П. Гурова [5].

§ 6. Вариационные принципы в линейной неравновесной термодинамике

Основные законы термодинамики необратимых процессов были установлены путем обобщения результатов равновесной термодинамики и феноменологических законов переноса, таких, например, как закон Фурье, который связывает поток тепла и градиент температуры. Подобные феноменологические законы позволяют определить кинетические коэффициенты и уравнения взаимосвязи термодинамических потоков и термодинамических сил.

Наряду с индуктивным существует другой путь – дедуктивный, когда уравнения неравновесной термодинамики выводятся из некоего вариационного принципа подобно тому, как это делается в механике или электродинамике.

Для того чтобы лучше понять сущность вариационных принципов, перечислим еще раз основные положения линейной термодинамики Онсагера.

1. Линейный закон взаимосвязи обобщенных термодинамических сил и обобщенных потоков:

$$I_i = \sum_k L_{ik} X_k.$$

2. Соотношения симметрии (взаимности) Онсагера, которые при наличии только нечетных по отношению к операции обращения времени потоков и отсутствии магнитного поля имеют вид

$$L_{ik} = L_{ki}.$$

3. При отсутствии потоков энтропии через поверхность производство энтропии в системе определяется положительно определенной симметричной квадратичной формой обобщенных сил:

$$\dot{S} = \sum_i X_i I_i = \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k \geq 0.$$

Онсагер первым показал, что перечисленные в пунктах 1–3 соотношения можно получить из некоего вариационного принципа. Определим функцию рассеяния

$$\varphi(X, X) = \frac{1}{2} \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k, \quad (1.29)$$

которая так же, как и производство энтропии, является мерой интенсивности необратимых процессов в системе. Производство энтропии при заданных внешних потоках запишем в виде бинарной комбинации обобщенных потоков и обобщенных термодинамических сил $\dot{S}(I, X) = \sum_i X_i I_i$.

Определим функционал $\mathfrak{L}(I, X)$ соотношением

$$\mathfrak{L}(I, X) = \dot{S}(I, X) - \varphi(X, X). \quad (1.30)$$

Согласно Онсагеру, для действительно происходящего в системе процесса функционал (1.30) имеет максимум по сравнению

с другими процессами с теми же потоками I , но различными сопряженными силами X :

$$\begin{aligned}\delta(\dot{S}(I, X) - \varphi(X, X)) &= \delta\left(\sum_i I_i X_i - \frac{1}{2} \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k\right) = \\ &= \sum_i \left(I_i - \sum_k L_{ik} X_k\right) \delta X_i.\end{aligned}\quad (1.31)$$

При выводе второй части соотношения (1.31) использовано свойство симметрии кинетических коэффициентов. Если реально действующие обобщенные силы X_i обеспечивают экстремум функционала $\mathfrak{L}(I, X)$ при заданных обобщенных потоках I_i , то вариация (1.31) должна быть равна нулю. Поскольку вариации δX_i произвольны, то из второй части формулы (1.31) сразу следует линейный закон взаимосвязи между обобщенными потоками и обобщенными термодинамическими силами:

$$I_i = \sum_k L_{ik} X_k.$$

Таким образом, принцип симметрии (взаимности) кинетических коэффициентов позволяет сформулировать вариационный принцип, из которого следуют линейные уравнения взаимосвязи между обобщенными потоками и обобщенными термодинамическими силами.

§ 7. Принцип минимального производства энтропии для слабонеравновесных стационарных состояний

Возможны другие формулировки вариационного принципа. Более подробное обсуждение этого вопроса можно найти в монографиях [6, 7]. Рассмотрим формулировку вариационного принципа для стационарных систем, когда термодинамические потоки постоянны. Этот важный в практическом отношении частный случай реализуется в открытых неравновесных системах. Какая физическая величина обладает в этих условиях

экстремальными свойствами? Ответ на этот вопрос дает вариационный принцип Пригожина: стационарное слабонеравновесное состояние открытой системы, в которой протекает необратимый процесс, характеризуется минимальным производством энтропии при заданных внешних условиях, препятствующих достижению равновесия.

В качестве примера использования вариационного принципа Пригожина рассмотрим процесс переноса тепла и вещества между двумя фазами при наличии между ними разности температур. Пусть I_1 – поток тепла, I_2 – поток вещества, X_1 и X_2 – соответствующие им сопряженные термодинамические силы. Запишем производство энтропии для этой системы в виде положительно определенной квадратичной формы. Учитывая сразу соотношения взаимности Онсагера, получаем

$$\dot{S} = L_{11} X_1^2 + 2L_{12} X_1 X_2 + L_{22} X_2^2. \quad (1.32)$$

Формально, варьируя производство энтропии (1.32) по термодинамическим силам X_1 и X_2 , из условий экстремальности запишем два уравнения

$$\left. \frac{d\dot{S}}{dX_1} \right|_{X_2} \delta X_1 = I_1 \delta X_1 = 2 (L_{11} X_1 + L_{12} X_2) \delta X_1 = 0, \quad (1.33)$$

$$\left. \frac{d\dot{S}}{dX_2} \right|_{X_1} \delta X_2 = I_2 \delta X_2 = 2 (L_{22} X_2 + L_{12} X_1) \delta X_2 = 0. \quad (1.34)$$

Равенство нулю в выражении (1.33) выполняется, если система находится в условиях, когда сила X_2 является контролируемой. Тогда, в силу произвольности вариации δX_1 , из формулы (1.33) следует, что поток $I_1 = d\dot{S}/dX_1 = 0$. Аналогично, если удастся реализовать условие, когда сила X_1 является контролируемой, из уравнения (1.34) следует равенство потока I_2 нулю. Остается выяснить, какое из условий можно реализовать экспериментально. Сопряженная потоку тепла I_1 термодинамическая сила $X_1 \sim \nabla T$. Очевидно, что условие постоянства градиента температуры реализовать довольно легко. Термодинамическая сила X_2 пропорциональна градиенту химического

потенциала $X_2 \sim \nabla \zeta$ и реализовать условие постоянства химического потенциала при варьирование производства энтропии по силе X_1 , скорее всего, нереально. В этой ситуации из принципа минимального производства энтропии Пригожина следует, что поток тепла $I_1 \neq 0$, а поток вещества $I_2 = 0$. Найденное состояние соответствует именно минимуму производства энтропии (1.32), поскольку для функции двух переменных

$$\dot{S} = L_{11} X_1^2 + 2L_{12} X_1 X_2 + L_{22} X_2^2$$

найденная экстремальная точка является минимумом, если выполняется условие

$$L_{11} L_{22} - L_{12}^2 > 0.$$

Это условие совпадает с условием положительности квадратичной формы (1.32) и поэтому выполняется автоматически.

Принцип минимального производства энтропии Пригожина можно обобщить на случай N независимых сил, из которых k , в силу каких-либо внешних причин, остаются постоянными. При этом принцип минимального производства энтропии приводит к требованию равенства нулю $N - k$ потоков и постоянству k потоков (исчезают потоки, соответствующие нефиксированным силам). Если ни одна из сил не фиксирована, то все потоки будут равны нулю и система останется в равновесном состоянии.

Принцип минимального производства энтропии в стационарных состояниях позволяет сделать заключение об устойчивости слабонеравновесных стационарных состояний. В системе, находящейся под действием не зависящих от времени внешних сил, по истечении некоторого времени устанавливается стационарное состояние с минимальным производством энтропии \dot{S} . При достаточно малом изменении состояния системы в результате флуктуации некоторого параметра, характеризующего ее неравновесное состояние, в системе будут возникать процессы, приводящие к восстановлению стационарного неравновесного состояния. Иначе говоря, всегда имеющиеся в системе флуктуации рассасываются, не выводя систему из стационарного неравновесного состояния. Поскольку механизмы реакции системы

на флуктуации макропараметров и действие внешних сил идентичны, то при внешнем воздействии на систему, находящуюся в стационарном неравновесном состоянии, в ней возникнут процессы, стремящиеся ослабить (или даже скомпенсировать) это внешнее воздействие (принцип Ле Шателье – Брауна). По этой причине естественно считать, что стационарное состояние слабонеравновесной системы является устойчивым.

1.2. Примеры применения теории Онсагера

§ 8. Термоэлектрические явления. Эффекты Пельтье, Зеебека, Томсона и их взаимосвязь

Число различных эффектов, возникающих при наличии магнитного поля, электрического тока и градиента температуры, чрезвычайно велико, поскольку эти эффекты могут быть определены для разных условий измерения, разных комбинаций теплового и электрического токов. Достаточно сказать, что только в поперечном магнитном поле теоретически возможно около 560 различных эффектов [8]. Обсудим лишь некоторые основные кинетические явления, которые чаще других используются для анализа свойств твердых тел.

Рассмотрим кинетические эффекты в изотропном проводнике, когда имеется только внешнее электрическое поле и градиент температуры. Систему уравнений (1.15) удобно переписать в таком виде, чтобы в правой части феноменологических уравнений фигурировали контролируемые в эксперименте величины – плотность электрического тока \vec{J} и градиент температуры $\vec{\nabla}T$:

$$\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \vec{J} + \hat{\alpha} \vec{\nabla}T, \quad \vec{J}_Q = \hat{\Pi} \vec{J} - \hat{\kappa} \vec{\nabla}T, \quad (1.35)$$

$$\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1}, \quad \hat{\alpha} = \hat{\sigma}^{-1} \hat{\beta}, \quad \hat{\Pi} = \hat{\chi} \hat{\sigma}^{-1}, \quad \hat{\kappa} = \hat{\kappa} - \hat{\chi} \hat{\alpha}. \quad (1.36)$$

Для записи феноменологических уравнений переноса (1.35) введены новые кинетические коэффициенты: удельное электросопротивление $\hat{\rho}$, коэффициент Зеебека (коэффициент дифференциальной термоэдс) $\hat{\alpha}$, коэффициент Пельтье $\hat{\Pi}$ и коэффициент удельной теплопроводности $\hat{\kappa}$. Физический смысл этих

коэффициентов и условия, при которых их экспериментально можно определить, подробно обсуждаются ниже.

Эффект Пельтье

Пусть по образцу протекает электрический ток \vec{J} , а градиент температуры равен нулю. В этом случае, как следует из второго из уравнений (1.35), по образцу будет течь и поток тепла $\vec{J}_Q = \hat{\Pi} \vec{J}$. В однородном материале этот поток тепла обнаружить невозможно, но если составить проводящую цепь из двух материалов с различными коэффициентами $\hat{\Pi}_1$ и $\hat{\Pi}_2$, то в местах контакта проводников с различными значениями коэффициентов Пельтье будет выделяться или поглощаться (в зависимости от направления тока) в дополнение к теплу Джоуля некоторое количество теплоты Пельтье Q :

$$Q = (\hat{\Pi}_1 - \hat{\Pi}_2) t S_k. \quad (1.37)$$

Выделение тепла Пельтье в области контакта двух материалов с различными коэффициентами Пельтье $\hat{\Pi}_1$ и $\hat{\Pi}_2$ носит название эффекта Пельтье. Как следует из формулы (1.37), количество теплоты Пельтье прямо пропорционально времени t , в течение которого пропускался электрический ток, и площади контакта S_k .

Эффект Пельтье качественно можно объяснить исходя из схемы зонной модели проводника вблизи контакта (рис. 1). Рассмотрим случай, когда в контакт приведены металл и электронный полупроводник, свободные электроны в котором подчиняются статистике Максвелла – Больцмана.

Условием равновесия электронного газа будет равенство уровня химического потенциала в обоих материалах. Поскольку в невырожденном полупроводнике уровень химического потенциала лежит ниже дна зоны проводимости, то электроны проводимости в полупроводнике будут иметь энергию большую, нежели энергия Ферми, а в металле их энергия будет совпадать с энергией Ферми. Поэтому при переходе каждого электрона из полупроводника в металл в области контакта будет выделяться дополнительная энергия. Переход электронов из металла в полупроводник сопровождается преодолением потенциального

барьера. Переход смогут осуществить лишь электроны, обладающие достаточной кинетической энергией.

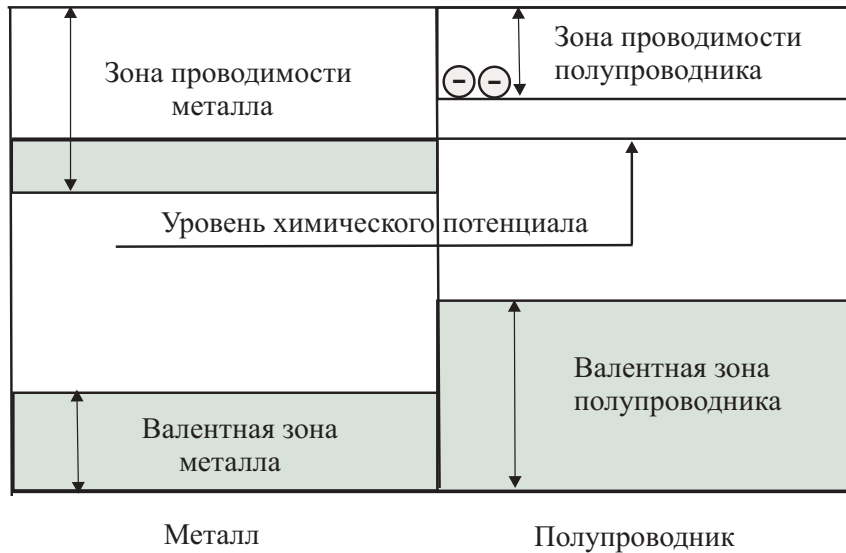


Рис. 1. Схема зонной структуры при контакте полупроводника с металлом

Этот процесс будет приводить к уменьшению числа высокоскоростных электронов в области контакта. Тепловое равновесие при этом нарушится, и для его восстановления потребуется подвод тепла, что и приводит к охлаждению области контакта. Холодильники на основе эффекта Пельтье широко используются для охлаждения электронных устройств, в частности процессоров ПК.

Эффект Зеебека

Предположим теперь, что $\vec{J} = 0$, а $\vec{\nabla}T \neq 0$. В этом случае из первого уравнения (1.35), вспоминая определения градиента электрохимического потенциала

$$\vec{\varepsilon} = \vec{E} - \frac{1}{e} \vec{\nabla}\zeta,$$

получаем

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{e} \vec{\nabla}\zeta(\vec{r}) + \hat{\alpha} \vec{\nabla}T. \quad (1.38)$$

Сущность явления термоэдс, или эффекта Зеебека, состоит в том, что в электрической цепи, состоящей из последовательно соединенных проводников, возникает электродвижущая сила (термоэдс), если места спая проводников цепи поддерживаются при различных температурах. В простейшем случае, когда такая цепь состоит из двух проводников, она носит название термоэлемента, или термопары. Коэффициент $\hat{\alpha}$, который в сущности определяет величину термоэдс при разности температур спаев равным одному градусу, называется коэффициентом дифференциальной термоэдс, или коэффициентом Зеебека.

Рассмотрим термопару, составленную из изотропных образцов металла и полупроводника с коэффициентами Зеебека металла α_m и полупроводника α_p . Схематически такая термопара изображена на рис. 2.

Найдем разность потенциалов между точками С и Д на схеме рис. 2, пользуясь формулой (1.38). Для разности потенциалов V_{CD} между точками С и Д получаем

$$V_{CD} = \int_C^D \vec{E}(\vec{r}) d\vec{r} = \int_C^D \alpha(\vec{r}) \vec{\nabla} T d\vec{r} + \frac{1}{e} \int_C^D \vec{\nabla} \zeta d\vec{r}. \quad (1.39)$$

Второй интеграл в правой части формулы (1.39) вклада не дает, поскольку мы предполагаем, что точки С и Д находятся в изотермическом сечении с одинаковым значением химического потенциала ζ .

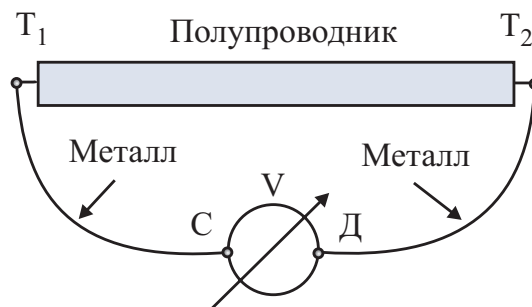


Рис. 2. Схематическое изображение устройства для измерения эффекта Зеебека

Переходя во втором выражении формулы (1.39) от интегрирования по координатам к интегрированию по температуре, после очевидных преобразований получаем

$$V_{CD} = \int_{T_1}^{T_2} (\alpha_n(T) - \alpha_m(T)) dT \simeq (\alpha_n - \alpha_m) (T_2 - T_1). \quad (1.40)$$

Второе из равенств в формуле (1.40) записано для того случая, когда можно пренебречь температурной зависимостью α_n и α_m в интервале температур от T_1 до T_2 .

Как следует из формулы (1.40), экспериментально невозможно найти коэффициент дифференциальной термоэдс для одного материала, поскольку измеряемая разность потенциалов определяется разностью коэффициентов Зеебека для материалов, составляющих термопару. Можно, однако, с точностью, достаточной для практических целей, подобрать термопару так, чтобы один из коэффициентов (α_n) был много больше другого (α_m). Действительно, как будет показано в следующих главах, при достаточно низких температурах $\alpha_m/\alpha_n \simeq k_B T/\zeta_m \approx 10^{-2}$ (k_B – постоянная Больцмана, ζ_m – энергия Ферми электронов в металле). В этом случае можно найти с хорошей точностью значение константы Зеебека для полупроводникового материала. Большей точности можно достичь лишь в области низких температур, используя термопару, одной из ветвей которой является материал в сверхпроводящем состоянии (в сверхпроводящем состоянии коэффициент дифференциальной термоэдс обращается в нуль).

Эффект Томсона

Явление Томсона состоит в том, что если вдоль проводника, по которому пропускается электрический ток, приложить еще и градиент температуры, то в объеме образца в дополнение к джоулеву теплу выделяется тепло Томсона Q , пропорциональное как плотности электрического тока, так и градиенту температуры

$$Q = -\sigma_T \vec{J} \vec{\nabla} T t, \quad (1.41)$$

где σ_T – коэффициент Томсона. Выразим коэффициент σ_T через кинетические коэффициенты, входящие в феноменологические уравнения переноса (1.35). Рассмотрим уравнение (1.10), выражающее баланс теплоты, и подставим в него выражения для градиента электрохимического потенциала $\vec{\varepsilon}$ и плотности потока тепла \vec{J}_Q , используя определения (1.35). В результате несложных преобразований получаем

$$\frac{dQ}{dt} = \text{div}(\hat{\kappa} \vec{\nabla} T) + \vec{J} \hat{\rho} \vec{J} + \vec{J} \left(\alpha - \frac{d\hat{\Pi}}{dT} \right) \vec{\nabla} T. \quad (1.42)$$

При выводе этого уравнения мы воспользовались предположением о постоянстве плотности потока заряда \vec{J} вдоль образца и учли, что коэффициент Пельтье зависит от координат только через температуру: $\hat{\Pi}(\vec{r}) = \hat{\Pi}(T(\vec{r}))$. В этом случае

$$\text{div}(\hat{\Pi} \vec{J}) = \vec{J} \frac{d\hat{\Pi}}{dT} \vec{\nabla} T.$$

В уравнении (1.42) первое слагаемое в правой части определяет поток тепла через поверхность объема проводника за счет явления теплопроводности. Коэффициент $\hat{\kappa}$ имеет смысл теплопроводности электронной системы. Второе слагаемое описывает объемную генерацию джоулева тепла, а коэффициент $\hat{\rho}$ имеет смысл удельного электросопротивления. Третье слагаемое описывает выделение тепла Томсона, поэтому

$$\hat{\sigma}_T = - \left(\hat{\alpha} - \frac{d\hat{\Pi}}{dT} \right). \quad (1.43)$$

Из выражений (1.28), (1.36) следует простая связь между кинетическими коэффициентами $\hat{\Pi}$ и $\hat{\alpha}$: $\hat{\Pi} = \hat{\alpha} T$. Подставляя этот результат в выражение (1.43), получаем другое определение коэффициента Томсона

$$\hat{\sigma}_T = T \frac{d\hat{\alpha}}{dT}. \quad (1.44)$$

Физическую причину явления Томсона легко понять, если исходить из наглядного представления о движении электронов

проводимости в образце при наличии в нем градиента температуры. На рис. 3 изображены два изотермических сечения образца, обозначенные цифрами 1 и 2. Градиентная заливка прямоугольника схематически изображает градиент температуры. Пусть в сечении 1 температура образца T_1 выше, нежели температура T_2 в сечении 2, а движение электронов совпадает с направлением стрелки.

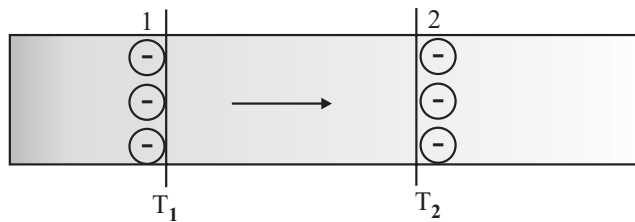


Рис. 3. Схема, поясняющая суть явления Томсона

Будем считать, что расстояние между сечениями 1 и 2 сравнимо с длиной свободного пробега электронов в образце и при движении между этими сечениями они не испытывают столкновений с решеткой. Электроны в сечении 1 находились в состоянии температурного равновесия с решеткой и, перейдя в сечение 2, окажутся там носителями избыточной кинетической энергии. Термализуясь они отдадут избыточную энергию в сечении 2 своему окружению. Именно эта энергия и выделяется в виде тепла Томсона. Проще всего эффект Томсона наблюдать нагревая середину образца, по которому течет ток. В этом случае легко заметить разницу температур на концах проводника.

Явления Пельтье, Томсона и Зеебека тесно связаны между собой, и знание, например, зависимости коэффициента дифференциальной термоэдс от температуры позволяет найти и коэффициент Пельтье, и коэффициент Томсона. Вместе с тем выражение (1.44) в принципе позволяет найти зависимость $\alpha(T)$, если известны значения коэффициента Томсона в широком температурном интервале. Действительно, интегрируя (1.44), получаем

$$\alpha(T) = \int_0^T \frac{\sigma_T(T)}{T} dT. \quad (1.45)$$

Практически это трудно осуществимо из-за достаточно сложных проблем прецизионного измерения эффекта Томсона.

Завершая краткий обзор термоэлектрических эффектов, рассмотрим пример применения соотношений взаимности Онсагера к анализу термоэлектрических явлений.

Задача 1.2

Обобщенные термодинамические потоки и обобщенные термодинамические силы можно определять по-разному. В случае, когда имеется только электрическое поле и градиент температуры, производство энтропии (без учета потока через поверхность), как известно, определяется формулой (1.11)

$$\frac{dS}{dt} = -\vec{J}_Q \frac{\vec{\nabla}T}{T^2} + \vec{J} \frac{\vec{\varepsilon}}{T}.$$

Поэтому можно определить два обобщенных потока

$$I_1 = \vec{\varepsilon}, \quad I_2 = \vec{J}_Q$$

и сопряженные им обобщенные термодинамические силы

$$X_1 = \frac{\vec{J}}{T}, \quad X_2 = -\frac{\vec{\nabla}T}{T^2}.$$

При таком определении обобщенных сил и обобщенных потоков соотношения (1.21) по-прежнему сохраняют свою силу.

Используя приведенные выше определения обобщенных потоков и обобщенных термодинамических сил, выразить обобщенные кинетические коэффициенты L_{ij} через тензорные величины, фигурирующие в уравнении (1.35) и, пользуясь соотношением взаимности Онсагера, установить взаимосвязь тензоров $\hat{\Pi}$ и $\hat{\alpha}$.

Решение

Запишем уравнения переноса двумя способами, используя обобщенные потоки и силы, определенные в условии задачи и с помощью

определений (1.35). В результате получаем

$$\begin{aligned}\vec{\varepsilon} &= L_{11} \frac{\vec{J}}{T} + L_{12} \left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T^2} \right), \\ \vec{J}_Q &= L_{21} \frac{\vec{J}}{T} + L_{22} \left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T^2} \right),\end{aligned}\tag{1.46}$$

$$\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \vec{J} + \hat{\alpha} \vec{\nabla}T, \quad \vec{J}_Q = \hat{\Pi} \vec{J} - \hat{\kappa} \vec{\nabla}T.\tag{1.47}$$

Сравнивая выражения (1.46) и (1.47), легко найти значения коэффициентов L_{ij} :

$$\begin{aligned}L_{11} &= \hat{\rho} T, & L_{12} &= -\hat{\alpha} T^2, \\ L_{21} &= \hat{\Pi} T, & L_{22} &= \hat{\kappa} T^2.\end{aligned}\tag{1.48}$$

Чтобы установить взаимосвязь тензоров Пельтье и дифференциальной термоэдс, используем соотношения взаимности Онсагера. Поскольку термодинамический поток I_1 в данном случае четен относительно операции обращения времени, а поток I_2 нечетен, то соотношения симметрии в соответствии с формулой (1.22) дают $L_{12} = -L_{21}$, откуда и следует искомая взаимосвязь $\hat{\Pi} = \hat{\alpha} T$.

§ 9. Эффекты, возникающие во внешнем магнитном поле

Включение внешнего магнитного поля приводит к появлению дополнительной анизотропии свойств кристаллов. Действительно, пусть среда до включения внешнего поля была изотропной. Тогда внешнее магнитное поле приводит к выделению одного направления в среде, совпадающего с направлением внешнего магнитного поля (ось Z .) Движение заряженной частицы вдоль магнитного поля происходит как квазисвободное, тогда как в плоскости, перпендикулярной оси Z , заряженные частицы, имеющие ненулевую скорость, будут испытывать действие силы Лоренца. Все направления в плоскости, перпендикулярной \vec{H} , останутся при этом эквивалентными. Я. И. Френкель предложил называть такую анизотропию

гиротропией. В гиротропной среде физические свойства остаются неизменными при повороте системы координат на произвольный угол вокруг оси Z . Отсюда следует, что и все кинетические коэффициенты должны быть инвариантными относительно этого преобразования. На основании этих рассуждений, например, для тензора электросопротивления ρ_{ik} получаем

$$\rho'_{ik} = \alpha_{il} \alpha_{km} \rho_{lm} = \rho_{ik}, \quad (1.49)$$

где ρ'_{ik} – значение тензора электросопротивления после преобразования вращения системы координат вокруг оси Z на произвольный угол, α_{il} – матрица, задающая это преобразование.

Требования инвариантности тензора электросопротивления относительно преобразований вращения вокруг оси Z на произвольный угол (1.49) сводятся к тому, что структура этого тензора должна иметь вид

$$\rho_{ik} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & 0 \\ -\rho_{xy} & \rho_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz} \end{pmatrix}. \quad (1.50)$$

Очевидно, что тензорная структура других кинетических коэффициентов в магнитном поле будет точно такой же.

Запишем систему уравнений (1.35) для случая, когда $\vec{H} \neq 0$, учитывая тензорную структуру кинетических коэффициентов (1.50):

$$\varepsilon_x = \rho_{xx} J_x + \rho_{xy} J_y + \alpha_{xx} \nabla_x T + \alpha_{xy} \nabla_y T, \quad (1.51)$$

$$\varepsilon_y = -\rho_{xy} J_x + \rho_{xx} J_y - \alpha_{xy} \nabla_x T + \alpha_{xx} \nabla_y T, \quad (1.52)$$

$$\varepsilon_z = \rho_{zz} J_z + \alpha_{zz} \nabla_z T. \quad (1.53)$$

$$J_{Q_x} = \Pi_{xx} J_x + \Pi_{xy} J_y - \tilde{\kappa}_{xx} \nabla_x T - \tilde{\kappa}_{xy} \nabla_y T, \quad (1.54)$$

$$J_{Q_y} = -\Pi_{xy} J_x + \Pi_{xx} J_y + \tilde{\kappa}_{xy} \nabla_x T - \tilde{\kappa}_{xx} \nabla_y T, \quad (1.55)$$

$$J_{Q_z} = \Pi_{zz} J_z - \tilde{\kappa}_{zz} \nabla_z T. \quad (1.56)$$

Пользуясь системой феноменологических явлений переноса (1.51) – (1.56), перейдем к обсуждению основных явлений в магнитном поле.

Эффекты в продольном магнитном поле

Как следует из формул (1.53), (1.56), магнитное поле не приводит к дополнительным эффектам, если градиент температуры и электрическое поле направлены вдоль оси Z . В действительности магнитное поле может изменять продольную составляющую электросопротивления, дифференциальной термоэдс и электронной теплопроводности. В полупроводниках природа этих эффектов, как правило, связана с влиянием магнитного поля на состояние рассеивателей, определяющих релаксацию импульса и энергии носителей тока. Продольные эффекты могут возникать и в металлах со сложной структурой поверхности Ферми, где они используются для изучения ее структуры. В любом случае интерпретация этих эффектов выходит за рамки вводного курса по физической кинетике, и в дальнейшем эффекты в продольном поле мы рассматривать не будем.

Гальваномагнитные явления. Эффект Холла

В зависимости от условий опыта различают изотермические и адиабатические эффекты. Если исследуемый образец помещен в термостат, то эффекты называются изотермическими, а если он теплоизолирован – адиабатическими. Рассмотрение изотермических явлений начнем с эффекта Холла.

Эффектом Холла называется возникновение электрического поля E_y при пропускании электрического тока J_x и равенстве нулю градиентов температуры в образце (предполагается, что магнитное поле H приложено вдоль оси Z). Типичная геометрия наблюдения эффекта Холла приведена на рис. 4.

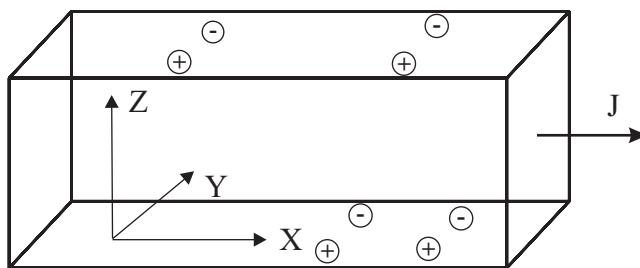


Рис. 4. Схема наблюдения эффекта Холла. Разность потенциалов возникает между передней и задней стенками образца

Эффект Холла принято характеризовать постоянной Холла R . При условии $J_y = 0$, $\nabla_x T = 0$, $\nabla_y T = 0$ на основании уравнения (1.52) имеем

$$R = \frac{\varepsilon_y}{J_x H} = \frac{E_y}{J_x H} = \frac{-\rho_{xy}}{H}. \quad (1.57)$$

Казалось бы, природа возникновения холловской разности потенциалов совершенно очевидна: при пропускании тока вдоль оси X на электроны будет действовать сила Лоренца, направленная вдоль оси Y . Поэтому на задней стенке образца возникнет избыточный отрицательный заряд, а на передней – избыточный положительный заряд (см. рис. 4). Это элементарное рассуждение не выдерживает критики, поскольку исходит из представления, что составляющая скорости v_x всех электронов вдоль оси X одинакова. Если скорости всех электронов одинаковы, то градиент концентрации заряда приведет к созданию электрического поля, которое полностью скомпенсирует действие магнитной составляющей силы Лоренца.

В действительности электроны распределены по скоростям, поэтому полной компенсации силы Лоренца холловским полем не будет: в геометрии рис. 4 более быстрые электроны будут смещаться к задней грани образца, а более медленные – к передней. Убедиться в необходимости учета распределения носителей тока по скоростям при интерпретации гальваномагнитных явлений достаточно легко. Например, изменение электросопротивления в магнитном поле или адиабатический эффект Эттингсауэна (возникновение градиента температуры $\nabla_y T$ при пропускании электрического тока J_x) просто оказались бы равными нулю, если не учитывать распределение электронов по скоростям.

Изменение сопротивления в магнитном поле

Как указывалось выше, изменение электрического сопротивления в магнитном поле можно объяснить, только учитывая распределение электронов по скоростям. В этом случае магнитная составляющая силы Лоренца компенсируется действием

холловской разности потенциалов лишь для электронов, имеющих некую среднюю скорость. Более медленные и более быстрые электроны в промежутках между двумя актами рассеяния будут двигаться по круговым участкам ларморовских орбит, что неизменно приведет к уменьшению их длины свободного пробега в направлении электрического поля. По этой причине следует ожидать увеличение электросопротивления в магнитном поле.

Изменение поперечного сопротивления обычно характеризуется отношением

$$\frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_{xx}} = \frac{\rho_{xx}(H) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)}. \quad (1.58)$$

Адиабатические гальваномагнитные явления.

Эффект Эттинсгаузена

Перейдем к рассмотрению адиабатических гальваномагнитных явлений. Если $J_x \neq 0$, $J_y = 0$, $J_{Q_y} = 0$, $\nabla_x T = 0$, то уравнение (1.55) указывает на появление градиента температуры в Y -направлении при пропускании электрического тока вдоль оси X . Это явление называется эффектом Эттинсгаузена и характеризуется коэффициентом P :

$$P = -\frac{\nabla_y T}{H J_x} = \frac{\Pi_{xy}}{H \tilde{\kappa}_{xx}}. \quad (1.59)$$

Причина возникновения разности температур между передней и задней стенками образца в геометрии, изображенной на рис. 4, состоит в том, что к задней стенке образца будут отклоняться наиболее быстрые («горячие») электроны, а к передней стенке – электроны, имеющие скорость меньше некоторой средней скорости, для которой магнитная составляющая силы Лоренца компенсируется действием поля Холла. Термализуясь, более быстрые электроны отдают избыточную энергию решетке, повышая температуру этой грани образца. Наоборот, более медленные электроны, в силу процессов релаксации энергии, забирают часть энергии от решетки, в результате чего температура передней стенки образца понижается. Таким образом, возникает разница температур между двумя противоположными гранями образца.

Эффект Холла, измеренный в адиабатических условиях

Если выполняются условия адиабатической изоляции вдоль оси Y ($J_{Q_y} = 0$) и отлична от нуля только составляющая тока J_x , то, полагая также, что $\nabla_x T = 0$, из уравнений (1.55) и (1.52) получаем

$$\nabla_y T = -\frac{\Pi_{xy} J_x}{\tilde{\kappa}_{xx}}; \quad (1.60)$$

$$\varepsilon_y = -\left(\rho_{xy} + \frac{\alpha_{xx} \Pi_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}}\right) J_x. \quad (1.61)$$

Определяя коэффициент Холла, измеренный в адиабатических условиях, обычным соотношением $R_{\text{ад}} = \varepsilon_y / J_x H$, имеем

$$R_{\text{ад}} = -\frac{1}{H} \left(\rho_{xy} + \frac{\alpha_{xx} \Pi_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}}\right). \quad (1.62)$$

Физическая причина различия эффекта Холла для изотермических и адиабатических условий измерения состоит в том, что в адиабатических условиях в Y -направлении возникает градиент температуры, который из-за наличия эффекта Зеебека приводит к появлению дополнительного термоэлектрического поля в этом направлении.

Эффект Нернста

Эффект Нернста заключается в возникновении градиента температуры вдоль оси X при отсутствии вдоль нее теплового потока. Этот эффект измеряется при условиях $J_x \neq 0$, $J_y = 0$, $J_{Q_x} = 0$, $\nabla_y T = 0$. В этом случае из уравнения (1.54) для коэффициента Нернста B получаем

$$B = \frac{\nabla_x T}{J_x} = \frac{\Pi_{xx}}{\tilde{\kappa}_{xx}}. \quad (1.63)$$

Следует отметить, что эффект Нернста возможен и при отсутствии внешнего магнитного поля. Магнитное поле лишь изменяет коэффициент B . Физическая природа возникновения явления Нернста довольно проста: протекание электрического

тока по образцу сопровождается и потоком тепла (см. формулу (1.35)). В условиях адиабатической изоляции образца в направлении оси X это приводит к нагреванию одного конца образца и охлаждению другого. Разница температур на концах образца растет до тех пор, пока возникший поток тепла за счет наличия градиента температуры не компенсирует поток тепла, связанный с явлением Пельтье.

При измерении эффекта Нернста возможна и другая ситуация, когда вместо условия $\nabla_y T = 0$ выполняется условие $J_{Q_y} = 0$ (адиабатический эффект Нернста). В этом случае из уравнений (1.54), (1.55) имеем

$$B_{\text{ад}} = \frac{\nabla_x T}{J_x} = \frac{\Pi_{xx} \tilde{\kappa}_{xx} + \Pi_{xy} \tilde{\kappa}_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}^2 + \tilde{\kappa}_{xy}^2}. \quad (1.64)$$

Поперечное электросопротивление в адиабатических условиях

Пусть выполняются условия $J_x \neq 0$, $J_y = 0$, $J_{Q_y} = 0$, $\nabla_x T = 0$. Определим в адиабатических условиях измерения компоненту тензора сопротивления ρ_{xx} условием $\rho_{xx\text{ад}} = \varepsilon_x / J_x$. Тогда, используя уравнения (1.51), (1.60), получаем

$$\rho_{xx\text{ад}} = \rho_{xx} - \frac{\alpha_{xy} \Pi_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}}. \quad (1.65)$$

Второй член в правой части формулы (1.65) обусловлен термомагнитным поперечным эффектом Нернста – Эттинсгаузена, приводящим к появлению дополнительного электрического поля в X -направлении при наличии градиента температур в Y -направлении.

Термомагнитные явления. Поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена

Термомагнитные явления возникают при наличии градиента температуры вдоль одной из осей образца и могут быть измерены как в изотермических условиях, когда остальные грани образца находятся в тепловом контакте с термостатом, так

и в адиабатических условиях, когда остальные грани образца находятся в адиабатических условиях изоляции. В этом случае потоки тепла вдоль оставшихся направлений равны нулю. Рассмотрение начнем с изотермического поперечного эффекта Нернста – Эттинсгаузена.

Поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена заключается в возникновении поперечной разности потенциалов в Y -направлении при наличии градиента температуры $\nabla_x T$ в X -направлении. Пусть выполняются условия $J_x = 0$, $J_y = 0$, $\nabla_y T = 0$. Тогда из уравнения (1.52)

$$\varepsilon_y = -\alpha_{xy} \nabla_x T. \quad (1.66)$$

Обычно поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена характеризуют коэффициентом $Q_{\text{нэ}} = \alpha_{xy}/H$.

Представляет интерес качественно обсудить причину возникновения эффекта Нернста – Эттинсгаузена и факторы, определяющие знак эффекта. Рассмотрим для определенности полупроводниковый образец n -типа, вдоль которого поддерживается постоянный градиент температуры $\nabla_x T$, а магнитное поле приложено вдоль оси Z .

Время свободного пробега электронов, как будет показано в главе 4, зависит от скорости (энергии) электронов и может как возрастать, так и убывать с увеличением энергии электронов в зависимости от того, какой механизм рассеяния определяет время релаксации импульса. Если рассмотреть некоторое сечение образца в направлении, перпендикулярном оси X , то проекция тепловой скорости электронов на ось X будет выше для электронов, пересекающих это сечение со стороны горячего конца образца, нежели скорости электронов, движущихся в противоположном направлении. По этой причине эти электроны будут по-разному отклоняться внешним магнитным полем. Следовательно, в Y -направлении возникнет отличный от нуля электрический ток, который и приведет к возникновению избыточного заряда, создающего электрическое поле E_y . Определить, от каких факторов зависит знак эффекта, можно с помощью следующей простой модели [8].

Пусть в образце имеются две группы электронов: n_1 электронов имеют скорость v_{1x} и движутся от холодного конца образца к горячему, а n_2 электронов имеют скорость v_{2x} ($v_{2x} > v_{1x}$) и движутся от горячего конца образца к холодному. В отсутствие магнитного поля электроны движутся только вдоль оси X , причем в стационарных условиях должно выполняться соотношение

$$n_1 v_{1x} = n_2 v_{2x}. \quad (1.67)$$

При помещении проводника в магнитное поле возникает поток заряда в Y -направлении:

$$\begin{aligned} J_y &= e (n_1 v_{1x} - n_2 v_{2x}) = \\ &= (n_1 v_{1x} \operatorname{tg} \varphi_1 - n_2 v_{2x} \operatorname{tg} \varphi_2), \end{aligned} \quad (1.68)$$

где $\varphi_1 = \omega_0 \tau_1$, $\varphi_2 = \omega_0 \tau_2$ – углы, характеризующие изменение вектора скорости электронов между двумя последовательными столкновениями, или углы Холла для медленной и быстрой групп электронов. ω_0 – частота ларморовской прецессии в магнитном поле, τ_1 и τ_2 – времена свободного пробега для электронов со скоростями v_1 и v_2 . Параметры $\varphi_1 = \omega_0 \tau_1$, $\varphi_2 = \omega_0 \tau_2$ в условиях некантованного магнитного поля много меньше единицы, и, следовательно, $\operatorname{tg} \varphi_1 \simeq \varphi_1$, $\operatorname{tg} \varphi_2 \simeq \varphi_2$. Оставляя в уравнении (1.68) лишь члены первого порядка по малому параметру $\omega_0 \tau$, вместо (1.68) получаем простое уравнение

$$J_y = e n_1 v_{1x} \omega_0 (\tau_1 - \tau_2), \quad (1.69)$$

из которого следует, что знак поперечного эффекта Нернста – Эттинсгаузена зависит от того, возрастает или убывает время релаксации τ с увеличением энергии электронов. Таким образом, изменение знака эффекта Нернста – Эттинсгаузена при варьировании температуры указывает на смену механизма релаксации импульса электронов. Качественные выводы, сделанные на основе формулы (1.69), полностью подтверждаются при последовательном вычислении величины $Q_{\text{нэ}}$ на основании решения кинетического уравнения.

Продольный эффект Нернста – Эттинсгаузена

Этот эффект заключается в изменении термоэдс при включении внешнего магнитного поля. Пусть $\nabla_x T \neq 0$, $\nabla_y T = 0$, $J_x = J_y = 0$. В этом случае из уравнения (1.51) получаем

$$\varepsilon_x = \alpha_{xx}(H) \nabla_x T. \quad (1.70)$$

Представляет интерес выяснить, от каких факторов зависит знак изменения дифференциальной термоэдс в магнитном поле. Будем исходить из той же самой модели проводника, которую мы использовали для анализа поперечного эффекта Нернста – Эттинсгаузена. При включении внешнего магнитного поля составляющие скоростей v_{1x} и v_{2x} изменятся и вместо уравнения баланса (1.67) в стационарных условиях получим

$$\begin{aligned} n'_1 v_{1x}(H) &= n'_2 v_{2x}(H), \\ v_{1x}(H) &= v_{1x} \cos \omega_0 \tau_1, \quad v_{2x}(H) = v_{2x} \cos \omega_0 \tau_2, \end{aligned} \quad (1.71)$$

где n'_1 и n'_2 – числа электронов со скоростями $v_{1x}(H)$ и $v_{2x}(H)$ соответственно. Раскладывая в формуле (1.71) $\cos \omega_0 \tau$ в ряд и ограничиваясь первыми не исчезающими членами по малому параметру $\omega_0 \tau$, с учетом (1.67) получаем

$$\frac{n'_1}{n'_2} = \frac{n_1}{n_2} \left(1 + \frac{\omega_0^2}{2} (\tau_1^2 - \tau_2^2) \right). \quad (1.72)$$

Число электронов на холодном конце n'_1 при включении магнитного поля возрастет и изменение термоэдс будет положительным, если время релаксации окажется выше для более медленных электронов, и, наоборот, знак эффекта будет отрицательным, если время релаксации электронов растет с увеличением скорости \vec{v} .

Эффект Маджи – Риги – Ледюка

Эффект состоит в изменении теплопроводности в магнитном поле и определяется при условиях $\nabla_x T \neq 0$, $\nabla_y T = 0$, $J_x = J_y = 0$. Из уравнения (1.54) получаем

$$\tilde{\kappa}_{xx}(H) = -\frac{J_{Qx}}{\nabla_x T}. \quad (1.73)$$

Физическая причина изменения электронной составляющей теплопроводности фактически та же, что и изменения поперечного электросопротивления: уменьшение проекции длины свободного пробега электронов в магнитном поле на направление градиента температуры.

Адиабатические термомагнитные эффекты

Все перечисленные выше изотермические эффекты имеют свои адиабатические аналоги, которые измеряются при условиях $J_x = J_y = 0$, $J_{Q_y} = 0$, $\nabla_x T \neq 0$. Ниже приведены выражения, определяющие коэффициенты, которыми обычно характеризуют адиабатические поперечный и продольный эффекты Нернста – Эттинсгаузена и адиабатический эффект Маджи – Риги – Ледюка:

$$Q_{\text{нэ ад}} = \frac{1}{H} \left(\alpha_{xy} - \frac{\alpha_{xx} \tilde{\kappa}_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}} \right), \quad (1.74)$$

$$\alpha_{xx \text{ ад}} = \alpha_{xx} + \frac{\alpha_{xy} \tilde{\kappa}_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}}, \quad (1.75)$$

$$\tilde{\kappa}_{xx \text{ ад}} = \tilde{\kappa}_{xx} + \frac{\tilde{\kappa}_{xy}^2}{\tilde{\kappa}_{xx}}. \quad (1.76)$$

Причина отличия изотермических эффектов от адиабатических состоит в том, что в условиях адиабатической изоляции возникает дополнительный градиент температуры в Y -направлении, который, действуя как новая термодинамическая сила, приводит к изменению разности потенциалов в Y -направлении в поперечном эффекте Нернста – Эттинсгаузена и определяет появление вторых слагаемых в правых частях формул (1.75), (1.76). Возникновение градиента температур в Y -направлении обусловлено эффектом Риги – Ледюка.

Действительно, для условий, в которых измеряются перечисленные адиабатические термомагнитные явления, из уравнения (1.55) следует

$$\nabla_y T = \frac{\tilde{\kappa}_{xy}}{\tilde{\kappa}_{xx}} \nabla_x T. \quad (1.77)$$

Обычно величину эффекта Риги – Ледюка характеризуют коэффициентом

$$S_{\text{рл}} = \frac{\nabla_y T}{H \nabla_x T}.$$

На основе этого определения из формулы (1.77) получаем выражение коэффициента Риги – Ледюка через компоненты тензора теплопроводности:

$$S_{\text{рл}} = \frac{\tilde{\kappa}_{xy}}{H \tilde{\kappa}_{xx}}. \quad (1.78)$$

Подстановка выражения (1.77) в формулы (1.51), (1.52), (1.54) позволяет легко получить приведенные выше значения (1.74) – (1.76) для коэффициентов, определяющих термомагнитные явления в адиабатических условиях измерения.

В заключение этого параграфа установим некоторые соотношения, связывающие кинетические коэффициенты, определяемые в рассмотренных выше эффектах. Наиболее очевиден тот факт, что все адиабатические эффекты выражаются через кинетические коэффициенты, определяемые при изотермических условиях. Действительно,

$$R_{\text{ад}} = R - \alpha_{xx} P, \quad (1.79)$$

$$\rho_{xx \text{ ад}} = \rho_{xx} - H^2 Q_{\text{нэ}} P, \quad (1.80)$$

$$Q_{\text{нэ ад}} = Q_{\text{нэ}} - \alpha_{xx} S_{\text{рл}}, \quad (1.81)$$

$$\alpha_{xx \text{ ад}} = \alpha_{xx} + H^2 Q_{\text{нэ}} S_{\text{рл}}, \quad (1.82)$$

$$\tilde{\kappa}_{xx \text{ ад}} = \tilde{\kappa}_{xx} (1 + H^2 S_{\text{рл}}^2). \quad (1.83)$$

Для вывода добавочных связей между кинетическими коэффициентами необходимо привлечь соотношение $\hat{\Pi} = \hat{\alpha} T$, следующее из принципа взаимности Онсагера. В результате получаем ряд дополнительных уравнений взаимосвязи

$$B \tilde{\kappa}_{xx} = T \alpha_{xx}, \quad (1.84)$$

$$P \tilde{\kappa}_{xx} = T Q_{\text{нэ}}, \quad (1.85)$$

$$B_{\text{ад}} \tilde{\kappa}_{xx \text{ ад}} = T \alpha_{xx \text{ ад}}. \quad (1.86)$$

Возможны и другие соотношения, которые уже не вытекают из общих принципов линейной неравновесной термодинамики, а являются следствием использованной модели.

1.3. Самоорганизация в сильнонеравновесных системах

§ 10. Диссипативные неравновесные структуры

Развитие физики, химии и биологии за последнее столетие позволило накопить достаточно большое количество примеров сильнонеравновесных систем, в которых неравновесность служит источником упорядоченности. Классическим примером является возникновение ячеек Бенара – своеобразной структуры конвективного движения в жидкости при наличии градиента температуры, направленного вдоль поля сил тяготения, открытого еще в 1901 г. Другим примером может служить генерация электромагнитных колебаний при пропускании постоянного тока в диодах Гана. Основной отличительной особенностью систем, демонстрирующих самоорганизацию, является то, что за счет энергии, получаемой этими системами извне, в них возникают и поддерживаются упорядоченные структуры, которых не было в равновесном состоянии. Такие структуры могут существовать лишь за счет притока энергии или вещества и поэтому их естественно назвать диссипативными структурами. Примером диссипативной структуры может служить большой город или даже земная цивилизация в целом.

Для самоорганизации характерно создание пространственных, временных или пространственно-временных структур. Очевидно, что это возможно только в том случае, если в таких системах имеется кооперативное поведение, когда разные части системы ощущают взаимное влияние. Все это послужило поводом выделить явления самоорганизации в сильнонеравновесных системах в особую науку, которую немецкий физик Г. Хакен назвал *синергетикой* (synergeia в переводе с греческого означает совместное действие, кооперацию). Многочисленные примеры других систем, в которых возникают диссипативные структуры, и существующие методы их описания можно найти в специальной литературе [9–12].

Механизм образования диссипативных структур следует отличать от механизма образования равновесных структур. Для изолированных равновесных систем действует принцип возрастания энтропии, а устойчивому равновесному состоянию соответствует максимальная энтропия. Для равновесных систем в термостате действует принцип минимальности свободной энергии (примером могут служить электрические или магнитные домены). Здесь возможно образование пространственных структур, возникновение которых не противоречит принципам равновесной термодинамики.

Подходы, основанные на принципах равновесной термодинамики, к диссипативным структурам неприменимы вообще. Например, появление диссипативных конвективных структур Бенара следует считать проявлением конвективной неустойчивости жидкости. С этой точки зрения, конвективный характер движения в жидкости существует всегда в виде достаточно малых флуктуаций, которые при малом значении градиента температуры не координированы и затухают на временах, меньших, нежели время, необходимое для координации этих флуктуаций. При возрастании величины градиента температуры выше некоторого критического значения возникает бифуркация (бифуркация происходит от лат. *bifurcus* – «раздвоенный» и употребляется для обозначения качественного изменения поведения системы при изменении некоторого управляющего параметра) и в системе возникает конвективное движение.

§ 11. Универсальный критерий эволюции Гленсдорфа – Пригожина

Как отмечалось выше, для линейных неравновесных процессов можно определить различные вариационные принципы, например принцип наименьшего рассеяния энергии Онсагера, который утверждает, что функционал (1.30) максимален при варьировании по обобщенным силам в условиях постоянства потоков. Для систем, находящихся в стационарных условиях, можно сформулировать вариационный принцип Пригожина, согласно

которому стационарное слабонерасовновесное состояние открытой системы, в которой протекает необратимый процесс, характеризуется минимальным производством энтропии при заданных внешних условиях, препятствующих достижению равновесия. Эти принципы носят, скорее, эвристический характер, не давая в руки исследователю методов построения описания той или иной системы. Зато они позволяют выяснить, не противоречит ли построенная теория неким общим положениям или принципам.

При рассмотрении нелинейных эффектов обычно предполагается, что производство энтропии по-прежнему можно записать в виде суммы произведений потоков и сопряженных им термодинамических сил:

$$\dot{S} = \int \sum_i I_i X_i dv. \quad (1.87)$$

Более того, обычно предполагают, что обобщенные кинетические коэффициенты можно определить соотношениями типа (1.24), но для нелинейных систем они вычисляются по неравновесному состоянию системы и поэтому сами являются функциями обобщенных термодинамических сил. Поскольку в нелинейном случае кинетические коэффициенты оказываются функцией обобщенных сил, прямое применение вариационного принципа Онсагера или Пригожина для таких систем неправомерно: ни функционал (1.30), ни производство энтропии (1.32) не обладают экстремальными свойствами.

Производную по времени производства энтропии (1.87) можно разбить на часть, обусловленную изменением потоков, и часть, обусловленную изменением термодинамических сил во времени:

$$\frac{d\dot{S}}{dt} = \int \sum_i \frac{dI_i}{dt} X_i dv + \int \sum_i I_i \frac{dX_i}{dt} dv. \quad (1.88)$$

Поведение первого слагаемого формулы (1.88) является неоднозначным, тогда как второе слагаемое удовлетворяет неравенству общего характера, которое в литературе известно как

принцип эволюции Гленсдорфа – Пригожина. Согласно этому принципу, в любой неравновесной системе с фиксированными граничными условиями процессы идут таким образом, что скорость изменения производства энтропии, обусловленная изменением термодинамических сил, уменьшается со временем:

$$\frac{d_X \dot{S}}{dt} = \int \sum_i I_i \frac{dX_i}{dt} dv \leq 0. \quad (1.89)$$

Критерий эволюции Гленсдорфа – Пригожина (1.89) называют универсальным критерием эволюции, поскольку пока не обнаружены ситуации, для которых неравенство (1.89) нарушается.

Задача 1.3

Проверить справедливость критерия эволюции Гленсдорфа – Пригожина (1.89) для явления теплопроводности с фиксированным значением градиента температуры на границе образца.

Решение

В случае теплопроводности имеется один обобщенный поток

$$I_1 = \vec{J}_Q$$

и сопряженная ему термодинамическая сила

$$X_1 = \vec{\nabla} \frac{1}{T}.$$

Конкретизируем выражение (1.89) применительно к этому случаю:

$$\frac{d_X \dot{S}}{dt} = \int \vec{J}_Q \frac{d}{dt} \vec{\nabla} \frac{1}{T} dv. \quad (1.90)$$

Преобразуем подынтегральный член в правой части (1.90):

$$\vec{J}_Q \frac{d}{dt} \vec{\nabla} \frac{1}{T} = \operatorname{div} \left(J_Q \frac{d}{dt} \frac{1}{T} \right) - \left(\frac{d}{dt} \frac{1}{T} \right) \operatorname{div} \vec{J}_Q.$$

Подставим этот результат в выражение (1.90). Преобразуя объемный интеграл в поверхностный, получаем

$$\frac{d_X \dot{S}}{dt} = \oint_S \vec{J}_Q \frac{d}{dt} \frac{1}{T} d\vec{S} - \int_V \left(\frac{d}{dt} \frac{1}{T} \right) \operatorname{div} \vec{J}_Q dv. \quad (1.91)$$

Поскольку предполагается, что на границе объема образца температура является фиксированной, то поверхностный интеграл в правой части формулы (1.91) обращается в нуль. Это условие может выполняться в открытых системах, когда изучаемая неравновесная система окружена внешними телами. Чтобы преобразовать объемный интеграл в правой части формулы (1.91), используем уравнение баланса тепла (1.10), записав его применительно к нашим условиям в виде

$$\frac{d\rho_0 C_v T}{dt} = -\operatorname{div} \vec{J}_Q.$$

В этой формуле ρ_0 — плотность образца, C_v — его теплоемкость.

В результате простых преобразований получаем

$$\frac{d_X \dot{S}}{dt} = - \int_V \frac{\rho_0 C_v}{T^2} \left(\frac{dT}{dt} \right)^2 dv \leq 0. \quad (1.92)$$

Знак равенства соответствует здесь стационарному состоянию. В результате проделанных вычислений мы показали, что для частного случая сильнонеравновесной системы, в которой осуществляется теплотперенос, скорость изменения производства энтропии за счет изменения внешних сил является отрицательной величиной.

§ 12. Способы описания сильнонеравновесных систем

Построить уравнения, описывающие поведение сильнонеравновесных систем, хотелось бы, конечно, из первых принципов, подобно тому, как строятся уравнения равновесной термодинамики в рамках равновесной статистической теории. При реализации этой программы сразу возникает проблема возникновения необратимого поведения. Как, взяв за основу, например, обратимые во времени динамические уравнения Ньютона, получить уравнения, пригодные для описания неравновесной системы? До недавних пор казалось, что между полностью детерминированным механическим описанием и статистическим описанием существует глубокая пропасть, преодолеть которую в рамках существующей парадигмы невозможно. Однако еще в трудах А. Пуанкаре были высказаны идеи детерминированного хаоса, которые позволяют преодолеть эту пропасть. Во второй

половине прошлого века благодаря трудам А. Н. Колмогорова, В. И. Арнольда, Я. Г. Синая, Г. М. Заславского и других ученых была развита стройная теория, позволяющая сформулировать условия, при которых динамическое описание системы становится бессмысленным и для ее описания требуется статистический подход.

Подход, основанный на представлениях о динамическом хаосе, весьма полезен для понимания принципов неравновесной статистической механики, и мы обсудим эти идеи в конце раздела, посвященного самоорганизации в сильнонеравновесных системах. Следует, однако, признать, что он мало пригоден для решения конкретных задач динамики сильнонеравновесных систем.

Бурный рост работ по теории самоорганизации в конце прошлого столетия связан в основном с появлением нового направления в математике, возникшего на стыке двух дисциплин — топологии и теории дифференциальных уравнений (математического анализа). Обе эти дисциплины слились в единую стройную теорию благодаря французскому математику Р. Тома, объединившему в своих трудах усилия предшественников Х. Уитни (топология) и А. Пуанкаре, А. Ляпунова, А. Андронова (качественная теория дифференциальных уравнений). С легкой руки английского математика К. Зимана новое направление получило название теории катастроф.

Громкое название породило огромное число спекуляций мистического содержания, не имеющих ничего общего с математикой или физикой. В действительности под катастрофой понимается скачкообразное изменение, возникающее в системе в ответ на плавное изменение внешних условий. В большинстве случаев, представляющих интерес для приложений в физике, речь идет о качественной перестройке (бифуркациях) характера решений дифференциальных уравнений определенного вида при плавном изменении одного из управляющих параметров.

Сущность нового подхода, определяющая его практическую ценность, состоит в том, что, как отмечал еще А. Пуанкаре,

очень часто нет необходимости получать полное решение сложной нелинейной системы дифференциальных уравнений, а достаточно ограничиться информацией о качественном поведении решений. Полное решение, даже если бы его удалось получить, затратив огромные усилия, способно лишь затруднить анализ поведения таких систем.

После сделанных выше замечаний можно поставить вопрос: как следует описывать сильнонеравновесные системы, способные к самоорганизации? Ясно, что для описания этих систем не подходит аппарат механики, поскольку механическое описание на языке координат и скоростей частиц, составляющих систему, является слишком мелкоструктурным, и для систем, демонстрирующих кооперативное поведение, оно окажется слишком сложным. Вместе с тем термодинамический подход, как уже указывалось выше, также неприемлем для описания этих систем.

По этой причине в большинстве случаев сильнонеравновесные системы с самоорганизацией принято описывать, определяя эволюцию подходящего набора макроскопических переменных, для которых предварительно должны быть найдены некие динамические уравнения движения. Строго говоря, этот подход выпускает из рассмотрения наиболее сложный этап вывода уравнений, описывающих эволюцию сильнонеравновесных систем из первых принципов (принципов неравновесной статистической механики), заменяя его полуфеноменологическим выводом подходящих динамических уравнений.

Если система остается пространственно однородной, то это должны быть дифференциальные уравнения первого порядка по времени (уравнения более высокого порядка можно всегда свести к системе уравнений первого порядка). После того как система уравнений найдена, для качественного анализа характера решений используются подходы, основанные на теории катастроф.

В качестве примера приведем вывод уравнений модели «хищник – жертва» Вольтерра – Лотки, описывающей численность популяции хищников (тунца) и жертвы (сардин), связанных

единой пищевой цепью. Модель «хищник – жертва» была предложена В. Вольтерра в 1920 г. Найденные им математические уравнения совпали с уравнениями А. Лотки, которые он предложил для гипотетической схемы реакций с образованием неустойчивого промежуточного соединения. Так возникла знаменитая модель Вольтерра – Лотки, получившая название «хищник – жертва» и присутствующая во всех монографиях, где обсуждается теория самоорганизации.

Пусть n_1 – количество «травоядных» в популяции, n_2 – количество «хищников». Тогда динамика популяций «хищников» и «травоядных» определится уравнениями

$$\begin{aligned}\dot{n}_1 &= \gamma_1 n_1 - \beta n_1 n_2, \\ \dot{n}_2 &= \beta n_1 n_2 - \gamma_2 n_2.\end{aligned}\tag{1.93}$$

Согласно уравнениям (1.93), скорость размножения «травоядных» пропорциональна их количеству n_1 и зависит от константы γ_1 , регулирующей скорость размножения. С другой стороны скорость уменьшения популяции пропорциональна числу «хищников» и числу «жертв» (β – некоторая константа). Скорость увеличения популяции хищников зависит от произведения $n_2 n_1$, поскольку определяется как числом особей «хищников», так и наличием корма. Скорость вымирания «хищников» зависит от их количества и определяется константой γ_2 .

Характерно, что система (1.93) является нелинейной. Временная зависимость $n_1(t)$ изображена на рис. 5. Аналогичную периодическую временную зависимость (с некоторым сдвигом по временной шкале) имеет и популяция n_2 .

Вместо того чтобы изучать временную зависимость, можно построить фазовый портрет системы. В случае модели «хищник – жертва» фазовое пространство представляет собой координатную плоскость с осями n_1 и n_2 . Каждому состоянию системы будет соответствовать точка в фазовом пространстве, а множество точек, отображающих состояние системы в разные моменты времени, и представляет фазовый портрет. На рис. 6 изображен фазовый портрет задачи «хищник – жертва».

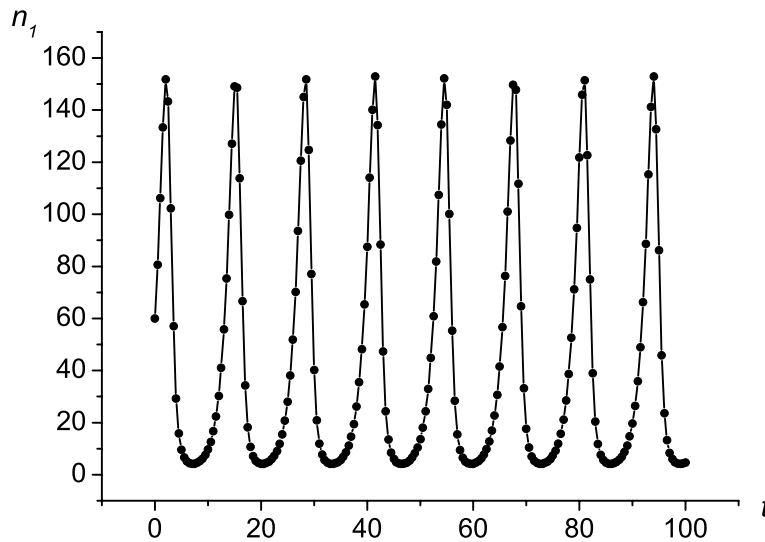


Рис. 5. Периодические колебания численности популяции n_1 в задаче «хищник – жертва»:

$n_1(0) = 60, n_2(0) = 20$; параметры $\gamma_1 = 0,3712, \beta = 0,0097, \gamma_2 = 0,3952$

О наличии почти периодических колебаний в модели «хищник – жертва» свидетельствует то, что фазовый портрет представляет собой замкнутую кривую, напоминающую окружность. Анализ фазовых портретов является весьма распространенным приемом изучения систем, демонстрирующим самоорганизацию.

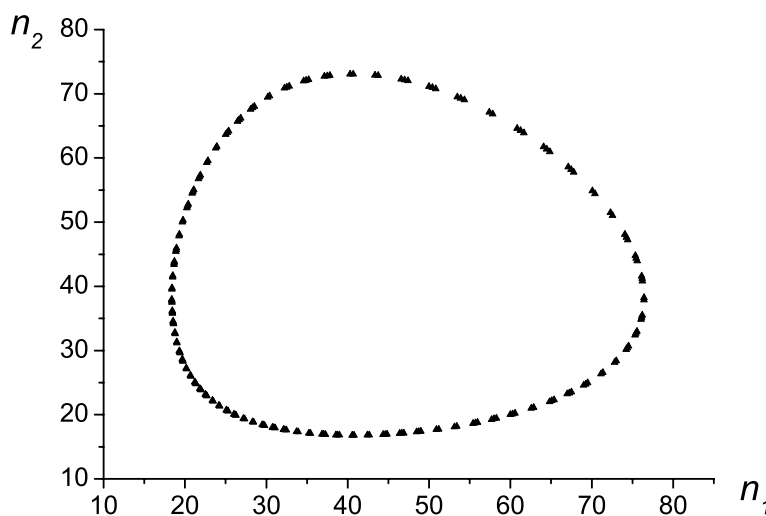


Рис. 6. Фазовый портрет задачи «хищник – жертва» (параметры модели такие же, как на рис. 5)

Обобщая полученные выше результаты, будем описывать состояние сильнонеравновесной системы набором переменных $q_1(\vec{r}, t), q_2(\vec{r}, t), \dots, q_n(\vec{r}, t)$, зависящих от координат и времени. Совокупность величин q_1, q_2, \dots, q_n определяет вектор состояния системы \vec{q} (точку в фазовом пространстве, которая однозначно характеризует состояние системы).

Зависимость $q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t)$ определяет эволюцию системы во времени. Для трех и более динамических переменных фазовый портрет системы построить достаточно сложно. В этом случае ее поведение можно изучить, рассекая фазовое пространство плоскостью и анализируя прохождение фазовых точек через эту плоскость (сечение Пуанкаре).

Более подробно методы получения информации о качественном поведении решений нелинейных систем уравнений будут рассмотрены в ближайших параграфах.

§ 13. Устойчивость состояний сильнонеравновесных систем

Будем полагать, что сильнонеравновесная система описывается набором макропараметров $q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t)$, для которых можно записать систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dq_i}{dt} = f_i(q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t), B); \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1.94)$$

где B – некоторые параметры, задающие внешние и внутренние условия. Функции f_i предполагаются дифференцируемыми. Как следует из записи (1.94), в правых частях уравнений нет явной временной зависимости. Дифференциальные уравнения, правые части которых не содержат явной временной зависимости, обычно называют *автономными*.

В силу теоремы о существовании и единственности решения, через каждую точку фазового пространства проходит одна-единственная фазовая траектория. Это означает, что фазовые траектории не пересекаются.

Качественный анализ решений обычно начинают с поиска стационарных точек, которые подчиняются уравнениям

$$\frac{dq_i}{dt} = 0; \quad f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, B) = 0; \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.95)$$

Стационарным состояниям соответствуют фиксированные точки фазового пространства. Если функции $f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, B)$ являются нелинейными, то решений, удовлетворяющих уравнениям

$$f_i(q_1, q_2, \dots, q_n, B) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

может быть достаточно много, и тогда встает вопрос, в каком из возможных состояний окажется система. Эта задача в значительной степени уже не столько математическая, сколько физическая. В каждой реальной физической системе существуют флуктуации параметров. Пусть набор параметров q_i^s , $i = 1, 2, \dots, n$ определяет некоторую стационарную особую точку, а $q_i(t) = q_i^s + \delta q_i$ определяет состояние, возникающее в результате флуктуации вблизи стационарного состояния. Если стационарная точка устойчива, то находящаяся в таком состоянии система нечувствительна к небольшим флуктуациям. Наоборот, если стационарная точка неустойчива, то флуктуации будут нарастать и система покинет стационарную точку.

Вопрос об устойчивости стационарных состояний допускает множество толкований. Рассмотрим несколько различных понятий устойчивости.

Асимптотическая устойчивость предполагает, что состояние является устойчивым и, кроме того, всегда можно найти $\varepsilon > 0$ такое, что при

$$|\vec{q}^s - \vec{q}_0'| < \varepsilon \quad \lim_{t \rightarrow \infty} |\vec{q}^s - \vec{q}(\vec{q}_0')| = 0. \quad (1.96)$$

В приведенной формуле \vec{q}_0' — некоторая точка вблизи стационарного состояния, в которой находилась система в начальный момент времени. Если стационарная точка асимптотически устойчива, то это означает, что все системы, фазовые точки которых расположены в некоторой окрестности стационарной точки, по истечении некоторого промежутка времени окажутся в стационарной точке. Именно поэтому асимптотически устойчивые состояния принято называть *аттракторами*, а стационарные точки, удовлетворяющие условию (1.96), — *притягивающими*, или *аттракторными*. Все множество точек, притягивающихся к \vec{q}^s , называют областью притяжения данного решения.

Все состояния термодинамического равновесия, которые не являются критическими точками, асимптотически устойчивы.

§ 14. Глобальный критерий устойчивости по Ляпунову

Стационарная особая точка \vec{q}^s является устойчивой, если в некоторой окрестности этой точки D удастся построить некоторую положительно (отрицательно) определенную функцию $V(q_1, q_2, \dots, q_n)$ такую, что ее производная dV/dt неположительно (неотрицательно) определена во всей области D . Устойчивость является асимптотической, если знаки V и dV/dt противоположны.

По существу, теорема Ляпунова обобщает метод потенциалов на системы, которые потенциалом не обладают. Важное значение этой теоремы в том, что если такую функцию удастся построить, то для решения вопроса устойчивости нет нужды решать уравнения движения, а нужно исследовать функции

$$V(q_1, q_2, \dots, q_n) \quad \text{и} \quad \frac{dV}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{dV}{dq_i} f_i(q_1, q_2, \dots, q_n), \quad (1.97)$$

поскольку из уравнений (1.95) следует, что $\dot{q}_i = f_i(q_1, q_2, \dots, q_n)$.

Практическая значимость этой теоремы не столь велика, поскольку она неконструктивна и ничего не говорит о том, как нужно строить такую функцию. Существует, однако, несколько простых примеров. В качестве первого рассмотрим функцию, описывающую поведение энтропии в зависимости от обобщенных координат при отклонении системы от состояния равновесия. Из условия экстремальности энтропии в равновесном состоянии следует, что отклонение энтропии от равновесного значения $\delta S \leq 0$. С другой стороны, в изолированной системе производство энтропии $\dot{S} \geq 0$. Таким образом, энтропия S является функцией Ляпунова для изолированной системы вблизи состояния термодинамического равновесия, а равновесное состояние является асимптотически устойчивым (аттрактором).

Другой пример функции Ляпунова взят из области линейной неравновесной термодинамики. Здесь роль функции Ляпунова может играть производство энтропии

$$\dot{S} = \sum_i I_i X_i \geq 0, \quad \frac{d\dot{S}}{dt} \leq 0. \quad (1.98)$$

Для систем, далеких от равновесия, также можно ввести функцию Ляпунова. Это становится особенно очевидным для систем, в которых потоки являются стационарными. Роль функции Ляпунова здесь снова может играть производство энтропии:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \sum_i I_i X_i \geq 0, \\ \frac{d_X \dot{S}}{dt} &= \frac{d\dot{S}}{dt} = \int \sum_i I_i \frac{dX_i}{dt} dv \leq 0. \end{aligned} \quad (1.99)$$

Доказательство теоремы Ляпунова для некоторых частных случаев можно найти в монографии Дж. Кайзера [13].

Можно сформулировать и другие критерии устойчивости решения дифференциальных уравнений.

Решение $\vec{q}(t)$ системы динамических уравнений (1.94) называется устойчивым (по Ляпунову), если для любых t_0 и $\varepsilon > 0$ существует величина $\eta = \eta(t_0, \varepsilon)$ такая, что для всякого решения $\vec{q}'(t)$, удовлетворяющего в момент t_0 условию

$$|\vec{q}(t_0) - \vec{q}'(t_0)| < \eta,$$

выполняется неравенство

$$|\vec{q}(t) - \vec{q}'(t)| < \varepsilon \quad \text{при } t \geq t_0. \quad (1.100)$$

Если при $t \rightarrow \infty$ выполняется условие

$$|\vec{q}(t) - \vec{q}'(t)| \rightarrow 0,$$

то можно говорить об асимптотической устойчивости решения.

Можно дать простую словесную интерпретацию условию (1.100). Решение (или движение) *устойчиво по Ляпунову*, если все решения (движения), находившиеся в начальный момент в непосредственной близости от него, продолжают оставаться в его окрестности. Решение (движение) асимптотически устойчиво, если все смежные решения асимптотически приближаются к нему. Устойчивость по Ляпунову накладывает весьма сильные ограничения на характер решения, так как требуется близость траекторий при всех t .

Менее строгим и более полезным при рассмотрении предельных циклов и хаотических траекторий является понятие *орбитальной устойчивости*. Для орбитальной устойчивости близкие в начальный момент времени траектории не обязательно должны быть близкими во все другие моменты времени. Здесь условие (1.100) заменяется более мягким: минимальное расстояние между траекториями должно быть меньше некоторого наперед заданного числа

$$|\vec{q}(t) - \vec{q}'(t')| < \varepsilon \quad \text{при } t \geq t_0, \quad t' \geq t_0. \quad (1.101)$$

Смысл понятия орбитальной устойчивости состоит в том, что если имеются две близкие циклические траектории, то фазовые точки систем, близкие в начальный момент времени, могут сильно разойтись по истечении достаточно большого промежутка времени, например из-за разных периодов обращения. В этом случае решение не будет устойчиво по Ляпунову, но будет орбитально устойчиво (рис. 7).

Во многих физически интересных случаях, как уже указывалось, правая часть динамических уравнений (1.94) зависит от некоторого набора параметров B . Пусть b_k — один из них. Если решение при изменении параметра b_k на величину δb_k меняется на величину $|\delta \vec{q}| \simeq \delta b_k$, то такое решение называется *структурно устойчивым*. Все значения параметров b_k , при небольшом изменении которых фазовый портрет изменяется лишь количественно, будем называть обыкновенными значениями параметра. Значения параметра b_k , при небольшом изменении которого имеет место качественное изменение траектории, назовем *критическими*, или

т о ч к а м и в е т в л е н и я. Точки ветвления (бифуркации) играют важную роль в процессе формирования структур при необратимых процессах.

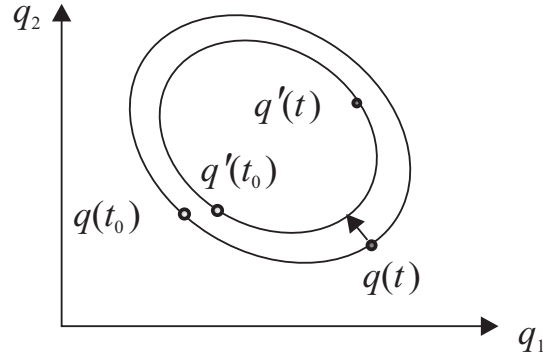


Рис. 7. К понятию орбитальной устойчивости: две фазовые точки $q(t_0)$ и $q'(t_0)$, близкие в начальный момент, сильно разошлись к моменту t , но минимальное расстояние между орбитами (показано стрелкой) осталось малым

Полный анализ структурной устойчивости динамических систем можно дать только для случаев одной или двух степеней свободы. Для произвольного числа степеней свободы исследован лишь случай градиентных систем, когда динамические уравнения движения имеют вид

$$\frac{dq_i}{dt} = -\frac{d}{dq_i} V(q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t), B), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.102)$$

Работы известного французского математика Р. Тома, приложившего много усилий для популяризации теории катастроф, как раз посвящены структурной устойчивости динамических систем, которые описываются уравнениями (1.102).

§ 15. Динамические системы с одной степенью свободы

Рассмотрим случай, когда динамика системы описывается одной переменной $q(t)$, подчиняющейся уравнению движения

$$\frac{dq}{dt} = f(q), \quad (1.103)$$

где $f(q)$ – некоторая функция динамической переменной q (система является автономной, поэтому правая часть уравнения (1.103) явно от времени не зависит).

Фазовое пространство в этом случае является линией, а точки стационарных состояний определяются решением уравнения $f(q) = 0$.

В силу теоремы единственности, если система начала свое движение не из стационарного состояния, то она не может достигнуть его за конечный промежуток времени. В противном случае, вопреки теореме единственности, уравнение (1.103) имело бы два решения: $q(t)$ и стационарное решение q^s . Поэтому система может только асимптотически стремиться к стационарному состоянию, если оно устойчиво. Для того чтобы исследовать устойчивость системы вблизи точек стационарных состояний, разложим функцию $f(q)$ в ряд в окрестности стационарных точек, ограничиваясь первым не исчезающим членом.

Для одномерной системы возможны лишь три ситуации, изображенные на рис. 8. Для стационарных точек q_1^s и q_2^s можно ограничиться линейными членами при разложении $f(q)$ по q в правой части (1.103). Тогда для отклонений $x(t) = q(t) - q^s$ получаем линеаризованные уравнения

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(q^s) + f'(q^s) x(t) + \dots \quad (1.104)$$

С учетом того, что $f(q^s) = 0$, вводя обозначение $f'(q^s) = p$, имеем

$$\frac{dx(t)}{dt} = p x(t); \quad x(t) = x(0) e^{p t}, \quad (1.105)$$

где $x(0)$ – отклонение системы от стационарного состояния в момент времени $t = 0$.

Из формулы (1.105) следует, что если для стационарной точки выполняется условие $df/dq = p < 0$, то такая стационарная точка является асимптотически устойчивой (точка q_1^s на рис. 8), а если $df/dq = p > 0$, то любое малое отклонение величины q от стационарного значения q^s будет нарастать со временем и система покинет окрестность стационарной точки (точка q_2^s).

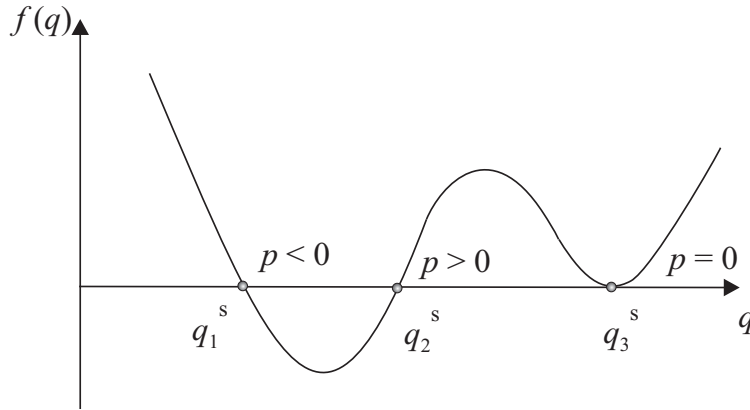


Рис. 8. Возможные виды стационарных точек для динамической системы с одной степенью свободы

Еще один случай, изображенный на рис. 8 (стационарная точка q_3^s), также соответствует неустойчивому узлу. В этом легко убедиться, если произвести разложение $f(q)$ до второго члена по степеням отклонений $x(t) = q(t) - q^s$ в окрестности этой точки. В итоге получаем уравнение

$$\frac{dx(t)}{dt} = a x^2(t), \quad a = \frac{1}{2} f''(q^s). \quad (1.106)$$

Решение уравнения (1.106) имеет вид

$$x(t) = \frac{1}{1/x(0) - a t}. \quad (1.107)$$

Поэтому если $x(0) < 0$, то из формулы (1.107) следует, что точка q_3^s устойчива, а если $x(0) > 0$, то стационарная точка q_3^s является неустойчивой. Если определять устойчивость по Ляпунову (1.96), то следует классифицировать эту стационарную точку как неустойчивую.

§ 16. Динамические системы с двумя степенями свободы

Перейдем теперь к качественному анализу поведения автономных систем с двумя степенями свободы вблизи стационарных точек. Пусть динамика системы описывается двумя пере-

менными q_1 и q_2 , временная зависимость которых определяется уравнениями

$$\begin{aligned}\frac{dq_1}{dt} &= f_1(q_1, q_2), \\ \frac{dq_2}{dt} &= f_2(q_1, q_2).\end{aligned}\tag{1.108}$$

В частном случае уравнения (1.108) могут совпадать с системой уравнений Гамильтона, например описывающих динамику одномерного нелинейного осциллятора. Тогда переменная q_1 будет иметь смысл обобщенной координаты, а q_2 – обобщенного импульса.

Особые точки (точки стационарных состояний) системы (1.108) определяются из уравнений

$$f_1(q_1, q_2) = 0, \quad f_2(q_1, q_2) = 0,$$

а поведение фазовой траектории можно определить, решая уравнение

$$\frac{dq_2}{dq_1} = \frac{f_2(q_1, q_2)}{f_1(q_1, q_2)}.\tag{1.109}$$

Уравнение (1.109) позволяет в каждой точке фазового пространства найти наклон касательной к траектории в данной точке и построить фазовый портрет по точкам. Направление, в котором движется фазовая точка, может быть найдено из системы уравнений (1.108).

Детальное исследование устойчивости производится так же, как и в одномерном случае, с помощью линеаризации уравнений движения (1.108) относительно малых отклонений динамических переменных от их стационарных значений. Введем новые динамические переменные $x_1(t) = q_1(t) - q_1^s$ и $x_2(t) = q_2(t) - q_2^s$. Линеаризуя уравнения (1.108) относительно x_1 и x_2 , получаем

$$\begin{aligned}\frac{dx_1(t)}{dt} &= a_{11} x_1(t) + a_{12} x_2(t), \\ \frac{dx_2(t)}{dt} &= a_{21} x_1(t) + a_{22} x_2(t).\end{aligned}\tag{1.110}$$

Элементы матрицы

$$a_{ij} = \left. \frac{df_i(q_1, q_2)}{dq_j} \right|_{q=q^s}$$

вычисляются для стационарной точки и поэтому являются постоянными величинами.

Для решения системы воспользуемся подстановкой Эйлера

$$x_1(t) = A e^{pt}, \quad x_2(t) = B e^{pt}.$$

В результате получим систему линейных однородных уравнений для определения констант A и B , условием непротиворечивости которой является равенство нулю определителя

$$\begin{vmatrix} a_{11} - p & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - p \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель, получаем характеристическое уравнение второй степени относительно величины p

$$p^2 - (a_{11} + a_{22}) p + a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21} = 0. \quad (1.111)$$

В общем случае уравнение (1.111) имеет два комплексно сопряженных корня:

$$p_{1,2} = \frac{T}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{T^2 - 4 \Delta},$$

$$T = a_{11} + a_{22}, \quad \Delta = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}. \quad (1.112)$$

Пусть $\sqrt{T^2 - 4 \Delta} \neq 0$ и корни p_1 и p_2 характеристического уравнения (1.111) различны. Тогда общее решение системы уравнений (1.110) является суперпозицией возможных частных решений и можно записать

$$\begin{aligned} x_1(t) &= A_1 e^{p_1 t} + A_2 e^{p_2 t}, \\ x_2(t) &= A_1 K_1 e^{p_1 t} + A_2 K_2 e^{p_2 t}. \end{aligned} \quad (1.113)$$

Константы A_1 и A_2 определяются из начальных условий, а константы K_1 и K_2 являются корнями уравнения

$$a_{12} K^2 + (a_{11} - a_{22}) K - a_{21} = 0.$$

Последнее уравнение легко получить, если принять, что $B = A K$.

Тип стационарной точки зависит от того, какими получились корни (1.112) характеристического уравнения (1.111). Существует всего шесть возможностей, которым соответствуют шесть типов стационарных точек. Схематически фазовые портреты двумерных систем изображены на рис. 9.

a) $T^2 - 4\Delta > 0$, $\Delta > 0$, $T < 0$. В этом случае p_1 и p_2 — действительные отрицательные числа. Система совершает апериодическое затухающее движение, приближаясь к положению равновесия. Такая стационарная точка называется *асимптотически устойчивым узлом*.

b) $T^2 - 4\Delta > 0$, $\Delta > 0$, $T > 0$. В этом случае p_1 и p_2 — действительные положительные числа. Стационарная точка неустойчива. При любой флуктуации, приводящей к смещению фазовой точки из стационарного состояния, возмущение будет нарастать и система покинет окрестность стационарной точки (апериодическое самовозбуждение). Такая стационарная точка называется *асимптотически неустойчивым узлом*.

c) $T^2 - 4\Delta < 0$, $T < 0$. В этом случае p_1 и p_2 — комплексные числа с отрицательной действительной частью. Система будет совершать затухающие колебания, асимптотически приближаясь к стационарной точке. Фазовый портрет такой системы напоминает закручивающуюся спираль. Стационарная точка является *устойчивым фокусом*.

d) $T^2 - 4\Delta < 0$, $T > 0$. В этом случае p_1 и p_2 — комплексные числа с положительной действительной частью. Система будет демонстрировать нарастающие по амплитуде колебания (самовозбуждение). Фазовый портрет такой системы напоминает раскручивающуюся спираль. Стационарная точка является *неустойчивым фокусом*.

e) $\Delta > 0$, $T = 0$. В этом случае p_1 и p_2 — чисто мнимые величины. Система будет совершать незатухающие колебания в окрестности стационарной точки. Фазовый портрет представляет собой замкнутую кривую. Такого типа стационарные точки принято называть *центром*. Особая точка типа центр

устойчива по Ляпунову, но не является асимптотически устойчивой.

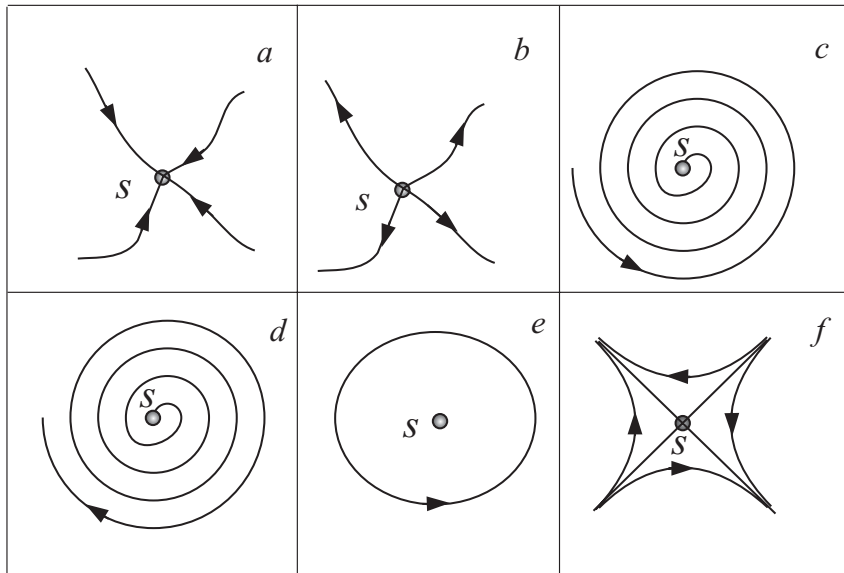


Рис. 9. Основные типы стационарных точек

для динамической системы с двумя степенями свободы:

a – асимптотически устойчивый узел; b – асимптотически неустойчивый узел; c – асимптотически устойчивый фокус; d – асимптотически неустойчивый фокус; e – стационарная точка типа центр; f – седловая стационарная точка

f) $T^2 - 4\Delta > 0$, $\Delta < 0$. В этом случае p_1 и p_2 – действительные числа, имеющие разные знаки. Траектории фазовой точки представляют собой гиперболические кривые, разделенные сепаратрисами (прямые линии на рис. 9*f*). Стационарная точка называется *с е д л о в о й*. Поскольку при $t \rightarrow \infty$ фазовые траектории уходят на бесконечность, седловая точка является неустойчивой стационарной точкой. Такие системы характеризуются наличием двух состояний (системы триггерного типа).

Приведенная выше классификация основывалась на предположении, что имеется два различных решения характеристического уравнения (1.111). Такие точки называются стационарными точками *о б щ е г о п о л о ж е н и я*. Возможны ситуации, при которых $\Delta = 0$. Такие особые точки имеют название *м н о ж е с т в е н н ы х*. Анализ поведения фазовых траекторий в окрестности множественных особых точек может оказаться достаточно сложным, но, к счастью, этот случай можно не

анализировать, поскольку при небольшом «шевелении» (изменении параметров системы) множественные особые точки распадаются на две или более особые точки общего положения.

Задача 1.4

Для рассмотренной выше модели «хищник – жертва» Вольтерра – Лотки

$$\begin{aligned}\dot{n}_1 &= \gamma_1 n_1 - \beta n_1 n_2, \\ \dot{n}_2 &= \beta n_1 n_2 - \gamma_2 n_2\end{aligned}\tag{1.114}$$

с численными значениями параметров $\gamma_1 = 0,3712$, $\beta = 0,0097$, $\gamma_2 = 0,3952$ определить стационарные значения популяций n_1^s , n_2^s , найти решение характеристического уравнения для линеаризованной модели и определить возможные типы стационарных точек в этой модели. Найти решение линеаризованной системы уравнений движения для небольших начальных отклонений чисел популяции от стационарных значений. Определить характер движения фазовой точки в окрестности стационарных точек. Выяснить, зависят ли типы стационарных точек в этой модели от численных значений параметров.

Решение

Стационарные значения популяций находим из уравнений

$$\begin{aligned}\gamma_1 n_1 - \beta n_1 n_2 &= 0, \\ \beta n_1 n_2 - \gamma_2 n_2 &= 0.\end{aligned}$$

Эта система имеет два решения. Первое решение является очевидным: $n_1^s = 0$, $n_2^s = 0$. Вторая стационарная точка соответствует значениям $n_1^s = \gamma_2/\beta = 40,7423$; $n_2^s = \gamma_1/\beta = 38,2680$. Рассмотрим вначале поведение системы вблизи второй стационарной точки.

Введем новые динамические переменные $x_1(t) = n_1(t) - n_1^s$ и $x_2(t) = n_2(t) - n_2^s$. Линеаризуя уравнения (1.114) относительно x_1 и x_2 , получаем

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= (\gamma_1 - \beta n_2^s) x_1 - \beta n_1^s x_2, \\ \dot{x}_2 &= \beta n_2^s x_1 - (\gamma_2 - \beta n_1^s) x_2.\end{aligned}\tag{1.115}$$

Сравнивая (1.115) и (1.110), легко убедиться, что в рассматриваемом случае $a_{11} = a_{22} = 0$, $a_{12} = -\beta n_1^s = -\gamma_2$, $a_{21} = \beta n_2^s = \gamma_1$, $T = 0$, $\Delta = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21} = \gamma_1 \gamma_2 > 0$.

Поэтому оба корня характеристического уравнения будут чисто мнимыми и стационарная точка является устойчивым центром. Фазовая траектория линеаризованной системы (1.115) представляет собой окружность, центром которой является стационарная точка. Фазовая траектория исходной системы (1.114) будет для малых отклонений также походить на окружность (см. рис. 6).

Используя общее решение (1.113), запишем параметрическое уравнение траекторий в окрестности этой стационарной точки. В рассматриваемом случае $p_{1,2} = \pm i \omega$, $\omega = \sqrt{\gamma_1 \gamma_2}$, $K_{1,2} = \pm i \sqrt{a_{21}/a_{12}} = \pm i \sqrt{\gamma_1/\gamma_2}$. Константы A_1 и A_2 в общем случае являются комплексными величинами, и поэтому представим их в виде $A_1 = a_1 + i b_1$, $A_2 = a_2 + i b_2$.

Подставляя полученные результаты в формулу для общего решения системы (1.113) и выделяя действительную часть, получаем параметрическое уравнение траектории

$$\begin{aligned} x_1(t) &= (a_1 + a_2) \cos \omega t + (b_2 - b_1) \sin \omega t, \\ \sqrt{\gamma_2/\gamma_1} x_2(t) &= -(a_1 + a_2) \sin \omega t + (b_2 - b_1) \cos \omega t. \end{aligned} \quad (1.116)$$

Изменяя масштаб вдоль оси x_2 , введем новую переменную $x_2^*(t) = \sqrt{\gamma_2/\gamma_1} x_2(t)$. Константы $(a_1 + a_2)$ и $b_2 - b_1$ определим из начальных условий: $(a_1 + a_2) = x_1(0)$, $b_2 - b_1 = x_2^*(0)$. Теперь легко убедиться, возводя левую и правую части каждого из уравнений (1.116) в квадрат и складывая, что выполняется условие

$$(x_1(t))^2 + (x_2^*(t))^2 = (x_1(0))^2 + (x_2^*(0))^2,$$

и, таким образом, действительно уравнение траектории фазовой точки является окружностью.

Перейдем теперь к анализу поведения системы вблизи стационарной точки $n_1^s = 0$, $n_2^s = 0$. В этом случае система линеаризованных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= \gamma_1 x_1(t), \\ \dot{x}_2(t) &= -\gamma_2 x_2(t). \end{aligned} \quad (1.117)$$

Поэтому $a_{11} = \gamma_1$, $a_{22} = -\gamma_2$, $a_{12} = a_{21} = 0$, $\Delta = -\gamma_1 \gamma_2 < 0$, и в соответствии с приведенной выше классификацией эта стационарная точка является неустойчивой седловой точкой. Фазовый портрет системы в окрестности этой стационарной точки для разных начальных условий приведен на рис. 10. Сепаратрисами в данном случае являются координатные оси x_1 и x_2 .

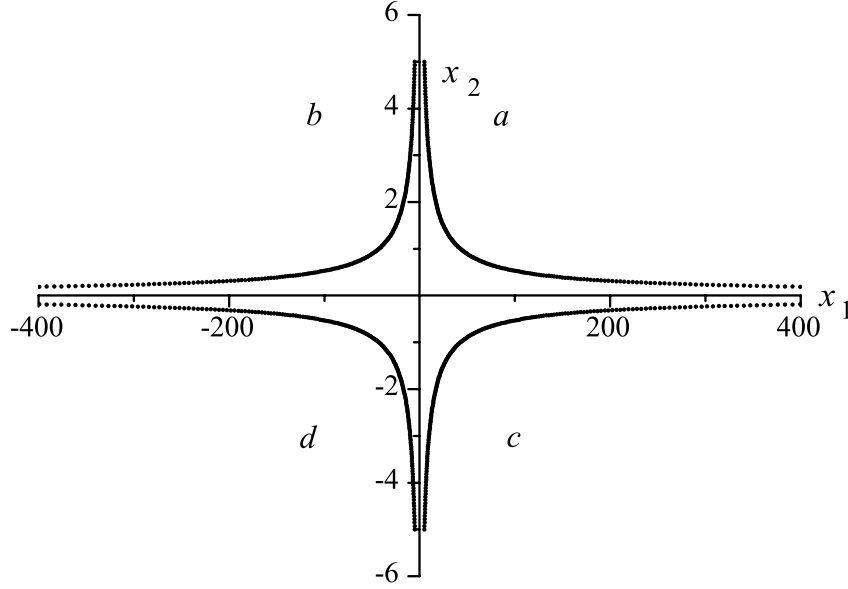


Рис. 10. Фазовый портрет линеаризованной системы (1.114)

в окрестности стационарной точки $n_1^s = 0$, $n_2^s = 0$:

$a - x_1(0) = 5, x_2(0) = 5$; $b - x_1(0) = 5, x_2(0) = -5$;

$c - x_1(0) = -5, x_2(0) = 5$; $d - x_1(0) = -5, x_2(0) = -5$

Из приведенного анализа следует, что типы стационарных точек для модели Вольтерра – Лотки не зависят от конкретных численных значений параметров модели. Таким образом, в зависимости от выбора начальных условий в системе будет наблюдаться либо неустойчивое седло, либо устойчивый центр.

В случае систем с произвольным значением числа степеней свободы для анализа поведения решений динамических уравнений в окрестности стационарной точки применяется тот же метод линеаризации уравнений движения. Пусть стационарная точка имеет координаты q_i^s , $i = 1, \dots, n$. Тогда, вводя отклонения динамических координат от стационарных значений $x_i(t) = q_i(t) - q_i^s$, вместо исходных динамических уравнений (1.94) получаем систему уравнений для отклонений координат от стационарных значений, в которой мы удержали лишь члены до второго порядка малости по отклонениям $x_i(t) = q_i(t) - q_i^s$:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j(t) + f_i^{(2)}(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)), \quad (1.118)$$

где функция $f_i^{(2)}$ содержит отклонения $x_i(t)$ в степени не ниже второй.

Если в выражении (1.118) пренебречь членами второго порядка и выше, то динамика отклонений $x_i(t) = q_i(t) - q_i^s$ будет определяться решением системы линейных уравнений (методика решения таких уравнений для двух переменных обсуждалась выше). Корни характеристического уравнения по-прежнему определяются из уравнения

$$\det |a_{ij} - p \delta_{ij}| = 0.$$

При этом справедливы следующие утверждения:

1) если все корни характеристического уравнения имеют отрицательную действительную часть, то стационарная точка $x_i = 0$ является устойчивой независимо от вида функции $f_i^{(2)}$;

2) если хотя бы один из корней характеристического уравнения имеет положительную действительную часть, то стационарная точка является неустойчивой независимо от вида функции $f_i^{(2)}$;

3) если корней с положительной действительной частью нет, но есть чисто мнимые корни, то устойчивость стационарной точки зависит от вида функции $f_i^{(2)}$.

Более подробно современные методы и проблемы динамического описания нелинейных систем изложены в курсе лекций С. П. Кузнецова [14], прочитанном им для студентов-физиков Саратовского университета. Большое количество книг российских и зарубежных авторов по затронутой проблеме можно найти и в электронной библиотеке, размещенной на сайте <http://www.scintific.narod.ru/nlib/>.

§ 17. Динамический хаос

Основной целью экскурса в область нелинейной динамики является желание объяснить, как обратимые во времени динамические уравнения, в частности уравнения Гамильтона, могут описывать необратимое поведение реальных систем. Заложена ли возможность необратимого поведения в динамических уравнениях или эту идею нужно привносить извне? Замечательным

результатом развития динамической теории во второй половине прошлого столетия стало открытие динамического хаоса.

Возникновение хаоса кажется, на первый взгляд, несовместимым с определением динамической системы, подразумевающей однозначное определение состояния в любой момент времени по заданному начальному состоянию. На самом деле противоречия нет, поскольку для систем, демонстрирующих хаотическую динамику, наблюдается сверхчувствительность динамики к заданию начальных условий. Сколь угодно малое изменение начальных условий приводит к конечному изменению состояния системы через достаточно большой промежуток времени. По этой причине, хотя система и остается динамической, предсказания динамики ее развития с конечной точностью становятся невозможными.

Впервые хаотический режим в системах с малым числом степеней свободы обнаружил американский метеоролог Э. Лоренц, изучая конвективное движение жидкости в эксперименте Бенара. Ему удалось преобразовать систему гидродинамических уравнений для плотности, скорости и температуры объема жидкости к системе трех достаточно простых уравнений для переменных x , y и z . Зависимость от свойств жидкости и условий эксперимента задается в модели Лоренца с помощью трех параметров σ , r и b :

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -\sigma (x - y), \\ \dot{y} &= -x z + r x - y, \\ \dot{z} &= x y - b z.\end{aligned}\tag{1.119}$$

Не обсуждая физический смысл динамических переменных и введенных параметров (подробный вывод системы уравнений Лоренца можно найти в упоминавшейся книге С. П. Кузнецова [14]), рассмотрим лишь качественный характер поведения решений этой системы, отвлекаясь от ее физической сущности.

Оказывается, что качественный характер решения зависит от параметра r . При $0 < r < 1$ имеется устойчивый узел в начале координат. При $r > 1$ аттрактор теряет устойчивость и появляются две стационарные точки

$$x_{12} = \pm \sqrt{b(r-1)}, \quad y_{1,2} = \pm \sqrt{b(r-1)}, \quad z_{12} = r - 1.$$

Они характеризуют стационарную конвекцию валов жидкости с противоположным направлением вращения. Фазовый портрет системы вблизи одной из таких точек показан на рис. 11*a*. При $r > r_{кр}$ фазовая траектория начинает вести себя странным образом. Она подходит к одной из стационарных точек, совершает несколько оборотов и уходит к другой стационарной точке. Фазовый портрет такой системы для значений параметров $\sigma = 10$, $b = 2,666$, $r = 26,7$ приведен на рис. 11*b*. Число оборотов вокруг каждого из узлов в каждой серии неодинаково, непредсказуемо и зависит от точного задания начальных условий.

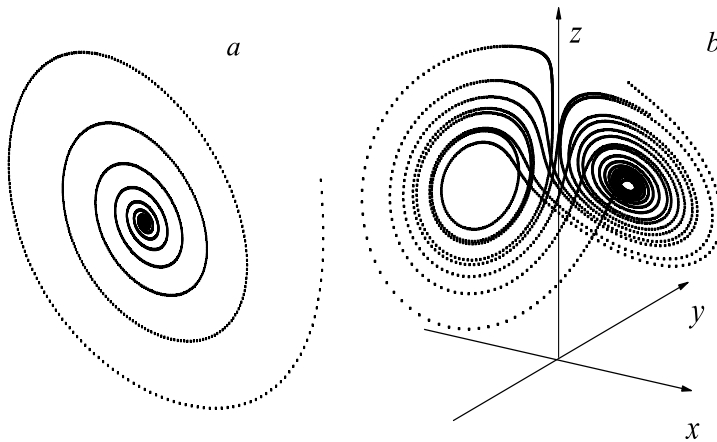


Рис. 11. Фазовый портрет системы (1.119) для параметров:

$$\sigma = 10, b = 2,666 ;$$

a – устойчивый фокус при $r = 10$; *b* – странный аттрактор при $r = 26,7$

Другой замечательной особенностью этой системы оказалось сжатие объема фазового пространства системы с течением времени и образование странного аттрактора. Чтобы разобраться в этом явлении, напомним, что классическая система, подчиняющаяся уравнениям Гамильтона, консервативна. Это означает, что если выделить небольшой элемент объема фазового пространства такой системы $d\Omega_0$, содержащий некоторое количество фазовых точек в начальный момент времени, то в процессе эволюции к моменту времени t фазовые точки окажутся в некотором объеме $d\Omega_t = d\Omega_0$. Это утверждение известно в классической механике как теорема Лиувилля.

Консервативные системы – это достаточно узкий класс динамических систем. Большинство динамических систем, описывающих реальные процессы, неконсервативны и не сохраняют

фазовый объем. К их числу относится и система уравнений Лоренца (1.119).

Рассмотрим небольшой элемент фазового объема системы (1.119) $\Delta \Omega = \Delta x \Delta y \Delta z$ и найдем относительную скорость изменения объема

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \frac{d}{dt}(\Delta x \Delta y \Delta z) &= \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} (\Delta \dot{x} \Delta y \Delta z + \\ &+ \Delta x \Delta \dot{y} \Delta z + \Delta x \Delta y \Delta \dot{z}) = \frac{\Delta \dot{x}}{\Delta x} + \frac{\Delta \dot{y}}{\Delta y} + \frac{\Delta \dot{z}}{\Delta z}. \end{aligned} \quad (1.120)$$

Из этой формулы видно, что относительная скорость изменения фазового объема определяется дивергенцией поля скоростей фазовых точек.

В общем случае, обобщая результат (1.120), для определения скорости изменения относительного объема фазового пространства с течением времени можем записать простую формулу

$$\frac{1}{\Omega} \frac{d\Omega}{dt} = \sum_i \frac{d\dot{x}_i}{dx_i} = \operatorname{div} \vec{v}. \quad (1.121)$$

В формуле (1.121) x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ – набор динамических переменных, описывающих систему, \vec{v} – вектор скорости фазовых точек в фазовом пространстве. Если система консервативна, то для нее выполняется равенство $\operatorname{div} \vec{v} = 0$. Динамическая система называется *диссипативной*, если выполняется условие $\operatorname{div} \vec{v} < 0$.

Для системы уравнений Лоренца вектор скорости фазовых точек определяется правыми частями уравнений (1.119)

$$v_x = -\sigma(x - y); \quad v_y = -x z + r x - y; \quad v_z = x y - b z,$$

а дивергенция этого вектора $\operatorname{div} \vec{v} = -\sigma - 1 - b$. Поскольку σ и b – величины положительные, то, решая уравнение

$$\frac{1}{\Omega} \frac{d\Omega}{dt} = \sum_i \frac{d\dot{x}_i}{dx_i} = -\sigma - 1 - b,$$

получаем

$$\Omega_t = \Omega_0 e^{-(\sigma+1+b)t}. \quad (1.122)$$

Отсюда следует, что с течением времени все фазовые точки сконцентрируются в некотором множестве нулевого объема. В действительности это означает, что фазовый поток в трехмерной модели Лоренца порождает множество точек, размерность которого оказывается меньше трех (хаусдорфова размерность этого аттрактора оказалась дробной и равной 2,06). Дробная размерность множества точек, к которым притягиваются траектории, – один из признаков того, что аттрактор является странным. Как эмпирически может быть определена хаусдорфова размерность аттрактора, мы обсудим позднее.

Другая особенность странного аттрактора состоит в том, что как бы ни были близко расположены фазовые точки в начальный момент времени, через некоторый временной интервал они разбегутся на конечное расстояние. Иначе говоря, наблюдается сверхчувствительность динамики к начальным условиям, что делает невозможным динамическое описание этой системы. По существу, возникновение динамического хаоса является одной из предпосылок перехода к статистическому описанию, поскольку динамическое описание таких систем невозможно. Важно отметить, что динамический хаос есть внутреннее свойство самих систем и не связано с действием каких-либо внешних факторов. Возникновение динамического хаоса в задаче конвективного движения в жидкости не является чем-то исключительным. Во-первых, к модели Лоренца сводится достаточно много других задач нелинейной динамики, в частности задача о переходе в режим генерации излучения одномодового лазера, а во-вторых, динамический хаос возникает и в простых гамильтоновых системах, например в системе двух осцилляторов Эно – Эйлиса с нелинейным взаимодействием [14].

Для систем, демонстрирующих динамический хаос, можно ввести понятие энтропии S . Действительно, энтропия является мерой неполноты наших знаний о состоянии системы:

$$S \sim - \sum_{i=1}^n P_i \ln P_i.$$

В этой формуле P_i – вероятность реализации i -го состояния системы. Если имеется полная определенность и вероятность реализации состояния равна единице, то энтропия равна нулю и максимальна при полной неопределенности, когда все состояния равновероятны.

Для динамических систем понятие энтропии было введено в работах Колмогорова и Синая еще в 1954 г. Пусть динамика описывается системой дифференциальных уравнений. Зададим в фазовом пространстве расстояние $d(t)$ между двумя фазовыми точками соотношением

$$d(t) = |\vec{x}_1(t) - \vec{x}_2(t)|.$$

Энтропию Колмогорова – Синая $S_{\text{КС}}$ определим соотношением

$$S_{\text{КС}} = \lim_{\substack{d(0) \rightarrow 0 \\ t \rightarrow \infty}} \frac{1}{t} \ln \left[\frac{d(t)}{d(0)} \right]. \quad (1.123)$$

Из этого определения следует, что если близкие в начальный момент времени фазовые точки остаются близкими в последующие моменты времени или если расстояние между ними увеличивается, но не по экспоненциальному закону, то $S_{\text{КС}} = 0$. Если же реализуется динамический хаос и

$$d(t) \simeq d(0) e^{\lambda t}, \quad (1.124)$$

где $\lambda > 0$, то энтропия Колмогорова – Синая принимает положительное значение. Важно отметить, что энтропия Колмогорова – Синая – размерная величина, пропорциональная скорости потери информации о системе. По существу, обратная величина $1/S_{\text{КС}}$ определяет время хаотизации (время, через которое динамическое описание системы становится бессмысленным).

Как по виду динамических уравнений определить возможность возникновения странного аттрактора? Ответить на этот вопрос достаточно легко, если установить связь показателя λ в уравнении (1.124) с собственными значениями характеристического уравнения линеаризованной системы (1.118). В общем случае всегда можно перейти к нормальным координатам, для которых матрица a_{ij} в уравнении (1.118) является

диагональной. *Показателями Ляпунова* λ_i называют действительные части характеристического уравнения $\det |a_{ij} - p \delta_{ij}| = 0$: $\lambda_i = \operatorname{Re} p_i$. Число различных корней, очевидно, совпадает с размерностью матрицы. Таким образом, спектр собственных значений матрицы a_{ij} определяет и спектр характеристических значений показателей Ляпунова.

Геометрический смысл показателей Ляпунова легко понять. Представим себе некоторую малую сферическую область с характерным радиусом ε_0 в пространстве нормальных координат, заполненную фазовыми точками. С течением времени каждая фазовая точка будет двигаться по своей траектории и сферическая область будет деформироваться. Тогда, если известны значения показателей Ляпунова для этой системы λ_1 , λ_2 , и λ_3 , можно утверждать, что через время t от начала эволюции фазовые точки будут заполнять эллипсоид с полуосями l_1 , l_2 и l_3 , равными

$$l_1 = \varepsilon_0 e^{\lambda_1 t}, \quad l_2 = \varepsilon_0 e^{\lambda_2 t}, \quad l_3 = \varepsilon_0 e^{\lambda_3 t}.$$

Для интересующего нас случая аттракторов показатели Ляпунова обладают следующими важными свойствами. Во-первых, сумма показателей Ляпунова равна дивергенции потока скоростей фазовых точек:

$$\sum_i^k \lambda_i = \sum_i^k \frac{d\dot{x}_i}{dx_i}.$$

Поэтому сумма показателей Ляпунова для диссипативной системы всегда отрицательна, а для консервативной – равна нулю. Во-вторых, у аттрактора отличного от неподвижной точки (узла), должен быть хотя бы один показатель Ляпунова, равный нулю. Этот показатель характеризует движение вдоль направления, по которому не происходит стягивание фазовых точек. Действительно, рассмотрим двумерный случай. Здесь если оба показателя Ляпунова отрицательны, то будет происходить стягивание фазовых точек в узел. Если же есть предельный цикл, то это означает, что фазовые точки концентрируются в ограниченной области фазового пространства, что возможно лишь

в том случае, если в среднем расстояние между ними не изменяется, что, в свою очередь, означает равенство нулю одного из показателей Ляпунова (более строгое доказательство этого утверждения можно найти в книге [14]).

Для одномерной системы аттрактором могут быть только особые точки, для которых $\lambda < 0$. Следовательно, в одномерных системах странные аттракторы невозможны, поскольку здесь фазовые точки не разбегаются, а стягиваются в узел.

В двумерных системах возможны два типа аттракторов: устойчивые стационарные точки и предельные циклы. Если оба показателя Ляпунова λ_1 и λ_2 отрицательны, то имеет место стягивание фазовых точек в узел. Если один из показателей Ляпунова отрицателен, а другой равен нулю, то имеет место другой вид аттрактора – предельный цикл. Никаких других аттракторов в двумерных системах быть не может.

В трехмерных системах возможны следующие комбинации знаков показателей Ляпунова (порядок следования знаков значения не имеет, и комбинации знаков, отличающихся только порядком, идентичны):

1. $\{-, -, -\}$ – притягивающий узел;
2. $\{0, -, -\}$ – предельный цикл;
3. $\{0, 0, -\}$ – двумерный тор;
4. $\{+, 0, -\}$ – странный аттрактор.

Обратим внимание на то, что только начиная со случая трех измерений возможно появление странных аттракторов. В этом случае исходный объем, который занимали фазовые точки в начальный момент времени, растягивается по одному из направлений, сжимается по другому направлению, а по третьему его характерный масштаб остается без изменений.

Возникновение странных аттракторов – это один из возможных механизмов возникновения хаотической динамики. В следующих параграфах этой главы мы познакомимся с другими сценариями возникновения хаотического поведения динамических систем.

§ 18. Динамический хаос в одномерных отображениях

До сих пор мы имели дело с динамическими системами, эволюция которых определяется дифференциальными уравнениями движения. Существует и другая возможность, которая определяет динамику системы с помощью уравнений в конечных разностях. В этом случае временной шаг предполагается некоторой конечной величиной. К уравнению в конечных разностях легко прийти, анализируя, например, взаимосвязь координат фазовой точки при последовательных появлениях ее в сечении Пуанкаре. Рассмотрим только один частный и довольно простой случай одномерного фазового пространства, когда отображение задается рекуррентным соотношением

$$x_{n+1} = f(x_n), \quad (1.125)$$

где функция $f(x) = r x (1 - x)$ зависит от единственного параметра r . Отображение, задаваемое рекуррентным соотношением (1.125), называется *логистическим отображением*. Даже этот простой случай весьма полезен для понимания тех проблем, с которыми приходится сталкиваться при изучении динамического хаоса.

Задаваемое формулой (1.125) отображение переводит точки отрезка $[0, 1]$ в точки отрезка $[0, r/4]$. Поэтому если $r \leq 4$, то все точки отображения лежат на отрезке $[0, 1]$.

Функция $f(x)$, очевидно, имеет максимум, равный $r/4$ в точке $x = 1/2$. Стационарные точки отображения находятся из условия $x_c = f(x_c)$. Подставляя явное значение функции, получим уравнение для определения стационарных значений x_c :

$$x_c^2 - x_c + \frac{1}{r} x_c = 0.$$

Отсюда следует, что имеются две стационарные точки $x_c = 0$ и $x_c = 1 - 1/r$. Поскольку $0 \leq x \leq 1$, то при $r < 1$ имеется одна стационарная точка $x_c = 0$. В точке $r = 1$ возникает бифуркация и появляются два стационарных решения:

$$x_c^{(1)} = 0, \quad x_c^{(2)} = 1 - \frac{1}{r}.$$

Определим, какая из стационарных точек является устойчивой при $r > 1$. Для этого зададим небольшое отклонение динамической переменной Δx_n от стационарного значения и линеаризуем рекуррентное соотношение (1.125) в окрестности стационарной точки. В результате получаем рекуррентное соотношение для малых отклонений от стационарных значений

$$\Delta x_{n+1} = r (1 - 2 x_c) \Delta x_n. \quad (1.126)$$

Если величина $|r (1 - 2 x_c)| < 1$, то последовательность (1.126) сходится к стационарной точке, а если она больше единицы, то уходит из окрестности x_c . Отсюда следует, что при $r > 1$ стационарная точка $x_c^{(1)} = 0$ неустойчива, а стационарная точка $x_c^{(2)}$ устойчива. Заметим, что проверка устойчивости стационарной точки сводится к вычислению значения производной функции f в стационарной точке:

$$|f'(x)|_{x=x_c} = |r (1 - 2 x_c)| < 1.$$

Если производная этой функции, взятая по модулю, в стационарной точке меньше единицы, то стационарная точка устойчива.

На рис. 12 показана так называемая бифуркационная диаграмма, на которой по оси ординат отложены численные значения стационарных точек x_c в зависимости от параметра r . Первая бифуркация, как уже указывалось, возникает в точке $r = 1$.

Вторая бифуркация возникает в точке $r = 3$ (см. рис. 12). При $3 < r < 1 + \sqrt{6}$ имеются два устойчивых стационарных решения, удовлетворяющих уравнениям

$$\begin{aligned} x_c^{(1)} &= r x_c^{(2)} (1 - x_c^{(2)}), \\ x_c^{(2)} &= r x_c^{(1)} (1 - x_c^{(1)}). \end{aligned} \quad (1.127)$$

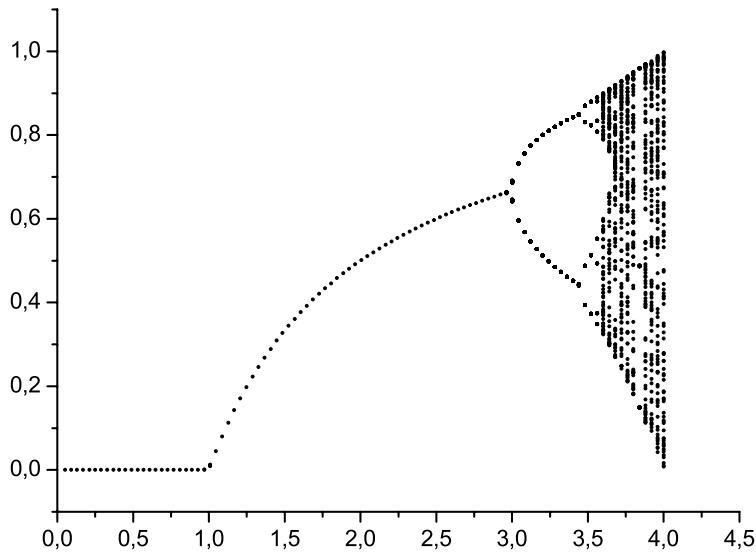


Рис. 12. Бифуркационная диаграмма логистического отображения: по оси ординат отложены координаты стационарных точек отображения, по оси абсцисс — параметр r

Решение этой системы уравнений легко получить численно, используя, например, пакет символьных и численных вычислений Maple. Стационарные точки $x = 0$ и $x = 1 - 1/r$ при $r > 3$ являются неустойчивыми и поэтому не отображаются на рис. 12.

Следующая бифуркация удвоения возникает в точке $r = 1 + \sqrt{6} \simeq 3,45$. В этой точке двухкратный устойчивый цикл сменяется четырехкратным устойчивым циклом:

$$\begin{aligned} x_c^{(1)} &= r x_c^{(2)} (1 - x_c^{(2)}), \\ x_c^{(2)} &= r x_c^{(3)} (1 - x_c^{(3)}), \\ x_c^{(3)} &= r x_c^{(4)} (1 - x_c^{(4)}), \\ x_c^{(4)} &= r x_c^{(1)} (1 - x_c^{(1)}). \end{aligned} \quad (1.128)$$

На рис. 13 динамика логистического отображения при $r = 3,46$ изображена с помощью *диаграммы Ламерея*.

Показана прямая линия $y = x$ и функция, задающая правую часть логистического отображения $y = r x (1 - x)$ при $r = 3,46$. Допустим, что на некотором шаге итерации было получено значение $y \simeq 0,4$, отмеченное цифрой 1 на рис. 13.

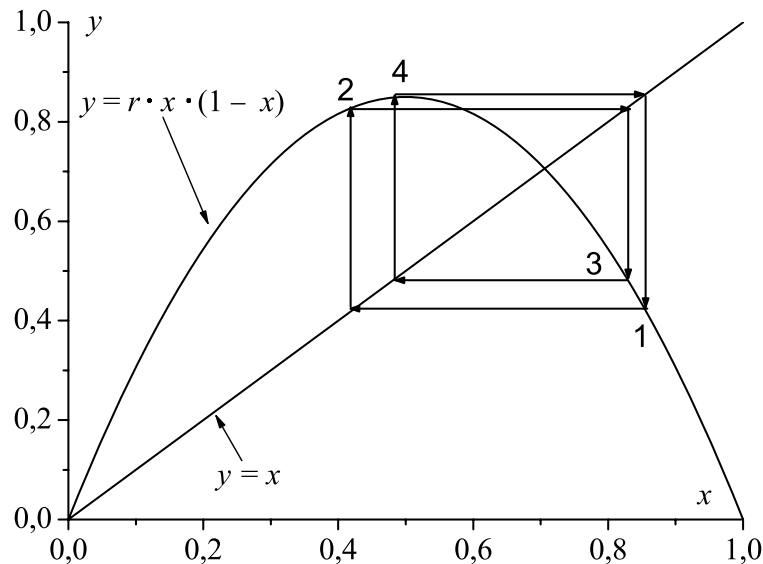


Рис. 13. Возникновение четырехкратного цикла логистического отображения при $r = 3,46$

Найдем графически значение $x = y$, которое следует подставить в функцию $y = r x (1 - x)$ на следующем шаге итерации. Для этого проведем горизонтальную прямую до пересечения ее с линией $y = x$. Если затем из этой точки провести вертикальную прямую до пересечения ее с кривой $y = r x (1 - x)$, то получим значение $y \simeq 0,8$ на следующем шаге итераций. Продолжив это построение, получим четыре стационарных решения, отмеченные цифрами 1, 2, 3, 4 на рис. 13, которые будут последовательно повторяться.

При дальнейшем увеличении r бифуркации удвоения цикла будут повторяться до значения $r = r_\infty \simeq 3,5699$, при котором возникает притягивающий (устойчивый) цикл бесконечно большого периода, а все циклы с периодом 2^m , $m = 1, 2, \dots$, становятся неустойчивыми. При значениях $r_\infty < r < 4$ динамика становится нерегулярной, появляются апериодические траектории, не сводящиеся к циклам, а при $r = 4$ в системе возникает динамический хаос.

При $r = 4$ отображение $x_{n+1} = 4 x_n (1 - x_n)$ имеет точное решение

$$x_n = \sin^2(\pi \Theta_n) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2 \pi \Theta_n)), \quad \Theta_n = 2^n \Theta_0. \quad (1.129)$$

Таким образом, при последовательных отображениях начальный угол умножается на два.

При измерении углов в радианной мере можно ограничиться рассмотрением начальных углов из интервала $0 \leq \Theta_0 \leq 1$. Тогда можно представить начальный угол в двоичной системе счисления

$$\Theta_0 = 0 + \frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{4} + \frac{a_3}{8} + \dots = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} 2^{-\nu}, \quad (1.130)$$

где коэффициенты a_{ν} равны нулю или единице. Такое представление начального угла позволяет увидеть, что последовательные отображения получаются из начального простым сдвигом разрядной точки на одну позицию вправо. Например, задавая некоторый произвольный угол $\Theta_0 = 0.10100110\dots$, получаем последовательность итераций

$$\Theta_1 = 1.0100110\dots, \quad \Theta_2 = 10.100110\dots, \quad \Theta_3 = 101.00110\dots$$

Очевидно, что эту последовательность можно продолжать неограниченно долго. Каждое новое значение величины x_n будет определяться значащей цифрой, стоящей в следующем разряде начального значения Θ_0 . Целая часть числа, определяющего значение Θ_n , в силу условия периодичности решения (1.129), никакого влияния на результат не оказывает и поэтому может быть отброшена.

Если начальная точка задана произвольно и значения значащих цифр случайны, то фазовая точка бесчисленное множество раз побывает в окрестности любой точки интервала $[0, 1]$. По существу, это утверждение эквивалентно утверждению об эргодичности системы (подробнее условие эргодичности системы обсуждается в главе 3).

Такого типа системы с поведением, полностью определяемым начальным значением (кодом), могут дать ключ для понимания того, как может работать генетический код. Количество заданных значащих цифр будет определять количество временных периодов, на которых поведение системы будет предопределено. Если же в n -м разряде двоичного числа, задающего начальное значение, ошибка была равной $\varepsilon = 1/2^n$, то через n временных циклов система полностью забудет свое начальное состояние и будет демонстрировать случайное поведение.

Это явление легко можно обнаружить, реализуя численный эксперимент. Ясно, что при некоторых начальных углах, например $\Theta_0 = 1/3$, $\Theta_0 = 1/5$, $\Theta_0 = 1/9$, решение (1.129) является циклическим. В частности, при $\Theta_0 = 1/5$ имеется цикл с периодом 2 и величина x_n периодически принимает значение либо $x_n \simeq 0,345$, либо $x_n \simeq 0,905$. Но ошибка в задании угла довольно быстро накапливается и через некоторое количество итераций информация о начальном угле полностью забывается. Число итераций, через которое происходит забывание начального условия, зависит от точности, с которой оно задано (рис. 14).

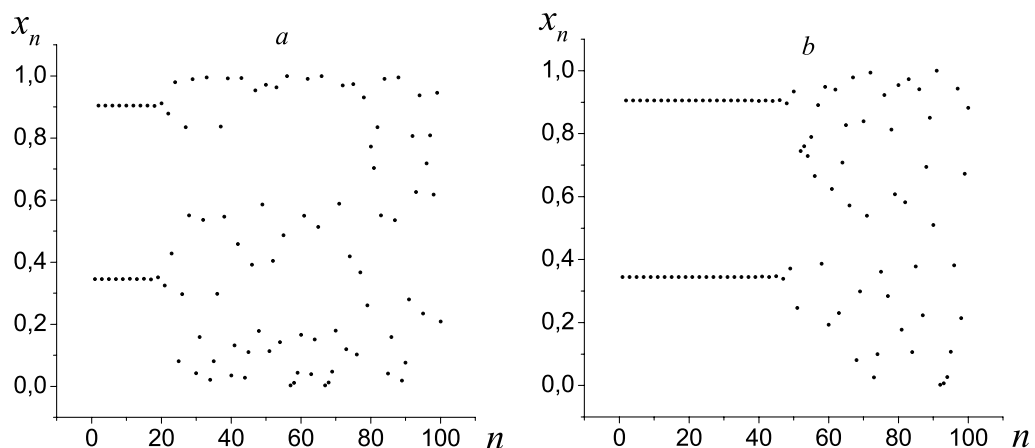


Рис. 14. Возникновение хаоса в отображении (1.129) при начальном угле $\Theta_0 = 1/5$:

a – начальное состояние задано с точностью 8 – 9 десятичных знаков; b – начальное состояние задано с точностью 19 – 20 десятичных знаков

Завершая краткое знакомство с особенностями одномерного логистического отображения, следует упомянуть и о том, как можно определить размерность множества точек этого отображения. Тем более что точно такая же проблема возникает и при анализе размерности странных аттракторов в других задачах, о чем упоминалось выше. Здесь мы ограничимся лишь качественным обсуждением проблемы. Подробнее этот материал изложен в книге Г. Шустера [16].

Наиболее простому определению поддается определение размерности множества точек, возникающих в результате последовательных бифуркаций удвоения цикла 2^m , $m \rightarrow \infty$. Оказывается, что это множество является самоподобным, обладающим фрактальной структурой, а размерность его не равна единице и представляет собой дробную величину, равную 0,543 [16].

Самоподобные фрактальные множества хорошо известны в математике. Простейшим из них является множество Кантора. *Множество Кантора* получается в результате следующего построения. Возьмем отрезок единичной длины и разделим его на три равные части, а затем отбросим среднюю часть; для каждого из оставшихся отрезков снова и снова будем выполнять эту же процедуру (первые три шага изображены на рис. 15). В результате получим самоподобное (фрактальное) множество Кантора. Обобщением множества Кантора на случай двух измерений является ковер Серпиньского, а на случай трех измерений – губка Серпиньского [14, 16].

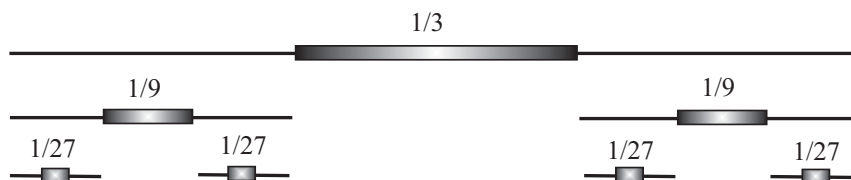


Рис. 15. Построение множества Кантора:

заштрихованные участки прямых выбрасываются (дробь сверху отмечает длину выброшенных участков прямой)

Найдем длину l отброшенной части единичного отрезка при построении множества Кантора. Используя формулу для суммы геометрической прогрессии, получаем

$$l = \frac{1}{3} + \frac{2}{9} + \frac{4}{27} + \dots = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{2}{3}\right)^k = \frac{1}{2} \frac{a_1}{1-q} = \frac{1/3}{1-2/3} = 1.$$

В этой формуле $a_1 = 2/3$ – первое слагаемое геометрической прогрессии, $q = 2/3$ – знаменатель прогрессии. Поскольку длина отброшенной части равна единице, то размерность множества Кантора не должна быть целым числом.

Можно предложить следующую процедуру определения размерности фрактального множества, пригодную для фазового пространства любой размерности. Пусть в n -мерном фазовом пространстве имеется множество состояний A . Покроем это множество n -мерными кубиками со стороной ε так, чтобы эти кубики содержали все точки множества, и сосчитаем эти кубики. Пусть их число оказалось $N(\varepsilon)$. Тогда размерность $d(A)$ множества A фазовых точек можно определить по формуле

$$d(A) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln(1/\varepsilon)} \right). \quad (1.131)$$

Легко показать, что формула (1.131) дает правильные результаты для регулярных множеств, имеющих размерность 1, 2 или 3. Рассмотрим одномерное множество точек – отрезок прямой единичной длины. Тогда для покрытия всех точек этого отрезка потребуется $N(\varepsilon) = 1/\varepsilon$ отрезков длиной ε . Применяя формулу (1.131), получаем $d = 1$.

Аналогично можно убедиться в том, что для двумерного и трехмерного случаев эта формула дает правильные результаты.

Применим правило определения размерности для множества Кантора. В этом случае длины интервалов, которыми покрывается множество, равны $(1/3)^m$, $m = 1, 2, 3, \dots$, а число интервалов, которое нужно для покрытия множества, будет соответственно равно 2, 4, 8, \dots . Поэтому в случае множества

Кантора $\varepsilon = (1/3)^m$, $N(\varepsilon) = N(m) = 2^m$. Применение формулы (1.131) для множества Кантора дает

$$d = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\frac{m \ln 2}{m \ln 3} \right) \simeq 0,631.$$

Действуя аналогично, можно определить размерность и других фрактальных множеств.

Определить размерность множества точек странного аттрактора на основании формулы (1.131) можно и в ходе численного эксперимента. Для этого следует покрыть фазовое пространство гиперкубами со стороной ε и подсчитать количество гиперкубов $N(\varepsilon)$, в которые попали фазовые точки. Затем, уменьшая сторону гиперкуба, например, в два, четыре, восемь и т. д. раз, повторять эту же процедуру подсчета. Полученные результаты следует представить графически, отложив по оси абсцисс значения $\ln(1/\varepsilon)$, а по оси ординат — $\ln N(\varepsilon)$. Если точки на графике можно аппроксимировать некоторой прямой, то тангенс угла наклона этой прямой к оси абсцисс и будет приближенно равен размерности множества точек этого аттрактора. Естественно, что все вычисления должны быть автоматизированы.

Завершая эту главу, следует еще раз подчеркнуть, что необратимое поведение и самоорганизация не являются альтернативой динамического описания. Эти явления присущи динамическим системам, в которых реализуется динамический хаос. Динамический хаос в диссипативных системах связан с сильной неустойчивостью нелинейных динамических систем и возможен в системах с небольшим числом степеней свободы. В системах с динамическим хаосом структура множества точек в фазовом пространстве является фрактальной. Пока совершенно неясно, как этот факт следует учитывать при статистическом описании свойств неравновесных систем.

Возникновение динамического хаоса в гамильтоновых системах и необратимое поведение квантовых систем рассмотрим в начале главы 3. Последние результаты в области исследования хаотического поведения квантовых систем можно найти в монографии Х. Ю. Штокмана [15].

Глава 2

БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ

2.1. Уравнение Ланжевена для броуновской частицы

§ 1. Характер движения броуновской частицы. Случайные силы

Броуновским движением называется хаотическое перемещение малых твердых частиц (с характерным размером R порядка длины волны видимого света), взвешенных в жидкости. Это явление обнаружил Роберт Браун (R. Brown) в 1827 г., наблюдая с помощью микроскопа хаотическое движение частиц цветочной пыльцы в капле воды.

Количественная теория броуновского движения была разработана в 1905 г. Эйнштейном. В 1908 г. Ланжевен, используя концепцию случайных сил, действующих на броуновскую частицу, получил достаточно простое феноменологическое уравнение движения, которое позволяет воспроизвести результаты, найденные Эйнштейном. Поскольку концепция случайных сил достаточно широко применяется в неравновесной статистической механике, рассмотрение проблемы броуновского движения начнем с вывода уравнений Ланжевена.

Будем считать, что броуновская частица имеет массу m и является сферически-симметричной частицей с характерным размером R . В этом случае при движении в жидкости со скоростью \vec{v} на нее, согласно формуле Стокса, будет действовать сила трения $\vec{F}_{\text{тр}} = -\gamma \cdot \vec{v}$, где $\gamma = 6 \cdot \pi \cdot R \cdot \eta$, η – коэффициент сдвиговой вязкости среды. Кроме силы трения, учтем еще силу, возникающую в результате упругих столкновений молекул жидкости с частицей. Поскольку жидкость предполагается однородной и изотропной, то равнодействующая сил упругих столкновений молекул жидкости и частицы может быть связана

только со случайными флуктуациями числа соударений молекул жидкости с частицей. Иначе говоря, величина и направление этой силы $f(t)$ является случайной величиной, зависящей от времени.

Поскольку среда изотропна, а частица сферически-симметрична, достаточно рассмотреть одномерное движение вдоль оси X . Оставаясь в рамках классической механики, запишем уравнение движения

$$m \cdot \ddot{x} + \gamma \cdot \dot{x} = f(t). \quad (2.1)$$

При записи уравнения (2.1) мы учли, что сила сопротивления ориентирована в направлении, противоположном направлению скорости. Это уравнение называется уравнением Ланжевена с источником случайных сил в правой части.

Легко получить формальное решение уравнения Ланжевена. С точки зрения теории дифференциальных уравнений, уравнение (2.1) представляет собой линейное неоднородное уравнение первого порядка относительно скорости $v_x = \dot{x}$ и его решением является суперпозиция общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения

$$v_x(t) = v_x(0) e^{-\gamma/m t} + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\gamma/m (t-t_1)} f(t_1) dt_1. \quad (2.2)$$

Естественно, что формальное решение (2.2) пока не дает каких-либо новых результатов, поскольку функция $f(t)$ неизвестна. Чтобы продвинуться вперед в решении проблемы движения броуновской частицы, следует изучить свойства функции $f(t)$.

Ланжевенский источник – это случайная функция времени. Поэтому если выбрать достаточно большой временной интервал T , то среднее значение этой силы будет равно нулю:

$$\langle f(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T f(t_1) dt_1 = 0.$$

В этой задаче имеется по меньшей мере два временных масштаба. Один из них связан с временем взаимодействия отдельной молекулы с броуновской частицей. Это характерное время τ_0 можно оценить как отношение радиуса действия межмолекулярных сил $r_0 \sim 10^{-8}$ см к тепловой скорости движения молекул $v_T \sim 10^5$ см/с:

$$\tau_0 \simeq \frac{r_0}{v_T} \simeq \frac{10^{-8} \text{ см}}{10^5 \text{ см/с}} \simeq 10^{-13} \text{ с.}$$

Другое характерное время связано с релаксацией скорости броуновской частицы в жидкости. Из формулы (2.2) следует, что если нет случайных сил, то скорость частицы

$$v_x(t) = v_x(0) e^{-\gamma/m t}$$

релаксирует с частотой релаксации $1/\tau \simeq \gamma/m$; $\tau \simeq m/\gamma$.

Если взять характерные значения величин, которые реализовались, например, в классических опытах Перрена: $R \simeq 10^{-7}$ м, $m \simeq 10^{-17}$ кг, вязкость воды $\eta \simeq 10^{-3}$ кг/м с, $\gamma = 6 \pi R \eta \simeq 2 \cdot 10^{-9}$ кг/с, то получается величина, существенно большая, нежели τ_0 : $\tau \simeq 10^{-8}$ с. Поэтому если нас интересует броуновское движение частицы на временах, больших, нежели время τ , то необходимо произвести усреднение уравнений движения (2.1) на временном интервале порядка τ . Тогда очевидно, что отдельные акты соударений можно будет не учитывать.

Рассмотрим поведение случайной силы при таком усреднении. Очевидно, что среднее значение этой силы $\langle f(t) \rangle$ на временном интервале τ будет равно нулю. Однако равенство нулю среднего значения еще не дает полной характеристики случайной величины. Не менее важной характеристикой является корреляция ее значений в разные моменты. Для характеристики взаимосвязи значений случайной силы, взятых в разные моменты времени, будем использовать парную корреляционную функцию $K_f(t_1, t_2)$, которую определим следующим образом:

$$\begin{aligned} K_f(t_1, t_2) &= \langle f(t_1) f(t_2) \rangle - \langle f(t_1) \rangle \langle f(t_2) \rangle \equiv \\ &\equiv \langle (f(t_1) - \langle f(t_1) \rangle) (f(t_2) - \langle f(t_2) \rangle) \rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Очевидно, что парная корреляционная функция (2.3), в силу однородности времени, зависит только от разности временных аргументов $t_1 - t_2$: $K_f(t_1, t_2) = K_f(t_1 - t_2)$. Для рассматриваемого нами процесса средние значения случайной силы $\langle f(t_1) \rangle = \langle f(t_2) \rangle = 0$. Поэтому можно считать, что

$$K_f(t_1, t_2) = \langle f(t) f(0) \rangle,$$

где $t = t_1 - t_2$. Основываясь на том, что в этой задаче есть два сильно различающихся временных масштаба, можно попытаться смоделировать поведение корреляционной функции $K_f(t_1, t_2) = \langle f(t_1 - t_2) f(0) \rangle$. Поскольку длительность каждого акта столкновений порядка τ_0 , то случайные силы $f(t_1)$ и $f(t_2)$ коррелированы только в том случае, когда $t = t_1 - t_2 \leq \tau_0$. Аппроксимируя временное поведение корреляционной функции самым грубым образом, будем считать, что корреляционная функция постоянна и равна некоторой величине C , если $|t| \leq \tau_0$, и равна нулю, если $|t| \geq \tau_0$:

$$K_f(t, 0) = \begin{cases} C & |t| \leq \tau_0, \\ 0 & |t| \geq \tau_0. \end{cases} \quad (2.4)$$

На рис. 16 *a* схематически изображено временное поведение случайной силы $f(t)$, а на рис. 16 *b* – график зависимости корреляционной функции $K_f(t, 0)$ от времени, задаваемый уравнением (2.4).

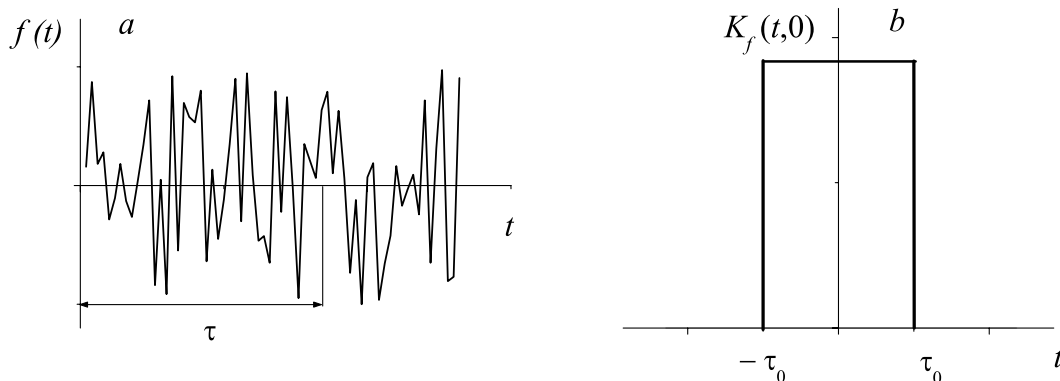


Рис. 16. Временное поведение случайной функции $f(t)$ (*a*) и корреляционной функции $K_f(t, 0)$ (*b*)

Поскольку в грубом временном масштабе τ величина временного интервала τ_0 может считаться очень малой, то, упрощая формулу (2.4), можно принять, что случайные силы коррелируют только в том случае, если их аргументы совпадают:

$$K_f(t_1 - t_2) = C \delta(t_1 - t_2). \quad (2.5)$$

Перейдем к Фурье-представлению $K_f(\omega)$ для корреляционной функции случайных сил:

$$K_f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_f(t) e^{i\omega t} dt = C \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) e^{i\omega t} dt = C. \quad (2.6)$$

Величину $K_f(\omega)$ часто называют также *спектральной плотностью* корреляционной функции случайных сил. Из формулы (2.6) следует, что $K_f(\omega) = C$ и не зависит от частоты. Случайный процесс, для которого спектральная плотность парной корреляционной функции не зависит от частоты, называется *белым шумом* (название получил от белого света, содержащего электромагнитные волны частот всего видимого диапазона электромагнитного излучения с равными интенсивностями).

Из формулы (2.6) следует, что константа C определяет спектральную интенсивность случайной силы. Выразим ее через средний квадрат флуктуаций скорости. Как уже указывалось, при $t > \tau$ среднее значение случайной силы равно нулю. Поэтому, усредняя уравнение (2.2) по временному интервалу $t \sim \tau$, получаем

$$\langle v_x(t) \rangle = v_x(0) e^{-t/\tau}, \quad \frac{1}{\tau} = \frac{\gamma}{m}.$$

Отсюда следует, что флуктуация скорости полностью определяется случайной силой:

$$v_x(t) - \langle v_x(t) \rangle = \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\gamma/m (t-t_1)} f(t_1) dt_1. \quad (2.7)$$

Определим величину, которая будет иметь смысл среднего квадрата флуктуации скорости:

$$D_v(t) = \langle (v_x(t) - \overline{v_x(t)})^2 \rangle. \quad (2.8)$$

В этой формуле мы для упрощения записи использовали обозначение $\langle v_x(t) \rangle \equiv \overline{v_x(t)}$. Подставляя в формулу (2.8) выражение для флуктуации скорости (2.7), получаем

$$D_v(t) = \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t e^{-(t-t_1)/\tau} e^{-(t-t_2)/\tau} K_f(t_1 - t_2) dt_1 dt_2. \quad (2.9)$$

Учитывая, что, согласно формуле (2.5), $K_f(t_1 - t_2) = C\delta(t_1 - t_2)$, произведем интегрирование по временному аргументу t_2 в выражении (2.9):

$$\begin{aligned} D_v(t) &= \frac{C}{m^2} \int_0^t e^{-2(t-t_1)/\tau} dt_1 = \frac{C}{m^2} e^{-2t/\tau} \int_0^t e^{2t_1/\tau} dt_1 = \\ &= \frac{C \tau}{2m^2} \left(1 - e^{-2t/\tau} \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Выражение (2.10) определяет квадрат скорости хаотического движения броуновской частицы:

$$D_v(t) = K_v(t, t) = \langle (v_x(t) - \overline{v_x(t)})^2 \rangle = \frac{C \tau}{2m^2} \left(1 - e^{-2t/\tau} \right).$$

Этот факт можно использовать для определения константы C . Оценку величины спектральной интенсивности случайной силы C можно получить, если вспомнить теорему о равномерном распределении энергии хаотического движения по степеням свободы. На одну степень свободы должна приходиться энергия, равная $k_B T/2$, где k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Поэтому для времен $t \gg \tau$ имеем

$$\frac{m}{2} \langle (v_x(t) - \overline{v_x(t)})^2 \rangle = \frac{C \tau}{4m} = \frac{k_B T}{2}.$$

Отсюда получается простая оценка для величины C :

$$C = \frac{2 k_B T m}{\tau} \equiv 2 k_B T \gamma.$$

Теперь можно записать выражение для парной корреляционной функции случайных сил в окончательной форме:

$$K_f(t_1 - t_2) = 2 k_B T \gamma \delta(t_1 - t_2), \quad K_f(\omega) = 2 k_B T \gamma. \quad (2.11)$$

Выражение (2.11) известно в литературе как одна из возможных формулировок флуктуационно-диссипационной теоремы, связывающей флуктуации случайных сил в равновесном состоянии с параметрами, характеризующими необратимые процессы (параметр γ определяет частоту релаксации импульса броуновской частицы в жидкости).

Найденная выше величина (2.8) по своему смыслу является парной корреляционной функцией флуктуаций скоростей броуновской частицы, взятых в один момент времени: $D_v(t) = K_v(t, t)$. Можно обобщить этот результат и определить корреляционную функцию флуктуаций компонент скорости, взятых в разные моменты времени:

$$K_v(t_1, t_2) = \langle (v(t_1) - \overline{v(t_1)}) (v(t_2) - \overline{v(t_2)}) \rangle. \quad (2.12)$$

Задача 2.1

Используя выражение (2.12), определить временное поведение парной корреляционной функции компонент скорости броуновской частицы.

Решение

Воспользуемся выражением (2.7) для флуктуации скорости броуновской частицы и подставим его в определение (2.12). В результате этой операции удастся выразить корреляционную функцию компонент скорости через коррелятор случайных сил $K_f(t_1, t_2)$:

$$K_v(t_1, t_2) = \frac{1}{m^2} \int_0^{t_1} dt \int_0^{t_2} dt' e^{-(t_1-t)/\tau} e^{-(t_2-t')/\tau} \langle f(t) f(t') \rangle. \quad (2.13)$$

Воспользуемся флуктуационно-диссипационной теоремой (2.11), согласно которой $\langle f(t) f(t') \rangle = K_f(t-t') = 2 k_B T \gamma \delta(t-t')$. Подставляя этот результат в выражение (2.13) и интегрируя по t' , получаем

$$\begin{aligned} K_v(t_1, t_2) &= \frac{2 k_B T \gamma}{m^2} e^{-(t_1+t_2)/\tau} \int_0^{t_1} dt e^{2t/\tau} = \\ &= \frac{k_B T \tau \gamma}{m^2} e^{-(t_2-t_1)/\tau} (1 - e^{-2t_1/\tau}). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Учитывая, что средний квадрат тепловой скорости броуновской частицы $\overline{v^2} = k_B T/m$, а обратное время релаксации скорости $1/\tau = \gamma/m$, выражение (2.14) можно существенно упростить:

$$K_v(t_1, t_2) = \overline{v^2} e^{-(t_2-t_1)/\tau} (1 - e^{-2t_1/\tau}). \quad (2.15)$$

Легко видеть, что если $t_1 = t_2 = t$, то мы возвращаемся к результату (2.10).

§ 2. Смещение броуновской частицы

Смещение броуновской частицы легко определить, интегрируя выражение для скорости (2.2):

$$\begin{aligned} x(t) - x(0) &= v_x(0) \int_0^t dt_1 e^{-\gamma/m t_1} + \\ &+ \frac{1}{m} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\gamma/m (t_1-t_2)} f(t_2). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Найдем среднее смещение броуновской частицы из начального положения к моменту времени t . Выполняя усреднение в левой и правой частях равенства (2.16) с учетом того, что среднее значение случайной силы $\overline{f(t_2)} = 0$, находим

$$\overline{x(t)} = x(0) + v_x(0) \tau (1 - e^{-t/\tau}); \quad \tau = \frac{m}{\gamma}. \quad (2.17)$$

Из формулы (2.17) следует, что при $t \ll \tau$ $\overline{x(t)} = x(0) + v_x(0) t$. Это означает, что смещение броуновской частицы при $t \ll \tau$ все еще происходит по законам классической динамики.

Найдем дисперсию смещения броуновской частицы $D_x(t) = \langle (x(t) - \overline{x(t)})^2 \rangle$. Для этих целей предварительно упростим двойной интеграл в правой части формулы (2.16), изменив порядок интегрирования по переменным t_1 и t_2 . В итоге с учетом (2.17) получаем

$$x(t) - x(0) = v_x(0) \tau (1 - e^{-t/\tau}) + \frac{1}{m} \int_0^t dt_2 f(t_2) \int_{t_2}^t dt_1 e^{-(t_1-t_2)/\tau}. \quad (2.18)$$

Интеграл по переменной t_1 в правой части формулы (2.18) легко вычисляется. В результате получаем простую формулу для флуктуации смещения

$$x(t) - \overline{x(t)} = \frac{\tau}{m} \int_0^t dt_2 f(t_2) (1 - e^{-(t-t_2)/\tau}). \quad (2.19)$$

Подставляя последний результат в формулу дисперсии смещения броуновской частицы, получаем

$$D_x(t) = \langle (x(t) - \overline{x(t)})^2 \rangle = \frac{\tau^2}{m^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 K_f(t_1 - t_2) (1 - e^{-(t-t_1)/\tau}) (1 - e^{-(t-t_2)/\tau}). \quad (2.20)$$

Учитывая δ -образный характер источника случайных сил

$$K_f(t_1 - t_2) \sim \delta(t_1 - t_2),$$

можно выполнить интегрирование по переменным t_1 и t_2 . В итоге получаем легко интерпретируемую формулу для дисперсии смещения броуновской частицы:

$$D_x(t) = \langle (x(t) - \overline{x(t)})^2 \rangle = \frac{2k_B T \tau}{m} \left(t - 2\tau (1 - e^{-t/\tau}) + \frac{\tau}{2} (1 - e^{-2t/\tau}) \right). \quad (2.21)$$

Из полученного выражения следует, что в пределе малых времен $t/\tau \ll 1$ с точностью до квадратичных членов по малому параметру $D_x = 0$. При $t \gg \tau$ из формулы (2.21) следует линейный рост дисперсии как функции времени

$$D_x(t) = \frac{2k_B T \tau}{m} \left(t - \frac{3}{2} \tau \right).$$

Экспериментально значительно проще проверить формулу для дисперсии смещения броуновской частицы, вычисленной относительно начальной координаты броуновской частицы x_0 , а не среднего смещения $\overline{x(t)}$. Поэтому следует преобразовать дисперсию (2.21) к формуле дисперсии, где отклонение исчисляется от начальной координаты x_0 . Формулу такого пересчета легко получить самостоятельно:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \langle (x(t) - \overline{x(t)})^2 \rangle + (\overline{x(t)} - x_0)^2.$$

Учитывая, что $\overline{x(t)} - x_0$ может быть найдено из выражения (2.17), получаем формулу Ланжевена для дисперсии смещения броуновской частицы

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \langle (x(t) - \overline{x(t)})^2 \rangle + (v_0 \tau)^2 \left(1 - e^{-t/\tau} \right)^2. \quad (2.22)$$

Рассмотрим поведение дисперсии смещения на временах, много меньших и много больших характерного времени релаксации импульса броуновской частицы τ . В пределе малых $t \ll \tau$ $D_x(t) = 0$ с точностью до квадратичных членов по параметру t/τ . Поэтому, раскладывая второе слагаемое в правой части формулы (2.22) по малому параметру t/τ , имеем

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \simeq v_0^2 t^2, \quad \frac{t}{\tau} \ll 1. \quad (2.23)$$

В пределе $t/\tau \gg 1$ вторым слагаемым в правой части (2.22) можно пренебречь, и мы получаем формулу Эйнштейна для дисперсии смещения броуновской частицы относительно начального положения:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \simeq \frac{2k_B T \tau}{m} t, \quad \frac{t}{\tau} \gg 1. \quad (2.24)$$

Найденные выше результаты временного поведения дисперсии скорости и дисперсии смещения броуновской частицы относительно x_0 приведены на рис. 17. Дисперсия скорости измерена в единицах $k_B T/m$, а дисперсия смещения – в единицах $k_B T/m \tau^2$. Рис. 17а демонстрирует релаксацию скорости броуновских частиц к максвелловскому распределению. Видно, что при переходе от механического описания к описанию в грубой временной шкале за время $t \sim \tau/2$ устанавливается максвелловское распределение по скоростям и частица забывает свою начальную скорость v_0 . В то же время смещение броуновской частицы продолжает сохранять черты механического поведения, поскольку при $t \ll \tau$ дисперсия смещения броуновской частицы, согласно формуле (2.23), пропорциональна t^2 .

На рис. 17b пунктирной линией показано поведение дисперсии смещения на малых временах $t \ll \tau$. Прямая линия соответствует поведению дисперсии смещения при очень больших временах $t \gg \tau$. Нижняя кривая соответствует дисперсии смещения, вычисленной по формуле Ланжевена (2.22) в предположении, что $v_0^2 = k_B T/m$.

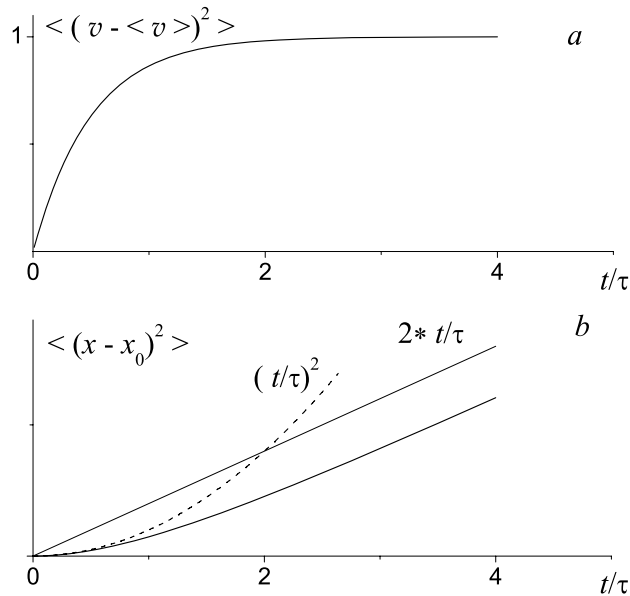


Рис. 17. Временное поведение дисперсии скорости (а) и дисперсии смещения $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle$ (b) броуновской частицы

Завершая краткое обсуждение теории броуновского движения по Ланжевену, следует еще раз остановиться на принципиальных моментах.

Во-первых, сокращенное (более грубое) описание стало возможным благодаря наличию двух временных масштабов в этой задаче. Вместо точного вычисления координат и скоростей броуновской частицы мы ограничились вычислением усредненных характеристик (моментов распределения) для двух предельных случаев $\tau_0 \ll t \ll \tau$ и $t \gg \tau$. В первом случае частично сохраняются следы механического движения и частица движется как бы по инерции со скоростью v_0 . Производя разложение по параметру t/τ в формуле (2.10) и подставляя значение константы C , получаем для первого предельного случая

$$\begin{aligned} \langle (v_x(t) - \overline{v_x(t)})^2 \rangle &\simeq \frac{2k_B T}{m} \frac{t}{\tau}, \\ \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &\simeq v_0^2 t^2, \quad \tau_0 \ll t \ll \tau. \end{aligned} \quad (2.25)$$

При $t \gg \tau$ следы динамического описания полностью теряются и движение броуновской частицы приобретает диффузионный характер

$$\begin{aligned} \langle (v_x(t) - \overline{v_x(t)})^2 \rangle &\simeq \frac{k_B T}{m}, \\ \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &\simeq \frac{2k_B T}{\gamma} t, \quad t \gg \tau. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Мы ограничились только вычислением моментов второго порядка (дисперсий), но есть, по крайней мере, принципиальная возможность вычисления моментов более высокого порядка [6, 17] (отличны от нуля только четные моменты: четвертый, шестой и т. д.).

Во-вторых, в задаче о движении броуновской частицы использовано временное усреднение по фазовой траектории. Лишь для определения амплитуды спектральной интенсивности случайной силы (константы C) пришлось использовать эргодическую гипотезу о равенстве временных и фазовых средних (подробнее эргодическая гипотеза обсуждается в следующей главе). В итоге спектральная интенсивность случайной силы оказалась зависящей от равновесной температуры.

Наконец, переход к описанию в грубой временной шкале оказался возможен лишь потому, что броуновская частица достаточно быстро за время $t \sim \tau/2$ забывает о своей начальной скорости. За это время ее движение хаотизируется и динамическое описание движения становится не только невозможным, но и бессмысленным. На временах $t \gg \tau$ эволюция броуновских частиц перестает подчиняться уравнениям механики и процесс становится *марковским*, т. е. состояние системы в данный момент времени не зависит от предыстории системы.

2.2. Уравнение Фоккера – Планка для броуновской частицы

§ 3. Вывод уравнения Фоккера – Планка

Рассмотрим эволюцию идеального газа броуновских частиц, используя подход, основанный на применении статистической функции распределения. Анализ будем вести в грубой временной шкале, полагая $t \gg \tau$. Как показано выше, за это время импульс броуновской частицы термализуется и среднее значение импульса за временной интервал $\sim \tau$ совпадает со средним тепловым импульсом. По этой причине нет никакого смысла сохранять зависимость функции распределения от импульса, и мы будем предполагать, что плотность распределения $\rho(\vec{r}, t)$ зависит только от координат \vec{r} и времени t . Естественно, что плотность распределения должна быть нормирована на единицу

$$\int \rho(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1. \quad (2.27)$$

Так как при своем движении броуновские частицы подчиняются закону сохранения числа частиц, то функция распределения должна удовлетворять уравнению неразрывности

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (2.28)$$

Здесь \vec{v} – скорость броуновских частиц.

Оставаясь в рамках полуфеноменологического описания, представим поток частиц состоящим из двух частей:

$$\vec{v} = \vec{u}_0 + \vec{u}_{\text{сл}}.$$

Первая часть потока \vec{u}_0 связана с наличием действующих внешних сил и ее можно назвать регулярной частью потока. При записи уравнения Ланжевена (2.1) предполагалось, что на броуновскую частицу действует сила сопротивления $F_{\text{тр}} = -\gamma \vec{v}$. Теперь, рассуждая аналогично, будем считать, что если броуновская частица находится в поле внешних сил $F_{\text{вн}} = -\vec{\nabla}U$ с потенциалом U , то эти внешние силы вызовут движение частицы со скоростью

$$\vec{u}_0 = \vec{F}_{\text{вн}}/\gamma = -\vec{\nabla}U/\gamma.$$

Этот результат является следствием не механических, а гидродинамических законов движения.

Вторая часть потока, связанная со случайным блужданием, имеет характер диффузионного процесса. В феноменологической теории диффузия описывается законом Фика, который утверждает, что плотность потока частиц $\vec{J}_{\text{сл}} = \rho \vec{v}_{\text{сл}}$ пропорциональна градиенту плотности числа частиц. Используя функцию плотности распределения, запишем закон Фика в следующей форме:

$$\rho \vec{u}_{\text{сл}} = -D \vec{\nabla}\rho.$$

Здесь D – феноменологический коэффициент диффузии.

Собирая эти два результата, найдем выражение для полного потока броуновских частиц:

$$\rho \vec{v} = -\left(\frac{\rho}{\gamma} \vec{\nabla}U + D \vec{\nabla}\rho \right). \quad (2.29)$$

Величины D и γ в формуле (2.29) для потока частиц на самом деле не являются независимыми феноменологическими коэффициентами. Между ними существует простая связь, которую легко установить. В условиях равновесия суммарный поток (2.29) равен нулю. Поэтому уравнение (2.29) для равновесного состояния системы можно рассматривать как уравнение для определения равновесного распределения ρ . В записи по

компонентам уравнение для определения равновесного распределения ρ можно представить в виде

$$\frac{d \ln \rho}{dx_\alpha} = -\frac{1}{\gamma D} \frac{dU}{dx_\alpha}; \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2.30)$$

Переменные в этом уравнении разделяются, поэтому его решение можно записать сразу

$$\rho(\vec{r}) = \text{const} \exp\left\{-\frac{U(\vec{r})}{\gamma D}\right\}. \quad (2.31)$$

Вместе с тем, если частицы находятся в поле потенциальных сил с потенциалом $U(\vec{r})$, то равновесное распределение этих частиц будет иметь вид

$$\rho(\vec{r}) = \text{const}, \exp\left\{-\frac{U(\vec{r})}{k_B T}\right\}. \quad (2.32)$$

Сравнивая выражения (2.31) и (2.32), находим выражение для коэффициента диффузии D :

$$D = \frac{k_B T}{\gamma}, \quad \gamma = 6 \pi R \eta,$$

где η – коэффициент сдвиговой вязкости среды, R – радиус броуновской частицы.

Теперь можно вернуться к уравнению неразрывности (2.28). Подставляя в него плотность потока частиц в форме (2.29), получаем уравнение Фоккера – Планка для плотности распределения броуновских частиц:

$$\frac{d\rho}{dt} - \frac{1}{\gamma} \operatorname{div}(\rho \operatorname{grad} U) - \frac{k_B T}{\gamma} \Delta \rho = 0, \quad (2.33)$$

где Δ – оператор Лапласа.

Уравнение (2.33) позволяет однозначно найти функцию распределения броуновских частиц $\rho(\vec{r}, t)$, если для этого уравнения заданы начальные и граничные условия. По своему смыслу это уравнение описывает релаксацию неравновесного распределения $\rho(\vec{r}, t)$ к равновесному больцмановскому распределению, определяемому формулой (2.31).

§ 4. Решение уравнения Фоккера – Планка

Рассмотрим простой случай, позволяющий, с одной стороны, просто решить уравнение Фоккера – Планка, а с другой, получить картину движения броуновской частицы, соответствующую пределу $t \gg \tau$ в уравнении Ланжевена.

Пусть потенциал внешних сил $U = 0$ и система предполагается бесконечной и пространственно-однородной. В этом случае достаточно рассмотреть одномерное распределение $\rho(x, t)$. Предположим, что в начальный момент времени броуновская частица находилась в точке с координатой $x = 0$, а плотность функции распределения описывалась дельта-функцией $\rho(x, 0) = \delta(x)$. Тогда дальнейшая динамика этого распределения будет подчиняться уравнению Фоккера – Планка

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{k_B T}{\gamma} \frac{d^2 \rho}{dx^2}. \quad (2.34)$$

Кроме начального условия $\rho(x, 0) = \delta(x)$, решение уравнения (2.34) должно еще удовлетворять условию нормировки (2.27) и условию стремления плотности распределения к нулю при бесконечном удалении от начальной точки:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \rho(x, t) = 0.$$

Для решения уравнения (2.34) определим фурье-преобразование плотности $\rho_p(t)$ распределения соотношением

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_p(t) e^{ipx} dp \quad (2.35)$$

и запишем уравнение (2.34) для фурье-трансформы $\rho_p(t)$ плотности распределения:

$$\frac{d\rho_p(t)}{dt} + \frac{k_B T}{\gamma} p^2 \rho_p(t) = 0, \quad \rho_p(0) = 1. \quad (2.36)$$

В уравнении (2.34) все коэффициенты являются постоянными величинами, а переменные разделяются. Поэтому, учитывая начальное условие $\rho_p(0) = 1$, запишем решение

$$\rho_p(t) = \exp \left(-\frac{k_B T}{\gamma} p^2 t \right). \quad (2.37)$$

Для нахождения функции распределения в координатном представлении подставим найденный результат в определение (2.35):

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k_B T/\gamma p^2 t} e^{ipx} dp. \quad (2.38)$$

Если выполнить интегрирование по p в этой формуле (методика вычисления такого рода интегралов рассмотрена в примере 2.2), то получим распределение Гаусса

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi k_B T/\gamma t}} \exp \left(-\frac{x^2}{4k_B T/\gamma t} \right). \quad (2.39)$$

Если теперь учесть, что распределение Гаусса (нормальное распределение) определяется двумя параметрами – средним значением \bar{x} и дисперсией D_x и имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D_x}} \exp \left(-\frac{(x - \bar{x})^2}{2 D_x} \right),$$

то простое сравнение с формулой (2.39) позволяет заключить, что среднее значение \bar{x} для распределения (2.39) равно нулю, а дисперсия

$$D_x(t) = \frac{2k_B T}{\gamma} t,$$

что совпадает с результатом (2.26), найденным из уравнения Ланжевена. Этот же результат можно получить, вычислив второй момент распределения

$$D_x(t) = \langle (x - \bar{x})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 \rho(x, t) dx$$

Интересно рассмотреть, как эволюционирует распределение (2.39) с ростом времени t . На рис. 18 приведены графики функции плотности распределения (2.39) для четырех значений параметра t/τ .

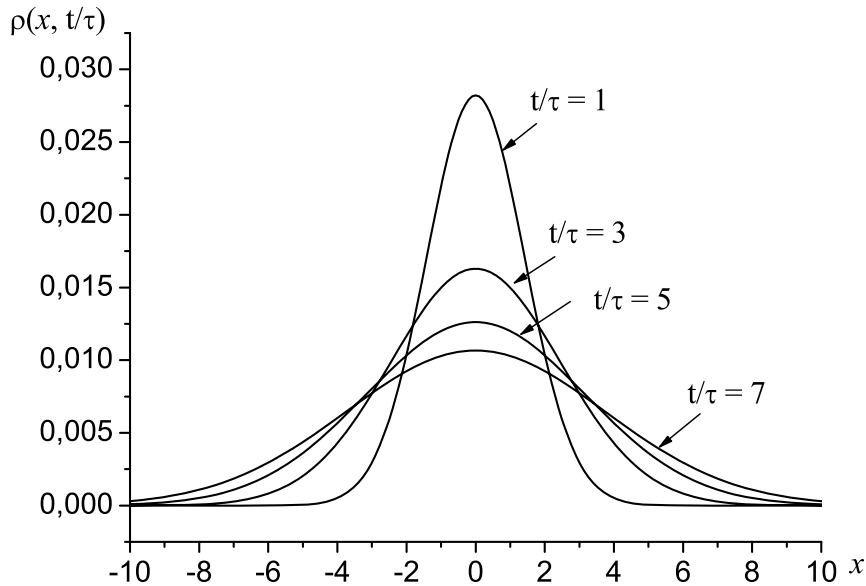


Рис. 18. Плотность распределения (2.39) для различных значений параметра t/τ ; величина x измерена в единицах $v_0 \tau$

Видно, что с ростом времени t эволюция распределения сводится к «размазыванию» распределения. Оно становится менее сосредоточенным, а вероятность обнаружить броуновскую частицу достаточно далеко от начальной точки возрастает.

Задача 2.2

Рассмотрим вычисление интеграла, возникающего при фурье-преобразовании нормального распределения (2.38).

Поставим задачу следующим образом: найти характеристическую функцию стандартного нормального распределения

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Х а р а к т е р и с т и ч е с к о й ф у н к ц и е й распределения $f(x)$ называется фурье-образ $f(p)$ этого распределения

$$f(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx. \quad (2.40)$$

Решение

Для нахождения интеграла, входящего в определение фурье-образа нормального распределения, предварительно вычислим интеграл Пуассона

$$I_{\Pi} = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx.$$

Самым простым и изящным способом нахождения интеграла Пуассона является его сведение к вычислению некоторого интеграла в полярных координатах по площади четверти круга:

$$I_{\Pi}^2 = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R \int_0^R e^{-x^2-y^2} dx dy.$$

Последний интеграл можно рассматривать как интеграл по площади круга радиусом R , находящейся в первом квадранте координатной плоскости. Этот интеграл легко может быть взят переходом к полярной системе координат $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$:

$$I_{\Pi}^2 = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^R r e^{-r^2} dr = \frac{\pi}{4}.$$

Отсюда следует, что

$$I_{\Pi} = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

а аналогичный интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-(Ax)^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{A}. \quad (2.41)$$

Для вычисления интеграла (2.40) попытаемся с помощью замены переменных привести его к виду (2.41), записав показатель экспоненты $-x^2/2 + ipx$ в подынтегральной функции выражения (2.40) в виде

$$-(Ax - B)^2 + C.$$

Сравнивая эти два выражения, находим $A = 1/\sqrt{2}$, $B = ip/\sqrt{2}$, $C = -p^2/2$. Используя результат (2.41), получаем

$$f(p) = \frac{1}{\sqrt{2} \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2 + i p x) dx = \exp(-\frac{p^2}{2}). \quad (2.42)$$

Таким образом, характеристическая функция стандартного нормального распределения найдена. Описанный выше прием использовался и для вычисления интеграла (2.38).

На этом закончим краткое знакомство с методами описания движения броуновской частицы. Более подробное рассмотрение и примеры решения многочисленных задач о движении броуновской частицы можно найти в книге И. А. Квасникова [17].

К обоснованию и применению уравнения Фоккера – Планка мы еще вернемся в следующей главе в связи с обсуждением кинетических уравнений.

Завершая главу, подведем некоторые итоги. Задача о движении броуновской частицы – это одна из простых задач физической кинетики. Она позволяет наглядно увидеть, как может происходить огрубление описания динамической системы. Точное описание движения броуновской частицы на языке уравнений классической механики не только невозможно, но и бессмысленно, поскольку через достаточно малый промежуток времени система забывает о своем начальном импульсе и дальнейшее ее движение напоминает диффузию, а не механическое движение. Причину такого явления мы подробно обсуждали в главе 1 применительно к динамике диссипативных систем. Естественно, встает вопрос о том, как возникает огрубленное описание в системах, подчиняющихся динамическим уравнениям Гамильтона. Поэтому в начале следующей главы будут проанализированы условия, при которых система не может быть описана на языке динамических уравнений движения и требуется ее статистическое описание.

Глава 3

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

3.1. Описание неравновесных систем в статистической механике

§ 1. Интегрируемые и неинтегрируемые динамические системы

К сожалению, по сложившейся традиции в курсе классической механики, который изучается в университете, совершенно недостаточно внимания уделяется неинтегрируемым системам, представляющим для нас наибольший интерес. По этой причине придётся сделать небольшой экскурс в механику классических систем.

Как известно, система динамических уравнений Гамильтона

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i, \quad i = 1, 2 \dots N, \quad (3.1)$$

называется полностью интегрируемой, если существует каноническое преобразование переменных q_i, p_i , в результате которого можно перейти от обобщенных координат q_i и обобщенных импульсов p_i к переменным J_i, α_i (действие — угол), в терминах которых система уравнений (3.1) записывается в виде [18]:

$$\frac{\partial H}{\partial J_i} = \dot{\alpha}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = 0, \quad i = 1, 2 \dots N. \quad (3.2)$$

В уравнениях (3.1) и (3.2) H — функция Гамильтона системы. Особая роль переменных действие — угол состоит в том, что в этих переменных функция Гамильтона зависит только от интегралов движения J_i и не зависит от углов α_i . Очевидно,

что если такие переменные удастся найти, то система уравнений (3.2) легко интегрируется:

$$J_i = J_i(0), \quad \alpha_i = \alpha_i(0) + \omega_i t, \quad \omega_i = \frac{\partial H}{\partial J_i}, \quad i = 1, 2 \dots N. \quad (3.3)$$

По этой причине с позиции теории канонических преобразований основной задачей механики является отыскание подходящего канонического преобразования, приводящего систему к виду (3.2). Более того, наши интуитивные представления о поведении механических систем также относятся исключительно к интегрируемым системам.

Между тем число систем, которые являются интегрируемыми, невелико. К ним, безусловно, относятся системы с одной степенью свободы и приводящиеся к ним (например системы невзаимодействующих частиц или совокупность гармонических осцилляторов, взаимодействующих между собой по гармоническому закону) несколько частных случаев систем с двумя и тремя степенями свободы. На этом перечень интегрируемых систем заканчивается. Все остальные системы неинтегрируемые, и их поведение может сильно отличаться от привычных для нас интегрируемых систем. Детерминированность, возможность динамического описания, обратимость во времени – все это, строго говоря, относится только к интегрируемым системам.

Простейшей системой, которая позволит нам рассмотреть различия в поведении интегрируемых и неинтегрируемых систем, является совокупность двух гармонических осцилляторов, взаимодействующих между собой не по гармоническому закону. Эта система описывается гамильтонианом Эно – Эйлеса [12]:

$$H = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} + V(q_1^2 q_2 - \frac{1}{3}q_2^3). \quad (3.4)$$

Здесь p_1, q_1, ω_1 и p_2, q_2, ω_2 – импульс, координата и собственная частота колебаний первого и второго осцилляторов соответственно. Масса частиц предполагается одинаковой. Если параметр V в уравнении (3.4) равен нулю, то мы получаем интегрируемую систему уравнений движения, если же $V \neq 0$, то система уравнений является неинтегрируемой в указанном

выше смысле и её решение может быть получено лишь с использованием численных методов интегрирования системы дифференциальных уравнений.

Прежде чем переходить к непосредственному анализу динамики системы с гамильтонианом (3.4), напомним читателю некоторые важные результаты классической механики, относящиеся к гамильтоновым системам (см. [19]).

Будем задавать состояние механической системы в данный момент времени положением фазовой точки в фазовом пространстве $6N$ переменных $q_i, p_i, i = 1, 2, \dots, 3N$. В этом случае эволюция системы наглядно может быть представлена траекторией фазовой точки в фазовом пространстве.

Рассмотрим некоторую малую область A фазового пространства. Уравнения динамики Гамильтона (3.1) задают однопараметрическую группу преобразований фазового пространства G^t , переводящую фазовую точку $(\vec{q}(0), \vec{p}(0))$ в новое положение $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$. Это преобразование обычно называют фазовым потоком. В результате действия преобразования G^t фазовые точки, принадлежащие области A , в момент времени t переходят в некоторую область A^t , причем $G^t A = A^t$.

Согласно теореме Лиувилля [19], для консервативных систем фазовый поток сохраняет фазовый объем. Иначе говоря, объём области A равен объёму области A^t . На основании этой теоремы Пуанкаре сформулировал парадоксальное на первый взгляд утверждение.

Если фазовая точка системы находится в произвольно малой области фазового пространства U , то в процессе эволюции она сколько угодно раз вновь может оказаться в этой области U . Это утверждение, известное как теорема о возвратах Пуанкаре, по сути говорит, что любая система в ходе эволюции должна через какое-то время вновь вернуться в исходное состояние. Доказательство теоремы Пуанкаре может быть легко получено.

Рассмотрим образы фазовой области U через равные интервалы времени τ , т. е. в моменты времени $t, t + \tau, t + 2\tau, \dots, t + n\tau$. Фазовый поток будет преобразовывать область U в момент времени $t + n\tau$ в область $G^{t+n\tau} U = U^n$. Поскольку объёмы областей $U^t, U^1, U^2, \dots, U^n$, согласно теореме Лиувилля, равны

между собой, то рано или поздно объёмы U^n и U^m перекроются, если фазовый объем системы не равен бесконечности. На рис. 19 схематически изображена эволюция фазовой области U и показано перекрытие этих областей в некоторый момент времени. Возникающие в процессе эволюции образы области U могут иметь различную форму, но сохраняют свой объём.

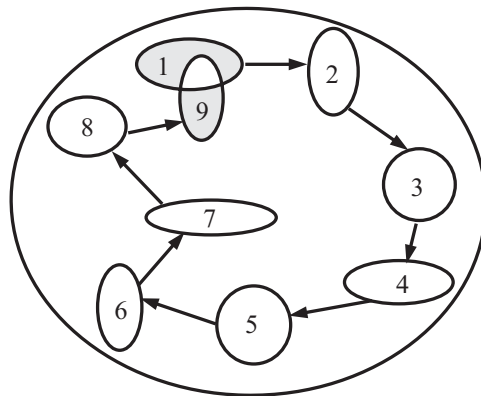


Рис. 19. К доказательству теоремы Пуанкаре:
эволюция малой области фазового пространства; показано частичное
перекрытие областей 1 и 9

Несмотря на кажущееся противоречие теоремы Пуанкаре здравому смыслу, может существовать несколько различных объяснений парадокса о возврате механической системы в исходное состояние. Одно из возможных объяснений сводится просто к оценке времени возврата. Учитывая огромное число возможных состояний, которое порядка $6N!$, и конечную скорость изменения фазовых переменных, легко получить оценку, согласно которой время возврата для макроскопической системы значительно превышает время существования Галактики. Это объяснение было исторически первым, но, как увидим в дальнейшем, есть и другие причины того, что для наблюдаемых нами систем теорема Пуанкаре о возвратах не выполняется.

§ 2. Эволюция динамических систем в фазовом пространстве

Вернемся теперь снова к вопросу о поведении интегрируемых и неинтегрируемых систем и рассмотрим его с позиций эволюции малой области фазового пространства системы. Можно

выделить три типичных сценария эволюции малой окрестности фазовой точки (для простоты мы иногда будем говорить не о малой окрестности точки в фазовом пространстве, а о фазовой точке).

В первом случае фазовая траектория является замкнутой линией и система совершает периодическое движение. Примером такой системы является совокупность двух невзаимодействующих гармонических осцилляторов с кратным отношением собственных частот колебаний ω_1 и ω_2 .

Её гамильтониан можно получить, если в выражении (3.4) считать $V = 0$, а отношение частот принять равным некоторому рациональному числу. На рис. 20 *a* изображена поверхность постоянной энергии этой системы, которая является тором в пространстве переменных p_2, q_1, q_2 , а фазовая траектория представляет собой замкнутую линию, навитую на тор.

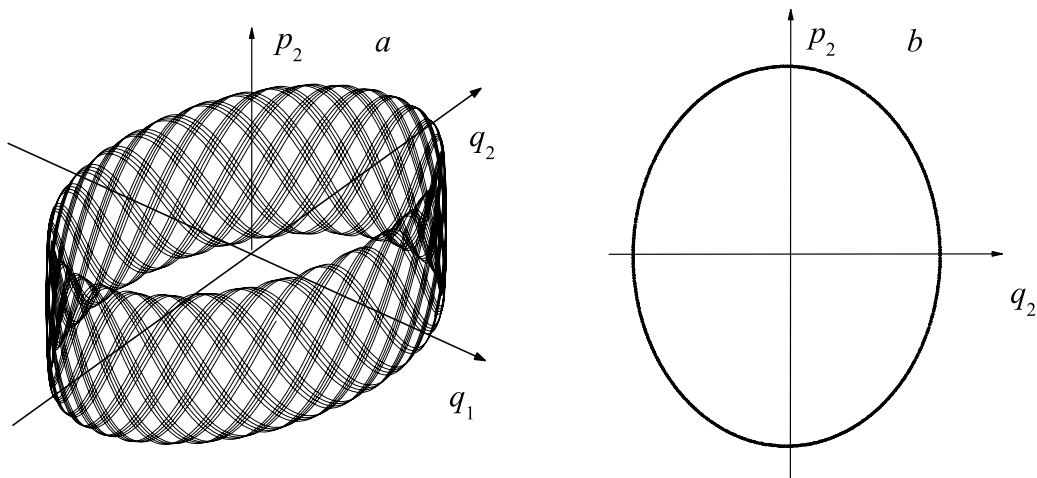


Рис. 20. Фазовый портрет системы (3.4):

a – случай неэргодической системы; фазовая траектория не покрывает тор; *b* – фазовый портрет эргодической системы в сечении Пуанкаре $\omega_1^2 = 65, \omega_2^2 = 4$

Для такой системы возможно динамическое описание. Статистическое описание вводить нецелесообразно. Информацию о поведении системы можно получить, наблюдая появление фазовых точек в сечении Пуанкаре, т. е. в сечении фазового пространства одной из плоскостей, например плоскостью $q_1 = 0$ (рис. 20 *b*). Если частоты соизмеримы, то в сечении Пуанкаре получим дискретное множество точек, если же

частоты несоизмеримы, то множество точек, в которых фазовая кривая «протыкает» плоскость $q_1 = 0$, будет представлять собой эллипс.

Рассмотрим теперь случай, когда отношение частот осцилляторов не сводится к рациональному числу (ω_1 и ω_2 несоизмеримы). В этом случае фазовая траектория является незамкнутой линией, которая полностью покрывает тор. Именно это обстоятельство позволяет ввести статистическое описание системы.

Определим функцию $\rho(p, q)$, задающую плотность вероятности обнаружить фазовую точку системы в бесконечно малом элементе объёма $dpdq$ в окрестности точки, положение которой в фазовом пространстве задается совокупностью величин p, q . Для этого в фазовом пространстве системы выделим элемент объёма dp, dq и будем отмечать долю времени τ , в течение которого фазовая точка находится внутри объёма $dpdq$. Для упрощения обозначений совокупность величин $p_i, q_i, i = 1, 2, \dots, N$ мы заменили буквами p и q соответственно. Очевидно, что предел отношения

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\tau}{t} = \rho(p, q)dpdq, \quad (3.5)$$

где t — время наблюдения за системой, задаёт вероятность обнаружить фазовую точку системы внутри объёма $dpdq$. Из определения плотности вероятности следует, что она нормирована на единицу:

$$\int_{\Omega} \rho(p, q)dpdq = 1. \quad (3.6)$$

В выражении (3.6) интегрирование ведется по изоэнергетической поверхности Ω $H(p, q) = \text{const}$. В дальнейшем введенную таким образом величину $\rho(p, q)$ будем называть статистическим оператором системы.

Если статистический оператор $\rho(p, q)$ уже известен, то среднее значение любой физической переменной $f(p, q)$ может быть найдено как математическое ожидание величины $f(p, q)$:

$$\langle f(p, q) \rangle = \int_{\Omega} f(p, q)\rho(p, q)dpdq, \quad (3.7)$$

где интегрирование ведется по доступной для системы области фазового пространства (поверхности постоянной энергии). Если система, кроме энергии, имеет ещё K интегралов движения, то размерность гиперповерхности, по которой производится интегрирование, будет равна $6N - K - 1$.

Среднее значение величины $f(p(t), q(t))$ можно получить также усреднением её по времени:

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(p(t), q(t)) dt. \quad (3.8)$$

Полученная в результате усреднения по формуле (3.7) величина $\langle f(p, q) \rangle$ может быть названа статистическим средним, а величина \bar{f} , вычисленная по формуле (3.8), — динамическим средним.

Представляется уместным подчеркнуть, что статистическая механика равновесных систем строится на весьма грубом упрощении формулы (3.7) для среднего по фазовому пространству. Краеугольным камнем статистической механики Гиббса является гипотеза, что величина $\rho(p, q) = \text{const}$, если p и q принадлежат изоэнергетической поверхности Ω . Причины удивительного успеха столь грубого приближения кроются в особенности динамики гамильтоновых систем, и мы вернемся к этой проблеме позднее.

Обычно предполагается, что статистическое и динамическое средние равны. С учетом постоянства $\rho(p, q)$ на изоэнергетической поверхности и условия нормировки (3.6) имеем

$$\langle f(p, q) \rangle = \bar{f} = \frac{\int_{\Omega} f(p, q) dp dq}{\int_{\Omega} dp dq}. \quad (3.9)$$

Это утверждение носит название *э р г о д и ч е с к о й* *г и - н о т е з ы*. Её справедливость не поддаётся строгому доказательству, но следствием эргодической гипотезы является возможность построить термодинамическое описание равновесных систем, которое хорошо согласуется с опытом.

Итак, если динамическая система устроена таким образом, что в ходе эволюции за достаточно большое время фазовая

траектория покрывает всю изоэнергетическую поверхность, то возможно статистическое описание системы с использованием статистического оператора $\rho(p, q)$. Существенное упрощение в описании возникает тогда, когда можно считать, что $\rho(p, q) = \text{const}$ на всей гиперповерхности постоянной энергии.

Перейдем теперь к рассмотрению еще одной возможной ситуации и примем в гамильтониане (3.4) $\omega_1 = \omega_2$ и $V = 1$. Гамильтонова система уравнений движения при этом перестает быть интегрируемой, а поведение фазовой траектории совершенно меняется. Теперь изоэнергетическая поверхность системы в фазовом пространстве уже не является тором. На рис. 21 *a* изображена фазовая траектория системы, полученная в результате численного интегрирования уравнений движения.

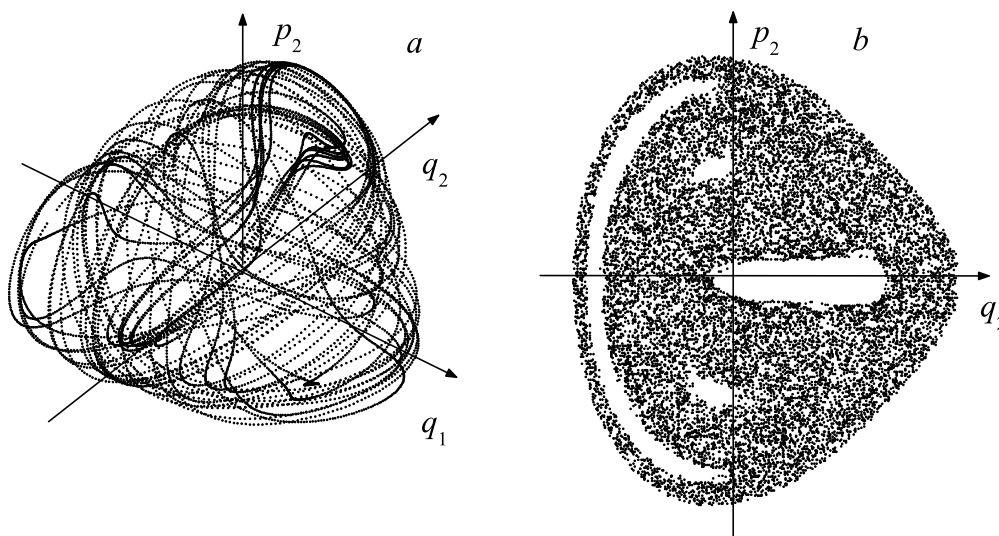


Рис. 21. Фазовый портрет системы (3.4):

a – параметр $V = 1$, $\omega_1 = \omega_2 = 1$; *b* – фазовый портрет той же системы в сечении Пуанкаре $q_1 = 0$

Траектория напоминает запутанный клубок ниток и совсем не похожа на регулярное движение фазовой точки по поверхности тора в предыдущем случае.

Более полную информацию о поведении системы можно получить, наблюдая появление фазовых точек в сечении Пуанкаре (сечении фазового пространства плоскостью $q_1 = 0$). Результат такого численного эксперимента показан на рис. 21 *b*. Каждая точка на этом рисунке соответствует «протыканию»

фазовой траекторией плоскости $q_1 = 0$ при движении фазовой точки вдоль положительного направления оси q_1 .

Строгих аналитических расчетов даже для такой простой модели не существует, а результаты численных экспериментов различных авторов однозначно указывают на то, что в этой модели реализуется стохастическое поведение. Доказательством является то, что если пронумеровать точки, возникающие на дисплее, то последовательность точек с близкими номерами оказывается хаотически разбросанной по всей изоэнергетической поверхности. Ситуация не меняется, если уменьшать временной шаг при интегрировании уравнений движения. Можно сказать, что в этой системе реализуется стохастическое поведение, или так называемый динамический хаос.

Попробуем понять, как может возникнуть состояние динамического хаоса в системе, описываемой уравнениями Ньютона. Рассмотрим некоторую малую область фазового пространства A . В случае интегрируемых систем фазовый поток фактически просто перемещает область A в новое положение на изоэнергетической поверхности, покрывая её всю со временем. В случае неинтегрируемых систем область A , сохраняя свой объём, расслаивается на тонкие нити и постепенно за некоторое характерное время, которое естественно назвать временем перемешивания, рассредоточивается по всей изоэнергетической поверхности. Количественное определение понятию перемешивания можно дать, используя понятие меры. Назовем отношение объёма области A к объёму фазового пространства, доступному для системы, мерой области A и обозначим $\mu(A)$. В ходе эволюции объём области A заменяется объёмом A^t . Но объём области A равен объёму A^t , поэтому, очевидно, $\mu(A) = \mu(A^t)$. Выделим некоторую другую произвольную область B и будем считать её неподвижной. Ясно, что из-за перемешивания кусочки области A будут попадать в область B . Перемешивание будет полным, если объём перекрывающихся частей областей A^t и B , отнесенный к объёму B , будет равен относительному объёму области A . На языке понятия меры это условие полного перемешивания можно записать следующим образом:

$$\mu(A) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mu(A^t \cap B)}{\mu(B)}. \quad (3.10)$$

Перемешивание возникает в таких системах, где имеется сильное «разбегание» двух фазовых точек, находившихся в начальный момент на произвольно близком расстоянии друг от друга. Такие системы называют неустойчивыми. Неустойчивость систем, в свою очередь, приводит к непредсказуемости их поведения. Действительно, если в начальный момент времени положение фазовой точки известно с некоторой точностью, т. е. мы знаем, что она принадлежит некоторой области с характерным размером ε , то сказать, где будет фазовая точка через некоторый промежуток времени t , невозможно. Она с конечной вероятностью может оказаться в любой точке изоэнергетической поверхности.

Когда мы говорим о разбегании фазовых точек в системах с перемешиванием, то это достаточно легко себе представить. В этом случае мы анализируем поведение копий систем, различающихся начальными условиями. Разбегание траекторий для таких систем означает их сверхчувствительность к начальным условиям. Но о каком хаосе может идти речь, когда мы решаем систему дифференциальных уравнений для нескольких частиц и анализируем движение одной фазовой точки? Теорема единственности решения дифференциальных уравнений, казалось бы, должна давать детерминированное поведение, и в каждый момент времени можно строго вычислить координаты и импульсы всех частиц, составляющих систему.

Стохастичность здесь также возникает из-за сверхвысокой чувствительности динамики системы к заданию начальных условий. Не имея возможности анализировать эту проблему в деталях, приведем лишь наглядный пример, демонстрирующий суть проблемы (говорят, что пример убеждает разумного, а доказательство — упрямого).

Простейшей моделью стохастической системы может служить бильярд Синая. Этот бильярд представляет собой плоский стол, ограниченный стенками. В середине бильярда помещена круглая шайба радиусом R . Другая подвижная шайба меньшим радиусом r запускается с некоторой начальной скоростью \vec{v} из произвольной точки бильярда. Предполагается, что все удары являются абсолютно упругими. Поскольку, как показано на рис. 22, результат рассеяния сильно зависит от начального направления скорости и начального положения подвижной

шайбы, любое малое изменение начальных условий приведет в конце концов к другой картине движения.

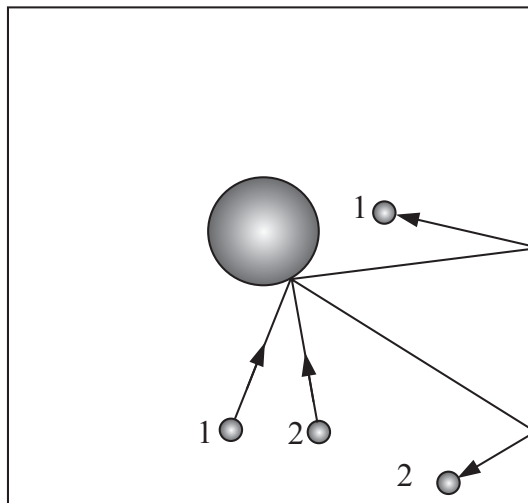


Рис. 22. Бильярд Синая – простейшая механическая система, демонстрирующая хаотическое поведение

Таким образом, именно сверхвысокая чувствительность к условиям рассеяния приводит к стохастическому поведению системы. При любой конечной точности вычислений через некоторое число актов рассеяния движущейся шайбы на центральном диске поведение частицы уже не будет зависеть от начального положения и начальной скорости частицы. Иначе говоря, система забудет своё начальное состояние и динамическое описание станет невозможным.

Описать движение такой шайбы можно, лишь вычислив вероятность её обнаружения в любой точке стола. Очевидно, что после некоторого времени, равного времени размешивания, эта вероятность уже не будет зависеть от t , а будет определяться лишь особенностями устройства системы, в частности геометрическими размерами. Более того, можно утверждать, что движение частицы в бильярде будет необратимым. Действительно, потеря информации о начальных условиях означает возрастание информационной энтропии в изолированной системе, что характерно для необратимого поведения. Критерием, позволяющим различать системы с размешиванием от интегрируемых систем, является отличие от нуля энтропии Колмогорова – Синая (1.123).

Завершая эту тему, хотелось бы еще раз обратить внимание читателя на следующие основные моменты.

Возможность, а точнее, необходимость введения статистического описания связана со слабой устойчивостью динамических систем. Можно сказать, что статистическое описание возможно потому, что за любое макроскопическое время измерения динамической величины фазовая точка успеет побывать в огромном числе точек, разбросанных хаотически по всей фазовой поверхности. Именно размешивание позволяет использовать представление о том, что плотность распределения фазовых точек на изоэнергетической поверхности представляет собой постоянную величину (микроканоническое распределение), что является краеугольным камнем статистической механики Гиббса. Эргодичность систем (3.9) необходимое, но не достаточное условие применимости статистического описания, и только в системах с размешиванием плотность распределения фазовых точек оказывается одинаковой на всей изоэнергетической поверхности системы.

Для интегрируемых систем статистическое описание невозможно, поскольку фазовая точка движется по траектории, и если уж вводить усредненное описание, то усреднение нужно проводить вдоль траектории движения, а не по всему фазовому пространству.

Хаотическое поведение возникает как в динамических системах, описываемых уравнениями Гамильтона, так и в диссипативных динамических системах, причем механизм возникновения динамического хаоса по существу одинаков – сверхвысокая зависимость картины движения от начальных условий.

Остановимся еще на одном вопросе. Не следует думать, что сложность системы автоматически гарантирует возникновение размешивания в ней. Еще на заре развития компьютерного эксперимента С. Улам, Д. Паста и Э. Ферми решили проверить при помощи численного эксперимента, выполняется ли одна из основных гипотез статистической механики – гипотеза о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Для этих целей была взята система осцилляторов, взаимодействующих не по гармоническому закону. Как показал численный эксперимент, при возбуждении одной из колебательных мод вначале происходил интенсивный обмен энергии с другими модами

и энергия, казалось бы, распределялась между всеми колебательными модами, но через некоторое время колебания исходной моды вновь усиливались. Наблюдалось явление, похожее на возврат системы в исходное состояние, предсказываемое теоремой Пуанкаре о возвратах. Решение проблемы Ферми – Паста – Улама было получено в начале 1960-х гг. М. Крускалом и Н. Забуским, доказавшими, что система Ферми – Паста – Улама представляет собой разностный аналог уравнения Кортевега – де Вриза и что равномерному распределению энергии препятствует солитонный характер распространения волн в этой системе (термин «солитон» предложен Н. Забуским).

Наконец, еще одно замечание. Статистическая механика Гиббса исходит из достаточно простых предположений о постоянстве плотности распределения фазовых точек на изоэнергетической поверхности. В то же самое время, как отмечалось в главе 1, в условиях динамического хаоса фазовое пространство становится фрактальным и имеет дробную размерность. К сожалению, пока совершенно не ясно, влияет ли это как-то на статистические свойства системы или нет.

3.2. Обоснование квазиклассических кинетических уравнений

§ 3. Уравнение Лиувилля для функции распределения

Рассмотрим газ классических частиц, состоящих из N одинаковых одноатомных молекул, заключенных в некоторый объем V . Пусть для простоты изложения динамическое состояние каждой молекулы определяется координатой q и импульсом p . Декартовы проекции векторов p и q обозначим соответственно p^α и q^α ($\alpha = 1, 2, 3$).

Поскольку мы рассматриваем газ классических частиц, их координаты и импульсы подчиняются уравнениям Гамильтона (3.1)

$$\frac{dp_i^\alpha}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i^\alpha}, \quad \frac{dq_i^\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i^\alpha}, \quad i = 1, 2 \dots N. \quad (3.11)$$

В формуле (3.11) H – полный гамильтониан системы, индекс i нумерует молекулы.

Состояние механической системы в некоторый момент t , как указывалось выше, задается совокупностью значений координат и импульсов всех частиц, составляющих систему. Таким образом, в каждый момент времени состояние системы представляется точкой в $6N$ -мерном фазовом пространстве. Эволюцию системы можно описывать, изучая движение фазовой точки в фазовом пространстве.

Следуя Гиббсу, перейдем к описанию динамики системы на языке функции распределения. Для этого, вместо того чтобы рассматривать эволюцию отдельной системы, рассмотрим совокупность совершенно одинаковых динамических систем, различающихся только начальным положением в фазовом пространстве. Такая совокупность систем называется *ансамблем Гиббса*. Если обозначить через $\rho(p, q, t)$ плотность точек в фазовом пространстве, нормированную на единицу, то величина $\rho(p, q, t) dp dq$ представляет собой вероятность обнаружить фазовую точку в элементе объема фазового пространства $dp dq$.

Описание системы в рамках метода Гиббса является чисто динамическим. В этом легко убедиться, если посмотреть, какому уравнению должна удовлетворять функция распределения $\rho(p, q, t)$. Как упоминалось выше в связи с обсуждением теоремы Пуанкаре о возвратах, движение фазовых точек в классической механике есть *фазовый поток*, который задается однопараметрической группой преобразований фазового пространства

$$G^t(p_1(0), p_2(0), \dots, p_N(0); q_1(0), q_2(0), \dots, q_N(0)) \rightarrow \\ \rightarrow G^t(p_1(t), p_2(t), \dots, p_N(t); q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)),$$

где $p(t)$ и $q(t)$ находятся из решения уравнений Гамильтона (3.11).

Рассмотрим фазовые точки, попавшие в момент времени t в некоторый элемент объема фазового пространства $dp dq$. Под

действием фазового потока эти точки в момент времени t' переместятся в элемент объема фазового пространства $dp'dq'$. Поскольку фазовые точки не уничтожаются и не возникают вновь, то можно записать очевидное равенство

$$\rho(p, q, t) dp dq = \rho(p', q', t') dp' dq',$$

выражающее закон сохранения фазовых точек фазовым потоком. Поскольку, согласно теореме Лиувилля, фазовый поток сохраняет фазовый объем и $dpdq = dp'dq'$, то отсюда следует условие постоянства функции распределения при эволюции частиц по фазовой траектории:

$$\rho(p, q, t) = \rho(p', q', t').$$

Предполагая временное приращений $dt = t' - t$ бесконечно малым, произведем разложение функции $\rho(p', q', t')$ с точностью до членов первого порядка:

$$\rho(p', q', t') = \rho(p, q, t) + \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] dt. \quad (3.12)$$

Отсюда следует равенство нулю выражения в квадратных скобках в правой части (3.12). Учитывая уравнения Гамильтона, которым удовлетворяют координаты и импульсы частиц системы, получаем уравнение Лиувилля для классической функции распределения

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0, \quad \text{где} \quad [\rho, H] = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right). \quad (3.13)$$

Уравнение (3.13) позволяет найти значение функции $\rho(p, q, t)$, если задано значение функции распределения $\rho(p, q, 0)$ в начальный момент времени. При описании системы на языке N -частичной функции распределения не достигается никакого сокращения в описании. Это описание столь же подробно, как и динамическое описание с использованием уравнений Гамильтона. Чтобы продвинуться дальше, необходимо перейти к менее подробному описанию системы, например на языке

одно-частичной функции распределения. То, что такое описание возможно, следует из материала, изложенного в § 1 главы 3. Действительно, при эволюции системы из начального состояния за временной период порядка характерного времени размешивания система забывает свое начальное состояние и коэффициенты корреляции высоких порядков обращаются в нуль. Поэтому, если рассматривать поведение системы на временах, больших времени хаотизации, то бессмысленно описывать систему на языке N -частичной функции распределения $\rho(p, q, t)$. Достаточно использовать упрощенное описание на языке одно- или двухчастичных функций распределения. Впервые этот подход для вывода кинетических уравнений продемонстрировал Н. Н. Боголюбов в работе «Проблемы динамической теории в статистической физике» [20].

§ 4. Цепочка уравнений Боголюбова

Поскольку N -частичные функции распределения содержат избыточную и бесполезную информацию о корреляции частиц высоких порядков, целесообразно ввести более простые s -частичные функции распределения $F_s(t, x_1, x_2, \dots, x_s)$, $s = 1, 2, \dots$, $s \ll N$, определив их таким образом, чтобы величина

$$\frac{1}{V^s} F_s(t, x_1, x_2, \dots, x_s) dx_1 dx_2 \dots dx_s \quad (3.14)$$

давала вероятность того, что в момент времени t динамические состояния группы из s молекул находятся в бесконечно малом объеме $dx_1 dx_2 \dots dx_s$ вблизи точки x_1, x_2, \dots, x_s . Для определения s -частичной функции распределения проинтегрируем $\rho(x_1, x_2, \dots, x_N)$ по всем «лишним» переменным:

$$F_s(t, x_1, x_2, \dots, x_s) = V^s \int \rho(t, x_1, x_2, \dots, x_N) dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N. \quad (3.15)$$

Здесь и далее величина x_i обозначает совокупность координаты и импульса i -й частицы, V – объем системы.

Нашей целью является вывод уравнения, которому подчиняется одночастичная функция распределения $F_1(t, x)$. Тем не

менее разумно начать вывод уравнения движения для s -частичной функции распределения, упростив его на заключительном этапе.

Для вывода уравнения движения, которому подчиняется s -частичная функция распределения, будем использовать уравнение Лиувилля (3.13). Пусть система представляет собой разреженный газ свободно двигающихся молекул, взаимодействие между которыми определяется короткодействующим потенциалом $\Phi(|q_i - q_j|)$, зависящим только от модуля расстояния между частицами. В этом случае гамильтониан системы в потенциальном поле $U(q)$ можно записать в виде

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} H_1(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|q_i - q_j|), \quad H_1(x_i) = \frac{p_i^2}{2m} + U(q_i). \quad (3.16)$$

Используя гамильтониан (3.16), запишем уравнение Лиувилля (3.13) для полной функции распределения:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_{1 \leq i \leq N} [H_1(x_i), \rho] + \sum_{1 \leq i < j \leq N} [\Phi(|q_i - q_j|), \rho]. \quad (3.17)$$

Умножим обе части уравнения (3.17) на V^s и проинтегрируем их по переменным $x_{s+1}, x_{s+2}, \dots, x_N$, причем интегрирование по каждой из переменных x_i производится по всем возможным значениям координаты и импульса i -й частицы. В результате получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_s}{\partial t} = & \sum_{1 \leq i \leq s} V^s \int [H_1(x_i), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N + \\ & + \sum_{s+1 \leq i \leq N} V^s \int [H_1(x_i), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N + \\ & + \sum_{1 \leq i < j \leq s} V^s \int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\substack{1 \leq i \leq s \\ s+1 \leq j \leq N}} V^s \int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N + \\
& + \sum_{s+1 \leq i < j \leq N} V^s \int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N. \quad (3.18)
\end{aligned}$$

При записи соотношения (3.18) мы учли, что для любой симметричной относительно перестановки индексов функции Φ_{ij} справедливо следующее представление двойной суммы:

$$\begin{aligned}
\sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^s \Phi_{ij} + \sum_{i=s+1}^N \Phi_{ij} \right) \left(\sum_{j=1}^s \Phi_{ij} + \sum_{j=s+1}^N \Phi_{ij} \right) = \\
&= \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} + \sum_{\substack{1 \leq i \leq s \\ s+1 < j \leq N}} \Phi_{ij} + \sum_{s+1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}.
\end{aligned}$$

Для дальнейшего преобразования уравнения (3.18) учтем тождества (доказательство см. в задаче 3.1)

$$\int [H_1(x_l), \rho] dx_l = 0; \quad (3.19)$$

$$\int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_i dx_j = 0, \quad (3.20)$$

которые выполняются, если плотность распределения ρ стремится к нулю на границах фазовой области (при $|q| \rightarrow \infty$ и $|p| \rightarrow \infty$). Рассмотрим последовательно каждое из слагаемых в правой части уравнения (3.18).

Выполняя интегрирование в первом слагаемом с учетом определения (3.15), запишем его в виде

$$\sum_{1 \leq i \leq s} V^s \int [H_1(x_i), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N = \sum_{1 \leq i \leq s} [H_1(x_i), F_s].$$

Второе слагаемое в соответствии с тождеством (3.19) обращается в нуль и вклада не дает.

Третье слагаемое в правой части (3.18) с учетом определения (3.15) легко преобразуется:

$$\sum_{1 \leq i < j \leq s} V^s \int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_{s+1} \dots dx_N = \sum_{1 \leq i < j \leq s} [\Phi(|q_i - q_j|), F_s].$$

В четвертом слагаемом можно обнаружить, что все слагаемые при суммировании по индексу j в силу тождественности частиц, приводящей к инвариантности функции распределения

$$\rho(x_1, x_2, \dots, x_s, \dots, x_j, \dots, x_N) = \rho(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_s, \dots, x_N)$$

относительно перестановки координат частиц x_j и x_s , заменой переменных при интегрировании можно привести к одинаковому виду. Число таких слагаемых, очевидно, $N - s$. Поэтому получаем

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{1 \leq i \leq s \\ s+1 \leq j \leq N}} V^s \int [\Phi(|q_i - q_j|), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N = \\ &= (N - s) \sum_{1 \leq i \leq s} V^s \int [\Phi(|q_i - q_{s+1}|), \rho] dx_{s+1} dx_{s+2} \dots dx_N = \\ &= \frac{(N - s)}{V} \sum_{1 \leq i \leq s} \int [\Phi(|q_i - q_{s+1}|), F_{s+1}] dx_{s+1}. \end{aligned}$$

Наконец, пятое слагаемое в правой части (3.18) с учетом тождества (3.20) равно нулю и вклада не дает.

Таким образом, уравнение для s -частичной функции распределения можно записать в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_s}{\partial t} = & \left[\sum_{1 \leq i \leq s} H_1(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi(|q_i - q_j|), F_s \right] + \\ & + \frac{N - s}{V} \int \left[\sum_{1 \leq i \leq s} \Phi(|q_i - q_{s+1}|), F_{s+1} \right] dx_{s+1}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Определим гамильтониан совокупности s молекул соотношением

$$H_s = \sum_{1 \leq i \leq s} H_1(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi(|q_i - q_j|) \quad (3.22)$$

и перейдем в уравнении (3.21) к термодинамическому пределу $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = n = \text{const}$, где n – плотность числа

частиц. Тогда уравнение для s -частичной функции распределения можно записать в более компактной форме:

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = [H_s, F_s] + n \int \sum_{1 \leq i \leq s} [\Phi(|q_i - q_{s+1}|), F_{s+1}] dx_{s+1}. \quad (3.23)$$

Записав это уравнение, мы еще не продвинулись вперед в задаче сокращения в описании. В действительности мы получили цепочку «зацепляющихся» уравнений для функций распределения, которая эквивалентна (по полноте информации) исходному уравнению Лиувилля. Эта идея использовать совокупность «зацепляющихся» уравнений движения для последовательности функций распределения или корреляционных функций вида (2.3) очень часто используется в неравновесной статистической механике для построения схем сокращенного описания. Похожие идеи высказывались в работах Борна, Грина, Кирквуда, Ивона. Поэтому в литературе очень часто уравнения движения (3.23) называют цепочками уравнений движения Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ).

Чтобы получить замкнутое уравнение, необходимо функцию распределения, например F_{s+1} , выразить через функции распределения меньших порядков. Тогда система уравнений замкнется и мы получим сокращение в описании. В следующих параграфах мы получим различные варианты уравнений для одночастичной функции распределения, взяв за основу цепочку уравнений (3.23).

Задача 3.1

Используя определение классических скобок Пуассона (3.13), доказать справедливость тождеств (3.19), (3.20) при условии, что ρ стремится к нулю на границах фазовой области.

Решение

Рассмотрим тождество (3.19). Используя определение скобок Пуассона, получаем

$$\int [H_1(p, q), \rho(p, q)] dp dq = - \int \left(\frac{\partial H_1(p, q)}{\partial p} \frac{\partial \rho(p, q)}{\partial q} - \frac{\partial H_1(p, q)}{\partial q} \frac{\partial \rho(p, q)}{\partial p} \right) dp dq. \quad (3.24)$$

Проинтегрируем первый и второй члены в правой части последнего выражения по частям.

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial H_1(p, q)}{\partial p} \frac{\partial \rho(p, q)}{\partial q} dp dq &= \int dp \frac{\partial H_1(p, q)}{\partial p} \rho(p, q) \Big|_{q \rightarrow \infty} - \\ &\quad - \int dp dq \frac{\partial^2 H_1(p, q)}{\partial p \partial q} \rho(p, q); \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial H_1(p, q)}{\partial q} \frac{\partial \rho(p, q)}{\partial p} dp dq &= \int dq \frac{\partial H_1(p, q)}{\partial q} \rho(p, q) \Big|_{p \rightarrow \infty} - \\ &\quad - \int dp dq \frac{\partial^2 H_1(p, q)}{\partial p \partial q} \rho(p, q). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Вклад от первого слагаемого в правой части (3.25) и (3.26) равен нулю, а вторые слагаемые оказались одинаковыми. Поэтому в правой части (3.24) стоит разность двух одинаковых членов.

Для доказательства тождества (3.20) воспользуемся определением скобок Пуассона (3.13). Поскольку потенциал парного взаимодействия частиц зависит только от координат, получаем

$$\begin{aligned} &\int \left[\Phi(|q_i - q_j|), \rho \right] dx_i dx_j = \\ &= \int \left(\frac{\partial \Phi(|q_i - q_j|)}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} + \frac{\partial \Phi(|q_i - q_j|)}{\partial q_j} \frac{\partial \rho}{\partial p_j} \right) dp_i dq_i dp_j dq_j. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Интегрируя каждое из слагаемых в правой части (3.27) по частям, легко заметить, что правая часть выражения (3.27) равна нулю и тождество (3.20) действительно выполняется.

§ 5. Уравнение для одночастичной функции распределения. Приближение времени релаксации

Получим уравнение движения для одночастичной функции распределения $F_1(x, t)$. Рассмотрим вначале скобку Пуассона $[H_1, F_1]$. Переходя к векторным обозначениям, получаем

$$\begin{aligned} [H_1, F_1] &= \frac{\partial H(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1(t, \vec{p}, \vec{r})}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}} \frac{\partial F_1(t, \vec{p}, \vec{r})}{\partial \vec{r}} = \\ &= -\vec{F}(\vec{r}) \vec{\nabla}_p F_1(t, \vec{p}, \vec{r}) - \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r F_1(t, \vec{p}, \vec{r}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Учитывая этот результат, на основании уравнения (3.23) запишем уравнение для одночастичной функции распределения $F_1(t, \vec{p}, \vec{r})$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{F}(\vec{r}) \vec{\nabla}_p + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r \right) F_1(t, \vec{p}, \vec{r}) = n \int dr' dp' \left[\Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|), F_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}') \right]. \quad (3.29)$$

Уравнение (3.29) все еще является точным динамическим уравнением. Его левая часть представляет собой скорость изменения одночастичной функции распределения за счет ее явной зависимости от времени и перемещения частиц в координатном и импульсном пространствах. Иначе говоря, в левой части (3.29) записана полная производная функции F_1 по времени. В отличие от N -частичной функции распределения эта производная не равна нулю, а равна изменению функции распределения за счет парных столкновений с другими частицами. По этой причине правую часть уравнения (3.29) часто называют *интегралом столкновений*. С учетом сказанного запишем уравнение для одночастичной функции распределения, заменяя правую часть интегралом столкновений

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \vec{F}(\vec{r}) \vec{\nabla}_p F_1 + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r F_1 = - \left(\frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{\text{ст}}. \quad (3.30)$$

Различные способы построения замкнутых кинетических уравнений различаются по существу только тем, как конструируется интеграл столкновений. Мы предполагаем рассмотреть в дальнейшем несколько таких способов, а начнем с простейшего — приближения времени релаксации.

Приближение времени релаксации исходит из простого предположения, что в отсутствие внешних сил пространственно однородная система будет релаксировать к равновесию с некоторым характерным временем τ . Иначе говоря, уравнение

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} = - \left(\frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{\text{ст}} \quad (3.31)$$

должно описывать релаксацию неравновесного распределения $F_1(t)$ к равновесной функции распределения системы f_0 . Легко видеть, что всем этим условиям удовлетворяет интеграл столкновений, записанный в форме

$$\left(\frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \frac{F_1(t) - f_0}{\tau}.$$

Решение уравнения (3.31) в этом случае будет иметь вид

$$F_1(t) - f_0 = C(0)e^{-t/\tau},$$

где константа $C(0)$ определяется из начальных условий для функции F_1 .

В итоге кинетическое уравнение в приближении времени релаксации может быть записано в следующей форме:

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \vec{F}(\vec{r}) \vec{\nabla}_p F_1 + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r F_1 = -\frac{F_1 - f_0}{\tau}. \quad (3.32)$$

Следует отметить, что каких-либо серьезных аргументов для того, чтобы считать процесс релаксации экспоненциальным, не существует. Тем не менее этот подход, в силу своей простоты, широко используется, особенно при качественной интерпретации результатов эксперимента. Использование понятия времени релаксации зачастую дает неплохие результаты при анализе кинетических явлений в металлах и полупроводниках. Величина τ при этом играет роль подгоночного параметра. В некоторых случаях для времени релаксации τ удается построить замкнутые выражения из первых принципов и тем самым обосновать использование приближения времени релаксации. Подробнее эти вопросы будут рассмотрены в главе 4.

§ 6. Кинетическое уравнение Власова для бесстолкновительной плазмы

Для получения из цепочки уравнений Боголюбова (3.29) замкнутого уравнения для одночастичной функции распределения нужно двухчастичную функцию распределения представить в виде некоторого функционала, зависящего только от одночастичных функций распределения. Ясно, что без привлечения каких-либо дополнительных физических идей относительно свойств потенциала взаимодействия или относительно характера поведения функции F_2 дальнейшее продвижение вперед невозможно. Поэтому будут рассмотрены два противоположных случая $R_0^3 n \ll 1$ и $R_0^3 n \gg 1$, где R_0 – характерный радиус взаимодействия микрочастиц, n – число частиц в единице объема. Первый случай соответствует случаю газа малой плотности, когда характерный радиус сил взаимодействия частиц много меньше среднего расстояния между частицами. Рассмотрение этого случая мы пока отложим.

Второй случай реализуется в ионизованной плазме, где величина R_0 имеет смысл радиуса дебаевского экранирования заряженных частиц.

Рассмотрим систему частиц с кулоновским потенциалом взаимодействия

$$\Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \pm \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Система в целом считается электрически нейтральной. Особенностью кулоновского взаимодействия является то, что потенциал взаимодействия слишком слабо спадает с расстоянием между частицами. Поэтому приходится учитывать взаимодействие пробной частицы со всеми остальными частицами системы. Более того, эффект парного взаимодействия пробной частицы с любой другой частицей системы оказывается много меньше эффекта ее взаимодействия с эффективным полем, создаваемым совокупностью оставшихся $N - 2$ частиц. Таким образом, мы приходим к выводу, что в случае кулоновского потенциала взаимодействия более важным является учет взаимодействия пробной частицы с усредненным полем других частиц, нежели учет парных взаимодействий. Отсюда следует справедливость важного упрощения.

Очевидно, что двухчастичную функцию распределения можно всегда записать в виде

$$F_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}') = F_1(t, \vec{p}, \vec{r}) F_1(t, \vec{p}', \vec{r}') + G_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}'), \quad (3.33)$$

где функция $G_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}')$ учитывает парные корреляции. Поскольку, как отмечено выше, учет парных корреляций оказывается менее важен, нежели влияние эффективного поля, парной корреляционной функцией G_2 в (3.33) можно пренебречь. Это упрощение сразу позволяет оборвать цепочку уравнений Боголюбова и получить замкнутое уравнение для одночастичной функции распределения.

В реальных системах, например электронной плазме, кулоновский потенциал экранируется подвижными электронами и предложенный выше способ рассуждений справедлив лишь на расстояниях $r \ll r_d$, где обратный радиус дебаевского экранирования q_0 определяется выражением

$$q_0 = \frac{1}{r_d} = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{k_B T}}.$$

С другой стороны, чтобы концепция среднего поля имела право на жизнь, необходимо, чтобы внутри сферы Дебая было достаточно много частиц: $n r_d^3 \gg 1$. Подставляя сюда оценку радиуса дебаевского экранирования, получаем условие $k_B T \gg 4\pi e^2 n^{1/3}$. Поскольку $n^{1/3} \sim 1/a_0$, где a_0 – величина порядка среднего расстояния между частицами, записанное выше условие легко интерпретируется: кинетическая энергия движения частиц должна быть много больше энергии кулоновского взаимодействия между ближайшими частицами

$$k_B T \gg \frac{4\pi e^2}{a_0}.$$

Итак, пренебрегая парными корреляциями, запишем двухчастичную функцию распределения в виде произведения одночастичных

$$F_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}') = F_1(t, \vec{p}, \vec{r}) F_1(t, \vec{p}', \vec{r}') \quad (3.34)$$

и подставим это выражение в правую часть формулы (3.29):

$$\begin{aligned} & n \int d\vec{r}' d\vec{p}' \left[\Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|), F_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}', \vec{r}') \right] = \\ & = n \int d\vec{r}' d\vec{p}' \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1(t, \vec{p}, \vec{r})}{\partial \vec{p}} F_1(t, \vec{p}', \vec{r}'). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Еще одно слагаемое, возникающее при раскрытии скобок Пуассона, в котором производные вычисляются по \vec{r}' и \vec{p}' , обращается в нуль в силу тождества (3.20).

Правую часть формулы (3.35) можно представить в форме

$$\frac{\partial \tilde{U}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1(t, \vec{p}, \vec{r})}{\partial \vec{p}},$$

где эффективный потенциал \tilde{U} определен выражением

$$\tilde{U}(t, \vec{r}) = n \int d\vec{p}' d\vec{r}' \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) F_1(t, \vec{p}', \vec{r}').$$

Подставляя этот результат в уравнение для одночастичной функции распределения (3.29), получаем замкнутое уравнение для функции F_1 с самосогласованным полем

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial (U(t, \vec{r}) + \tilde{U}(t, \vec{r}))}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}} = 0. \quad (3.36)$$

При записи этого уравнения мы предположили, что внешняя сила $\vec{F}(t, \vec{r}) = -\vec{\nabla} U(t, \vec{r})$, где $U(t, \vec{r})$ – потенциал поля внешних сил. Уравнение (3.36) и есть уравнение Власова, полученное им в 1938 г. Отметим несколько основных особенностей этого уравнения.

Во-первых, интегродифференциальное уравнение Власова обратимо во времени. Обратимость во времени является естественным следствием отказа от учета взаимодействия между частицами.

Во-вторых, однокомпонентная плазма реально существовать не может. Поэтому к уравнению для функции распределения электронов следует добавить уравнение для функции распределения ионов. Исключение составляет модельный случай, когда плотность распределения ионов однородна и постоянна.

В-третьих, движение заряженных частиц приводит к возникновению переменного электромагнитного поля. Поэтому уравнение Власова еще необходимо дополнить уравнениями Максвелла для компонент электрического и магнитного полей. Таким образом, уравнения (3.36) в действительности следует рассматривать как некую программу, реализация которой требует серьезных усилий. Рассмотрим интересную и практически важную задачу, для решения которой можно использовать линеаризованное уравнение Власова.

Задача 3.2

Используя линеаризованное кинетическое уравнение Власова, определить спектр продольных колебаний электронной плазмы, предполагая, что положительно заряженные ионы неподвижны и имеют однородное распределение.

Решение

В условиях сформулированной задачи можно ограничиться только рассмотрением движения электронов. Представим одночастичную функцию распределения F_1 в виде суммы равновесной функции распределения $f_0(v)$ и неравновесной добавки $f(t, \vec{v}, \vec{r})$:

$$F_1(t, \vec{v}, \vec{r}) = f_0(v) + f(t, \vec{v}, \vec{r}).$$

Электронный газ будем считать невырожденным. В этом случае равновесное распределение f_0 является распределением Максвелла – Больцмана

$$f_0(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right). \quad (3.37)$$

В этой формуле m – масса электронов, v – их скорость. Распределение (3.37) нормировано на единицу:

$$\int dv_x dv_y dv_z \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right) = 1.$$

При таком выборе нормировки функции распределения интегрирование в формуле для самосогласованного потенциала \tilde{U} должно производиться по \vec{v}' , а не по \vec{r}' .

Если неравновесность является слабой и $f(t, \vec{v}, \vec{r})/f_0(v) \ll 1$, то уравнение (3.36) можно линеаризовать. Действительно, проанализируем силы, действующие на электрон. Согласно (3.36), на электрон

действует внешняя сила взаимодействия с положительно заряженным фоном $-\vec{\nabla}U(\vec{r})$, и сила, определяемая градиентом самосогласованного поля $-\vec{\nabla}\tilde{U}(t, \vec{r})$. В условиях равновесия эти силы должны компенсировать друг друга. Поэтому результирующая сила, действующая на электрон, будет определяться только неравновесной добавкой $f(t, \vec{v}, \vec{r})$:

$$-\vec{\nabla}(U + \tilde{U}) = -e \vec{E}(\vec{r}, t) = -n \vec{\nabla}_r \int d\vec{v}' d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} f(t, \vec{v}', \vec{r}'). \quad (3.38)$$

Магнитное поле, которое возникает при движении заряженных частиц, в данном случае вклада не дает, поскольку слагаемое

$$[\vec{v} \vec{H}] \vec{\nabla}_p f_0 = 0$$

в силу коллинеарности векторов \vec{v} и $\vec{\nabla}_p f_0$.

Используя (3.38), легко получить уравнение, которому удовлетворяет вектор напряженности $\vec{E}(\vec{r}, t)$ результирующего электрического поля. Найдем дивергенцию левой и правой частей (3.38). Учитывая, что

$$\operatorname{div} \vec{\nabla}_r \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = \Delta \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

получаем из (3.38) одно из хорошо известных уравнений Максвелла

$$\operatorname{div} \vec{E}(t, \vec{r}) = -4\pi en \int d\vec{v} f(t, \vec{v}, \vec{r}). \quad (3.39)$$

Здесь Δ – оператор Лапласа.

Используя определение (3.38), запишем линеаризованное уравнение Власова (3.36) для рассматриваемого случая

$$\frac{\partial f(t, \vec{v}, \vec{r})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f(t, \vec{v}, \vec{r})}{\partial \vec{r}} - e \vec{E}(t, \vec{r}) \frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}} = 0. \quad (3.40)$$

Линеаризация в данном случае состоит в том, что в уравнении (3.40) удержаны лишь линейные члены по малой добавке $f(t, \vec{v}, \vec{r})$. Поскольку в последнем слагаемом (3.40) электрическое поле $\vec{E}(t, \vec{r})$ линейно по этой добавке, градиент $\vec{\nabla}_p F_1$ можно заменить $\vec{\nabla}_p f_0$ – величиной, вычисленной по равновесному распределению.

Система уравнений (3.39), (3.40) позволяет решить задачу об определении спектра продольных колебаний электронной плазмы.

Как указывалось выше, уравнение Власова обратимо во времени. Эта обратимость приводит к вырождению решений относительно операции обращения времени. Вырождение можно снять, добавив бесконечно малый источник в правую часть уравнения (3.40), который подобен интегралу столкновений (3.32) при записи кинетического уравнения в приближении времени релаксации:

$$\left(\frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \varepsilon f(t, \vec{v}, \vec{r}).$$

В этой формуле ε – малая величина, которая после выполнения термодинамического предела $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = n = \text{const}$ должна быть устремлена к нулю. Для дальнейших вычислений будем использовать «исправленное» уравнение Власова

$$\frac{\partial f(t, \vec{v}, \vec{r})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f(t, \vec{v}, \vec{r})}{\partial \vec{r}} - e \vec{E}(t, \vec{r}) \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} = -\varepsilon f(t, \vec{v}, \vec{r}), \quad (3.41)$$

дающее решения запаздывающего типа.

Поскольку нас интересуют продольные колебания, то вместо фурье-трансформы уравнений (3.39), (3.41) можно просто искать решение в форме

$$f(t, \vec{v}, \vec{r}) = f_{k,\omega}(\vec{v}) e^{i(kx - \omega t)}, \quad \vec{E}(t, \vec{r}) = E(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)}.$$

Подставляя эти выражения в формулы (3.39), (3.41), получаем уравнения для фурье-компонент $f_{k,\omega}(\vec{v})$ и $E(k, \omega)$

$$\begin{aligned} -i(\omega - v_x k + i\varepsilon) f_{k,\omega}(\vec{v}) - \frac{e}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} E(k, \omega) &= 0, \\ ikE(k, \omega) &= -4\pi en \int d\vec{v} f_{k,\omega}(\vec{v}). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Из первого уравнения (3.42) найдем

$$f_{k,\omega}(\vec{v}) = i \frac{e}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{E(k, \omega)}{\omega - v_x k + i\varepsilon}$$

и подставим это значение в правую часть второго из уравнений (3.42). В результате получаем уравнение для определения фурье-компонент поля

$$k E(k, \omega) = -E(k, \omega) \frac{4\pi e^2 n}{m} \int d\vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{1}{\omega - v_x k + i\varepsilon}. \quad (3.43)$$

Уравнение (3.43) имеет тривиальное решение $E(k, \omega) = 0$. Если существует нетривиальное решение и $E(k, \omega) \neq 0$, то должно выполняться условие

$$1 + \frac{4\pi e^2 n}{m k} \int d\vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{1}{\omega - v_x k + i\varepsilon} = 0. \quad (3.44)$$

Это уравнение и является искомым дисперсионным соотношением, выражающим зависимость частоты колебаний электронов ω от их волнового вектора k (напомним, что рассматриваются продольные колебания электронной плазмы вдоль оси X). Для того чтобы получить явный вид зависимости $\omega(k)$, необходимо вычислить интеграл, входящий в формулу (3.44). Поскольку основной задачей этого примера была иллюстрация применения уравнения Власова для решения задач физической кинетики и мы эту задачу выполнили, получив уравнение (3.44), опустим далее подробные детали последующих вычислений, отсылая читателей к имеющейся литературе [17].

Для нахождения явного закона дисперсии введем плазменную частоту ω_0 , определив ее соотношением

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m},$$

и выполним интегрирование по компонентам скорости v_y и v_z . Учитывая, что

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_x} = -\frac{m v_x}{k_B T} f_0, \quad \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right) \int dv_y dv_z \exp\left(-\frac{m(v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}\right) = 1,$$

получаем

$$1 - \frac{\omega_0^2}{k} \frac{m}{k_B T} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \exp\left(-\frac{m v_x^2}{2k_B T}\right) \frac{v_x}{\omega - v_x k + i\varepsilon} = 0. \quad (3.45)$$

Интеграл в (3.45) содержит особенность при $v_x = \omega/k$. Для его вычисления применим известное соотношение

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\varepsilon} = P \frac{1}{x} - i\pi \delta(x),$$

где P – операция выделения главной части, сводящейся к «выкалыванию» точки, содержащей особенность. В результате этой операции

дисперсионное соотношение можно записать в виде

$$1 - \operatorname{Re} I + i \operatorname{Im} I = 0, \quad (3.46)$$

$$\operatorname{Re} I = \frac{\omega_0^2}{k} \frac{m}{k_B T} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right) \frac{v_x}{\omega - v_x k}, \quad (3.47)$$

$$\operatorname{Im} I = \pi \frac{\omega_0^2}{k} \frac{\omega}{k^2} \frac{m}{k_B T} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m(\omega/k)^2}{2k_B T}\right). \quad (3.48)$$

При выполнении интегрирования по v_x было использовано тождество $\delta(\omega - kv_x) = 1/k \delta(\omega/k - v_x)$.

К сожалению, вычислить интеграл по формуле (3.47) точно не удается. Поэтому рассмотрим лишь длинноволновое приближение $kv_x/\omega \ll 1$ и разложим дробь в подынтегральном выражении по этому малому параметру, удерживая лишь несколько первых членов

$$\frac{v_x}{\omega - v_x k} = \frac{1}{\omega} \left(v_x + \frac{v_x^2 k}{\omega} + \frac{v_x^3 k^2}{\omega^2} + \frac{v_x^4 k^3}{\omega^3} + \dots \right).$$

Учитывая, что нечетные моменты распределения Максвелла – Больцмана равны нулю, а второй и четвертый моменты легко вычисляются: $\overline{v_x^2} = k_B T/m$, $\overline{v_x^4} = 3(K_B T/m)^2$, где

$$\overline{v_x^n} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dv_x v_x^n \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right),$$

получаем приближенное выражение для правой части (3.47)

$$\operatorname{Re} I = \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left(1 + 3 \frac{k^2}{\omega^2} \frac{k_B T}{m} \right). \quad (3.49)$$

Вернемся теперь к анализу дисперсионного соотношения (3.46). Отбрасывая пока мнимую часть, получим дисперсионное соотношение в длинноволновом приближении без учета затухания. Для этого подставим (3.49) в (3.46):

$$\omega^2 = \omega_0^2 \left(1 + 3 \frac{k^2}{\omega^2} \frac{k_B T}{m} \right). \quad (3.50)$$

Отсюда в нулевом приближении по малому параметру

$$\frac{k^2}{\omega^2} \frac{k_B T}{m}$$

получаем $\omega = \omega_0$. Подставляя этот результат в правую часть (3.50) и извлекая квадратный корень из левой и правой частей, в первом приближении по k^2 получаем

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{k_B T}{m} \frac{k^2}{\omega_0^2} \right). \quad (3.51)$$

Затухание плазменных колебаний будем искать в нулевом приближении по параметру kv_x/ω , полагая, что $\omega = \Omega + i\gamma$, где Ω – действительная часть плазменной частоты ω , а γ – ее мнимая часть. Чтобы найти связь между γ и $\text{Im } I$, вернемся к дисперсионному уравнению (3.46), записав его в виде

$$1 - \frac{\omega_0^2}{(\Omega + i\gamma)^2} = 0.$$

Считая, что затухание мало и $\gamma/\Omega \ll 1$, разложим знаменатель в последнем выражении с точностью до линейных членов по γ/Ω :

$$1 - \frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \left(1 - i \frac{2\gamma}{\Omega} \right) = 0.$$

Сравнивая это выражение с (3.46) в нулевом порядке по k ($\Omega = \omega_0$), для константы затухания получаем следующее выражение:

$$\gamma = \sqrt{\pi} \frac{\omega_0^4}{k^3} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(\omega_0/k)^2}{2k_B T}\right). \quad (3.52)$$

Затухание продольных плазменных волн, определяемое выражением (3.52), было найдено Л. Д. Ландау в 1946 г. Следует обратить внимание на то, что это затухание получено без учета столкновений электронов с рассеивателями. Электрическое поле в данном случае играет роль квазиупругой силы. Затухание определяется лишь той частью электронов, для которых скорость вдоль оси X совпадает с фазовой скоростью волны, равной ω/k . Эти электроны наиболее эффективно периодически разгоняются, а затем замедляются электрическим полем. После ускорения в электрическом поле число электронов, для которых выполняется условие $v_x = \omega/k$, больше, нежели после замедления. Поэтому тормозящее действие электрического поля эффективнее, нежели ускоряющее, и электроны этой группы за цикл колебаний в среднем теряют часть своей энергии. Следует

отметить, что, кроме затухания Ландау, существуют и другие механизмы, приводящие к затуханию плазменных колебаний без учета столкновений: например излучение электромагнитной энергии ускоренно движущимися электронами.

§ 7. Уравнение Больцмана для газа малой плотности

Одним из основных результатов кинетической теории является кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения, полученное Л. Больцманом в 1872 г. Рассмотрим два различных подхода, позволяющих получить это уравнение: качественный, которому следовал Л. Больцман, и вывод из первых принципов с использованием цепочки зацепляющихся уравнений движения для функций распределения Н. Н. Боголюбова. Прежде чем переходить к непосредственному выводу кинетического уравнения, следует проанализировать условия применимости развиваемого подхода.

Во-первых, рассмотрение будет ограничено парными столкновениями, поскольку задача рассеяния двух тел имеет аналитическое решение, а задачи рассеяния трех и более тел имеют только численное решение и не могут быть представлены в аналитической форме. По этой же причине ограничим свое рассмотрение пространственно однородными системами. На самом деле требование пространственной однородности не является сильно лимитирующим ограничением. Функция распределения не должна существенно изменяться на расстояниях $r \sim \lambda$ (порядка длины свободного пробега частиц). Функция распределения, тем не менее, может зависеть от координат как от параметра. Для большинства физических приложений этого оказывается достаточно.

Во-вторых, будем рассматривать систему частиц с потенциалом взаимодействия типа отталкивания. В этом случае при рассеянии не могут возникнуть связанные состояния.

В-третьих, будем считать, что радиус сил взаимодействия r_0 много меньше среднего расстояния между частицами $a_0 = v^{1/3}$, где v – это объем, приходящийся на одну частицу. Параметр r_0^3/v будет считаться малым по сравнению с другими пространственными масштабами системы.

Существование двух различных пространственных масштабов приводит и к появлению двух различных временных масштабов. Если считать, что система состоит из частиц одного сорта, имеющих среднюю скорость \bar{v} , то можно ввести характерное время взаимодействия частиц $\tau_0 = r_0/\bar{v}$ и характерное время свободного пробега $\tau = \lambda/\bar{v}$, где λ – длина свободного пробега. Очевидно, что выполняется условие $\tau_0 \ll \tau$.

Действительно, численные оценки для газа при нормальных условиях дают: $N/V \sim 3 \cdot 10^{19}$ частиц/см³; объем, приходящийся на одну частицу, $v_0 \sim 3 \cdot 10^{-20}$ см³; среднее расстояние между частицами $a_0 = 3 \cdot 10^{-7}$ см; характерный радиус сил взаимодействия между частицами $r_0 \sim 10^{-8}$ см; длина свободного пробега $\lambda \sim 10^{-5}$ см; тепловая скорость движения молекул $\bar{v} = 10^5$ см/с. Отсюда получаем $\tau_0 \sim 10^{-13}$ с, а $\tau \sim 10^{-10}$ с. Наличие столь разных временных и пространственных масштабов позволяет огрубить описание и осуществить переход от динамического описания к статистическому.

§ 8. Качественный вывод уравнения Больцмана

Если столкновения между молекулами не учитывать совсем, то каждую частицу газа можно рассматривать как замкнутую подсистему и для одночастичной функции распределения $F_1(t, \vec{p}, \vec{r})$ тогда справедлива теорема Лиувилля

$$\frac{dF_1}{dt} = 0; \quad \text{или} \quad \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r F_1 + \vec{F} \vec{\nabla}_p F_1 = 0.$$

Учет столкновений приводит к тому, что функция распределения будет претерпевать изменения не только за счет движения частицы по фазовой траектории, но и за счет ее столкновений с другими частицами. Эта часть изменения функции распределения, как указывалось выше, называется интегралом столкновения. Заслугой Больцмана является как раз построение интеграла столкновений для газа малой плотности.

Хотя при построении интеграла столкновений необходимо учитывать кинематику процесса столкновений, этот вывод не может быть чисто динамическим. Если интересоваться поведением системы на временах $\tau_0 \ll t \leq \tau$, то не возникает

необходимости в точном описании процесса столкновения частиц: достаточно знать лишь асимптотическое поведение системы (т. е. найти взаимосвязь состояний задолго до столкновения с состояниями через достаточно большой промежуток после столкновения).

При упругих столкновениях двух частиц должны выполняться законы сохранения импульса и энергии

$$\begin{aligned}\vec{p} + \vec{p}_1 &= \vec{p}' + \vec{p}_1' = \vec{P}, \\ p^2 + p_1^2 &= p'^2 + p_1'^2,\end{aligned}\tag{3.53}$$

где \vec{p} , \vec{p}_1 и \vec{p}' , \vec{p}_1' – импульсы частиц до столкновения и после него, \vec{P} – полный импульс системы двух частиц. Скорости относительного движения $\vec{u} = (\vec{p}_1 - \vec{p})/m$ и $\vec{u}' = (\vec{p}_1' - \vec{p}')/m$ до столкновения и после него равны по абсолютной величине и противоположны по направлению: $\vec{u} = -\vec{u}'$.

Очевидно, что, используя уравнения (3.53), импульсы частиц до и после столкновений можно выразить через две величины: суммарный импульс частиц \vec{P} и скорость относительного движения \vec{u} :

$$\begin{aligned}\vec{p} &= \frac{\vec{P}}{2} - \frac{m\vec{u}}{2}, & \vec{p}_1 &= \frac{\vec{P}}{2} + \frac{m\vec{u}}{2}, \\ \vec{p}' &= \frac{\vec{P}}{2} - \frac{m\vec{u}'}{2}, & \vec{p}_1' &= \frac{\vec{P}}{2} + \frac{m\vec{u}'}{2}.\end{aligned}\tag{3.54}$$

Перейдем к построению интеграла столкновений. Для упрощения записи введем обозначения:

$$\begin{aligned}F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) &= f, & F_1(t, \vec{r}, \vec{p}_1) &= f_1, \\ F_1(t, \vec{r}, \vec{p}') &= f', & F_1(t, \vec{r}, \vec{p}_1') &= f_1'.\end{aligned}\tag{3.55}$$

В некоторый момент времени t в элементе объема фазового пространства $d\vec{r}d\vec{p}$ будет находиться $nfd\vec{r}d\vec{p}$ частиц, где $n = 1/v$ – число частиц в единице объема (концентрация). Интеграл столкновений определяет скорость изменения числа частиц, находящихся в элементе объема фазового пространства

$d\vec{r}d\vec{p}$ в окрестности точки \vec{r}, \vec{p} . Для того чтобы ее найти, необходимо подсчитать, сколько частиц уходит из этого объема фазового пространства и сколько приходит за единицу времени. Поскольку все акты рассеяния происходят независимо и рассеянные частицы к следующему акту рассеяния успевают термализоваться, каждый акт рассеяния можно рассматривать независимо.

Рассмотрим одну частицу, имеющую координату \vec{r}, \vec{p} , и остановим ее, т. е. перейдем в систему координат, связанную с этой частицей. В качестве модели взаимодействия частиц возьмем модель твердых сфер, полагая, что каждая из частиц имеет радиус r_0 . Окружим выделенную частицу сферой взаимодействия частиц радиусом $2r_0$, в центре которой поместим начало цилиндрической системы отсчета. Ось Z этой системы направим вдоль вектора относительной скорости \vec{u} . Схема выбора осей координат приведена на рис. 23.

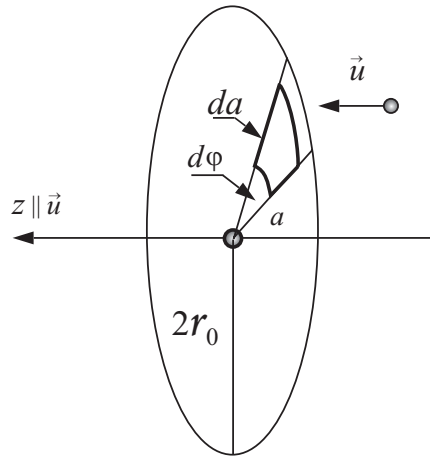


Рис. 23. Выбор координат при анализе парных столкновений частиц

Координату, задающую полярный угол, обозначим φ , а радиальную переменную – буквой a . Обозначим бесконечно малый элемент площади поперечного сечения сферы $adad\varphi$ как $d\Omega$ (на рис. 23 этот элемент площади выделен более жирной линией). Среднее число частиц с импульсами от \vec{p}_1 до $\vec{p}_1 + d\vec{p}_1$, падающих на эту площадку за единицу времени, будет равно $n f_1 u d\Omega d\vec{p}_1$. Тогда среднее число столкновений частиц, находящихся в элементе фазового объема $d\vec{r}d\vec{p}$, с частицами, имеющими импульс от \vec{p}_1 до $\vec{p}_1 + d\vec{p}_1$, будет определяться выражением

$$n f d\vec{r}d\vec{p} n f_1 u d\Omega d\vec{p}_1. \quad (3.56)$$

Поскольку в результате каждого из этих столкновений одна частица покидает элемент объема фазового пространства $d\vec{r}d\vec{p}$, изменяя свой импульс, то полное число таких столкновений можно найти, проинтегрировав по всем возможным значениям импульсов \vec{p}_1 и площади поперечного сечения сферы рассеяния. В итоге получаем число частиц, покидающих элемент фазового объема $d\vec{r}d\vec{p}$ за единицу времени:

$$n \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_- d\vec{r}d\vec{p} = -n^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2r_0} a da \int f f_1 u d\vec{p}_1 d\vec{r}d\vec{p}. \quad (3.57)$$

Чтобы найти число частиц, приходящих за единицу времени в элемент объема фазового пространства $d\vec{r}d\vec{p}$, достаточно заметить, что частицы, имеющие до рассеяния импульсы \vec{p} и \vec{p}_1 , после рассеяния будут обладать импульсами \vec{p}' и \vec{p}_1' . Следовательно, для нахождения числа частиц, приходящих в элемент объема фазового пространства $d\vec{r}d\vec{p}$, нужно произвести «обращение» процесса рассеяния, заменив в формуле (3.57) $f \rightarrow f'$, $f_1 \rightarrow f_1'$, $d\vec{p} \rightarrow d\vec{p}'$, $d\vec{p}_1 \rightarrow d\vec{p}_1'$, $\vec{u} \rightarrow -\vec{u}$. В результате получаем

$$n \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_+ d\vec{r}d\vec{p}' = n^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2r_0} a da \int f' f_1' u d\vec{p}_1' d\vec{r}d\vec{p}'. \quad (3.58)$$

Используя кинематику законов рассеяния, легко доказать, что $d\vec{p}d\vec{p}_1 = d\vec{p}'d\vec{p}_1'$. Действительно, как известно, закон перехода от одной системы координат к другой задается с помощью якобиана преобразований $d\vec{p}d\vec{p}_1 = |D|d\vec{p}'d\vec{p}_1'$, где якобиан преобразования D (функциональный определитель) определяется выражением

$$D = \frac{\partial(\vec{p}', \vec{p}_1')}{\partial(\vec{p}, \vec{p}_1)} = \frac{\partial(\vec{p}', \vec{p}_1')}{\partial(\vec{P}, \vec{u}')} \frac{\partial(\vec{P}, \vec{u}')}{\partial(\vec{P}, \vec{u})} \frac{\partial(\vec{P}, \vec{u})}{\partial(\vec{p}, \vec{p}_1)}.$$

Анализируя уравнения (3.54), можно обнаружить, что

$$\frac{\partial(\vec{p}', \vec{p}_1')}{\partial(\vec{P}, \vec{u}')} = \frac{\partial(\vec{p}, \vec{p}_1)}{\partial(\vec{P}, \vec{u})},$$

поскольку взаимосвязь переменных \vec{p}', \vec{p}_1' и \vec{P}, \vec{u}' точно такая же, как для переменных \vec{p}, \vec{p}_1 и \vec{P}, \vec{u} . Отсюда следует ([1, 3]), что

$$\frac{\partial(\vec{p}', \vec{p}_1')}{\partial(\vec{P}, \vec{u}')} \frac{\partial(\vec{P}, \vec{u})}{\partial(\vec{p}, \vec{p}_1)} = 1, \quad D = \frac{\partial(\vec{P}, \vec{u}')}{\partial(\vec{P}, \vec{u})} = \frac{\partial(\vec{u})}{\partial(\vec{u}')} \Big|_{\vec{P}=\text{const}}.$$

Чтобы найти функциональный определитель D , подставим значения проекций относительной скорости до парного столкновения и после него: $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$, $\vec{u}' = (u_x, u_y, -u_z)$. Поскольку в выбранной нами для рассмотрения акта упругого рассеяния системе координат изменяется только компонента скорости u_z , а компоненты скорости u_x и u_y остаются постоянными, то функциональный определитель, используя его свойства ([1], [3]), можно еще упростить:

$$D = \frac{\partial(\vec{u})}{\partial(\vec{u}')} = \frac{\partial(u_x, u_y, u_z)}{\partial(u_x, u_y, -u_z)} = \frac{\partial(u_z)}{\partial(-u_z)} \Big|_{\substack{u_x=\text{const} \\ u_y=\text{const}}} = -1.$$

Таким образом, мы доказали, что $|D| = 1$ и $d\vec{p}d\vec{p}_1 = d\vec{p}'d\vec{p}_1'$. Этот результат позволяет объединить члены, описывающие уход и приход частиц в элемент объема $d\vec{r}d\vec{p}$, под одним знаком интеграла и произвести сокращение одинаковых членов в левой и правой частях уравнений (3.57) и (3.58). Объединив полученные результаты, запишем уравнение Больцмана для газа малой плотности с интегралом столкновения в правой части:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \vec{\nabla}_p f = n \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2r_0} da \int (f' f_1' - f f_1) u d\vec{p}_1. \quad (3.59)$$

Для практических расчетов в формуле (3.59) переменные \vec{p}' и \vec{p}_1' , от которых зависят функции f' и f_1' , следует выразить через переменные \vec{p} и \vec{p}_1 , используя соотношения (3.53), (3.54).

Рассмотрим альтернативные способы записи интеграла столкновений для случая парных столкновений в центральном поле (центральным называется силовое поле, потенциал которого зависит только от расстояния до силового центра). В центральном

поле в процессе столкновения, в дополнение к энергии и импульсу, сохраняется еще и момент количества движения. Это приводит к тому, что каждый элементарный акт рассеяния происходит в плоскости, перпендикулярной вектору момента количества движения (рассмотренный выше случай столкновения упругих шаров является частным примером рассеяния в центральном поле). Рассеяние в центральном поле обычно описывают на языке сечения рассеяния.

Пусть однородный пучок частиц падает на неподвижный рассеивающий центр с постоянной скоростью \vec{u} . *Сечением рассеяния* $\sigma(\Omega, u)$ называется коэффициент пропорциональности между величиной плотности потока падающих частиц I и числом частиц dN , рассеянных в телесный угол $d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\varphi$ за единицу времени:

$$dN = I \sigma(\Omega, u) d\Omega. \quad (3.60)$$

В этой формуле θ – так называемый угол рассеяния, т. е. угол между векторами относительной скорости \vec{u} и \vec{u}' до рассеяния и после него. Геометрический смысл параметров, в терминах которых описывается столкновение частиц в центральном поле, изображен на рис. 24 (рассмотрен случай столкновения упругих шаров радиусом r_0).

Все частицы, имеющие прицельный параметр от b до $b+db$, попадут в сферический пояс на сфере рассеяния, изображенный на рис. 24 *a*, и будут иметь углы рассеяния от θ до $\theta + d\theta$. Отсюда следует, что все частицы, попавшие в элемент поверхности $b \, db \, d\varphi$ сферы рассеяния, будут рассеяны в телесный угол $d\Omega$. Следовательно, $dN = I \, b \, db \, d\varphi$. Сравнивая это выражение с формулой (3.60), находим

$$\sigma(\Omega, u) = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (3.61)$$

Производная $db/d\theta$ здесь взята по модулю, поскольку при нашем определении угла рассеяния он увеличивается с уменьшением прицельного параметра.

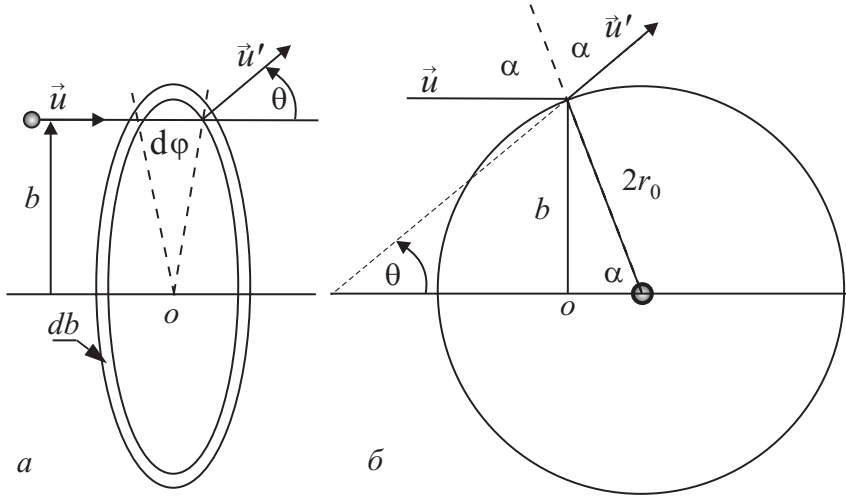


Рис. 24. Кинематика упругого рассеяния:

a – сечение сферы взаимодействия плоскостью, перпендикулярной \vec{u} ;
 b – построение, позволяющее найти взаимосвязь прицельного параметра b с углом рассеяния θ

Функциональную связь между прицельным параметром b и углом рассеяния θ можно найти, используя построение на рис. 24 б. Как следует из него, $b = 2r_0 \sin \alpha$. Угол α связан с углом рассеяния θ простым соотношением $\alpha = \pi/2 - \theta/2$. Поэтому $b = 2r_0 \cos \theta/2$. Подставляя этот результат в формулу (3.61), получаем выражение для сечения рассеяния в случае упругого столкновения частиц радиусом r_0 :

$$\sigma(\Omega, u) = \frac{2r_0^2 \cos \theta/2 \sin \theta/2}{\sin \theta} = r_0^2. \quad (3.62)$$

Полное сечение рассеяния σ_T может быть найдено интегрированием по всему телесному углу

$$\sigma_T = \int \sigma(\Omega, u) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2r_0} b db = 4\pi r_0^2. \quad (3.63)$$

Второе равенство здесь получено с использованием определения (3.61).

Сравнивая выражение (3.63) и правую часть формулы (3.59), легко обнаружить, что интеграл столкновений в кинетическом

уравнении Больцмана можно записать, используя для характеристики рассеяния понятие сечения рассеяния. В этом случае вместо (3.59) имеем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \vec{\nabla}_p f = n \int u \sigma(\Omega, u) (f' f'_1 - f f_1) d\vec{p}_1 d\Omega. \quad (3.64)$$

Для практических целей удобно записать интеграл столкновений так, чтобы он явно содержал законы сохранения энергии и импульса. Для этого нужно в интеграле столкновений добавить интегрирование по импульсу \vec{p}_1' и энергии E_1' налетающих частиц после рассеяния и дописать соответствующие δ -функции, выражающие закон сохранения энергии:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} &= n \int d\vec{p}_1 d\vec{p}_1' dE_1' u \sigma d\Omega [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] \times \\ &\times \delta(\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}' - \vec{p}_1') \delta(E + E_1 - E' - E_1'). \end{aligned} \quad (3.65)$$

Рассматривая рассеяние частиц как переход системы из состояния \vec{p}, \vec{p}_1 в состояние \vec{p}', \vec{p}_1' , введем понятие вероятности перехода $W(\vec{p}, \vec{p}_1; \vec{p}', \vec{p}_1')$, определив ее соотношением

$$dE_1' u \sigma d\Omega = d\vec{p}' W(\vec{p}, \vec{p}_1; \vec{p}', \vec{p}_1').$$

В результате интеграл столкновений может быть записан в следующей форме:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} &= n \int d\vec{p}_1 d\vec{p}' d\vec{p}_1' W(\vec{p}, \vec{p}_1; \vec{p}', \vec{p}_1') [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - \\ &- f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] \delta(\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}' - \vec{p}_1') \delta(E + E_1 - E' - E_1'). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Анализируя структуру интеграла столкновений (3.66), легко заметить, что он распадается на два вклада, описывающих приход частиц в состояние с импульсом \vec{p} и уход частиц из этого состояния. Для того чтобы такое представление было возможно, вероятность переходов $W(\vec{p}, \vec{p}_1; \vec{p}', \vec{p}_1')$ должна удовлетворять условию

$$W(\vec{p}, \vec{p}_1; \vec{p}', \vec{p}_1') = W(\vec{p}', \vec{p}_1'; \vec{p}, \vec{p}_1). \quad (3.67)$$

Соотношение (3.67) есть частный случай проявления принципа *детального равновесия*, который в данном случае сводится просто к тому, что механические (квантово-механические) вероятности переходов между состояниями в прямом и обратном направлении равны.

§ 9. Вывод уравнения Больцмана из цепочки уравнений Боголюбова

Запишем первые два уравнения цепочки Боголюбова для функций распределения F_1 и F_2 в линейном приближении по параметру r_0^3/v . Раскрывая скобку Пуассона в (3.29), (3.23), получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{F}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_p + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r \right) F_1 = \frac{1}{v} \int d\vec{r}_1 d\vec{p}_1 \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}_1|)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}}, \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} \right) F_2 - \frac{\partial(\Phi(|\vec{r} - \vec{r}_1|) + U(\vec{r}))}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}} - \\ - \frac{\partial(\Phi(|\vec{r} - \vec{r}_1|) + U(\vec{r}_1))}{\partial \vec{r}_1} \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}_1} = 0. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Поскольку интегральный член в правой части (3.68) уже содержит первую степень малого параметра r_0^3/v (потенциал взаимодействия отличен от нуля только внутри сферы радиусом r_0), мы опустили интегральный член в правой части уравнения (3.69), содержащий первую степень малого параметра r_0^3/v . Тогда уравнение для функции F_2 превращается в уравнение Лиувилля для двухчастичной функции распределения.

Будем искать решение системы уравнений (3.68), (3.69), удовлетворяющее принципу пространственного ослабления корреляций, который в данном случае сводится к тому, что при достаточно большом удалении частиц друг от друга их корреляция ослабевает и парная корреляционная функция может быть записана в виде произведения одночастичных функций:

$$F_2(t, \vec{p}, \vec{r}, \vec{p}_1, \vec{r}_1) |_{|\vec{r} - \vec{r}_1| \rightarrow \infty} = F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) F_1(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1). \quad (3.70)$$

Выражение (3.70) можно рассматривать как граничное условие, накладываемое на функцию распределения, которое позволяет отобрать физически осмысленное решение.

Поскольку уравнение (3.66) представляет собой уравнение Лиувилля для двухчастичной функции распределения при полном пренебрежении столкновениями с другими частицами, то его решением будет функция, остающаяся постоянной при движении вдоль фазовой траектории:

$$F_2(t, x(t, x_0), x_1(t, x_0)) = F_2(t - \tau, x(t - \tau, x_0), x_1(t - \tau, x_0)) = \\ = S_{-\tau}(x, x_1) F_2(t - \tau, x(t, x_0), x_1(t, x_0)). \quad (3.71)$$

В формуле (3.71) величины x, x_1 используются для обозначения совокупности координаты и импульса частиц. Величина x_0 обозначает координаты и импульсы совокупности двух частиц в начальный момент времени. Запись $x(t, x_0)$ означает, что координата и импульс частицы вычислены в результате решения механической задачи с начальным условием $\{x, x_1\} = x_0$. При записи второй части равенства (3.71) использован оператор $S_{-\tau}(x, x_1)$, который сдвигает частицы вдоль фазовой траектории на временной интервал $-\tau$:

$$S_{-\tau}(x, x_1) = e^{-iL_2\tau}, \quad iL_2A = [A, H].$$

Здесь iL_2 – оператор Лиувилля двух частиц.

Предположим теперь, что время τ столь велико, что частицы разводятся на расстояние, превышающее характерный радиус корреляции. В этом случае двухчастичная функция распределения распадется на произведение одночастичных функций распределения и, продолжив цепочку равенств (3.71), получаем

$$F_2(t, x, x_1) = S_{-\tau}(x, x_1) F_2(t - \tau, x, x_1) = \\ = S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t - \tau, x) F_1(t - \tau, x_1) = \\ = S_{-\tau}(x, x_1) S_{\tau}(x) S_{\tau}(x_1) F_1(t, x) F_1(t, x_1), \quad (3.72)$$

где $S_{\tau}(x), S_{\tau}(x_1)$ – одночастичные операторы эволюции.

Выражение (3.72) определяет взаимосвязь одночастичной и двухчастичной функций распределения, взятых в один и тот же момент времени. Это уравнение справедливо в приближении

газа малой плотности $r_0^3/v \ll 1$ для механических систем, в которых реализуется пространственное ослабление корреляций.

В дальнейшем будем рассматривать пространственно однородный случай. Тогда зависимость одночастичной функции F_1 от координат может быть только параметрической, связанной с плавным изменением внешних условий (например наличием градиента температуры), а на расстояниях порядка длины свободного пробега эта функция от координат не зависит. Поэтому соотношение (3.72) можно еще упростить:

$$F_2(t, x, x_1) = S_{-\tau}(x, x_1) S_{\tau}(\vec{p}) S_{\tau}(\vec{p}_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1). \quad (3.73)$$

Это представление для двухчастичной функции распределения является формально точным, если система пространственно однородна и справедлив принцип ослабления корреляций.

Вернемся к анализу уравнения (3.69). Частная производная по времени в этом уравнении в рассматриваемом приближении может быть опущена. Действительно, явная зависимость от времени функции распределения может возникнуть только за счет внешних взаимодействий по отношению к выбранной системе из двух частиц. Такими взаимодействиями могут быть столкновения с другими частицами или взаимодействие с переменным внешним полем с характерной частотой ω . Будем считать, что выполняется условие

$$\frac{\partial F_2}{\partial t} \sim \omega F_2 \ll \left. \frac{\partial F_2}{\partial t} \right|_{\text{ст}} \sim \frac{F_2}{\tau}.$$

Вводимое ограничение не является очень жестким, поскольку $\tau \sim 10^{-14}$ с и вплоть до частот оптического диапазона условие $\omega \ll 1/\tau$ хорошо выполняется.

В этом случае частная производная $\partial F_2/\partial t$ порядка интеграла столкновений и, следовательно, порядка r_0^3/v . Поскольку мы строим кинетическое уравнение в первом приближении по этому параметру, а правая часть (3.68) его уже содержит, то в уравнении (3.69) для функции F_2 линейные по r_0^3/v члены можно опустить. По существу, отбрасывание частной производной в уравнении (3.69) эквивалентно предположению, что столкновение двух частиц происходит в стационарных условиях.

Проинтегрируем уравнение (3.69) по \vec{r}_1 и \vec{p}_1 . Вводя относительную координату $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}$, получаем

$$\int \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}}{m} \frac{\partial F_2(\vec{R}, \vec{p}, \vec{p}_1)}{\partial \vec{R}} d\vec{p}_1 d\vec{R} = \int \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}_1|)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}} d\vec{r}_1 d\vec{p}_1. \quad (3.74)$$

При записи последнего результата учтено, что

$$\int \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}_1|)}{\partial \vec{r}_1} \frac{\partial F_2}{\partial \vec{p}_1} d\vec{r}_1 d\vec{p}_1 = 0$$

в силу условия $F_2|_{p_1=\pm\infty} = 0$ и $U(\vec{r}) = 0$.

Выражение в правой части (3.74) с точностью до множителя совпадает с интегралом столкновения для одночастичной функции распределения, и поэтому правую часть в формуле (3.68) можно представить в виде

$$\left. \frac{\partial F_1}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{1}{v} \int \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}}{m} \frac{\partial F_2(\vec{R}, \vec{p}, \vec{p}_1)}{\partial \vec{R}} d\vec{p}_1 d\vec{R}. \quad (3.75)$$

При интегрировании по R в правой части формулы (3.75) перейдем в полярную систему координат, выбрав начало отсчета в точке \vec{r} , где находится одна из частиц, ось Z направим вдоль вектора относительной скорости $\vec{u} = (\vec{p}_1 - \vec{p})/m$, обозначим полярные координаты буквами a и φ (см. рис. 20) и вместо функции F_2 подставим ее выражение через одночастичные функции распределения (3.73). Так же, как и при выводе уравнения (3.58), будем считать, что частицы являются упругими шарами радиусом r_0 , так что областью взаимодействия будет сфера радиусом $2r_0$. В итоге получаем следующее выражение для интеграла столкновений:

$$\left. \frac{\partial F_1}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{1}{v} \int d\vec{p}_1 \int_0^\infty da \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^\infty dz \frac{d}{dz} S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1). \quad (3.76)$$

При записи этого выражения операторы эволюции для одночастичной функции распределения были опущены, поскольку

при движении по фазовой траектории одночастичный оператор эволюции сохраняет импульс каждой из частиц. Поэтому

$$S_{\tau}(\vec{p}) S_{\tau}(\vec{p}_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) = F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1).$$

Выполним интегрирование по z в правой части (3.76):

$$\left. \frac{\partial F_1}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{1}{v} \int d\vec{p}_1 \int_0^{\infty} da \int_0^{2\pi} d\varphi u S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) \Big|_{-\infty}^{\infty}. \quad (3.77)$$

При подстановке нижнего предела $z = -\infty$ частицы уже разведены на достаточно большое расстояние и не взаимодействуют между собой. Оператор эволюции $S_{-\tau}(x, x_1)$ еще дальше разводит их, и поэтому импульсы частиц не изменятся. В итоге получаем

$$S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) \Big|_{-\infty} = -F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1).$$

При подстановке верхнего предела $z = \infty$ частицы также окажутся разведенными на достаточно большое расстояние и поэтому не взаимодействуют между собой. Но оператор эволюции $S_{-\tau}(x, x_1)$, сдвигая частицы по фазовой траектории, приведет их в состояние взаимодействия. Поэтому, если прицельный параметр $a < 2r_0$, получаем

$$S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) \Big|_{\infty} = F_1(t, \vec{p}') F_1(t, \vec{p}_1').$$

Если прицельный параметр $a > 2r_0$, то частицы не столкнутся и их импульсы в результате действия оператора эволюции останутся неизменными

$$S_{-\tau}(x, x_1) F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) \Big|_{\infty} = F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1).$$

Учитывая полученные выше результаты, запишем интеграл столкновения для случая взаимодействия упругих шаров:

$$\left. \frac{\partial F_1}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{1}{v} \int d\vec{p}_1 \int_0^{2r_0} da \int_0^{2\pi} d\varphi u \left[F_1(t, \vec{p}') F_1(t, \vec{p}_1') - F_1(t, \vec{p}) F_1(t, \vec{p}_1) \right]. \quad (3.78)$$

Легко заметить, что полученное выражение для интеграла столкновений полностью совпадает с интегралом столкновений в уравнении Больцмана (3.59).

§ 10. Уравнение Фоккера – Планка

Значительную часть кинетических явлений составляют процессы, в которых изменение параметров функции распределения в каждом элементарном акте рассеяния малы по сравнению с их характерными значениями. Типичным примером такой задачи является релаксация импульса тяжелой частицы в газе легких частиц. Концентрация тяжелых частиц предполагается малой, и поэтому столкновениями тяжелых частиц между собой можно пренебречь. При столкновении тяжелой частицы с легкой импульс тяжелой частицы меняется незначительно как по абсолютной величине, так и по направлению. Обозначим импульс передачи в элементарном акте рассеяния буквой \vec{q} , $\vec{p} \gg \vec{q}$. Найдем уравнение, которому подчиняется одночастичная функция распределения $f(t, \vec{p})$ (здесь и далее ради упрощения обозначений мы отказались от обозначения F_1 для одночастичной функции распределения).

Введем обозначение $w(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{q}$ для числа переходов за единицу времени тяжелых частиц из состояния с импульсом \vec{p} в состояние с импульсом $\vec{p} - \vec{q}$. Тогда величина $w(\vec{p} + \vec{q}, \vec{q}) d\vec{q}$ равна скорости переходов из состояния $\vec{p} + \vec{q}$ в состояние с импульсом \vec{p} . Как показано выше, интеграл столкновений в кинетическом уравнении может быть записан в виде разности двух членов, один из которых описывает скорость перехода частиц в состояние с импульсом \vec{p} , а другой – скорость ухода частиц из этого состояния. Применяя этот принцип, сконструируем интеграл столкновений для тяжелой частицы в легком газе [21]:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \int [w(\vec{p} + \vec{q}, \vec{q}) f(t, \vec{p} + \vec{q}) - w(\vec{p}, \vec{q}) f(t, \vec{p})] d\vec{q}. \quad (3.79)$$

Согласно сделанным предположениям, величина $w(\vec{p}, \vec{q})$ быстро убывает с ростом \vec{q} (импульс передачи мал). Поэтому величина \vec{q} мала по сравнению с импульсом частиц \vec{p} . Это обстоятельство позволяет произвести разложение в интеграле столкновений (3.79)

$$w(\vec{p} + \vec{q}, \vec{q}) f(t, \vec{p} + \vec{q}) \simeq w(\vec{p}, \vec{q}) f(t, \vec{p}) + \\ + \vec{q} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} [w(\vec{p}, \vec{q}) f(t, \vec{p})] + \frac{1}{2} q^\alpha q^\beta \frac{\partial^2}{\partial p^\alpha \partial p^\beta} [w(\vec{p}, \vec{q}) f(t, \vec{p})]. \quad (3.80)$$

Подставляя разложение (3.80) в (3.79), получаем

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \left[A'_\alpha f(t, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial p^\beta} B_{\alpha\beta} f(t, \vec{p}) \right]; \quad (3.81)$$

$$A'_\alpha = \int q^\alpha w(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{q}; \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q^\alpha q^\beta w(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{q}. \quad (3.82)$$

Основной отличительной особенностью кинетического уравнения Фоккера – Планка является то, что при его записи удается выразить интеграл столкновений через усредненные характеристики индивидуального акта рассеяния. Уравнения (3.81) и (3.82) подтверждают сказанное. Интеграл столкновений содержит лишь усредненные характеристики процесса рассеяния, которые выражаются через константы A'_α и $B_{\alpha\beta}$. Как будет показано ниже, во многих практически важных случаях это число констант можно сократить всего лишь до одной константы.

Обратим внимание еще на одну особенность полученного интеграла столкновений. Правая часть (3.81) представляет собой дивергенцию вектора потока числа частиц s_α в импульсном пространстве

$$s_\alpha = -A'_\alpha f(t, \vec{p}) - \frac{\partial}{\partial p^\beta} B_{\alpha\beta} f(t, \vec{p}).$$

Аналогичные принципы были использованы и при построении уравнения Фоккера – Планка для описания движения броуновских частиц (см. формулы (2.29) – (2.33)), хотя там шла речь о потоке частиц не в импульсном, а в координатном пространстве.

Поскольку A'_α и $B_{\alpha\beta}$ – всего лишь некоторые константы, удобнее для целей дальнейшего изложения вместо константы A'_α ввести новую константу A_α , определив ее соотношением

$$A_\alpha = A'_\alpha + \frac{\partial}{\partial p^\beta} B_{\alpha\beta}.$$

Выражение для потока s_α при этом существенно упростится:

$$s_\alpha = -A_\alpha f(t, \vec{p}) - B_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p^\beta} f(t, \vec{p}).$$

Константы A'_α и $B_{\alpha\beta}$ в действительности не являются независимыми. Связь между ними легко установить, если рассмотреть равновесный случай. В условиях равновесия функция распределения известна: это функция распределения Максвелла – Больцмана. В дальнейшем чаще всего будем использовать нормировку функций распределения на полное число частиц в образце n (напомним, что ранее буквой n обозначалась концентрация частиц). Это расхождение в обозначениях не принципиально, поскольку для оценок всегда объем образца полагается равным единице:

$$f(t, \vec{p}) = \frac{n}{Z} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right), \quad Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right),$$

а поток s_α^0 в условиях равновесия должен обратиться в нуль. Отсюда, производя необходимые вычисления, получаем

$$s_\alpha^0 = -A_\alpha + B_{\alpha\beta} \frac{p^\beta}{mk_B T} = 0, \quad A_\alpha = \frac{B_{\alpha\beta} p^\beta}{mk_B T}.$$

Если вероятность перехода $w(\vec{p}, \vec{q})$ будет зависеть лишь от модуля вектора \vec{q} , то, как следует из определения коэффициентов $B_{\alpha\beta}$ (3.82), в силу условий симметрии $B_{\alpha\beta} = B \delta_{\alpha\beta}$. В частности, такая ситуация реализуется, если можно пренебречь скоростью движения тяжелых частиц по сравнению со скоростью движения легких частиц и при анализе рассеяния считать, что скорость тяжелых частиц $\vec{p}/m \simeq 0$.

В этом случае запись интеграла столкновений для уравнения Фоккера – Планка оказывается наиболее простой:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = B \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \left[\frac{p^\alpha}{mk_{\text{Б}}T} f(t, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial p^\alpha} f(t, \vec{p}) \right]. \quad (3.83)$$

Задача 3.3

С помощью уравнения Фоккера – Планка определить подвижность μ тяжелой частицы в легком газе.

Решение

При наличии внешнего электрического поля, задаваемого вектором напряженности \vec{E} , на заряженную тяжелую частицу будет действовать сила $\vec{F} = e \vec{E}$, где e – заряд частицы. Будем полагать, что электрическое поле является однородным и постоянным. В этих условиях функция распределения зависит только от импульсов и не зависит от координат и времени. Тогда, учитывая соотношение (3.59), для функции распределения $f(\vec{p})$ можно записать кинетическое уравнение с интегралом столкновений в форме (3.82):

$$e E^\alpha \frac{\partial f}{\partial p^\alpha} = B \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \left[\frac{p^\alpha}{mk_{\text{Б}}T} f(t, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial p^\alpha} f(t, \vec{p}) \right]. \quad (3.84)$$

Поскольку левая и правая части уравнения (3.84) содержат одинаковые производные $\partial/\partial p^\alpha$, то с точностью до несущественной константы должно выполняться равенство

$$e E^\alpha f(\vec{p}) = B \left[\frac{p^\alpha}{mk_{\text{Б}}T} f(t, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial p^\alpha} f(t, \vec{p}) \right]. \quad (3.85)$$

Будем искать решение уравнения (3.85) в линейном приближении по внешним силам, записав неравновесную функцию распределения в виде суммы равновесной функции f_0 и малой поправки δf : $f = f_0 + \delta f$. Поскольку в левой части уравнения (3.85) уже набран первый порядок по внешней силе, заменим здесь f на f_0 . Подстановка равновесной функции распределения f_0 в интеграл столкновения дает нулевой результат. Поэтому в линейном приближении по внешним силам получаем простое уравнение для определения поправки к функции распределения

$$\frac{\partial}{\partial p^\alpha} \delta f + \frac{p^\alpha}{mk_{\text{Б}}T} \delta f = \frac{e E^\alpha}{B} f_0. \quad (3.86)$$

Полученное уравнение является линейным неоднородным уравнением. Легко проверить, что общим решением однородного уравнения является равновесная функция распределения f_0 . Частное решение неоднородного уравнения будем искать в виде

$$\delta f = C^\alpha p^\alpha f_0,$$

где C^α – неизвестные пока коэффициенты. Подставляя пробное решение в уравнение (3.86), находим значения коэффициентов C^α и явный вид поправки к функции распределения δf

$$C^\alpha = \frac{e E^\alpha}{B}; \quad \delta f = \frac{e E^\alpha}{B} p^\alpha f_0.$$

Электропроводность σ и подвижность μ при одном сорте носителей тока определяются из феноменологических выражений

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} = e n \mu \vec{E}, \quad \sigma = e n \mu. \quad (3.87)$$

Полный ток \vec{J} можно выразить также через среднюю скорость дрейфа носителей заряда в электрическом поле $\vec{v}_{\text{др}}$:

$$\vec{J} = e n \vec{v}_{\text{др}}.$$

Сравнивая этот результат с формулой (3.87), получаем

$$\mu = \frac{v_{\text{др}}}{E}.$$

Таким образом, *п о д в и ж н о с т ь* численно равна средней дрейфовой скорости носителей заряда при напряженности электрического поля E , равной единице.

Полный электрический ток в образце определяется поправкой к функции распределения δf . Подставляя ее значение в определение потока заряда, получаем

$$J^\alpha = e n \mu E^\alpha = \frac{e^2}{B} \int v^\alpha E^\beta p^\beta f_0(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (3.88)$$

Отсюда получаем выражение для подвижности

$$\mu = \frac{2e}{3n B} \int \frac{p^2}{2m} f_0(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (3.89)$$

При записи выражения (3.89) учтено, что функция $f(\vec{p})$ в действительности зависит от модуля этого вектора, и поэтому при интегрировании в формуле (3.88) можно записать

$$v^\alpha p^\beta = \frac{1}{3} \frac{p^2}{m} \delta_{\alpha\beta},$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера.

Интеграл в правой части (3.89) представляет собой среднюю энергию частиц. Действительно, переходя в этом интеграле к интегрированию в сферической системе координат с учетом условия нормировки функции $f(\vec{p})$ и полагая $\varepsilon = p^2/2m$, получаем

$$\frac{4\pi n \int_0^\infty \varepsilon \exp(-\varepsilon/k_B T) p dp^2}{4\pi \int_0^\infty \exp(-\varepsilon/k_B T) p dp^2} = \frac{n \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon} = n k_B T \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2)}. \quad (3.90)$$

Используя известные соотношения для гамма-функции

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1} e^{-x} dx; \quad \Gamma(5/2) = 3/2 \Gamma(3/2),$$

получаем для подвижности тяжелых частиц в легком газе простую формулу

$$\mu = \frac{e k_B T}{B}.$$

В этом выражении константу B можно рассматривать как феноменологический параметр, который следует найти из эксперимента или оценить из первых принципов, задавая явный вид выражения для вероятности перехода в формуле (3.82).

3.3. Решение кинетических уравнений

§ 11. Решение уравнения Больцмана для равновесного состояния

Анализ проблемы решения кинетического уравнения Больцмана начнем с простейшего случая равновесного состояния системы. В условиях равновесия функция распределения не содержит явной зависимости от координат и времени, а внешние силы, выводящие систему из состояния равновесия, отсутствуют. Тогда левая часть выражения (3.64) равна нулю и кинетическое уравнение для равновесного состояния сводится к равенству нулю интеграла столкновений

$$\int u \sigma(\Omega, u) (f' f'_1 - f f_1) d\vec{p}_1 d\Omega = 0. \quad (3.91)$$

Заметим, что до сих пор мы записывали кинетическое уравнение для одночастичной функции F_1 , и в уравнении (3.59) фигурирует именно эта функция. Введенное соотношением (3.55) обозначение $F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = f$ не должно вводить в заблуждение. В дальнейшем удобно перейти к более привычному определению функции распределения, нормированной на концентрацию. Поскольку одночастичная функция распределения $F_1(t, \vec{r}, \vec{p})$ связана с функцией $f(t, \vec{r}, \vec{p})$, нормированной на концентрацию, простым соотношением $f(t, \vec{r}, \vec{p}) = n F_1(t, \vec{r}, \vec{p})$, то для того, чтобы перейти к новым обозначениям при записи кинетического уравнения, достаточно опустить выражение для концентрации в интеграле столкновений (3.59). В дальнейшем будем считать, что такой переход уже осуществлен, и полагать, что фигурирующие в кинетическом уравнении функции нормированы на концентрацию. Именно поэтому при записи интеграла столкновений (3.91) мы опустили выражение для концентрации n перед интегралом.

Очевидно, что равенство нулю (3.91) достигается, если выполняется условие

$$f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') = f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)$$

или после логарифмирования

$$\ln f(\vec{p}') + \ln f(\vec{p}_1') = \ln f(\vec{p}) + \ln f(\vec{p}_1). \quad (3.92)$$

Равенство (3.92) можно интерпретировать как некоторый закон сохранения: сумма логарифмов функции распределения частиц до столкновения равна сумме логарифмов функции распределения частиц после столкновения. Известно, что парные упругие столкновения частиц характеризуются наличием аддитивных законов сохранения импульса, энергии и числа частиц (массы). Закон сохранения величины A называется *аддитивным*, если эта величина может быть представлена как сумма величин A_i для всех частей системы при условии отсутствия взаимодействия между ними. Никаких других аддитивных законов сохранения в этой задаче нет (вообще говоря, момент импульса также является аддитивным интегралом движения, но если не учитывать вращение молекул и изменение момента импульса в процессе столкновения, то этот интеграл движения можно не учитывать). Поэтому логарифм функции распределения может зависеть только от перечисленных выше пяти аддитивных инвариантов столкновения:

$$\ln f(\vec{p}) = A \frac{p^2}{2m} + \vec{B} \vec{p} + C, \quad (3.93)$$

где A , \vec{B} и C – некоторые константы. Выберем эти константы таким образом, чтобы моменты функции распределения имели осмысленные физические значения:

$$\int d\vec{p} f(\vec{p}) = n, \quad (3.94)$$

$$\int d\vec{p} f(\vec{p}) \vec{p} = n m \vec{v}_0, \quad (3.95)$$

$$\int d\vec{p} f(\vec{p}) \frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T n. \quad (3.96)$$

Момент нулевого порядка (3.94) является условием нормировки функции распределения; n – полное число (или концентрация) частиц в образце. Первый момент (3.95) представляет собой полный импульс системы частиц; \vec{v}_0 – средняя скорость

дрейфа, а второй момент (3.96) равен полной энергии хаотического движения частиц. Легко видеть, что при таком выборе констант A , \vec{B} и C функция распределения имеет вид

$$f(\vec{p}) = \frac{n}{(2\pi mk_B T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2mk_B T}\right). \quad (3.97)$$

Таким образом, для равновесного случая решением кинетического уравнения (3.91) является известная функция распределения Максвелла – Больцмана.

Результаты (3.94) – (3.97) могут быть обобщены по нескольким направлениям. Во-первых, предыдущее рассмотрение можно применить и к локально-равновесному состоянию. В этом случае функция распределения параметрически будет зависеть от координат и времени через локальную концентрацию $n(\vec{r}, t)$ и локальную температуру $T(\vec{r}, t)$, и дрейфовую скорость $\vec{v}_0(\vec{r}, t)$. Такой подход позволяет использовать уравнение Больцмана для вывода гидродинамических уравнений баланса. В следующей главе, используя этот метод, будут получены уравнения баланса импульса, энергии и числа частиц для системы горячих электронов в проводящих кристаллах.

Нетрудно обобщить результаты (3.94) – (3.97) и на случай, когда частицы газа находятся в стационарном силовом потенциальном поле $U(\vec{r})$, или случай неупругого рассеяния частиц (эти результаты можно найти в монографии [22]).

§ 12. H -теорема Больцмана

В отличие от уравнений динамики, которые являются обратимыми во времени, кинетическое уравнение Больцмана неинвариантно относительно операции обращения времени. Для того чтобы в этом убедиться, применим операцию обращения времени ($t \rightarrow -t$, $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, $\vec{r} \rightarrow \vec{r}$) к кинетическому уравнению (3.59). Обозначив $\hat{f} = f(-t, -\vec{p}, \vec{r})$, получим

$$-\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} - \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r \hat{f} - \vec{F} \vec{\nabla}_p \hat{f} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2r_0} a da \int (\hat{f}' \hat{f}'_1 - \hat{f} \hat{f}_1) u d\vec{p}_1. \quad (3.98)$$

После операции обращения времени левая часть уравнения (3.98) для функции $\hat{f} = f(-t, -\vec{p}, \vec{r})$ поменяла знак, а правая – нет.

Необратимость уравнения Больцмана связана с тем, что из всех возможных решений цепочки уравнений Боголюбова отобраны те решения, которые удовлетворяют принципу ослабления корреляций. Современники подвергли Больцмана острой критике за отход от идей детерминизма. С позиций современного знания, как указывалось в § 2 этой главы, точное решение динамической задачи в системах, демонстрирующих динамический хаос, является совершенно бессмысленной задачей, и для получения результатов, имеющих практический смысл, необходимо переходить к статистическому описанию. Именно эту идею и реализовал Больцман, предложив свое уравнение.

Необратимый характер поведения системы, описание которой производится на языке функции распределения, удовлетворяющей уравнению Больцмана, становится очевидным, если, следуя Больцману, определить величину H (функцию Ляпунова см. (1.97))

$$H(t) = \int d\vec{p} f(\vec{p}, t) \ln f(\vec{p}, t), \quad (3.99)$$

которая является невозрастающей функцией времени. Очевидно, что можно определить и неубывающую величину $S(t) = -H(t)$, совпадающую с точностью до размерного множителя с энтропией системы. Существование невозрастающей функции $H(t)$, определенной формулой (3.99), для функций, являющихся решением уравнения (3.59), обычно называют H -теоремой Больцмана.

Приведем доказательство этой теоремы для случая пространственно однородного распределения газа в условиях отсутствия внешних сил. Кинетическое уравнение в этой ситуации описывает релаксацию газа к равновесному состоянию и имеет наиболее простой вид

$$\frac{\partial f(\vec{p})}{\partial t} = \int u \sigma(\Omega, u) [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] d\vec{p}_1 d\Omega. \quad (3.100)$$

Найдем производную функции $H(t)$ по времени и покажем, что она всегда неположительна. Выполняя дифференцирование

по времени в (3.99), получаем

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} = \int d\vec{p} [1 + \ln f(\vec{p})] \frac{\partial f(\vec{p})}{\partial t}.$$

Подставим в это выражение значение производной функции распределения из кинетического уравнения (3.100):

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(t)}{\partial t} = \int u \sigma(\Omega, u) [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] \times \\ \times [1 + \ln f(\vec{p})] d\vec{p} d\vec{p}_1 d\Omega. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Поскольку интегрирование по \vec{p} и \vec{p}_1 ведется в одинаковых пределах, выражение (3.101) можно симметризовать, записав его в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int u \sigma(\Omega, u) [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] \times \\ \times [2 + \ln(f(\vec{p}) f(\vec{p}_1))] d\vec{p} d\vec{p}_1 d\Omega. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Полученный результат можно подвергнуть дальнейшей симметризации. Поскольку $d\vec{p} d\vec{p}_1 = d\vec{p}' d\vec{p}_1'$, $u = -u'$. Поэтому возможна дальнейшая симметризация

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(t)}{\partial t} = \frac{1}{4} \int u \sigma(\Omega, u) [f(\vec{p}') f(\vec{p}_1') - f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)] \times \\ \times [2 + \ln(f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)) - 2 - \ln(f(\vec{p}') f(\vec{p}_1'))] d\vec{p} d\vec{p}_1 d\Omega. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Если рассматривать только выражения в квадратных скобках, то можно заметить, что подынтегральная функция в правой части формулы (3.103) может быть представлена в виде

$$f(x, y) = (x - y) \ln \frac{y}{x},$$

где $x = f(\vec{p}') f(\vec{p}_1')$, $y = f(\vec{p}) f(\vec{p}_1)$. Теперь очевидно, что при любых значениях $x \neq y$ функция $f(x, y)$ отрицательна. Равенство нулю достигается только в случае равенства $x = y$. Поскольку относительная скорость частиц до соударения u и

сечение рассеяния $\sigma(\Omega, u)$ являются положительными величинами, то подынтегральная функция в правой части (3.103) является неположительной величиной во всей области интегрирования и

$$\frac{\partial H(t)}{\partial t} \leq 0.$$

Этим исчерпывается доказательство теоремы.

Заметим, что H -теорема Больцмана, доказанная выше, эквивалентна второму началу термодинамики, которое гласит, что энтропия системы не может уменьшаться. Фактически H -теорема является даже более общим утверждением, поскольку она справедлива и для систем, далеких от состояния равновесия. Она позволяет утверждать, что и для неравновесного состояния можно определить функцию Ляпунова, которая в каком-то смысле эквивалентна энтропии для равновесных систем. Другие формулировки доказательства H -теоремы и обсуждение проблемы необратимости решений уравнения Больцмана можно найти в специальной литературе [23, 24].

§ 13. Разложение Гильберта

Кинетическое уравнение Больцмана (3.64) является нелинейным интегродифференциальным уравнением, и нахождение его решений, удовлетворяющих начальным и граничным условиям, представляет необычайно сложную проблему. Неудивительно, что до сих пор нет полного анализа существования и единственности решений этого уравнения в общем виде. Полученные к настоящему времени результаты весьма скромны, и большая их часть изложена в упоминавшихся монографиях [23, 24]. Основные направления практического использования уравнения Больцмана для решения задач физической кинетики состоят в попытках построения теории возмущений.

Самым простым и физически ясным является метод линеаризации интеграла столкновений. В этом случае теория возмущений строится по степеням отклонения системы от состояния равновесия, а решение кинетического уравнения $f(\vec{p}, t)$ ищется в виде равновесной функции распределения $f_0(\vec{p})$ и малой поправки $\delta f(\vec{p}, t)$. Линеаризация интеграла столкновений состоит в том, что удерживаются только линейные по $\delta f(\vec{p}, t)$ члены.

Для линеаризованного уравнения Больцмана имеется ряд строгих результатов существования и единственности решений задач с начальными и граничными условиями [24]. Недостатком этого подхода является то, что анализ оказывается справедливым только для слабонеравновесных состояний.

Другая группа методов теории возмущений состоит в разложении функции распределения в ряд по степеням некоего малого параметра и построении итерационной схемы последовательного определения коэффициентов разложения. Впервые этот прием для анализа решений уравнений Больцмана применил Д. Гильберт в 1912 г. Изложим кратко сущность и результаты разложения Гильберта.

Оценим вначале порядок различных членов в уравнении Больцмана. Если ω – характерная частота изменения внешних воздействий, v – характерная скорость частиц, d – характерный размер пространственной неоднородности системы, l – длина свободного пробега частиц, а $l/v = \tau$ – время свободного пробега частиц, то можно оценить порядок различных членов в уравнении Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \sim \omega f, \quad \vec{v} \vec{\nabla}_r f \sim \frac{v}{d} f, \quad \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{ст}} \sim \frac{f}{\tau} \sim \frac{v}{l} f.$$

Отсюда следует, что можно ввести два безразмерных параметра, характеризующих относительную величину интеграла столкновений по сравнению с вкладом слагаемых в левой части уравнения: $\omega\tau$ и l/d . В качестве первого приближения можно считать, что эти параметры близки по величине, и тогда относительный вклад интеграла столкновений определяется лишь одним параметром $\text{Kn} = l/d$, который носит название *числа Кнудсена*. При малых значениях числа Кнудсена длина свободного пробега мала, столкновения происходят достаточно часто и вклад интеграла столкновений велик. При больших значениях числа Кнудсена $\text{Kn} \gg 1$ возможен режим свободномолекулярного течения газа, когда интеграл столкновений в кинетическом уравнении можно опустить. Этот анализ наводит на мысль, что теорию возмущений для кинетического уравнения можно строить для двух разных предельных случаев, когда число Кнудсена $\text{Kn} \rightarrow 0$ и когда это число велико и $\text{Kn} \rightarrow \infty$.

Разложение Гильберта соответствует первому случаю, когда число Кнудсена $\text{Kn} = \epsilon$ является малым параметром (плотные газы). Запишем кинетическое уравнение (3.64), вводя для интеграла столкновений символическое обозначение $I(f, f)$:

$$\epsilon \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \vec{\nabla}_p f \right] = I(f, f). \quad (3.104)$$

Величина ϵ в левую часть (3.104) введена для того, чтобы проще было отобрать члены одинакового порядка малости по параметру ϵ при построении итерационной процедуры.

Решение кинетического уравнения f будем искать в виде разложения в бесконечный ряд по степеням параметра ϵ :

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (3.105)$$

После того как все члены разложения (3.105) будут найдены, параметр ϵ следует положить равным единице и вернуться к исходным определениям. В этом смысле разложение является формальным приемом, всего лишь позволяющим правильно отобрать члены одинакового порядка малости.

Подставим разложение (3.105) в уравнение (3.104) и приравняем члены в левой и правой частях уравнения (3.104), содержащие нулевой, первый, второй и т. д. порядки по ϵ . В результате получаем бесконечную последовательность уравнений, позволяющих определить коэффициенты разложения $f^{(i)}$:

$$0 = I(f^{(0)}, f^{(0)}), \quad (3.106)$$

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r f^{(0)} + \vec{F} \vec{\nabla}_p f^{(0)} = I(f^{(1)}, f^{(0)}) + I(f^{(0)}, f^{(1)}), \quad (3.107)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r f^{(1)} + \vec{F} \vec{\nabla}_p f^{(1)} = \\ & = I(f^{(0)}, f^{(2)}) + I(f^{(2)}, f^{(0)}) + I(f^{(1)}, f^{(1)}), \end{aligned} \quad (3.108)$$

.....

Уравнение (3.106) позволяет определить $f^{(0)}$. Легко видеть, что по существу это уравнение совпадает с уравнением (3.91) и

его решением будет квазиравновесная функция распределения (3.97)

$$f^{(0)}(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{n}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2m k_B T}\right), \quad (3.109)$$

где параметры n , v_0 , T являются локально-равновесными величинами и зависят от координат и времени.

Проанализируем структуру уравнений (3.107), (3.108). Дальнейшие выкладки достаточно громоздки. Поскольку нас интересуют лишь принципиальные моменты метода, а не прикладные аспекты, без всякого ущерба можно опустить член, пропорциональный внешней силе, в уравнениях (3.107), (3.108). Каждое из этих уравнений позволяет определить очередную поправку в разложении (3.105). Таким образом, в принципе, можно определить все члены разложения (3.105), но для этого придется на каждом шаге решить некоторое линейное неоднородное интегральное уравнение. Структура интегральных уравнений для определения очередной поправки $f^{(n)} = f^{(0)} h^{(n)}$ одинакова и может быть записана в символической форме:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r\right] f^{(0)} h^{(n-1)} = L h^{(n)} + S^{(n)}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.110)$$

$$L h^{(n)} = I(f^{(0)}, f^{(0)} h^{(n)}) + I(f^{(0)} h^{(n)}, f^{(0)}), \quad h^{(0)} = 1, \quad (3.111)$$

$$S^{(1)} = 0, \quad S^{(n)} = \sum_{k=1}^{n-1} I(f^{(0)} h^{(k)}, f^{(0)} h^{(n-k)}), \quad n = 2, 3, \dots, \quad (3.112)$$

где L – линейный интегральный оператор, а $S^{(n)}$ – некоторая функция, явный вид которой известен, если найдены предыдущие члены разложения (3.105). Поскольку величины $f^{(0)}$ известны, приходим к системе уравнений для отыскания функций $h^{(n)}$, структура которых одинакова и представляет собой на каждом шаге линейное неоднородное интегральное уравнение Фредгольма второго рода:

$$L h^{(n)} = g^{(n)}. \quad (3.113)$$

Решениями однородного уравнения $Lh^{(n)} = 0$ для случая упругого рассеяния частиц являются аддитивные инварианты столкновения ψ_α $\alpha = 1, 2, \dots, 5$, т. е. константа, три компоненты импульса и кинетическая энергия (заметим, что эти величины являются собственными функциями уравнения $Lh = \lambda h$, соответствующие собственному значению $\lambda = 0$). Решение неоднородного уравнения (3.113) эквивалентно нахождению обратного оператора L^{-1} , что в общем случае невозможно, поскольку $\lambda = 0$ входит в число возможных собственных значений оператора L . Поэтому потребуем дополнительно, чтобы вектор $g^{(n)}$, задающий неоднородность, был ортогонален ψ_α , и будем искать решения на этом классе функций. Впрочем, можно сослаться и на более общее утверждение: решение неоднородного уравнения Фредгольма второго рода существует тогда и только тогда, когда его правая часть (неоднородность) ортогональна всем его решениям. В результате получаем очень важное условие, которое позволит получить уравнения переноса ($n = 1, 2, \dots$):

$$\int \psi_\alpha \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r \right) f^{(0)} h^{(n-1)} - S^{(n)} \right] d\vec{p} = 0; \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.114)$$

В формуле (3.114) ψ_α – вектор, компонентами которого являются инварианты столкновения (набор собственных функций однородного уравнения $Lh^{(n-1)} = 0$ на шаге $n - 1$).

Общим решением неоднородного уравнения (3.113) является сумма частного решения $\hat{h}^{(n)}$ неоднородного уравнения и общего решения однородного уравнения

$$h^{(n)} = \hat{h}^{(n)} + C_\alpha^{(n)} \psi_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.115)$$

Здесь $\hat{h}^{(n)}$ – любое частное решение уравнения (3.113), $C_\alpha^{(n)}$ – это пять величин (аналог коэффициентов A , \vec{B} и C в уравнении (3.93)), зависящих от координат и времени, которые нужно будет определить на каждом шаге итерации.

Чтобы сделать выбор функций $\hat{h}^{(n)}$ однозначным, наложим пять дополнительных условий:

$$\int \psi_\alpha \hat{h}^{(n)} f^{(0)} d\vec{p} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.116)$$

С точки зрения математики, необходимость этих условий связана с тем, что решение неоднородного уравнения следует искать на множестве функций, ортогональных базису собственных функций однородного уравнения $Lh^{(n)} = 0$, что обеспечивает существование оператора L^{-1} .

Итак, функция $f^{(0)}$ находится из уравнения (3.106), и она совпадает с равновесной функцией распределения f_0 . Поправки

$$f^{(n)} = f^{(0)} (\hat{h}^{(n)} + C_{\alpha}^{(n)} \psi_{\alpha}) \quad (3.117)$$

для $n = 1, 2, \dots$ содержат неизвестные функции координат и времени $C_{\alpha}^{(n)}$ и неизвестные функции $\hat{h}^{(n)}$ и их следует найти из условий (3.114), (3.110), обеспечивающих существование поправки на $n+1$ шаге. Таким образом, по крайней мере принципиально, есть возможность построить итерационную схему определения всех членов разложения (3.105).

Реализуем описанную выше схему для случая $n = 1$. Поскольку интегралы

$$\int \psi_{\alpha} S^{(n)} d\vec{p} = 0$$

для всех n , если величины ψ_{α} являются инвариантами столкновений [23], условия ортогональности (3.114) сводятся к пяти уравнениям, представляющим собой уравнения Эйлера для невязкой среды

$$\int \psi_{\alpha} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_r \right] f^{(0)} d\vec{p} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.118)$$

Напоминаем, что в качестве величин ψ_{α} следует взять пять инвариантов столкновений: массу частицы m , три компоненты импульса частицы $m\vec{v}$ и кинетическую энергию $mv^2/2$.

Взяв $\psi_1 = m$, из (3.118) получим уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_{0i}}{\partial r_i} = 0, \quad (3.119)$$

$$\rho = m n = \int m f^{(0)} d\vec{p}, \quad v_{0i} = \frac{1}{n} \int v_i f^{(0)} d\vec{p}. \quad (3.120)$$

Для $\psi_{2,3,4} = m\vec{v}$ из (3.118) получаем уравнение баланса импульса

$$\frac{\partial \rho v_{0i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_j} (P_{ij} + \rho v_{0i} v_{0j}) = 0, \quad (3.121)$$

$$P_{ij} = m \int (v_i - v_{0i})(v_j - v_{0j}) f^{(0)} d\vec{p} = m \int c_i c_j f^{(0)} d\vec{p}. \quad (3.122)$$

В этой формуле P_{ij} – компоненты тензора напряжений, $c_i = v_i - v_{0i}$ – компоненты скорости теплового движения. При выводе формулы (3.121) следует записать скорость частицы v_i в виде суммы скоростей теплового движения c_i и скорости дрейфа v_{0i} . Тогда, с учетом того, что средняя скорость теплового движения равна нулю, получаем

$$\begin{aligned} m \int v_i v_j f^{(0)} d\vec{p} &= m \int (c_i + v_{0i})(c_j + v_{0j}) f^{(0)} d\vec{p} = \\ &= m \int c_i c_j f^{(0)} d\vec{p} + m v_{0i} v_{0j} \int f^{(0)} d\vec{p} = P_{ij} + \rho v_{0i} v_{0j}. \end{aligned}$$

Наконец, подставляя в качестве ψ_5 кинетическую энергию частицы $mv^2/2$, получаем макроскопическое уравнение баланса энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(\frac{3}{2} \frac{k_B T}{m} + \frac{1}{2} v_0^2 \right) + \frac{\partial}{\partial r_j} \left[\rho v_{0j} \left(\frac{3}{2} \frac{k_B T}{m} + \frac{1}{2} v_0^2 \right) + v_{0i} P_{ij} + q_j \right] = 0. \quad (3.123)$$

Вывод формулы (3.123) не представляет труда, если учесть соотношения (3.96) и определение тензора напряжений (3.122). Величина q_j представляет собой поток тепла

$$q_j = \frac{m}{2} \int c_i^2 c_j f^{(0)} d\vec{p}.$$

Уравнения (3.119), (3.121), (3.123) представляют собой уравнения Эйлера для пяти макроскопических величин, входящих в $f^{(0)}$, т. е. для $n(\vec{r}, t)$ или $\rho(\vec{r}, t)$, $v_{0i}(\vec{r}, t)$ и $T(\vec{r}, t)$. Найденные в результате решения этих уравнений гидродинамические параметры еще не являются истинными плотностью, скоростью

и температурой. Их можно рассматривать как первое приближение к истинным параметрам. Для нахождения очередной поправки следует перейти к следующему шагу итерации.

Обобщим результаты (3.119), (3.121), (3.123) для случая произвольных значений $n \geq 1$. Очевидно, что совокупность пяти гидродинамических уравнений, вытекающих из условия (3.114), всегда можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho_\alpha^{(n)}}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J}_\alpha^{(n)} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.124)$$

$$\rho_\alpha^{(n)} = \int \psi_\alpha f^{(n)} d\vec{p}, \quad \vec{J}_\alpha^{(n)} = \int \psi_\alpha \vec{v} f^{(n)} d\vec{p}. \quad (3.125)$$

На каждом шаге итерации систему уравнений (3.124) необходимо решить и найти неизвестные коэффициенты $C_\alpha^{(n)}$, содержащиеся в поправках $f^{(n)}$, а затем еще найти величины $\hat{h}^{(n)}$ – частное решение соответствующего неоднородного уравнения (3.110). Таким образом, очевидно, что намеченная программа трудно реализуема, и главная ценность разложения Гильберта не в практическом методе нахождения решения уравнения Больцмана, а в доказательстве существования и единственности решения. Кроме того, разложение Гильберта позволяет установить взаимно однозначное соответствие между функцией распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ и первыми ее моментами $n(\vec{r}, t)$, $\vec{v}_0(\vec{r}, t)$ и $T(\vec{r}, t)$. Иначе говоря, разложение Гильберта позволяет доказать, что кинетическое уравнение Больцмана однозначно определяет функцию распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$, если в начальный момент времени заданы первые пять моментов функции распределения.

Для доказательства этого положения достаточно в выражение для плотности $\rho_\alpha^{(n)}$ (3.125) подставить выражение для $f^{(n)}$ из (3.117). В результате получаем уравнение взаимосвязи величин $\rho_\alpha^{(n)}$ и коэффициентов $C_\alpha^{(n)}$:

$$\rho_\alpha^{(n)} = \int \psi_\alpha f^{(0)} \hat{h}^{(n)} d\vec{p} + \sum_{\beta=1}^5 C_\beta^{(n)} \int \psi_\alpha f^{(0)} \psi_\beta d\vec{p}. \quad (3.126)$$

В силу условия (3.116) первый интеграл в выражении (3.126) равен нулю, и мы получаем пять уравнений, позволяющих выразить величины $C_\alpha^{(n)}$ через $\rho_\alpha^{(n)}$. Поскольку величины $C_\alpha^{(n)}$ определяются из решения дифференциальных уравнений, то для их однозначного определения нужно задать начальные условия на каждом шаге итерации. Но так как мы доказали однозначное соответствие между величинами $C_\alpha^{(n)}$ и $\rho_\alpha^{(n)}$, то на каждом шаге итерации можно задавать начальные условия не для $C_\alpha^{(n)}$, а для $\rho_\alpha^{(n)}$. Таким образом, все поправки к функции распределения будут найдены из уравнения Больцмана, если в начальный момент времени будут заданы величины $\rho_\alpha^{(n)}$. Иначе говоря, функция распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ однозначно определяется пятью параметрами $n(\vec{r}, t)$, $\vec{v}_0(\vec{r}, t)$ и $T(\vec{r}, t)$, заданными в начальный момент времени. Поскольку в качестве начального времени можно выбрать любой момент времени, можно утверждать, что имеется взаимно однозначное соответствие между функцией распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ и вектором ее первых пяти моментов, заданным в произвольный момент времени, т. е. обосновать применимость гидродинамических уравнений для описания эволюции системы.

Величины $\hat{h}^{(n)}$, естественно, тоже подлежат определению как частные решения уравнений (3.110) на каждом шаге итерации. Но уравнения (3.110) не требуют задания начальных условий и содержат величины $C_\alpha^{(n-1)}$, найденные уже на предыдущем шаге. Поэтому проблема нахождения величин $\hat{h}^{(n)}$ никак не скажется на сделанных выше выводах о том, что задание первых пяти моментов функции распределения в начальный момент времени однозначно определяет решение уравнения Больцмана.

Таким образом, Гильберт доказал существование и единственность решения уравнения Больцмана в классе решений, которые могут быть представлены в виде разложения (3.105). Доказать возможность такого разложения, а тем более убедиться в его сходимости, к сожалению, до сих пор не удалось. Тем не менее разложение Гильберта служит теоретической основой для большинства практически применяемых методов решения уравнения Больцмана и в частности метода Энскога – Чепмена, основные идеи которого будут изложены ниже.

§ 14. Метод Энскога – Чепмена. Вывод уравнений гидродинамики

В предыдущем параграфе показано, что решение уравнения Больцмана может быть построено в виде разложения по малому параметру (числу Кнудсена), которое полностью определяется заданием в начальный момент гидродинамических величин. Но если функция распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ в произвольный момент времени t выражается через гидродинамические величины в начальный момент времени, то и гидродинамические величины в произвольный момент времени должны выражаться через начальные значения гидродинамических параметров. Следовательно, можно исключить из рассмотрения функцию распределения и установить прямую связь между гидродинамическими величинами в различные моменты времени. Этот результат теории Гильберта позволяет обосновать применение гидродинамических уравнений для описания газодинамики.

Система гидродинамических уравнений (3.119), (3.121), (3.123) представляет собой пять независимых уравнений для определения *тринадцати* неизвестных величин. Этими неизвестными величинами являются: плотность ρ , три компоненты средней скорости \vec{v}_0 , шесть компонент симметричного тензора напряжений P_{ij} и три компоненты потока тепла \vec{q} . Температура T легко может быть выражена через диагональные компоненты тензора напряжений. Действительно, определяя давление соотношением

$$p = \frac{1}{3}(P_{11} + P_{22} + P_{33}),$$

где компоненты тензора P_{ij} определяются выражением (3.122), и вспоминая условие (3.96), получаем хорошо известное соотношение $p = nk_B T$, и температура в действительности может быть определена через другие гидродинамические параметры.

Таким образом, система гидродинамических уравнений незамкнута. Для того чтобы ее замкнуть, необходимо выразить величины P_{ij} и q_i через гидродинамические величины n , \vec{v}_0 , p (или T). Тогда система гидродинамических уравнений будет замкнута и мы получим пять независимых уравнений для определения пяти гидродинамических параметров на каждом шаге итерации.

Цель метода Энскога – Чепмена состоит в установлении указанной связи и получении замкнутой системы гидродинамических уравнений баланса. Метод Энскога – Чепмена является развитием метода Гильберта, и можно показать [24], что в методе Энскога – Чепмена реализована перестройка разложения Гильберта для функции распределения $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$ по степеням малого параметра ϵ (числа Кнудсена). Такая перестройка необходима, поскольку разложение Гильберта в любом порядке по ϵ позволяет получить лишь уравнения гидродинамики невязкой жидкости. В физике достаточно много примеров, когда в любом порядке теории возмущений теоретический результат не согласуется с экспериментом и нужна перестройка ряда теории возмущений (часто эквивалентная суммированию некоторой бесконечной последовательности членов ряда теории возмущений). Применение диаграммной техники и метода массового оператора в задачах физики твердого тела как раз может служить примером такого подхода.

Не имея возможности изложить все детали оригинального метода Энскога – Чепмена, ограничимся лишь обсуждением принципов, позволяющих получить замкнутые уравнения гидродинамики, пригодные для описания вязкой жидкости (уравнений Навье – Стокса).

Начальные шаги построения разложения Энскога – Чепмена полностью совпадают с разложением Гильберта. Таким образом, рассуждая точно так же, как и в предыдущем параграфе, приходим к уравнениям (3.105) – (3.108). Для простоты ограничимся случаем, когда внешняя сила $\vec{F} = 0$.

Решением уравнения (3.106) является функция (3.109), в которой параметры n , \vec{v}_0 , T представляют собой локальную плотность частиц, их среднюю скорость и температуру и в общем случае являются произвольными функциями координат и времени. Строго говоря, в уравнении (3.109) должны стоять величины $n^{(0)}$, $\vec{v}_0^{(0)}$, $T^{(0)}$ – гидродинамические параметры нулевого приближения. Однако теория получается значительно более

изящной, а результаты легко интерпретируемыми, если сразу считать, что параметры n , \vec{v}_0 , T удовлетворяют уравнениям

$$\int d\vec{p} f^{(0)}(\vec{p}, \vec{r}, t) = n, \quad (3.127)$$

$$\int d\vec{p} f^{(0)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \vec{p} = n m \vec{v}_0, \quad (3.128)$$

$$\int d\vec{p} f^{(0)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T n. \quad (3.129)$$

Здесь $f^{(0)}$ – это функция распределений (3.109). Тогда поправки $f^{(n)}$, $n = 1, 2, \dots$, должны удовлетворять системе определений

$$\int d\vec{p} f^{(n)}(\vec{p}, \vec{r}, t) = 0, \quad (3.130)$$

$$\int d\vec{p} f^{(n)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \vec{p} = 0, \quad (3.131)$$

$$\int d\vec{p} f^{(n)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2m} = 0. \quad (3.132)$$

Пять уравнений (3.130) – (3.132) представляют собой аналог уравнений (3.116). Как эти уравнения следует использовать при построении уравнений гидродинамики, обсудим чуть позже.

Если в разложении (3.105) ограничиться лишь первым членом и положить $f = f^{(0)}$, то в качестве уравнений гидродинамики получим уравнения Эйлера (3.119), (3.121), (3.123). Легко заметить, что в этом случае тензор напряжений может быть записан в виде $P_{ij} = p\delta_{ij}$, а поток тепла \vec{q} равен нулю. Тогда система гидродинамических уравнений является замкнутой. Этот результат совпадает с тем, что дает разложение Гильберта.

Учтем теперь поправку $f^{(1)}$ в разложении (3.105) и положим

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} = f^{(0)}(1 + \epsilon h^{(1)}). \quad (3.133)$$

В этом случае для $h^{(1)}$ можно записать интегральное уравнение

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r \right] f^{(0)} = I(f^{(0)}, f^{(0)} h^{(1)}) + I(f^{(0)} h^{(1)}, f^{(0)}). \quad (3.134)$$

Неоднородное интегральное уравнение (3.134) для определения $h^{(1)}$ можно получить, полагая n равным единице в уравнениях (3.110) – (3.112). Анализ уравнения (3.134) в методе Энскога – Чепмена радикальным образом отличается от анализа Гильберта. Как уже указывалось, основной целью метода Энскога – Чепмена является вывод гидродинамических уравнений. Поскольку разложение Гильберта в любом порядке по ϵ не позволяет получить уравнения движения вязкой жидкости, разложение следует перестроить. Эта перестройка основана на результате, полученном Гильбертом. Поскольку решение уравнения Больцмана однозначно определяется заданием первых пяти моментов функции распределения, то и производная по времени в уравнении (3.134) может быть выражена через эти моменты.

Для реализации этой программы подставим в левую часть уравнения (3.134) функцию $f^{(0)}$, определяемую выражением (3.109), и выполним дифференцирование по координатам и времени, полагая, что функциями координат и времени являются гидродинамические параметры n , \vec{v}_0 , T . В результате простых вычислений получаем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \vec{\nabla}_r \right] f^{(0)} = f^{(0)} & \left[\frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} \left[\frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2mk_B T} - \frac{3}{2} \right] + \right. \\ & + \frac{\vec{p} - m\vec{v}_0}{k_B T} \frac{\partial \vec{v}_0}{\partial t} + \frac{1}{n} \vec{v} \frac{\partial n}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{T} \vec{v} \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} \left[\frac{(\vec{p} - m\vec{v}_0)^2}{2mk_B T} - \frac{3}{2} \right] + \\ & \left. + ((\vec{v} \vec{\nabla}_r) \vec{v}_0) \frac{\vec{p} - m\vec{v}_0}{k_B T} \right]. \end{aligned} \quad (3.135)$$

Все производные по времени в правой части (3.135) исключим с помощью гидродинамических уравнений (3.119), (3.121), (3.123), которые с учетом того, что $P_{ij} = p\delta_{ij}$, $p = nk_B T$, $\vec{q} = 0$, $\rho = n m$, можно записать в более простой форме

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } n\vec{v}_0 = 0, \quad (3.136)$$

$$\frac{\partial \vec{v}_0}{\partial t} + ((\vec{v}_0 \vec{\nabla}_r) \vec{v}_0) = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla}_r p, \quad (3.137)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v}_0 \vec{\nabla}_r T + \frac{2}{3} T \text{ div } \vec{v}_0 = 0. \quad (3.138)$$

Для вывода последнего уравнения следует преобразовать (3.123), используя законы сохранения (3.136) и (3.137).

После исключения производных по времени в результате простых, но достаточно громоздких преобразований правую часть (3.135) можно представить в виде [22]:

$$f^{(0)} \left[\left[\frac{\vec{v} - \vec{v}_0}{T} \vec{\nabla}_r T \right] \left[\frac{m(\vec{v} - \vec{v}_0)^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right] - \frac{1}{3} \frac{m}{k_B T} (\vec{v} - \vec{v}_0)^2 \times \right. \\ \left. \times \operatorname{div} \vec{v}_0 + \frac{m}{k_B T} (\vec{v} - \vec{v}_0)_i (\vec{v} - \vec{v}_0)_j \frac{\partial v_{0i}}{\partial r_j} \right]. \quad (3.139)$$

Запишем теперь интегральное уравнение (3.134), используя полученный выше результат. Для упрощения записи, как и ранее, будем использовать скорость теплового движения $\vec{c} = \vec{v} - \vec{v}_0$. Для интеграла столкновений воспользуемся выражением в правой части (3.100) и подставим вместо функции распределения f ее разложение (3.133). Тогда, учитывая законы сохранения энергии, получаем

$$f^{(0)} \left[\frac{\vec{c}}{T} \vec{\nabla}_r T \left(\frac{m\vec{c}^2}{2k_B T} - \frac{5}{2} \right) + \frac{m}{k_B T} (\vec{c}_i \vec{c}_j - \frac{1}{3} \vec{c}^2 \delta_{ij}) \frac{\partial v_{0i}}{\partial r_j} \right] = \\ = \int u \sigma(\Omega, u) f^{(0)} f_1^{(0)} [h^{(1)'} + h_1^{(1)'} - h^{(1)} - h_1^{(1)}] d\vec{p}_1 d\Omega. \quad (3.140)$$

Уравнение (3.140) представляет собой неоднородное уравнение Фредгольма, и его решение является суперпозицией общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения. Оно позволяет найти поправку к функции распределения первого порядка по ϵ . Подробно методика решения уравнения (3.140) изложена в монографии М. Н. Когана [25]. Не вдаваясь в детали вычислений, отметим, что частное решение интегрального уравнения (3.140) ищется в виде

$$h^{(1)} = -A c_i \frac{\partial T}{\partial r_i} - B \left(c_i c_j - \frac{1}{3} c^2 \delta_{ij} \right) \frac{\partial v_{0i}}{\partial r_j}, \quad (3.141)$$

где скалярные величины A и B предполагаются зависящими от модуля скорости теплового движения, концентрации и температуры. Для определения этих констант выражение (3.141)

следует подставить в уравнение (3.140), в результате чего оно распадается на два уравнения – уравнение для определения параметра A и уравнение для определения параметра B , которые затем следует решить.

Функцию распределения с точностью до первого порядка по ϵ можно записать в виде

$$f = f^{(0)} \left\{ 1 - A^* c_i \frac{\partial T}{\partial r_i} - B \left(c_i c_j - \frac{1}{3} c^2 \delta_{ij} \right) \frac{\partial v_{0i}}{\partial r_j} \right\}, \quad (3.142)$$

где A^* – перенормированная скалярная величина A . Эта перенормировка возникает в связи с учетом решения однородного уравнения [25].

Выражение для функции распределения (3.142) позволяет найти поток тепла и уточненное выражение для тензора напряжений. Подставляя (3.142) в определения плотности потока тепла q_j и тензора напряжения P_{ij}

$$q_j = \frac{m}{2} \int c_i^2 c_j f d\vec{p}, \quad P_{ij} = m \int c_i c_j f d\vec{p},$$

получаем

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r_j}, \quad P_{ij} = p \delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial v_{0i}}{\partial r_j} + \frac{\partial v_{0j}}{\partial r_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \operatorname{div} \vec{v}_0 \right); \quad (3.143)$$

$$\lambda = \frac{m}{6} \int A^* c^4 f^{(0)} d\vec{p}, \quad \mu = \frac{m}{15} \int B f^{(0)} c^4 d\vec{p}. \quad (3.144)$$

Константы λ и μ , входящие в выражение (3.144), должны быть найдены из решения уравнения (3.140). Для этих целей функции $A(c)$ и $B(c)$ раскладываются в ряд по полиномам Сонина [25]. Процедура разложения достаточно громоздка, а результат зависит от конкретной модели взаимодействия частиц. Приведем здесь результат лишь для случая, когда частицы являются упругими шарами с диаметром d и в разложении по полиномам Сонина оставлен лишь первый член разложения [25]. В этом случае

$$\mu = \frac{15}{16} \frac{\sqrt{m k_B T}}{\sqrt{\pi} d^2}, \quad \lambda = \frac{5}{2} C_v \mu.$$

В последней формуле C_v – это теплоемкость газа при постоянном объеме.

Таким образом, учет поправки $h^{(1)}$ к функции распределения позволяет вместо уравнений (3.136) – (3.138) получить новую замкнутую систему гидродинамических уравнений баланса с перенормированным значением тензора напряжений и отличным от нуля потоком тепла. Перенормировка тензора напряжений связана с учетом необратимого (вязкого) переноса импульса в газе. Коэффициент μ называется коэффициентом вязкости среды, а коэффициент λ – коэффициентом теплопроводности. Важно отметить, что коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности не являются феноменологическими параметрами, а вычисляются из первых принципов.

В заключение отметим, что, хотя процедуру последовательного нахождения коэффициентов разложения функции (3.133) в методе Энскога – Чепмена можно и продолжить, вычислительные трудности приводят к тому, что получить поправки к функции распределения более высокого порядка, нежели второй, фактически не удастся. Не удастся также доказать и сходимость процедуры разложения (3.133) в общем виде. Поэтому, хотя метод Энскога – Чепмена широко используется на практике, сфера его применимости остается не до конца исследованной.

§ 15. Метод моментов

Наиболее универсальным методом, позволяющим в принципе замкнуть систему гидродинамических уравнений баланса при произвольных числах Кнудсена, является метод моментов. Рассмотренные выше гидродинамические переменные по существу являются моментами функции распределения:

$$n(\vec{r}, t) = M^{(0)} = \int f d\vec{p}, \quad (3.145)$$

$$nv_{0i}(\vec{r}, t) = M_i^{(1)} = \int \frac{p_i}{m} f d\vec{p}, \quad (3.146)$$

$$P_{ij}(\vec{r}, t) = m\mathcal{M}_{ij}^{(2)} = m \int c_i c_j f d\vec{p}, \quad (3.147)$$

$$q_i(\vec{r}, t) = \frac{m}{2}\mathcal{M}_{ijj}^{(3)} = \frac{m}{2} \int c_i c^2 f d\vec{p}. \quad (3.148)$$

В формулах (3.145) – (3.148) индексы i, j пробегают значения 1, 2, 3. Моменты \mathcal{M} называются центральными и определены для отклонений скорости относительно среднего значения. Моменты функции распределения M и центральные моменты \mathcal{M} очевидно связаны между собой и легко могут быть выражены друг через друга.

Основная идея метода моментов состоит в том, чтобы выразить функцию распределения через ее моменты

$$f(\vec{p}, \vec{r}, t) = f(\vec{p}, M^{(0)}, M^{(1)}, \dots), \quad (3.149)$$

где моменты $M^{(k)}$ являются функциями координат и времени. Тогда, подставив таким образом записанную функцию распределения в кинетическое уравнение Больцмана, получим систему уравнений для отыскания моментов функции распределения. В общем случае кинетическое уравнение Больцмана эквивалентно бесконечной системе уравнений для моментов, но в большинстве практически важных случаев можно ограничиться учетом нескольких первых моментов.

Впервые метод моментов для решения кинетического уравнения применил Грэд в 1949 г. Следуя Грэду, разложим функцию распределения в ряд по трехмерным полиномам Эрмита:

$$f = f^{(0)} \left(a^{(0)} H^{(0)} + a_i^{(1)} H_i^{(1)} + \frac{1}{2!} a_{ij}^{(2)} H_{ij}^{(2)} + \frac{1}{3!} a_{ijk}^{(3)} H_{ijk}^{(3)} + \dots \right). \quad (3.150)$$

В этой формуле коэффициенты разложения $a_{i,j,\dots}^{(N)}$ являются функциями координат и времени. Полиномы Эрмита являются функциями безразмерной относительной скорости

$$\vec{\xi} = \frac{\vec{p} - m\vec{v}_0}{\sqrt{mk_B T}}$$

и их явный вид можно получить с помощью формулы

$$H_{ij\dots k}^{(N)} = (-1)^N \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{\partial^N}{\partial \xi_i \partial \xi_j \dots \partial \xi_k} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \quad (3.151)$$

Используя формулу (3.151), легко вычислить явный вид полинома Эрмита любого порядка. На практике требуются лишь полиномы низших порядков, часть из которых приведена ниже:

$$\begin{aligned} H^{(0)} &= 1, \quad H_i^{(1)} = \xi_i, \quad H_{ij}^{(2)} = \xi_i \xi_j - \delta_{ij}, \\ H_{ijk}^{(3)} &= \xi_i \xi_j \xi_k - (\xi_i \delta_{jk} + \xi_j \delta_{ik} + \xi_k \delta_{ij}). \end{aligned} \quad (3.152)$$

Из определения полиномов Эрмита (3.151) следует, что все полиномы, различающиеся перестановкой индексов, тождественно равны. Полиномы Эрмита (3.151) ортогональны с некоторой весовой функцией

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_\alpha^{(n)} H_\beta^{(m)} d\vec{\xi} = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.153)$$

Функция $f^{(0)}$ в формуле (3.150) определена соотношением

$$f^{(0)} = \frac{n}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \quad (3.154)$$

Коэффициенты разложения, пользуясь ортогональностью полиномов Эрмита, можно выразить через гидродинамические параметры или моменты функции распределения:

$$a_\alpha^{(N)} = \frac{(m k_B T)^{3/2}}{n(\vec{r}, t)} \int f H_\alpha^{(N)} d\vec{\xi}. \quad (3.155)$$

Приведем явные выражения для нескольких первых коэффициентов разложения:

$$\begin{aligned} a^{(0)} = M^{(0)} &= 1, \quad a_i^{(1)} = \mathcal{M}_i^{(1)} = 0, \quad a_{ij}^{(2)} = \frac{P_{ij} - p\delta_{ij}}{p}, \\ a_{ijk}^{(3)} &= \frac{m \mathcal{M}_{ijk}^{(3)}}{p} \sqrt{\frac{m}{k_B T}}. \end{aligned} \quad (3.156)$$

Поскольку коэффициенты разложения $a_\alpha^{(N)}$ выражаются через моменты функции распределения, а те, в свою очередь,

представляют собой интересующие нас гидродинамические величины, то проблема нахождения гидродинамических уравнений баланса в методе моментов сводится к проблеме нахождения уравнений для коэффициентов разложения (3.150). Уравнения движения коэффициентов $a_\alpha^{(N)}$ можно найти, используя кинетическое уравнение Больцмана. Для этого нужно подставить функцию распределения (3.150) в кинетическое уравнение, умножить обе части уравнения на соответствующий полином Эрмита с весовой функцией и проинтегрировать по относительной скорости. Условие ортогональности полиномов Эрмита позволяет существенно ограничить число членов в каждом из уравнений. Хотя эта процедура представляется достаточно простой, она чрезвычайно громоздкая, и мы опустим вывод этих уравнений, отсылая читателя к специальной литературе [25].

С практической точки зрения, желательно получить уравнения для тех моментов (гидродинамических величин), которые поддаются измерению и имеют ясный физический смысл. Как отмечалось выше, таких моментов 13: концентрация n , три компоненты дрейфовой скорости v_{0i} , температура T , шесть компонент симметричного тензора напряжений p_{ij} и три компоненты потока тепла q_i . Для получения гидродинамических уравнений для этих переменных достаточно аппроксимировать функцию распределения (3.150) выражением

$$f = f^{(0)} \left(1 + \frac{1}{2} a_{ij}^{(2)} H_{ij}^{(2)} + \frac{1}{10} a_{ijj}^{(3)} H_{ikk}^{(3)} \right), \quad (3.157)$$

оставив в ней всего три первых члена разложения. Эта аппроксимация функции распределения известна в литературе как тринадцатимоментное приближение Грэда. Результаты, полученные в этом приближении, полностью согласуются с результатами Энскога – Чепмена. Полный вывод гидродинамических уравнений, соответствующих тринадцатимоментному приближению Грэда, можно найти в упоминавшейся монографии [25].

Следует отметить, что в методе моментов аппроксимация функции распределения с помощью некоторой комбинации гидродинамических параметров может быть фактически произвольной. Конкретный вид аппроксимирующей функции зависит от поставленной задачи и особенностей изучаемого физического явления. В следующей главе метод моментов будет применен для получения замкнутых гидродинамических уравнений для системы горячих электронов в проводящих кристаллах.

Глава 4

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ В ПРОВОДЯЩИХ КРИСТАЛЛАХ

4.1. Кинетические коэффициенты в приближении времени релаксации

§ 1. Кинетическое уравнение для электронов и его решение в приближении времени релаксации

Рассмотрим простейшую модель проводника, согласно которой носителями тока являются квазисвободные электроны или дырки, взаимодействующие в результате процессов столкновения с дефектами кристаллической решетки или фононами. Для простоты будем предполагать, что закон дисперсии электронов (дырок) является параболическим и имеет вид

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m}, \quad (4.1)$$

где \vec{p} – вектор импульса носителей тока, m – их масса. Предположение о параболическом характере закона дисперсии не является принципиальным для рассматриваемой в этой главе элементарной теории кинетических явлений. Все результаты могут быть обобщены на случай сферически-симметричной зоны проводимости, когда энергия электронов произвольным образом зависит от модуля волнового вектора \vec{k} .

В состоянии термодинамического равновесия свойства электронного газа определяются функцией распределения Ферми – Дирака

$$f_0(\varepsilon_{\vec{p}}) = \left\{ \exp\left(\frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{k_B T}\right) + 1 \right\}^{-1}, \quad (4.2)$$

где k_B – постоянная Больцмана.

В неравновесном случае также можно ввести неравновесную функцию распределения $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$, зависящую от координат \vec{r} , импульса \vec{p} и времени t и удовлетворяющую условию нормировки

$$\sum_{\sigma} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} d\vec{r} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = n, \quad (4.3)$$

где σ нумерует проекцию спина электрона на ось Z ($\sigma = \pm 1/2$), n – число электронов в образце. В дальнейшем везде объем образца будет полагаться равным единице и величина n будет иметь смысл концентрации электронов. Множитель

$$\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi\hbar)^3}$$

имеет смысл плотности числа электронов в импульсном пространстве. Его появление в формуле (4.3) связано с тем, что состояния электронов квантованы:

$$p_x = \pm \frac{2\pi\hbar n_1}{L_x}, \quad p_y = \pm \frac{2\pi\hbar n_2}{L_y}, \quad p_z = \pm \frac{2\pi\hbar n_3}{L_z},$$

где n_1, n_2, n_3 – целые числа, пробегающие значения от нуля до бесконечности. Поэтому при подсчете числа состояний в формуле (4.3) необходимо вести суммирование по дискретным состояниям электронов, различающихся значениями компонент импульса. Поскольку суммирование по дискретным состояниям значительно усложняет вычисления, суммирование обычно заменяют интегрированием, умножив интеграл на размерный коэффициент, имеющий смысл плотности состояний в импульсном пространстве. Из формулы (4.3) следует, что выражение

$$\frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} d\vec{p} d\vec{r} f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

имеет смысл числа электронов с импульсом \vec{p} , координатой \vec{r} , попавших в элемент фазового объема $d\vec{p} d\vec{r}$ в момент времени t .

Если предположить, что электроны являются невзаимодействующими частицами, то каждый электрон можно рассматривать как изолированную систему. Фазовые точки, соответствующие возможным различным состояниям частицы, просто перемещаются из одной области фазового пространства в другую, не исчезая и не возникая вновь, поскольку процессы с рождением и уничтожением частиц здесь не рассматриваются. Схематически картина движения фазовых точек изображена на рис. 25.

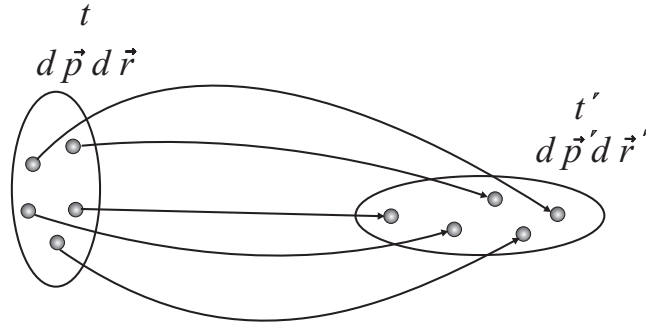


Рис. 25. Схема перемещения фазовых точек в фазовом пространстве

Каждая фазовая точка из области фазового пространства $d\vec{p} d\vec{r}$ в момент t переместится в момент t' в некоторую область $d\vec{p}' d\vec{r}'$, как показано на рис. 25. Поэтому можно записать равенство

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} d\vec{r} = f(\vec{r}', \vec{p}', t') d\vec{p}' d\vec{r}'. \quad (4.4)$$

Как уже отмечалось в § 8 предыдущей главы, согласно теореме Лиувилля, фазовый поток сохраняет фазовый объем системы, и поэтому имеет место равенство $d\vec{p} d\vec{r} = d\vec{p}' d\vec{r}'$. Тогда из формулы (4.4) следует важный результат

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f(\vec{r}', \vec{p}', t'), \quad (4.5)$$

согласно которому неравновесная функция распределения невзаимодействующих электронов является интегралом движения и ее полная производная по времени должна быть равна нулю. Если все-таки взаимодействие существует, то полная производная равна не нулю, а изменению функции распределения за

счет взаимодействия (столкновений) с рассеивателями, например дефектами кристаллической решетки или фононами. Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \dot{\vec{p}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}}. \quad (4.6)$$

Левая часть выражения (4.6) описывает изменение функции распределения за счет эволюции в фазовом пространстве, а правая – изменение функции распределения за счет столкновений. В общем случае, как это следует из материала, изложенного в предыдущей главе, столкновительный член в правой части (4.6) является нелинейным функционалом, ядро которого содержит функцию распределения и зависит от конкретного механизма взаимодействия электронов с подсистемами кристалла. Уравнение (4.6) представляет собой кинетическое уравнение для подвижных носителей заряда (электронов или дырок) в квазиклассическом приближении. Условия применимости квазиклассического описания движения электронов в кристалле будут рассмотрены позднее.

Как отмечалось выше, попытка строгого решения кинетического уравнения даже для простейших потенциалов взаимодействия наталкивается на серьезные вычислительные трудности. Однако хорошо известно, что многие особенности кинетических явлений в металлах и полупроводниках можно понять в рамках приближения времени релаксации, когда интеграл столкновений аппроксимируется выражением

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \frac{f - f_0}{\tau_{\vec{p}}}. \quad (4.7)$$

Поэтому знакомство с теорией явлений переноса в проводящих кристаллах начнем, основываясь на этом простейшем приближении.

Для дальнейшего упрощения кинетического уравнения (4.6) заметим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} &\simeq \omega f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) \ll \frac{f_1(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\tau_{\vec{p}}}, \\ f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) &= f(\vec{r}, \vec{p}, t) - f_0(\varepsilon_{\vec{p}}). \end{aligned} \quad (4.8)$$

В выражении (4.8) $f_1(\vec{r}, \vec{p}, t)$ является поправкой к равновесной функции распределения, которая возникает за счет действия внешних термодинамических сил. Вплоть до частот оптического диапазона параметр $\omega\tau_{\vec{p}} \ll 1$, и поэтому в кинетическом уравнении (4.6) производную по времени можно опустить. Иначе говоря, поскольку время релаксации импульса достаточно мало ($\tau_{\vec{p}} \simeq 10^{-13} \text{ с}$), электронная система успевает подстраиваться к изменяющемуся с частотой ω внешнему полю и переменное поле в каждый момент времени можно рассматривать как статическое. Это означает, что если не рассматривать эффекты в высокочастотном электрическом поле, то можно пренебречь явной зависимостью от времени неравновесной функции распределения и опустить частную производную по времени в кинетическом уравнении (4.6).

Еще одно существенное упрощение связано с тем, что в локально-равновесном состоянии неравновесная функция распределения будет зависеть от координат только параметрически, через зависимость от координат термодинамических параметров, таких как температура и химический потенциал

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = \frac{\partial f}{\partial T} \vec{\nabla} T + \frac{\partial f}{\partial \zeta} \vec{\nabla} \zeta. \quad (4.9)$$

Если ограничиться в кинетическом уравнении (4.6) линейным приближением по термодинамическим силам $\vec{\nabla} T$, $\vec{\nabla} \zeta$, считая неравновесность слабой ($f_0 \gg f_1$), то в правой части выражения (4.9) неравновесную функцию распределения можно заменить равновесной функцией $f_0(\varepsilon_{\vec{p}})$, и в результате несложных вычислений получаем

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \left[\vec{\nabla} \zeta + \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right]. \quad (4.10)$$

При наличии внешнего электрического поля, задаваемого вектором напряженности \vec{E} , и магнитного поля с индукцией \vec{H}

$$\dot{\vec{p}} = e\vec{E} + \frac{e}{c}[\vec{v} \times \vec{H}]. \quad (4.11)$$

Поэтому в линейном приближении по термодинамическим силам (магнитное поле в данном случае термодинамической силой, вызывающей отклонение от состояния равновесия, не является) имеем

$$\dot{\vec{p}} \vec{\nabla}_{\vec{p}} f = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} e \vec{v} \vec{E} + \vec{\nabla}_{\vec{p}} f_1 \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]. \quad (4.12)$$

При получении результата (4.12) мы учли, что $\vec{\nabla}_{\vec{p}} f_0 \sim \vec{v}$ и поэтому вклад

$$\vec{\nabla}_{\vec{p}} f_0 \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}] = 0,$$

поскольку $\vec{v} [\vec{v} \times \vec{H}] = 0$.

Подставляя результаты (4.7), (4.10), (4.12) в кинетическое уравнение (4.6), получаем

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \vec{v} \left(e \vec{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right) = \frac{f_1}{\tau_{\vec{p}}} + \vec{\nabla}_{\vec{p}} f_1 \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]. \quad (4.13)$$

В том случае, когда магнитное поле равно нулю, выражение (4.13) сразу позволяет определить поправку к функции распределения f_1 , линейную по градиенту электрохимического потенциала $\vec{\varepsilon} = -\vec{\nabla}(\varphi + 1/e \zeta)$ (1.14) и градиенту температуры T :

$$f_1 = \tau_{\vec{p}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \vec{v} \left(e \vec{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right). \quad (4.14)$$

Если магнитное поле не равно нулю, то для решения уравнения (4.13) будем искать поправку f_1 в виде

$$f_1 = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} (\vec{v} \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})), \quad (4.15)$$

где $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})$ — неизвестная векторная функция, зависящая только от энергии.

Вычислим градиент в импульсном пространстве от функции f_1 . Пользуясь определением (4.15), получаем

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_{\vec{p}} f_1 &= -\frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}^2} \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})) - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \vec{\nabla}_{\vec{p}} (\vec{v} \cdot \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})), \\ \vec{\nabla}_{\vec{p}} (\vec{v} \cdot \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})) &= v_i \vec{\nabla}_{\vec{p}} \chi_i(\varepsilon_{\vec{p}}) + \chi_i(\varepsilon_{\vec{p}}) \vec{\nabla}_{\vec{p}} v_i, \\ \vec{\nabla}_{\vec{p}} \chi_i(\varepsilon_{\vec{p}}) &= \frac{\partial \chi_i(\varepsilon_{\vec{p}})}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \vec{v}, \quad \chi_i(\varepsilon_{\vec{p}}) \vec{\nabla}_{\vec{p}} v_i = \frac{\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})}{m}.\end{aligned}\quad (4.16)$$

Подставляя полученные результаты в последнее слагаемое в правой части (4.13) и учитывая, что члены, пропорциональные вектору скорости \vec{v} , вклада не дадут, получаем простое выражение

$$\vec{\nabla}_{\vec{p}} f_1 \frac{e}{c} [\vec{v} \times \vec{H}] = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \omega_0 \vec{v} [\vec{h} \times \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})]. \quad (4.17)$$

При выводе формулы (4.17) мы воспользовались определением частоты ларморовской прецессии ω_0 электронов в магнитном поле

$$\omega_0 = \frac{eH}{mc}, \quad (4.18)$$

ввели единичный вектор \vec{h} , ориентированный вдоль направления вектора индукции магнитного поля ($\vec{H} = \vec{h} H$), H – модуль вектора индукции магнитного поля, и переставили порядок векторов в векторно-скалярном произведении.

Подставляя результаты (4.15), (4.17) в формулу (4.13) и производя необходимые сокращения, получаем векторное уравнение для определения функции $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})$

$$\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}}) + [\vec{a} \times \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})] = \vec{b}; \quad (4.19)$$

$$\vec{a} = \omega_0 \tau_{\vec{p}} \vec{h}; \quad \vec{b} = \tau_{\vec{p}} \left(e\vec{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right). \quad (4.20)$$

Для решения уравнения (4.19) умножим его один раз скалярно, а второй раз векторно на вектор \vec{a} . В результате простых

алгебраических преобразований можно выразить вектор $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})$ через векторы \vec{a} и \vec{b} :

$$\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}}) = \frac{\vec{b} + \vec{a} (\vec{a} \vec{b}) - [\vec{a} \times \vec{b}]}{1 + a^2}. \quad (4.21)$$

Для получения более удобной структуры решения воспользуемся тождеством

$$\vec{b} = \frac{1}{a^2} \{ \vec{a} (\vec{a} \vec{b}) - [\vec{a} \times [\vec{a} \times \vec{b}]] \} \quad (4.22)$$

и подставим это выражение для \vec{b} в решение (4.21). В результате получаем представление для функции $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}})$, выраженное через векторы \vec{a} и \vec{b} :

$$\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}}) = \frac{1}{a^2} \vec{a} (\vec{a} \vec{b}) - \frac{[\vec{a} \times \vec{b}] + 1/a^2 [\vec{a} \times [\vec{a} \times \vec{b}]]}{1 + a^2}. \quad (4.23)$$

Наконец, учитывая явный вид векторов \vec{a} и \vec{b} и подставляя их значения (4.20) в формулу (4.23), получаем

$$\begin{aligned} \vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{p}}) = e\tau_{\vec{p}} \left\{ (\vec{h} \vec{\varepsilon}) \vec{h} - \frac{\omega_0 \tau_{\vec{p}} [\vec{h} \times \vec{\varepsilon}] + [\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\varepsilon}]]}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \right\} + \\ + \tau_{\vec{p}} \frac{\zeta - \varepsilon_{\vec{p}}}{T} \left\{ (\vec{h} \vec{\nabla} T) \vec{h} - \frac{\omega_0 \tau_{\vec{p}} [\vec{h} \times \vec{\nabla} T] + [\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\nabla} T]]}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Формулы (4.14), (4.15), (4.24) будут использованы в дальнейшем для определения потоков заряда и тепла и вычисления кинетических коэффициентов, определяющих термомагнитные и гальваномагнитные явления в проводящих кристаллах.

§ 2. Условия применимости квазиклассического описания электронов в проводящих кристаллах

Записанное в предыдущем разделе кинетическое уравнение (4.6), (4.13) является квазиклассическим. Поскольку хорошо известно, что электроны в кристалле – это квантовые объекты и есть достаточно много убедительных эффектов (например дифракция электронов в кристаллах), в которых квантовые свойства электронов наглядно проявляются, встает вопрос о применимости такого описания. В действительности квазиклассическое описание накладывает некоторые ограничения на условия проведения физического эксперимента, но можно показать, что для большинства реальных ситуаций, в которых производится измерение кинетических явлений в твердых телах, применение квазиклассического описания вполне оправданно. Ниже сформулированы основные условия применимости квазиклассического кинетического уравнения для описания кинетических явлений в проводящих кристаллах при наличии постоянного внешнего магнитного поля и без него.

Эти условия приводят к трем основным ограничениям.

Во-первых, длина волны электрона λ должна быть меньше других характерных пространственных масштабов задачи, что позволяет рассматривать электрон как точечный объект. В отсутствие магнитного поля естественным параметром размерности длины является длина свободного пробега l . Поэтому квазиклассическое описание возможно, если

$$\lambda \ll l.$$

Во-вторых, неопределенность в энергии электрона ΔE , которая является следствием квантово-механического принципа неопределенности, должна быть малой по сравнению со средней энергией электрона $\bar{\varepsilon}$ (средняя энергия $\bar{\varepsilon} \simeq k_B T$ для невырожденного случая и $\bar{\varepsilon} \simeq \zeta$ в условиях вырождения)

$$\frac{\hbar}{\tau_0} \ll \bar{\varepsilon},$$

где τ_0 – характерное время взаимодействия электрона с другими подсистемами кристалла. Поэтому время характерного взаимодействия электронов с рассеивателями τ_0 должно быть достаточно большим. В этом случае столкновительное уширение энергетических уровней можно считать пренебрежимо малым и температура будет единственным параметром, хаотизирующим движение носителей заряда. Это условие служит основанием для описания электронной системы на языке функции распределения. Вместе с тем характерное время столкновений должно быть существенно меньше, чем время между двумя последовательными столкновениями, поскольку каждое из них рассматривается как независимый процесс и считается, что после каждого столкновения в системе успевает сформироваться неравновесное распределение. Поэтому в качестве верхней оценки времени τ_0 можно взять время между двумя последовательными столкновениями и считать, что $\tau_0 \approx \tau_{\vec{p}}$. Это тем более оправданно, поскольку величина τ_p легко поддается экспериментальной оценке. В этом случае условие

$$\frac{\hbar}{\tau_0} \approx \frac{\hbar}{\tau_{\vec{p}}} \ll \bar{\varepsilon}$$

по существу сводится к условию $\lambda \ll l$. В этом легко убедиться, если предыдущее условие записать в виде

$$\frac{\bar{v}\hbar}{\bar{\varepsilon}} \ll \bar{v}\tau_{\vec{p}},$$

умножив левую и правую часть неравенства на среднюю скорость электронов \bar{v} . Тогда в левой части неравенства стоит величина $\hbar/p \approx \lambda$, а в правой – длина свободного пробега $l = \bar{v}\tau_{\vec{p}}$. Таким образом, первое и второе ограничения в отсутствие магнитного поля приводят к одному и тому же условию $\lambda \ll l$.

Еще одно ограничение возникает в том случае, когда электрон находится в области действия внешних силовых полей. В этом случае, если электрон рассматривается как точечный объект, изменение его энергии на длине порядка длины волны де Бройля должно быть много меньше средней энергии электрона. Иначе говоря, если, например, рассматривать движение электрона во внешнем электрическом поле, то должно выполняться условие $\lambda eE \ll \bar{\varepsilon} \simeq k_B T$ для невырожденного случая.

Это ограничение не является очень существенным, поскольку простые оценки дают ограничение $E < 10^6$ В/м, что вполне приемлемо для большинства экспериментальных ситуаций.

Рассмотрим условия применимости кинетического уравнения для описания неравновесных носителей тока в магнитном поле. В этом случае имеется три характерных параметра размерности длины: l_H , так называемая «магнитная длина» — характерный размер ларморовской орбиты электрона

$$l_H = \left(\frac{\hbar c}{eH} \right)^{1/2},$$

длина волны электрона де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\bar{\varepsilon}}}$$

и длина свободного пробега электронов между двумя последовательными столкновениями l .

В этих условиях первым критерием квазиклассического описания является условие

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\bar{\varepsilon}}} \ll \left(\frac{\hbar c}{eH} \right)^{1/2}.$$

Полагая в этом выражении $\bar{\varepsilon} \simeq k_B T$, получаем хорошо известное в литературе условие применимости квазиклассического описания электронов в магнитном поле:

$$\hbar\omega_0 \ll k_B T. \quad (4.25)$$

Это условие допускает простую интерпретацию: при квазиклассическом описании расстояния между квантованными уровнями энергии электронов в магнитном поле должны быть малыми, по сравнению со средней энергией теплового движения электронов.

Другое условие применимости кинетического уравнения в магнитном поле также связано с влиянием магнитного поля на орбитальное движение электронов. Расстояние между уровнями Ландау в магнитном поле $\hbar\omega_0$ должно быть существенно

меньше столкновительного уширения уровня $\sim \hbar/\tau_{\vec{p}}$, вызванного рассеянием электронов на дефектах кристаллической решетки или фононах. Это условие обычно записывают в виде

$$\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1. \quad (4.26)$$

Условие (4.26) может иметь и другую интерпретацию: для того чтобы квазиклассическое описание было применимо, необходимо, чтобы электрон, двигаясь по циклотронной орбите, между двумя актами рассеяния успевал пройти лишь малую часть периода T круговой траектории

$$T \simeq \frac{2\pi l_H}{\bar{v}}, \quad \frac{2\pi}{T} = \omega_0, \quad \frac{l_H}{\bar{v}} = \frac{1}{\omega_0}.$$

В этой формуле \bar{v} – в вырожденном случае скорость электрона на поверхности Ферми (в невырожденном случае эту величину следует заменить на среднюю тепловую скорость). Поскольку время релаксации импульса

$$\tau_{\vec{p}} \simeq \frac{l}{\bar{v}},$$

условие $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$ может быть записано также в виде $l_H \gg l$. Иначе говоря, радиус циклотронной орбиты должен быть много больше длины свободного пробега электрона.

Полученные неравенства позволяют выделить три области изменения внешнего магнитного поля: слабые поля, сильные поля и квантующие магнитные поля.

Если выполняются неравенства $l_H \gg l$ или, что эквивалентно, $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$, то магнитные поля называются слабыми.

Если выполняются обратные неравенства, то магнитные поля называются сильными. В этом случае магнитное поле существенно искривляет траекторию движения электронов, но если его влияние можно не учитывать при расчете вероятностей рассеяния, то и в случае сильных магнитных полей даже в условиях $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \gg 1$ кинетическое уравнение применимо для описания кинетических явлений в магнитном поле. Естественно, что условие $\lambda \ll l$ должно оставаться справедливым.

При дальнейшем увеличении магнитного поля нарушается условие (4.25) и магнитное поле становится квантующим.

В этом случае спектр носителей заряда в магнитном поле полностью перестраивается и влияние магнитного поля следует учитывать не только при анализе орбитального движения электронов, но и при расчете вероятностей рассеяния в каждом элементарном акте столкновений.

§ 3. Определение потоков заряда и тепла. Вычисление кинетических коэффициентов в случае $H = 0$

Обобщая простейшее выражение для потока заряженных частиц $\vec{J} = e n \vec{v}$, где n – число частиц, имеющих скорость \vec{v} , для плотности потока заряда и тепла получаем выражения

$$\vec{J} = \sum_{\sigma} \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} f(\vec{p}) \vec{v}, \quad (4.27)$$

$$\vec{J}_Q = \sum_{\sigma} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta) f(\vec{p}) \vec{v}. \quad (4.28)$$

Суммирование по спиновому квантовому числу в формулах (4.27), (4.28) дает численный множитель, равный двум, так как мы не учитываем спиновое расщепление уровней. При записи выражения (4.28) мы учли определение (1.12).

Из физических соображений легко понять, что в формулах (4.27), (4.28) отличный от нуля вклад дает только неравновесная поправка к функции распределения $f_1(\vec{p})$, определяемая выражением (4.14) в отсутствие магнитного поля и выражениями (4.15), (4.24) при наличии внешнего магнитного поля.

Рассмотрим сначала кинетические явления в отсутствие внешнего магнитного поля. В этом случае кинетические коэффициенты являются скалярными величинами. Тогда, подставляя выражение (4.14) в формулы, определяющие поток заряда и тепла, имеем

$$\vec{J} = e^2 K_0 \vec{\varepsilon} - \frac{e}{T} K_1 \vec{\nabla} T, \quad (4.29)$$

$$\vec{J}_Q = e K_1 \vec{\varepsilon} - \frac{1}{T} K_2 \vec{\nabla} T, \quad (4.30)$$

где интегралы K_l , $l = 0, 1, 2$, определены соотношением

$$K_l = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{3} \int d\vec{p} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \tau_{\vec{p}} v^2 (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l. \quad (4.31)$$

При выводе формул (4.29) – (4.31) мы учли, что для произвольной функции модуля квазиимпульса электронов $\Phi(\varepsilon_{\vec{p}})$ справедливо представление

$$\int d\vec{p} \Phi(\varepsilon_{\vec{p}}) v_i v_j = \frac{1}{3} \int d\vec{p} \Phi(\varepsilon_{\vec{p}}) v^2 \delta_{ij},$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, $i, j = x, y, z$.

Сравнивая формулы (4.29), (4.30) с соответствующими феноменологическими результатами (1.15), (1.35), (1.36), получаем выражение кинетических коэффициентов, определяющих явления теплоэлектропроводности и термоэлектрические явления через введенные выше интегралы K_l :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{e^2 K_0}, \quad \alpha = \frac{K_1}{e T K_0}, \\ \tilde{\kappa} &= \frac{K_2 K_0 - K_1^2}{T K_0}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Таким образом, для вычисления этих кинетических коэффициентов необходимо вычислить интегралы K_l (4.31). Переходя к интегрированию по энергии в формуле (4.31), после выполнения интегрирования по полярному и азимутальному углам в сферической системе координат имеем

$$K_l = \frac{2 (2m)^{1/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \tau_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}}^{3/2} (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)^l. \quad (4.33)$$

Интегралы по энергии, содержащие функцию Ферми или ее производные, могут быть сведены к так называемым интегралам Ферми $F_p(\zeta/k_B T)$ индекса p :

$$F_p\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right) = \int_0^\infty \frac{x^p}{\exp(x - \zeta/k_B T) + 1} dx, \quad (4.34)$$

зависящим от параметра $\zeta/k_B T$, для которых хорошо известны различные асимптотические представления [8]. Общие выражения, которые получаются при этом, оказываются достаточно громоздкими, и поэтому мы рассмотрим лишь два предельных случая, для которых легко получаются простые оценки.

Случай сильного вырождения

В этом случае $\zeta > 0$, $\zeta/k_B T \gg 1$ и производная по энергии от функции распределения имеет резкий максимум при $\varepsilon_{\vec{p}} = \zeta$. На рис. 26 представлена зависимость функции Ферми – Дирака

$$f_0(x) = \frac{1}{e^x + 1}, \quad x = \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{k_B T}$$

и ее первой производной от безразмерного параметра x .

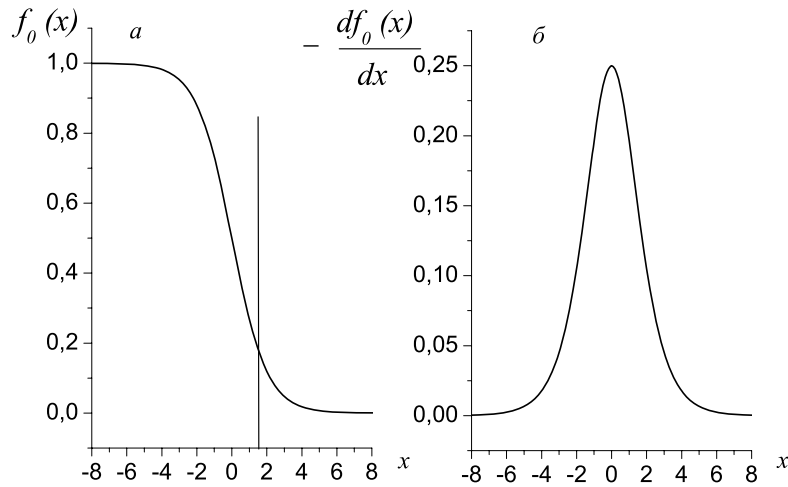


Рис. 26. Графики функция распределения Ферми – Дирака и ее производной:

a – функция распределения Ферми – Дирака $f_0(x)$ в зависимости от аргумента $x = (\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)/k_B T$; b – производная функции распределения $\left(-\frac{\partial f_0(x)}{\partial x}\right)$ в зависимости от того же аргумента

Как следует из рис. 26 b , производная от функции распределения отлична от нуля лишь в небольшом интервале энергий $\varepsilon_{\vec{p}} \simeq k_B T$. Эта особенность производной функции распределения широко используется для построения приближенных формул вычисления интегралов, содержащих в качестве подынтегральной функции произведение гладкой функции $\Phi(\varepsilon_{\vec{p}})$ и производной от функции распределения Ферми – Дирака по

энергии $\varepsilon_{\vec{p}}$. Простейшей аппроксимацией является замена производной от функции распределения дельта-функцией Дирака

$$-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \simeq \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta).$$

В общем случае строится разложение подынтегральной функции по малому параметру $k_B T / \zeta$ [26]. Как правило, достаточно удержать два первых члена разложения

$$\int_0^\infty d\varepsilon_{\vec{p}} \Phi(\varepsilon_{\vec{p}}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \simeq \Phi(\zeta) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{\partial^2 \Phi(\varepsilon_{\vec{p}})}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}^2} \right|_{\varepsilon_{\vec{p}}=\zeta} + \dots \quad (4.35)$$

Производя простые вычисления с использованием формул (4.33), (4.35) и оставляя первые не исчезающие члены по малому параметру $k_B T / \zeta$, получаем

$$\begin{aligned} K_0 &= \frac{n}{m} \tau_{\vec{p}}(\zeta), \quad K_2 = \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 K_0, \\ K_1 &= \frac{\pi^2}{3} \frac{n}{m} \frac{(k_B T)^2}{\zeta} \left[\zeta \frac{\partial \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{\partial \zeta} + \frac{3}{2} \tau_{\vec{p}}(\zeta) \right]. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Для практического применения формул (4.36) необходимо знать численное значение и вид функциональной зависимости времени релаксации импульса от энергии $\tau_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}})$. Обычно эту зависимость считают степенной:

$$\tau_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}}) = \tau_0 (\varepsilon_{\vec{p}} / k_B T)^r,$$

где r — показатель рассеяния, значение которого зависит от конкретного механизма релаксации импульса электрона, τ_0 — размерный множитель, величина которого зависит от механизма рассеяния и температуры. Конкретные значения величин τ_0 и r для различных механизмов рассеяния можно найти в монографиях [8, 26, 27].

Выражения для кинетических коэффициентов в пределе сильного вырождения легко могут быть получены, если выражения для интегралов K_l (4.36) подставить в формулы (4.32):

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{e^2 n}{m} \tau_{\vec{p}}(\zeta), \quad (4.37)$$

$$\alpha = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} \frac{k_B T}{\zeta} (3/2 + r), \quad (4.38)$$

$$\tilde{\kappa} \simeq \kappa = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \frac{n}{m} \tau_{\vec{p}}(\zeta). \quad (4.39)$$

При выводе последнего соотношения мы учли, что $K_0 K_2 \gg K_1^2$.

Полученные результаты (4.37) – (4.39) качественно правильно описывают поведение электропроводности σ , дифференциальной термоэдс α и теплопроводности $\tilde{\kappa}$ в нормальных металлах и сильновырожденных полупроводниках. Мы не приводим здесь значения термоэлектрических коэффициентов, характеризующих явления Пельтье и Томсона, поскольку, как показано в главе 1, они выражаются в изотропном случае через коэффициент дифференциальной термоэдс. Оценим порядок величины дифференциальной термоэдс α , используя формулу (4.38)

$$\alpha \simeq \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} \frac{k_B T}{\zeta} \simeq 10^{-8} T \quad (\text{В/К}), \quad (4.40)$$

где температура T измеряется в градусах по шкале Кельвина. Эта оценка по порядку величины совпадает с известными экспериментальными данными для термоэдс большинства металлов ($\alpha = 3 \div 10$ мкВ/К). Существенные отклонения от формулы (4.38) могут возникать, например, при наличии магнитных примесей (эффект Кондо). Мы не будем останавливаться на этом интересном вопросе, отсылая читателей к специальной литературе [28, 30].

Другим важным результатом рассматриваемой теории является выполнение закона Видемана – Франца для коэффициентов σ и $\tilde{\kappa}$,

$$\tilde{\kappa} = \sigma T L, \quad L = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2},$$

который хорошо подтверждается на эксперименте при достаточно высоких температурах ($T \simeq 300\text{ K}$).

Задача 4.1

Используя выражение для поправки к функции распределения (4.14), дать качественное квантово-статистическое объяснение возникновения тока в проводнике при наличии внешнего электрического поля и градиента температуры.

Решение

Пусть имеется только внешнее электрическое поле, задаваемое вектором напряженности \vec{E} . До включения внешнего электрического поля равновесная функция распределения была сферически симметричной и зависела только от модуля импульса $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. При включении внешнего электрического поля одно из направлений выделяется и функция распределения перестает быть сферически симметричной. В стационарном неравновесном состоянии импульс электронов будет иметь добавку $\Delta \vec{p} = e\vec{E}\tau_{\vec{p}}$, связанную с действием внешнего электрического поля. В вырожденном случае участие в электропереносе, как следует из рис. 26 б, принимает лишь небольшой слой электронов шириной порядка $k_B T$ вблизи поверхности Ферми. Остальные электроны не могут ускоряться внешним электрическим полем, поскольку ближайшие энергетические состояния заняты. Поэтому и добавку к импульсу получают лишь электроны, лежащие на поверхности Ферми.

Рассмотрим для простоты направление, совпадающее с внешним электрическим полем. Электроны, двигающиеся в направлении электрического поля, тормозятся полем (электрон является отрицательно заряженной частицей) и на поверхности Ферми имеют меньшую скорость, нежели электроны, двигающиеся в противоположном направлении. Схематически эта ситуация изображена на рис. 27 а.

Таким образом, при включении электрического поля возникает группа электронов вблизи поверхности Ферми, движущаяся в направлении против поля, которая имеет дополнительную поправку к скорости $\Delta \vec{v} = |e|/m \vec{E} \tau_{\vec{p}}(\zeta)$. Аналогичная по численности группа электронов, движущаяся по полю, будет иметь меньшую скорость, что и приводит к появлению направленного движения электронов при включении электрического поля.

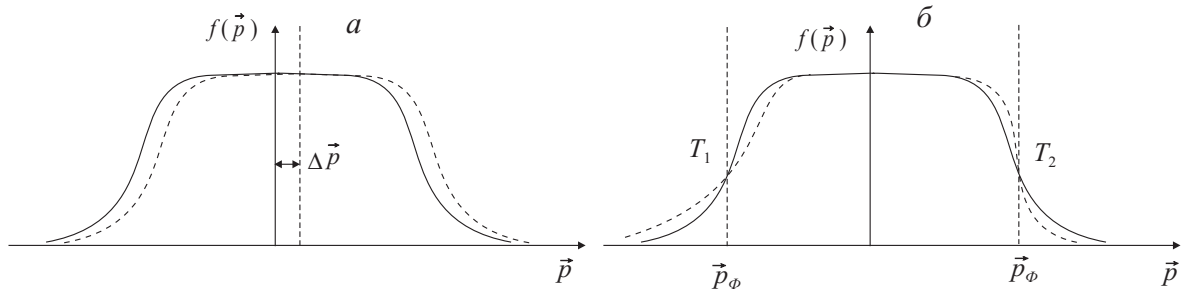


Рис. 27. Возникновение асимметрии функции распределения при наличии внешнего поля и градиента температуры:

a – смещение границы Ферми при наличии электрического поля на величину $\Delta \vec{p} = |e| \vec{E} \tau_{\vec{p}}(\zeta)$; b – изменение формы функции распределения вблизи уровня Ферми при наличии градиента температуры

Иначе говоря, включение постоянного электрического поля приводит к смещению Ферми-поверхности в импульсном пространстве на величину $\Delta \vec{p} = e \vec{E} \tau_{\vec{p}}$. Поэтому искажение функции распределения можно найти, если записать равновесное распределение в системе координат, сдвинутой на величину $\Delta \vec{p} = e \vec{E} \tau_{\vec{p}}(\zeta)$:

$$f_0(\varepsilon_{\vec{p}-e\vec{E}\tau_{\vec{p}}}) = f_0\left(\frac{(\vec{p}-e\vec{E}\tau_{\vec{p}})^2}{2m}\right) \simeq f_0\left(\frac{p^2}{2m} - e\vec{v} \cdot \vec{E}\tau_{\vec{p}}\right) = f_0 - e \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \vec{v} \cdot \vec{E} \tau_{\vec{p}}.$$

Последнее выражение в этой формуле и является поправкой к функции распределения при включении электрического поля. Хотя, как уже отмечалось, концепция сдвига поверхности Ферми в импульсном пространстве не является полностью корректной, она позволяет получить правильное выражение для поправки к функции распределения в электрическом поле.

Рассмотрим теперь влияние градиента температуры. Снова проанализируем движение электронов лишь вдоль одного направления, совпадающего с ориентацией градиента температуры. Тогда, если взять два сечения образца на расстоянии, меньшем, нежели длина свободного пробега, то электроны,двигающиеся из сечения с большей температурой T_1 , будут иметь равновесное распределение, соответствующее этой температуре, а электроны,двигающиеся от более холодного сечения, – равновесное распределение, соответствующее более низкой температуре T_2 . Схематически оба этих распределения изображены на рис. 27 б. Поскольку вклад в перенос дают только электроны из узкого энергетического слоя шириной несколько $k_B T$, то важно посмотреть, как меняется распределение по скоростям для этой группы электронов. На «горячем» сечении число электронов,

имеющих больший импульс, нежели импульс Ферми p_F , увеличилось по сравнению с их числом в условиях равновесия, а на «холодном» сечении, наоборот, уменьшилось. Это изменение формы распределения и приводит к появлению электрического тока при наложении градиента температуры. Приведенные выше рассуждения на «пальцах» позволяют получить и количественную оценку для кинетических коэффициентов, описывающих термоэлектрические явления.

Невырожденный электронный газ

В другом предельном случае невырожденного электронного газа, подчиняющегося статистике Максвелла – Больцмана, выполняются условия $\zeta < 0$, $|\zeta|/k_B T \gg 1$ и функция Ферми – Дирака аппроксимируется выражением

$$f_0(\varepsilon_{\vec{p}}) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{k_B T}\right). \quad (4.41)$$

Рассмотрим вычисление интегралов K_l в этом пределе. Используя выражение для интегралов K_l (4.33), с учетом (4.41) получаем

$$\begin{aligned} K_0 &= \frac{2 (2m)^{1/2} e^{\zeta/k_B T} (k_B T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \\ &= \frac{4n}{3\pi^{1/2} m} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x) = \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle, \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \tau_{\vec{p}}(x); \quad (4.43)$$

$$n = \frac{(2mk_B T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} e^{\zeta/k_B T}. \quad (4.44)$$

Совершенно аналогично вычисляются интегралы K_1 и K_2 .

Суммируя результаты, имеем

$$\begin{aligned} K_0 &= \frac{n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle, \\ K_1 &= \frac{n}{m} k_B T \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_B T) \rangle, \\ K_2 &= \frac{n}{m} (k_B T)^2 \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_B T)^2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Найдем выражения для интересующих нас кинетических коэффициентов. Для этого подставим значения интегралов K_l в определения (4.32). В результате получаем

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle, \quad (4.46)$$

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left(\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} - \frac{\zeta}{k_B T} \right), \quad (4.47)$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{n}{m} k_B^2 T \left(\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^2 \rangle - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} \right). \quad (4.48)$$

Рассмотрим теперь средние $\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle$, входящие в выражения для кинетических коэффициентов (4.46) – (4.48). Учитывая определение (4.43) и обычно используемую аппроксимацию $\tau_{\vec{p}}(x) = \tau_0 x^r$, эти средние можно записать в виде отношения гамма-функций

$$\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} \tau_0 x^{r+k+3/2} = \tau_0 \frac{\Gamma(r+k+5/2)}{\Gamma(5/2)}, \quad (4.49)$$

где $\Gamma(p)$ означает гамма-функцию, определенную обычным образом:

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^{p-1}, \quad \Gamma(5/2) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}.$$

Подставляя выражение (4.49) в определения кинетических коэффициентов для невырожденного случая (4.46) – (4.48), по-

лучаем

$$\rho^{-1} = \sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)}, \quad (4.50)$$

$$\alpha = \frac{k_B}{e} \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 1)}{\Gamma(5/2 + r)} - \frac{\zeta}{k_B T} \right] = \frac{k_B}{e} \left[\frac{5}{2} + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right], \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa} &= \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \left[\frac{\Gamma(5/2 + r + 2)}{\Gamma(5/2)} - \frac{\Gamma(5/2 + r + 1)^2}{\Gamma(5/2 + r) \Gamma(5/2)} \right] = \\ &= \frac{n}{m} k_B^2 T \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + r)}{\Gamma(5/2)} (5/2 + r). \end{aligned} \quad (4.52)$$

При получении формул (4.51), (4.52) было использовано известное соотношение, которому удовлетворяет гамма-функция $\Gamma(p + 1) = p \Gamma(p)$.

Сравнивая выражения (4.50) и (4.52), легко заметить, что, как и в случае сильного вырождения, электропроводность и электронная составляющая теплопроводности связаны соотношением Видемана – Франца

$$\tilde{\kappa} = \sigma T L, \quad L = \frac{k_B^2}{e^2} (5/2 + r).$$

Представляет интерес сравнить величину коэффициента дифференциальной термоэдс для сильновырожденного и невырожденного случаев. Сопоставляя формулы (4.38) и (4.51), можно заметить, что в условиях сильного вырождения электронного газа выражение для коэффициента дифференциальной термоэдс содержит дополнительный малый параметр $k_B T / \zeta \simeq 10^{-2}$. По этой причине термоэдс типичных металлов существенно меньше, нежели термоэдс в типичных полупроводниках.

Отметим также, что фигурирующий в формуле (4.51) заряд электрона e – отрицательная величина и поэтому коэффициент α является отрицательной величиной, если носители заряда – электроны. В случае дырочной проводимости выражение для коэффициента дифференциальной термоэдс (4.51) остается в силе, если величину e заменить на $|e|$ и вместо химического потенциала электронов ζ ввести химический потенциал дырки:

$$\zeta_p = -E_g - \zeta. \quad (4.53)$$

Таким образом, если носителями заряда являются дырки, то коэффициент термоэдс имеет положительный знак, что может быть использовано на эксперименте для определения типа носителей заряда в кристалле.

Мы привели выражения для кинетических коэффициентов в пределе сильного вырождения и в пределе невырожденной статистики. В принципе, имеются оценочные формулы для интегралов Ферми (4.34), которые дают погрешность, не превышающую 1,2% для актуальных значений индекса p при всех значениях $x = \zeta/k_B T$ [29].

Задача 4.2

Получить выражение коэффициента дифференциальной термоэдс для случая смешанной электронно-дырочной проводимости.

Решение

Рассмотрим простейший случай невырожденного собственного проводника с почти заполненной электронами валентной зоной. Если ширина запрещенной зоны E_g не очень велика, то электроны проводимости возникают в результате теплового возбуждения валентных электронов в зону проводимости. В валентной зоне при этом появляются пустые, не заполненные электронами состояния, которые принято называть дырками. Концепция дырок является удобной и существенно упрощает описание кинетических явлений, в которых принимают участие электроны валентной зоны. Рассмотрим вначале равновесные статистические свойства электронно-дырочной системы.

Электроны в зоне проводимости и валентной зоне являются единой совокупностью частиц и характеризуются единым термодинамическим потенциалом. Начало отсчета энергии для состояний электронов в валентной зоне и зоне проводимости выберем в нижней точке зоны проводимости. Принимая параболический закон дисперсии в зоне проводимости и валентной зоне, имеем

$$\varepsilon_c = \frac{p^2}{2m_c}, \quad \varepsilon_v = -E_g - \frac{p^2}{2m_v}, \quad (4.54)$$

где m_c и m_v – эффективные массы электронов в зоне проводимости и валентной зоне. Химический потенциал электронов можно найти из закона сохранения частиц: число электронов в зоне проводимости n должно совпадать с числом пустых мест p (дырок) в валентной зоне.

В результате в условиях равновесия получаем очевидное соотношение для определения химического потенциала

$$\sum_{\sigma, \vec{p}} \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_c - \zeta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = \sum_{\sigma, \vec{p}} \left\{ 1 - \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \right\}. \quad (4.55)$$

Преобразуем фигурную скобку в правой части выражения (4.55)

$$\left\{ 1 - \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \right\} = \left[\exp\left(\frac{-\varepsilon_v + \zeta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Для получения последнего результата мы использовали определение ε_v (4.54) и ввели обозначение ε_p для энергии и ζ_p для химического потенциала дырок

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m_v}, \quad \zeta_p = -E_g - \zeta.$$

Переходя в (4.55) от суммирования по квазиимпульсу к интегрированию по квазиимпульсу в сферической системе координат, а затем к интегрированию по безразмерной переменной $x = \varepsilon_c/k_B T$ для электронов и $x = \varepsilon_p/k_B T$ для дырок, получаем

$$n = \frac{(2m_c k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right), \quad p = \frac{(2m_v k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{-E_g - \zeta}{k_B T}\right), \quad (4.56)$$

$$F_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right) = \begin{cases} \int_0^{\zeta/k_B T} x^{1/2} dx = \frac{2}{3} \left(\frac{\zeta}{k_B T}\right)^{3/2}, \\ \int_0^\infty e^{\zeta/k_B T} e^{-x} x^{1/2} dx = e^{\zeta/k_B T} \Gamma(3/2). \end{cases} \quad (4.57)$$

Используя формулы (4.55) – (4.57), легко найти выражение для химического потенциала в собственном полупроводнике:

$$\zeta = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} \ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right). \quad (4.58)$$

Аналогично, используя концепцию дырок, можно получить выражение для равновесных термодинамических потенциалов и при наличии донорных и акцепторных примесных центров.

Рассмотрим теперь, как, используя концепцию дырок, можно найти вклад валентных электронов в электроперенос. Используя

формулу (4.27), запишем выражения для вклада электронов валентной зоны в электрический ток

$$\vec{J} = e \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) = |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} \left\{ 1 - f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) \right\}. \quad (4.59)$$

При записи второго равенства в выражении (4.58) мы учли, что вклад в электрический ток полностью заполненной валентной зоны равен нулю. Выражение в фигурной скобке последней формулы представляет собой функцию распределения дырок

$$\left\{ 1 - f\left(\frac{\varepsilon_v - \zeta}{k_B T}\right) \right\} = f\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right),$$

поэтому вклад в электрический ток валентных электронов можно представить как ток положительно заряженных квазичастиц, имеющих положительную массу (положительна вторая производная по импульсу от энергии квазичастиц $\varepsilon_p = p^2/2m$):

$$\vec{J} = |e| \sum_{\sigma, \vec{p}} \vec{v} f\left(\frac{\varepsilon_p - \zeta_p}{k_B T}\right). \quad (4.60)$$

При включении внешнего электрического поля и градиента температуры равновесная функция распределения дырок претерпевает искажения, которые можно определить тем же самым способом, что и искажения электронной функции распределения в задаче 4.1. Повторяя рассуждения, приведенные в задаче 4.1 для случая дырок, находим, что под действием электрического поля дырки будут иметь дрейфовую скорость, направленную вдоль электрического поля, и их вклад будет складываться с вкладом электронов, увеличивая результирующий электрический ток.

Искажения функции распределения, возникающие под действием градиента температуры для дырочной функции распределения, точно такие же, как и для электронной. Поэтому поток дырок, возникающий под действием градиента температуры, имеет то же направление, что и поток электронов. Суммируя эти результаты, можно записать феноменологическое уравнение для потока заряда в полупроводнике со смешанным типом проводимости при наличии электрического поля и градиента температуры

$$\vec{J} = (\sigma_n + \sigma_p) \vec{\varepsilon} - (\beta_n - \beta_p) \vec{\nabla} T, \quad (4.61)$$

которое является обобщением первого из уравнений системы феноменологических уравнений переноса (1.15) на случай смешанного типа проводимости; σ_n , σ_p и β_n , β_p – коэффициенты электропроводности и термоэлектрические коэффициенты электронной и дырочной подсистем. Пользуясь соотношениями (1.35) и (1.36), найдем выражение для поля \vec{E} в однородном проводнике

$$\vec{E} = \frac{1}{\sigma_n + \sigma_p} \vec{J} + \left[\frac{\beta_n}{\sigma_n + \sigma_p} - \frac{\beta_p}{\sigma_n + \sigma_p} \right] \vec{\nabla} T. \quad (4.62)$$

Вводя коэффициенты дифференциальной термоэдс электронов $\alpha_n = \sigma_n^{-1} \beta_n$ и дырок $\alpha_p = \sigma_p^{-1} \beta_p$ и учитывая, что для электронов коэффициент дифференциальной термоэдс определяется формулой (4.51) (аналогичную формулу следует написать и для дырок), получаем

$$\alpha = \frac{k_B}{e\sigma} \left[\sigma_n \left(5/2 + r - \frac{\zeta}{k_B T} \right) - \sigma_p \left(5/2 + r' - \frac{\zeta_p}{k_B T} \right) \right]. \quad (4.63)$$

В этой формуле $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ – полная электропроводность, r' – показатель рассеяния для дырок.

Не следует считать, что эта простая теория кинетических коэффициентов, основанная на параболическом законе дисперсии электронов и дырок, может дать хорошее количественное согласие с экспериментом. Например, в таких типичных металлах, как литий, медь, серебро, золото, величина термоэдс совпадает по порядку величины с результатами простой оценки, но имеет положительный знак (типичный для дырочных материалов) в очень широком температурном интервале вплоть до температур плавления. Было предпринято достаточно много попыток объяснить эту аномалию. Идею, которая напрашивается самой первой, – объяснить эффект влиянием непараболичности закона дисперсии и влиянием сложной формы поверхности Ферми, пришлось отбросить сразу, поскольку знак эффекта Холла в этих материалах типичен для электронных носителей. Можно объяснить эффект, если предположить, что существует аномально резкая зависимость времени релаксации импульса электронов от энергии [30]. Действительно, из формулы (4.33), в которой l нужно положить равным единице, следует, что знак интеграла определяется тем, какие электроны дадут больший

вклад в интеграл. Интеграл можно разбить на две части и рассмотреть вклад электронов с энергией, меньшей и большей ζ . Электроны с энергией $\varepsilon_{\vec{p}} < \zeta$ дадут отрицательный вклад, а электроны с кинетической энергией $\varepsilon_{\vec{p}} > \zeta$ – положительный. Если вклад электронов с кинетической энергией $\varepsilon_{\vec{p}} > \zeta$ подавляется за счет резкого уменьшения времени релаксации, то результирующее значение интеграла K_1 получится отрицательным и термоэдс будет иметь положительный знак.

Любопытно заметить, что положительный знак термоэдс для электронов означает, что они будут диффундировать в поле температурного градиента в сторону более высоких температур.

§ 4. Рассеяние электронов на колебаниях решетки

Приближение времени релаксации дает достаточно хорошие результаты при описании термоэлектрических явлений в проводящих кристаллах, но, во-первых, это приближение само нуждается в обосновании, а во-вторых, есть эффекты, которые требуют выхода за рамки приближения времени релаксации. Примером может служить явление увлечения электронов фононами, которое сильно изменяет значение коэффициента дифференциальной термоэдс при достаточно низких температурах. Другим аргументом в пользу более детального изучения процессов рассеяния электронов в кристалле является необходимость независимой оценки величины времени релаксации τ из первых принципов и определение температурной зависимости времени релаксации.

Для того чтобы построить теорию, позволяющую решить поставленные задачи, нужно найти явный вид гамильтониана взаимодействия электронов с рассеивателями, записать соответствующий интеграл столкновений и затем, если это окажется необходимым, заново решить кинетическое уравнение и определить термоэлектрические коэффициенты. Существует достаточно много различных механизмов взаимодействия электронов с рассеивателями, и даже их краткий обзор занял бы слишком много места (более полную информацию можно найти в

монографиях [26, 27, 31]). Мы рассмотрим только два вида взаимодействий: взаимодействие электронов с продольными акустическими колебаниями и взаимодействие электронов с заряженными примесными центрами.

Для того чтобы вывести гамильтониан электрон-фононного взаимодействия, необходимо записать выражение для смещения атомов кристаллической решетки при возбуждении малых (подчиняющихся гармоническому закону) тепловых колебаний атомов кристаллической решетки. В простейшем случае одноатомной кристаллической решетки кинетическую энергию колебаний можно записать в виде

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_i M \dot{\vec{u}}_i^2, \quad (4.64)$$

где M – масса атома, \vec{u}_i – вектор смещения i -го атома из положения равновесия. Для достаточно длинноволновых колебаний можно ввести плавную функцию смещения атома $\vec{u}(\vec{r})$ в точке \vec{r} и записать кинетическую энергию в континуальной форме

$$E_k = \frac{\rho}{2} \int \dot{\vec{u}}^2(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (4.65)$$

где ρ – плотность кристалла. Интегрирование ведется по всему объему кристалла. Для перехода от классического описания колебаний атомов кристаллической решетки к квантовому достаточно ввести правила квантования координат и импульсов

$$M [\dot{u}_i^\alpha, u_j^\beta] = -i\hbar \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.66)$$

Для континуальной формы записи это соотношение можно представить в следующем виде:

$$\rho [\dot{u}^\alpha(\vec{r}), u^\beta(\vec{r}')] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.67)$$

Убедиться в справедливости такого представления достаточно просто: нужно просуммировать левую и правую части (4.66) по всем атомам, а левую и правую части (4.67) проинтегрировать по всему объему. Тогда правые части полученных выражений будут равны $-i\hbar \delta_{\alpha\beta}$, а левые – представлять одну и ту же величину – коммутатор суммарного импульса решетки и смещения в одной из точек кристалла.

Будем рассматривать продольные колебания и разложим оператор смещения $\vec{u}(\vec{r})$ в ряд Фурье (в действительности речь идет о представлении смещения в виде суперпозиции нормальных координат). Поскольку смещения $\vec{u}(\vec{r})$ являются действительными величинами, то это разложение следует записать так, чтобы оператор $\vec{u}(\vec{r})$ обладал свойством самосопряженности:

$$u(\vec{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{\vec{q}} \{ u_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r} - i\Omega_{\vec{q}}t} + u_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r} + i\Omega_{\vec{q}}t} \}. \quad (4.68)$$

Здесь \vec{q} и $\Omega_{\vec{q}}$ – волновой вектор и частота нормальных возбуждений. Подставляя разложение (4.68) в условие квантования (4.67), получаем коммутационные соотношения для амплитуд нормальных колебаний $u_{\vec{q}}, u_{\vec{q}}^+$:

$$[u_{\vec{q}}, u_{\vec{q}'}^+] = \frac{\hbar}{2\rho\Omega_{\vec{q}}} \delta_{\vec{q}\vec{q}'}, \quad [u_{\vec{q}}, u_{\vec{q}'}] = 0, \quad [u_{\vec{q}}^+, u_{\vec{q}'}^+] = 0. \quad (4.69)$$

Введем операторы рождения и уничтожения фононов (нормальных колебаний) с волновым вектором \vec{q} :

$$b_{\vec{q}}^+ = \left(\frac{2\rho\Omega_{\vec{q}}}{\hbar} \right)^{1/2} u_{\vec{q}}^+, \quad b_{\vec{q}} = \left(\frac{2\rho\Omega_{\vec{q}}}{\hbar} \right)^{1/2} u_{\vec{q}},$$

которые, очевидно, удовлетворяют простым коммутационным соотношениям

$$[b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}] = 0, \quad [b_{\vec{q}}^+, b_{\vec{q}'}^+] = 0, \quad [b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}^+] = \delta_{\vec{q}\vec{q}'}. \quad (4.70)$$

Для выполнения коммутационных соотношений (4.70) необходимо потребовать, чтобы при действии на волновую функцию в представлении вторичного квантования выполнялись следующие условия:

$$b_{\vec{q}}^+ |N_{\vec{q}}\rangle = \sqrt{N_{\vec{q}} + 1} |N_{\vec{q}} + 1\rangle, \quad b_{\vec{q}} |N_{\vec{q}}\rangle = \sqrt{N_{\vec{q}}} |N_{\vec{q}} - 1\rangle. \quad (4.71)$$

Используя операторы рождения и уничтожения фононов, запишем выражение для оператора смещения $u(\vec{r})$

$$u(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \{ b_{\vec{q}}(t) e^{i\vec{q}\vec{r}} + b_{\vec{q}}^+(t) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \},$$

$$b_{\vec{q}}(t) = b_{\vec{q}} e^{-i\Omega_{\vec{q}}t}, \quad b_{\vec{q}}^+(t) = b_{\vec{q}}^+ e^{i\Omega_{\vec{q}}t}. \quad (4.72)$$

Выражение для кинетической энергии (4.65) позволяет записать и гамильтониан фононной системы в представлении вторичного квантования. Напомним, что для гармонических колебаний средняя кинетическая и средняя потенциальная энергии равны. Поэтому полная энергия может быть найдена как удвоенная кинетическая энергия. Подставляя в (4.65) разложение (4.68) и усредняя его по времени, для средней кинетической энергии получим

$$\overline{E}_k = \frac{\rho}{2} \sum_{\vec{q}} (u_{\vec{q}} u_{\vec{q}}^+ + u_{\vec{q}}^+ u_{\vec{q}}) \Omega_{\vec{q}}^2. \quad (4.73)$$

Заменяя в этом выражении операторы $u_{\vec{q}}$, $u_{\vec{q}}^+$ на операторы $b_{\vec{q}}$, $b_{\vec{q}}^+$ с учетом перестановочных соотношений (4.70), для гамильтониана фононов находим

$$H_p = \sum_{\vec{q}} \hbar \Omega_{\vec{q}} \left(b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.74)$$

Выражения (4.70), (4.72), (4.74) найдены в результате простых качественных соображений и не претендуют на строгий и последовательный вывод. Тем не менее, как показывают расчеты, вклад всех трех ветвей колебаний для акустических фононов и появление оптических ветвей можно просто учесть, используя полученные выше результаты.

Перейдем теперь к выводу гамильтониана электрон-фононного взаимодействия. Как уже указывалось, существует множество механизмов, вызывающих рассеяние электронов на колебаниях решетки. Мы рассмотрим самый простой механизм, суть которого состоит в том, что колебания атомов кристаллической решетки вызывают локальную деформацию кристалла, что неизбежно приведет к изменению энергии электронов. Все свойства кристалла при наличии деформации будут определяться компонентами симметричного тензора деформации

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right).$$

Поэтому и энергия электронов в кристалле с деформацией будет функцией компонент этого тензора $\varepsilon(\vec{p}, \epsilon_{ij})$. Раскладывая в ряд энергию электрона в кристалле с деформацией по компонентам тензора деформации, получаем

$$\varepsilon(\vec{p}, \epsilon_{ij}) = \varepsilon(\vec{p}) + E_{ij}\epsilon_{ij}.$$

В изотропном случае или в кристаллах с кубической симметрией тензор деформации может быть представлен в виде $\epsilon_{ij} = \text{div } \vec{u} \delta_{ij}$, и поэтому поправку к энергии электрона, которая и играет роль гамильтониана взаимодействия электрона с колебаниями решетки H_{ep} , можно записать в виде

$$H_{ep} = E_0 \text{div } \vec{u}.$$

Величину E_0 принято называть потенциалом деформации. Подставляя в это выражение смещение $\vec{u}(\vec{r})$ (4.72), получаем выражение для гамильтониана взаимодействия электрона, находящегося в некоторой точке пространства \vec{r} , и фононным полем:

$$H_{ep} = i \sum_{\vec{q}} \left(\frac{E_0^2 \hbar}{2\rho\Omega_{\vec{q}}} \right)^{1/2} (\vec{e}_{\vec{q}} \vec{q}) \{ b_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} - b_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}} \}, \quad (4.75)$$

где $\vec{e}_{\vec{q}}$ – единичный вектор поляризации звуковой волны.

В литературе можно встретить и другое определение для гамильтониана H_{ep} :

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q}\lambda} C_{\vec{q}\lambda} \{ b_{\vec{q}\lambda} e^{i\vec{q}\vec{r}} + b_{\vec{q}\lambda}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}} \}, \quad (4.76)$$

где $C_{\vec{q}\lambda}$ – амплитуда электрон-фононного взаимодействия

$$|C_{\vec{q}\lambda}|^2 = \frac{E_0^2 \hbar}{2\rho s} q^t,$$

s – скорость звука. $\Omega_{\vec{q}\lambda} = sq$, λ – индекс поляризации звуковой волны. Показатель степени t варьируется в зависимости от механизма электрон-фононного взаимодействия (для рассеяния на акустических фононах в методе потенциала деформации

$t = 1$). Гамильтониан в форме (4.76) при надлежащем выборе константы $C_{\bar{q}\lambda}$ и показателя степени t может быть использован и для других механизмов электрон-фоонного взаимодействия, отличных от рассеяния на продольных акустических колебаниях.

§ 5. Гамильтониан взаимодействия электронов с заряженными примесными центрами

Пусть n – средняя концентрация электронов в кристалле, n' – их концентрация в окрестности примесного центра. Если φ – суммарный потенциал электростатического поля иона, помещенного в начале координат, и отрицательного заряда электронов $-|e|(n' - n)$, то он должен удовлетворять уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi|e|}{\epsilon}(n' - n), \quad (4.77)$$

где ϵ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость.

В этом выражении концентрация электронов n определяется формулой (4.56), а для величины n' можно записать аналогичное выражение, заменив химический потенциал $\zeta \rightarrow \zeta - e\varphi$. Действительно, энергия электрона в результирующем электростатическом потенциале будет $\varepsilon_{\vec{p}} + e\varphi$, и функция распределения электронов будет зависеть от аргумента $\varepsilon_{\vec{p}} + e\varphi - \zeta$. Таким образом,

$$n' = \frac{(2mk_{\text{B}}T)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{\zeta - e\varphi}{k_{\text{B}}T}\right) = n + \frac{(2mk_{\text{B}}T)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} F'_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_{\text{B}}T}\right) \frac{|e|\varphi}{k_{\text{B}}T}.$$

Подставляя последний результат в уравнение Пуассона, получаем простое уравнение для определения потенциала φ :

$$\nabla^2 \varphi = q_0^2 \varphi, \quad (4.78)$$

$$q_0^2 = \frac{2e^2 (2m)^{3/2} (k_{\text{B}}T)^{1/2}}{\epsilon\pi\hbar^3} F'_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_{\text{B}}T}\right), \quad (4.79)$$

где величина q_0 имеет смысл обратного радиуса экранирования электростатического потенциала иона.

Решение уравнения (4.78), обладающего сферической симметрией и удовлетворяющего условию

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi(r) = 0,$$

имеет вид

$$\varphi = \frac{|e|}{\epsilon r} e^{-q_0 r}.$$

Энергию взаимодействия электрона E_{ei} , имеющего координату \vec{r} , с примесным однократно ионизованным центром можно записать следующим образом:

$$E_{ei} = -\frac{e^2}{\epsilon \vec{r}} e^{-q_0 \vec{r}} = -\sum_{\vec{q}} G_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}},$$

где $G_{\vec{q}}$ – фурье-образ экранированного кулоновского потенциала точечного заряда (умноженный на заряд электрона)

$$G_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon(q^2 + q_0^2)}. \quad (4.80)$$

В действительности в кристалле находится N_i примесей, имеющих координаты \vec{R}_j , и N электронов, имеющих координаты \vec{r}_i . Если взаимодействие электронов с примесными атомами аддитивно, то для получения гамильтониана взаимодействия электронов со всеми примесными центрами достаточно просуммировать выражение E_{ei} по всем примесным центрам и по всем электронам:

$$H_{ei} = -\sum_i^N \sum_{\vec{q}} G_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}_i}; \quad \rho_{\vec{q}} = \sum_{j=1}^{N_i} e^{i\vec{q}\vec{R}_j}. \quad (4.81)$$

Для практических приложений удобнее записать гамильтониан электрон-примесного рассеяния в представлении вторичного квантования, предполагая, что состояния электронов описываются волновой функцией $|\nu, \sigma\rangle$, где ν, σ – квантовые числа, задающие орбитальное и спиновое состояния соответственно. В этом случае, используя правило перехода к представле-

нию вторичного квантования для оператора A аддитивного типа [4]

$$A = \sum_i A_i = \sum_{\nu' \sigma', \nu \sigma} \langle \nu' \sigma' | A | \nu \sigma \rangle a_{\nu' \sigma'}^+ a_{\nu \sigma},$$

для гамильтониана электрон-примесного рассеяния получаем

$$H_{ei} = - \sum_{\vec{q}} G_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} \langle \nu' \sigma' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \nu \sigma \rangle a_{\nu' \sigma'}^+ a_{\nu \sigma}. \quad (4.82)$$

Задача 4.3

Получить выражение (4.80) для фурье-образа потенциала электрон-примесного взаимодействия.

Решение

Для решения задачи проще убедиться, что обратное фурье-преобразование образа (4.80) приводит нас к выражению для экранированного кулоновского потенциала $\varphi(r)$:

$$\varphi(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{4\pi|e|}{\epsilon(q^2 + q_0^2)} e^{-i\vec{q}\vec{r}}.$$

В последнем интеграле перейдем к интегрированию в полярной системе координат, положив $d\vec{q} = q^2 dq \sin \theta d\theta d\varphi$. Выполняя затем интегрирование по углу φ и полагая $x = \cos \theta$, получаем

$$\varphi(r) = \frac{|e|}{\pi} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{\epsilon(q^2 + q_0^2)} \int_{-1}^1 e^{-iqr x} dx = \frac{|e|}{\pi} \int_0^\infty \frac{q dq}{\epsilon(q^2 + q_0^2)} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{ir}.$$

Выполнив во втором члене последнего интеграла замену переменной интегрирования $q \rightarrow -q$, приведем этот интеграл к виду, более удобному для интегрирования:

$$\varphi(r) = \frac{|e|}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{iqr}}{\epsilon(q^2 + q_0^2)} dq. \quad (4.83)$$

Последний интеграл легко вычисляется с помощью теории вычетов. Напомним, что если подынтегральная функция

$$f(z) = \frac{\phi(z)}{\psi(z)}$$

и функция $\phi(z)$ не имеет полюсов внутри области интегрирования, а функция $\psi(z)$ имеет простой полюс в точке a , то

$$\int_{\Gamma} f(z) dz = 2\pi i \frac{\phi(a)}{\psi'(a)}.$$

Подынтегральное выражение в формуле (4.83) имеет два полюса $q = \pm iq_0$. Контур интегрирования в комплексной плоскости следует замыкать таким образом, чтобы внутри контура оказался лишь один полюс, при выборе которого потенциал стремится к нулю на бесконечности. В итоге получаем

$$\varphi(r) = \frac{|e|}{\epsilon r} e^{-q_0 r},$$

что и требовалось доказать.

§ 6. Интеграл столкновений при взаимодействии электронов с фононами

Получим явное выражение для интеграла столкновений при взаимодействии электронов с фононами, предполагая для простоты, что электроны в зоне проводимости можно рассматривать как свободные частицы с волновым вектором \vec{k} .

Вычислим вероятность перехода $W_{\vec{k}', \vec{k}}$ из состояния с волновым вектором \vec{k} в состояние с волновым вектором \vec{k}' под действием возмущения, задаваемого гамильтонианом (4.76). Согласно основным положениям нестационарной теории возмущений, вероятность перехода системы определяется квадратом модуля амплитуды перехода $a_{\vec{k}', \vec{k}}(t)$, усредненным по состояниям фононной системы

$$W_{\vec{k}', \vec{k}} = \langle |a_{\vec{k}', \vec{k}}(t)|^2 \rangle, \\ a_{\vec{k}', \vec{k}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \langle \vec{k}' | H_{ep}(t) | \vec{k} \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}})t}, \quad (4.84)$$

$|\vec{k} \rangle$ — волновая функция свободного электрона в состоянии с волновым вектором \vec{k} , угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают

квантово-статистическое усреднение по состояниям фононной системы, $\varepsilon_{\vec{k}}$ – энергия электрона с волновым вектором \vec{k} .

Подставляя явный вид гамильтониана H_{ep} (4.76) в формулу (4.84) и учитывая, что временная зависимость бозе-операторов $b_{\vec{q}\lambda}(t)$, $b_{\vec{q}\lambda}^+(t)$ определяется соотношениями (4.72), а квантово-статистические средние по фононным переменным для произведений операторов рождения уничтожения имеют вид

$$\begin{aligned} \langle b_{\vec{q}\lambda}^+ b_{\vec{q}'\lambda'} \rangle &= N_{\vec{q}\lambda} \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad \langle b_{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}'\lambda'}^+ \rangle = (N_{\vec{q}\lambda} + 1) \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \langle b_{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}'\lambda'} \rangle &= \langle b_{\vec{q}\lambda}^+ b_{\vec{q}'\lambda'}^+ \rangle = 0, \\ N_{\vec{q}\lambda} &= \left\{ \exp\left(\frac{\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}}{k_B T}\right) - 1 \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (4.85)$$

$\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}$ – энергия фонона с волновым вектором \vec{q} и поляризацией λ , получаем

$$\begin{aligned} W_{\vec{k}', \vec{k}} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \left\{ \left| \langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle \right|^2 N_{\vec{q}\lambda} \delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}) + \right. \\ &\quad \left. + \left| \langle \vec{k}' | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle \right|^2 (N_{\vec{q}\lambda} + 1) \delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.86)$$

При записи последнего выражения мы учли, что

$$\begin{aligned} \left| \frac{e^{i/\hbar(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda})t} - 1}{i/\hbar(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda})} \right|^2 &= \frac{4 \sin^2[(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda})t/2\hbar]}{1/\hbar^2(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda})^2} = \\ &= 2\pi\hbar t \delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}) \end{aligned}$$

и воспользовались определением δ -функции

$$\delta(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(x t)}{x^2 t}.$$

Выражение (4.86) естественным образом разбивается на два слагаемых, одно из которых описывает переходы из состояния \vec{k} в состояние \vec{k}' с рождением фонона и пропорционально $N_{\vec{q}\lambda} + 1$,

другое пропорционально $N_{\vec{q}\lambda}$ и описывает процессы с поглощением фонона. Из закона сохранения энергии и импульса следует, что из состояния с волновым вектором \vec{k} и энергией $\varepsilon_{\vec{k}}$ возможны переходы в состояние с волновым вектором $\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$ и энергией $\varepsilon_{\vec{k}'} = \varepsilon_{\vec{k}} \pm \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}$. Эти два процесса приводят к уменьшению числа электронов в состоянии \vec{k} . Кроме того, возможны переходы из состояния с волновым вектором $\vec{k} + \vec{q}$ и $\vec{k} - \vec{q}$ в состояние \vec{k} . Эти переходы будут увеличивать число электронов в состоянии \vec{k} . Перечисленные возможные переходы схематически изображены на рис. 28.

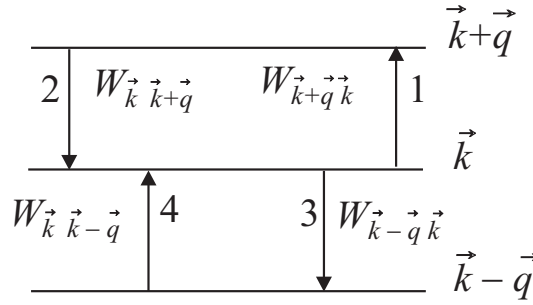


Рис. 28. Схема переходов между состояниями электронов с энергией $\varepsilon_{\vec{k}}$, $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}$, $\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}$, дающих вклад в изменение числа электронов в состоянии с волновым вектором \vec{k}

Пользуясь формулой (4.86), запишем выражения для вероятностей этих переходов:

$$\begin{aligned}
 1. \quad W_{\vec{k}+\vec{q}\vec{k}} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 |\langle \vec{k} + \vec{q} | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 N_{\vec{q}\lambda} \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}), \\
 2. \quad W_{\vec{k}\vec{k}+\vec{q}} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 |\langle \vec{k} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} + \vec{q} \rangle|^2 (N_{\vec{q}\lambda} + 1) \times \\
 &\quad \times \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}), \\
 3. \quad W_{\vec{k}-\vec{q}\vec{k}} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 |\langle \vec{k} - \vec{q} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 (N_{\vec{q}\lambda} + 1) \times \\
 &\quad \times \delta(\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}), \\
 4. \quad W_{\vec{k}\vec{k}-\vec{q}} &= \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 |\langle \vec{k} | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} - \vec{q} \rangle|^2 N_{\vec{q}\lambda} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}).
 \end{aligned}
 \tag{4.87}$$

Формулы (4.87) дают квантово-механическую вероятность перехода за время t между состояниями электронов с волновым вектором \vec{k} $\vec{k} \pm \vec{q}$, усредненную по состояниям фононной системы. Для нахождения скорости изменения функции распределения

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ст}},$$

входящей в правую часть кинетического уравнения (4.6), необходимо найти скорости изменения числа электронов с волновым вектором \vec{k} , принимая во внимание заполнение начальных состояний и наличие пустых мест в конечных состояниях. Учитывая, что переходы 1 и 3 приводят к уменьшению числа электронов в состоянии \vec{k} , а переходы 2 и 4 – к увеличению числа электронов в этом состоянии, получаем

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \{ [(N_{\vec{q}\lambda} + 1)f_{\vec{k}+\vec{q}}(1 - f_{\vec{k}}) - N_{\vec{q}\lambda}f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}+\vec{q}})] \times \\ & \times \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}) + [N_{\vec{q}\lambda}f_{\vec{k}-\vec{q}}(1 - f_{\vec{k}}) - (N_{\vec{q}\lambda} + 1)f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}-\vec{q}})] \times \\ & \times \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}) \}. \end{aligned} \quad (4.88)$$

При выводе выражения (4.88) мы воспользовались четностью дельта-функции $\delta(x) = \delta(-x)$ и учли, что, в силу условия нормировки,

$$|\langle \vec{k} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} + \vec{q} \rangle|^2 = |\langle \vec{k} + \vec{q} | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 = 1.$$

Пользуясь выражением (4.88), можно показать, что для упругого рассеяния электронов на фононах удастся ввести время релаксации импульса электронов $\tau_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}})$ и обосновать представление интеграла столкновений в приближении времени релаксации (4.7). Действительно, рассеяние можно считать упругим, если энергия фононов $\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}$ много меньше средней тепловой энергии электронов $\bar{\varepsilon} \simeq k_{\text{Б}}T$. Раскладывая в этом случае экспоненту, входящую в знаменатель функции Планка $N_{\vec{q}\lambda}$ по малому параметру $\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}/k_{\text{Б}}T$, и ограничиваясь линейным приближением, получаем

$$N_{\vec{q}\lambda} = \frac{k_{\text{Б}}T}{\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}} \gg 1, \quad N_{\vec{q}\lambda} + 1 \simeq N_{\vec{q}\lambda}. \quad (4.89)$$

Если учесть результат (4.89), то можно существенно упростить выражение для интеграла столкновений (4.88) за счет сокращения членов, в которые функция $f_{\vec{k}}$ распределения входит квадратичным образом:

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k}, \vec{k}') (f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}}) \delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}}),$$

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 N_{\vec{q}\lambda} (\delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}} + \delta_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{q}}). \quad (4.90)$$

Далее, если записать неравновесную функцию распределения в виде

$$f_{\vec{k}} = f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) + f_1(\vec{k}) = f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - \frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} (\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{k}}) \vec{k}), \quad (4.91)$$

где $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{k}})$ – неизвестная векторная функция, зависящая только от энергии электронов, то разность функций распределений в формуле (4.90) можно выразить через поправку к функции распределения $f_1(\vec{k})$

$$f_{\vec{k}'} - f_{\vec{k}} = \frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} (\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{k}}) \vec{k}) \left[1 - \frac{k'_{\chi}}{k_{\chi}} \right],$$

где k'_{χ} и k_{χ} – проекции векторов \vec{k}' и \vec{k} на вектор $\vec{\chi}(\varepsilon_{\vec{k}})$;

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{f_1(\vec{k})}{\tau_{\vec{k}}(\varepsilon_{\vec{k}})},$$

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}(\varepsilon_{\vec{k}})} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} V(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'_{\chi}}{k_{\chi}} \right] \delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.92)$$

Хотя результат (4.92) не очень удобен для практических вычислений, он оправдывает сделанное предположение о возможности введения времени релаксации для описания кинетических явлений в проводящих кристаллах и указывает пределы применимости этого приближения.

Совершенно аналогично можно получить структуру интеграла столкновений при рассеянии на экранированном кулоновском потенциале, магнитных примесях.

Задача 4.4

Выразить среднее значение $\langle c_\nu^+ c_\nu \rangle$ произведения операторов рождения c_ν^+ и уничтожения c_ν бозонов (фермионов) в состоянии $|\nu\rangle$ через бозонную (фермионную) функцию распределения.

Решение

Покажем, что $\langle c_\nu^+ c_\nu \rangle \equiv \text{Sp}\{\rho_0 c_\nu^+ c_\nu\} = f_\nu \delta_{\nu\nu'}$, где ρ_0 – равновесное статистическое распределение

$$\rho_0 = \exp\{-\beta(\Phi + H_0)\}, \quad \Phi = \frac{1}{\beta} \ln \text{Sp}\{e^{-\beta H_0}\}, \quad H_0 = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} c_{\nu}^+ c_{\nu}, \quad (4.93)$$

$\beta = 1/k_B T$ – обратная температура, f_ν – равновесная функция распределения бозонов или фермионов.

Если, кроме энергии, в системе имеются и другие интегралы движения, то ρ_0 следует записать в виде

$$\rho_0 = \exp\{-\beta(\Phi + H_0 + \sum_k P_k F_k)\}, \quad (4.94)$$

где P_k – операторы, представляющие собой сохраняющиеся величины (термодинамические координаты), F_k – соответствующие этим координатам термодинамические силы. Например, в случае Ферми-частиц очень часто сохраняющейся величиной является число частиц. В этом случае оператор статистического распределения в представлении вторичного квантования следует записать в виде

$$\rho_0 = \exp\{-\beta[\Phi + \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \zeta) \hat{n}_{\nu}]\}, \quad \Phi = \frac{1}{\beta} \ln \text{Sp}\{e^{-\beta \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \zeta) \hat{n}_{\nu}}\}. \quad (4.95)$$

В формуле (4.95) $\hat{n}_{\nu} = c_{\nu}^+ c_{\nu}$, величина Φ представляет собой термодинамический потенциал системы частиц. Величина ζ является химическим потенциалом для фермионной системы. Для бозонов $\zeta = 0$.

Интересующая нас величина f_{μ} – функция распределения квази-частиц по энергиям – представляет собой среднее значение оператора числа частиц в некотором состоянии μ . Проще всего найти эту величину, используя термодинамический потенциал Φ :

$$-\frac{d\Phi}{d\varepsilon_{\mu}} = \frac{\text{Sp}\{\exp[-\beta \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \zeta) \hat{n}_{\nu}] \hat{n}_{\mu}\}}{\text{Sp}\{\exp[-\beta \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \zeta) \hat{n}_{\nu}]\}} = \text{Sp}\{\rho_0 \hat{n}_{\mu}\} = f_{\mu}. \quad (4.96)$$

Таким образом, для вычисления $\langle c_\nu^+, c_\nu \rangle$ необходимо найти термодинамический потенциал Φ , который, в свою очередь, выражается через статистическую сумму Z . Статистическую сумму идеального газа бозонов или фермионов проще всего вычислить в представлении вторичного квантования

$$Z = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots} \exp\{-\beta \sum_\nu (\varepsilon_\nu - \zeta) n_\nu\}. \quad (4.97)$$

В этой формуле n_ν – это собственные значения оператора числа частиц, которые для бозонной системы принимают значения $0, 1, 2, \dots$, а для фермионной системы – только значения 0 и 1 . Правую часть выражения (4.97) можно перестроить, записав ее в виде

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_N} e^{-\beta(\varepsilon_1 - \zeta)n_1} e^{-\beta(\varepsilon_2 - \zeta)n_2} \dots e^{-\beta(\varepsilon_N - \zeta)n_N} = \prod_\nu \sum_{n_\nu} e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)n_\nu}. \quad (4.98)$$

Таким образом, выполняя суммирование по возможным значениям чисел заполнения n_ν , получаем (для статистики Бозе суммирование сводится к нахождению суммы бесконечно убывающей геометрической прогрессии)

$$Z = \begin{cases} \prod_\nu (1 + e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)}) & \text{статистика Ферми,} \\ \prod_\nu (1 - e^{-\beta\varepsilon_\nu})^{-1} & \text{статистика Бозе.} \end{cases} \quad (4.99)$$

Поскольку на основании формулы (4.95) $\Phi = \ln Z / \beta$, логарифмируя (4.99), для термодинамического потенциала Φ получаем простое выражение

$$\Phi = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \ln \begin{cases} (1 + e^{-\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)}) & \text{статистика Ферми,} \\ (1 - e^{-\beta\varepsilon_\nu})^{-1} & \text{статистика Бозе.} \end{cases} \quad (4.100)$$

Используя результат (4.96), получаем

$$\langle c_\nu^+, c_\nu \rangle = -\frac{d\Phi}{d\varepsilon_\mu} = \frac{\exp\{-\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)\}}{1 + \exp\{-\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)\}} = \frac{1}{\exp\{\beta(\varepsilon_\nu - \zeta)\} + 1} \quad (4.101)$$

в случае статистики Ферми и

$$\langle c_\nu^+, c_\nu \rangle = -\frac{d\Phi}{d\varepsilon_\mu} = \frac{\exp\{-\beta\varepsilon_\nu\}}{1 - \exp\{-\beta\varepsilon_\nu\}} = \frac{1}{\exp\{\beta\varepsilon_\nu\} - 1} \quad (4.102)$$

в случае статистики Бозе.

§ 7. Явление фононного увлечения

Рассмотрим теперь явление фононного увлечения. Если считать, что фононная подсистема кристалла образует газ квазичастиц (фононов), то при наличии градиента температуры этот газ также будет отклоняться от состояния термодинамического равновесия и возникнет поток фононов, который и обеспечивает решеточный теплоперенос. Таким образом, функция распределения фононов перестанет быть равновесной функцией Планка (4.85). Поскольку поток фононов будет направлен от более горячей грани полупроводника к более холодной, то электронам при рассеянии будет передаваться дрейфовый импульс фононной системы, что вызовет дополнительный вклад в поток электронов в сторону холодной грани проводника и, следовательно, увеличение электронной составляющей термоэдс. Увеличение электронной составляющей термоэдс, связанное с учетом неравновесности фононной системы, принято называть *явлением фононного увлечения*.

Для нахождения поправки к термоэдс, связанной с увлечением электронов фононами, необходимо найти поправку к функции распределения фононов $\delta N_{\vec{q}\lambda}$, вызванную приложенным градиентом температуры. Найдем эту поправку исходя из кинетического уравнения для фононов, записанного в приближении времени релаксации. В рамках концепции локального равновесия получаем

$$\left. \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial t} \right|_{\text{поле}} + \left. \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = 0, \quad \left. \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{\delta N_{\vec{q}\lambda}}{\tau_{\vec{q}\lambda}}, \quad (4.103)$$

где $\tau_{\vec{q}\lambda}$ – время релаксации длинноволновых фононов, взаимодействующих с электронами, на тепловых фононах или границах образца.

$$\left. \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial t} \right|_{\text{поле}} = (\vec{v}_{\vec{q}\lambda} \vec{\nabla}) N_{\vec{q}\lambda}(T(\vec{r})) = -(\vec{v}_{\vec{q}\lambda} \vec{\nabla} T) \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial \Omega_{\vec{q}\lambda}} \frac{\Omega_{\vec{q}\lambda}}{T}. \quad (4.104)$$

В формуле (4.104) величина $\vec{v}_{\vec{q}\lambda}$ является групповой скоростью фононов.

Результаты (4.103), (4.104) сразу позволяют найти поправку к функции распределения фононов

$$\delta N_{\vec{q}\lambda} = \tau_{\vec{q}\lambda} \frac{\partial N_{\vec{q}\lambda}}{\partial \Omega_{\vec{q}\lambda}} \frac{\Omega_{\vec{q}\lambda}}{T} (\vec{v}_{\vec{q}\lambda} \vec{\nabla} T) \simeq -\frac{k_B \tau_{\vec{q}\lambda}}{\hbar q} \left(\frac{\vec{q}}{q} \vec{\nabla} T \right). \quad (4.105)$$

При записи последнего равенства мы учли, что $N_{\vec{q}\lambda} \simeq k_B T / \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}$, $\Omega_{\vec{q}\lambda} = sq$, где s – скорость звука в кристалле, и учли, что $\vec{v}_{\vec{q}\lambda} = s\vec{q}/q$.

Вернемся теперь к кинетическому уравнению для электронов. Учет неравновесности фононной системы приведет к появлению дополнительного слагаемого в интеграле столкновений. Действительно, для неравновесных фононов величины $N_{\vec{q}\lambda}$ в интеграле столкновений (4.88) следует заменить на величины $N_{\vec{q}\lambda} + \delta N_{\vec{q}\lambda}$. Тогда в линейном приближении по термодинамическим силам интеграл столкновений I распадается на два слагаемых

$$I = I[f_1(\vec{k}), N_{\vec{q}\lambda}] + I[f_0(\varepsilon_{\vec{k}}), \delta N_{\vec{q}\lambda}]$$

Первое слагаемое в этом выражении описывает рассеяние неравновесных электронов на фононах, находящихся в условиях термодинамического равновесия, а второе учитывает поправки, связанные с неравновесностью фононной системы. Во втором слагаемом электронные функции распределения можно считать равновесными, поскольку уже набран первый порядок по термодинамическим силам. Очевидно, что нас интересует второе слагаемое. После несложных преобразований, учитывая, что $N_{\vec{q}\lambda} = N_{-\vec{q}\lambda}$, а $\delta N_{\vec{q}\lambda} = -\delta N_{-\vec{q}\lambda}$, получаем выражение для той части интеграла столкновений, которая описывает поправку, связанную с рассеянием электронов на неравновесных фононах:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ув}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \delta N_{\vec{q}\lambda} [f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})] \times \\ &\times [\delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}) - \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda})]. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Следует обратить внимание на то, что эффект увлечения возникает только для неупругого рассеяния. Если отбросить

$\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}$ в δ -функциях, то правая часть выражения (4.106) немедленно обращается в нуль.

Изменение энергии электронов при поглощении или испускании фононов мало: $\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda} \ll k_B T$, поэтому разность функций распределения в первой квадратной скобке (4.105), используя разложение $f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})$ по малому параметру $\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}/k_B T$, запишем в виде

$$f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) = \frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}).$$

Подставляя этот результат в формулу (4.106), получаем простое выражение, пригодное для численных оценок:

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ув}} = \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \delta N_{\vec{q}\lambda} \frac{\partial f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}). \quad (4.107)$$

Для дальнейших вычислений произведем замену суммирования интегрированием в формуле (4.107) и подставим в нее выражение для $|C_{\vec{q}\lambda}|^2$, полученное ранее (с. 216), и $\delta N_{\vec{q}\lambda}$ (4.105). В результате, переходя к сферической системе координат, получаем

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ув}} = -\frac{E_0^2 k_B m}{8\pi\rho (\hbar k)^3} (\hbar\vec{k} \cdot \vec{\nabla} T) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \int_0^{2k} \tau_{\vec{q}\lambda} q^3 dq. \quad (4.108)$$

На выводе этой формулы следует остановиться подробнее. Интегрирование в сферической системе координат в формуле (4.107) приводит нас к интегралу

$$\begin{aligned} & \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} dq q^3 \tau_{\vec{q}\lambda} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \delta\left(\frac{\hbar^2 k q \cos \theta}{m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\right) \times \\ & \times \int_0^{2\pi} \left(\frac{\vec{k}}{k} \cdot \vec{\nabla} T\right) \frac{\cos \alpha}{\cos \beta} d\varphi. \end{aligned} \quad (4.109)$$

В этой формуле α – угол между вектором \vec{q} и вектором градиента температуры, β – угол между вектором \vec{k} и градиентом температуры. Выбор углов α , β , θ и φ показан на рис. 29.

Можно показать [31], что между углами α , β , θ и φ существует простая взаимосвязь

$$\cos \alpha = \cos \theta \cos \beta + \sin \theta \sin \beta \cos \varphi.$$

Поскольку, как следует из рис. 29, от угла φ зависит только угол α , то интегрирование по углу φ дает

$$\int_0^{2\pi} \left(\frac{\vec{k}}{k} \vec{\nabla} T \right) \frac{\cos \alpha}{\cos \beta} d\varphi = 2\pi \left(\frac{\vec{k}}{k} \vec{\nabla} T \right) \cos \theta. \quad (4.110)$$

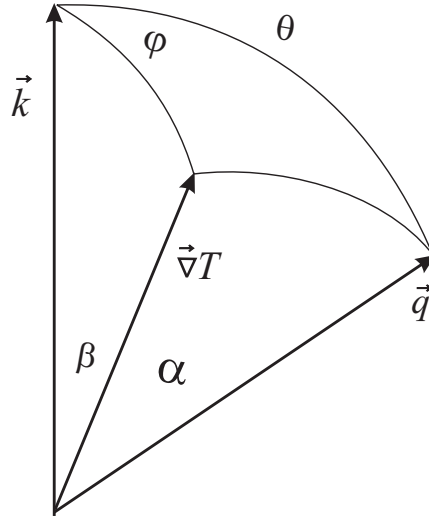


Рис. 29. Векторы \vec{k} , \vec{q} , $\vec{\nabla} T$ и углы между ними

В формуле (4.109) после замены переменной $x = -\hbar^2 k q \cos \theta / m$ вычисляем интеграл по углу θ :

$$\int_{-\hbar^2 k q / m}^{\hbar^2 k q / m} x dx \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - x\right) \left(\frac{m}{\hbar^2 k q}\right)^2 = \frac{m}{2\hbar^2 k^2}; \quad q < 2k. \quad (4.111)$$

Из выражения (4.111) следует, что в силу необходимости выполнения закона сохранения энергии и импульса электронов, в каждом элементарном акте рассеяния электроны могут взаимодействовать только с так называемыми длинноволновыми фононами с волновыми векторами $q < 2k \simeq (8m\bar{\epsilon}/\hbar)^{1/2}$. Поэтому в выражении (4.111) интеграл по волновому вектору фононов должен вычисляться в пределах от 0 до $2k$.

Найдем теперь поправку к функции распределения f_1 (4.14), вызванную эффектом увлечения. Для этого добавим в кинетическое уравнение поправку к интегралу столкновения, вызванную неравновесностью фононной системы:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \vec{v} \left(e\vec{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right) = \frac{f_1}{\tau_{\vec{p}}} + \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ув}}. \quad (4.112)$$

Подставляя в это выражение формулу (4.108), получаем

$$\begin{aligned} f_1 &= \tau_{\vec{p}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{p}}} \right) \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m} \vec{\Phi}(\varepsilon_{\vec{k}}) \right), \\ \vec{\Phi}(\varepsilon_{\vec{k}}) &= \left(e\vec{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta}{T} \vec{\nabla} T \right) - A_{\text{ув}}(\varepsilon_{\vec{k}}) \vec{\nabla} T \\ A_{\text{ув}}(\varepsilon_{\vec{k}}) &= \frac{E_0^2 k_B m^2}{8\pi \rho (\hbar k)^3} \int_0^{2k} \tau_{\vec{q}\lambda} q^3 dq. \end{aligned} \quad (4.113)$$

Для практического использования полученного результата (4.113) необходимо еще вычислить интеграл по q , учитывая один из известных механизмов релаксации длинноволновых фононов. Обычно при рассмотрении эффектов увлечения обсуждаются два таких механизма: механизм Херринга, который дает оценку

$$\tau_{\vec{q}\lambda} = \frac{\rho \hbar^2 s^3}{(k_B T)^3 q^2}, \quad (4.114)$$

и механизм Саймонса

$$\tau_{\vec{q}\lambda} = \frac{\rho \hbar^3 s^4}{(k_B T)^4 q}. \quad (4.115)$$

Оба этих механизма приводят к достаточно сильной зависимости времени релаксации от температуры ($\tau_{\vec{q}\lambda} \sim 1/T^4$ или $\tau_{\vec{q}\lambda} \sim 1/T^3$). Поэтому неэлектронные механизмы релаксации фононов заметно увеличивают свой вклад при низких температурах $T \simeq 4K$ и в этой области составляющая термоэдс,

обусловленная эффектами увлечения, может заметно превосходить обычную диффузионную составляющую термоэдс.

Численную оценку вклада эффекта увлечения в термоэдс электронов можно получить, если, учитывая формулы (4.112), (4.113), подставить $A_{ув}(\varepsilon_{\vec{k}})$ в формулу для интеграла K_1 (4.45) вместо величины $(\varepsilon_{\vec{p}} - \zeta)/T$. Мы не будем приводить здесь эти простые вычисления, предоставляя возможность выполнить их самостоятельно в качестве упражнений.

§ 8. Выражения для потоков заряда и тепла в магнитном поле. Тензорная структура кинетических коэффициентов

Получим явные выражения для компонент тензоров $\hat{\rho}$, $\hat{\alpha}$, $\hat{\Pi}$, $\hat{\kappa}$ для случая, когда внешнее магнитное поле не равно нулю. Для этих целей, пользуясь формулами (4.15), (4.24) и (4.27), (4.28), найдем выражения для потоков заряда и тепла:

$$\vec{J} = e^2 \{ K_0^{\parallel}(\vec{h}, \vec{\varepsilon}) \vec{h} - K_0^H[\vec{h} \times \vec{\varepsilon}] - K_0^{\perp}[\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\varepsilon}]] \} - \frac{e}{T} \{ K_1^{\parallel}(\vec{h}, \vec{\nabla} T) \vec{h} - K_1^H[\vec{h} \times \vec{\nabla} T] - K_1^{\perp}[\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\nabla} T]] \}, \quad (4.116)$$

$$\vec{J}_Q = e \{ K_1^{\parallel}(\vec{h}, \vec{\varepsilon}) \vec{h} - K_1^H[\vec{h} \times \vec{\varepsilon}] - K_1^{\perp}[\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\varepsilon}]] \} - \frac{1}{T} \{ K_2^{\parallel}(\vec{h}, \vec{\nabla} T) \vec{h} - K_2^H[\vec{h} \times \vec{\nabla} T] - K_2^{\perp}[\vec{h} \times [\vec{h} \times \vec{\nabla} T]] \}, \quad (4.117)$$

где для удобства дальнейшего изложения введены следующие обозначения ($l = 0, 1, 2$):

$$\begin{vmatrix} K_l^{\parallel} \\ K_l^H \\ K_l^{\perp} \end{vmatrix} = \frac{2\sqrt{2m}}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{3/2} (\varepsilon - \zeta)^l \begin{vmatrix} \tau_{\vec{p}} \\ \frac{\omega_0 \tau_{\vec{p}}^2}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \\ \frac{\tau_{\vec{p}}(\varepsilon)}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \end{vmatrix}. \quad (4.118)$$

Уравнения (4.116), (4.117) имеют такую же структуру, как и феноменологические уравнения (1.15), что позволяет выразить компоненты тензоров $\hat{\sigma}$, $\hat{\beta}$ и $\hat{\kappa}$ через введенные интегралы K_l^{\parallel} , K_l^H , K_l^{\perp} . Запишем уравнения (4.116), (4.117) в компонентах. Полагая, что магнитное поле H ориентировано вдоль оси Z , $\vec{h} \parallel \vec{e}_z$, $\vec{\varepsilon} = \varepsilon_x \vec{e}_x + \varepsilon_y \vec{e}_y + \varepsilon_z \vec{e}_z$, $\vec{\nabla} T = \nabla_x T \vec{e}_x + \nabla_y T \vec{e}_y + \nabla_z T \vec{e}_z$, где \vec{e}_x , \vec{e}_y , \vec{e}_z — единичные орты декартовой системы координат, получаем

$$\begin{aligned} J_x &= e^2 K_0^{\perp} \varepsilon_x + e^2 K_0^H \varepsilon_y - \frac{e}{T} K_1^{\perp} \nabla_x T - \frac{e}{T} K_1^H \nabla_y T, \\ J_y &= e^2 K_0^{\perp} \varepsilon_y - e^2 K_0^H \varepsilon_x - \frac{e}{T} K_1^{\perp} \nabla_y T + \frac{e}{T} K_1^H \nabla_x T, \\ J_z &= e^2 K_0^{\parallel} \varepsilon_z - \frac{e}{T} K_1^{\parallel} \nabla_z T, \end{aligned} \quad (4.119)$$

$$\begin{aligned} J_{Qx} &= e K_1^{\perp} \varepsilon_x + e K_1^H \varepsilon_y - \frac{1}{T} K_2^{\perp} \nabla_x T - \frac{1}{T} K_2^H \nabla_y T \\ J_{Qy} &= e K_1^{\perp} \varepsilon_y - e K_1^H \varepsilon_x - \frac{1}{T} K_2^{\perp} \nabla_y T + \frac{1}{T} K_2^H \nabla_x T, \\ J_{Qz} &= e K_1^{\parallel} \varepsilon_z - \frac{1}{T} K_2^{\parallel} \nabla_z T. \end{aligned} \quad (4.120)$$

Сравнивая (4.119), (4.120) с феноменологическими уравнениями переноса (1.15), можно найти компоненты тензоров $\hat{\sigma}$, $\hat{\beta}$ и $\hat{\kappa}$, выразив их через введенные выше интегралы K_l^{\parallel} , K_l^H , K_l^{\perp} :

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{\perp} & \sigma_H & 0 \\ -\sigma_H & \sigma_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_{\perp} & \beta_H & 0 \\ -\beta_H & \beta_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (4.121)$$

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & \chi_H & 0 \\ -\chi_H & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad \hat{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_{\perp} & \kappa_H & 0 \\ -\kappa_H & \kappa_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (4.122)$$

где мы ввели следующие обозначения:

$$\sigma_i = e^2 K_0^i, \quad \beta_i = \frac{e}{T} K_1^i, \quad \chi_i = e K_1^i, \quad \kappa_i = \frac{1}{T} K_2^i, \quad (4.123)$$

$i = \{\perp, \parallel, H\}$. Как упоминалось в главе 1, при проведении экспериментов значительно удобнее контролировать ток \vec{J} через образец, нежели градиент электрохимического потенциала $\vec{\varepsilon}$. Поэтому при исследовании термогальваномагнитных явлений определяются компоненты тензоров $\hat{\rho}$, $\hat{\alpha}$, $\hat{\Pi}$, $\hat{\kappa}$, явный вид которых можно получить, пользуясь формулами (1.35), (1.36) и (4.121) – (4.123). Производя необходимые преобразования тензорных величин, получаем

$$\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \rho_{\perp} & \rho_H & 0 \\ -\rho_H & \rho_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha} = \hat{\rho} \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \alpha_{\perp} & \alpha_H & 0 \\ -\alpha_H & \alpha_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\parallel} \end{pmatrix},$$

$$\hat{\tilde{\kappa}} = \hat{\kappa} - \hat{\chi} \hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \tilde{\kappa}_{\perp} & \tilde{\kappa}_H & 0 \\ -\tilde{\kappa}_H & \tilde{\kappa}_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\kappa}_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (4.124)$$

$$\rho_{\perp} = \frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\perp}^2 + \sigma_H^2}, \quad \rho_H = \frac{-\sigma_H}{\sigma_{\perp}^2 + \sigma_H^2}, \quad \rho_{\parallel} = \frac{1}{\sigma_{\parallel}},$$

$$\alpha_{\perp} = \frac{\beta_{\perp}\sigma_{\perp} + \beta_H\sigma_H}{\sigma_{\perp}^2 + \sigma_H^2}, \quad \alpha_H = \frac{\beta_H\sigma_{\perp} - \beta_{\perp}\sigma_H}{\sigma_{\perp}^2 + \sigma_H^2}, \quad \alpha_{\parallel} = \frac{\beta_{\parallel}}{\sigma_{\parallel}},$$

$$\tilde{\kappa}_{\perp} = \kappa_{\perp} - \chi_{\perp}\alpha_{\perp} + \chi_H\alpha_H, \quad \tilde{\kappa}_H = \kappa_H - \chi_{\perp}\alpha_H - \chi_H\alpha_{\perp},$$

$$\tilde{\kappa}_{\parallel} = \kappa_{\parallel} - \chi_{\parallel}\alpha_{\parallel}. \quad (4.125)$$

Отметим основные особенности полученных выражений для кинетических коэффициентов. Как следует из формул (4.121), (4.122), (4.124), структура тензоров $\hat{\rho}$, $\hat{\alpha}$, $\hat{\Pi}$, $\hat{\kappa}$ характерна для гиротропных сред и совпадает со структурой, которая предполагалась в главе 1. Далее, диагональные компоненты тензоров, характеризующие явления в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, содержат лишь четные степени магнитного поля, а продольные составляющие тензоров $\hat{\rho}$, $\hat{\alpha}$, $\hat{\Pi}$, $\hat{\kappa}$ не зависят от магнитного поля. Отличные от нуля недиагональные элементы, имеющие тензорные индексы xu и yx , нечетны по магнитному полю, равны между собой по абсолютной величине, но имеют противоположные знаки. Учитывая все сказанное,

можно утверждать, что полученные выражения для кинетических коэффициентов удовлетворяют соотношениям симметрии Онсагера

$$\begin{aligned}\rho_{ik}(\vec{H}) &= \rho_{ki}(-\vec{H}), \quad \alpha_{ik}(\vec{H}) = \alpha_{ki}(-\vec{H}), \\ \tilde{\kappa}_{ik}(\vec{H}) &= \tilde{\kappa}_{ki}(-\vec{H}).\end{aligned}\tag{4.126}$$

Еще одно соотношение следует из формул (4.122), (4.123) и связывает между собой тензоры $\hat{\beta}$ и $\hat{\kappa}$: $\hat{\beta}T = \hat{\kappa}$. Отсюда, учитывая результат (1.36), получаем

$$\Pi_{ik}(\vec{H}) = \alpha_{ik}(\vec{H})T.\tag{4.127}$$

§ 9. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в полупроводниках с параболическим законом дисперсии

Рассмотрим термогальваномагнитные явления, качественно обсуждавшиеся в главе 1, и, пользуясь результатами (4.118), (4.124), (4.125), вычислим кинетические коэффициенты, определяющие эти эффекты.

Необходимо сразу указать на ограниченную применимость получаемых таким образом результатов, поскольку простейший вариант электронной теории кинетических явлений переноса в приближении времени релаксации и учете только одной группы носителей заряда с изотропным квадратичным законом дисперсии не может дать даже качественного объяснения зависимости кинетических коэффициентов от амплитуды и ориентации магнитного поля в металлах в случае сильных магнитных полей. В этом случае электрон, двигаясь по ларморовской орбите, проходит между двумя актами рассеяния значительный участок поверхности Ферми и успевает «почувствовать» ее реальную структуру. Гальваномагнитные явления в сильных магнитных полях весьма чувствительны к особенностям энергетического спектра носителей заряда и служат надежным способом определения структуры поверхности Ферми [28, 32].

В случае полупроводников с одним экстремумом зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна наиболее серьезные ограничения связаны с необходимостью учета квантования, если выполняется условие $\hbar\omega_0 \gg k_B T$. Поэтому будем предполагать, что магнитное поле не является квантующим и выполняется неравенство $\hbar\omega_0 \ll k_B T$, что позволяет использовать квазиклассическое приближение для описания движения электрона в магнитном поле.

Учет наличия нескольких эквивалентных минимумов (долин) в симметричных точках зоны Бриллюэна и эллипсоидальный характер изоэнергетических поверхностей, имеющий место в ряде полупроводниковых материалов (Ge, Si), может быть произведен без существенных изменений основных положений рассматриваемой теории [8, 31] и поэтому здесь рассматриваться не будет.

Наиболее полный обзор результатов по теории термомагнитных и гальваномагнитных явлений приведен в монографии Б. М. Аскерова [8], где имеется и обширная библиография по этому вопросу. Рамки книги не позволяют рассмотреть с необходимой строгостью и полнотой всю совокупность современных результатов по теории термогальваномагнитных явлений. Поэтому рассмотрим лишь самую простую ситуацию: полупроводник со стандартной зоной проводимости в случаях 1) предельно сильного вырождения электронного газа и 2) невырожденного электронного газа, подчиняющегося статистике Максвелла – Больцмана.

Рассмотрим вычисление интегралов K_l^{\parallel} , K_l^H , K_l^{\perp} , определенных выражением (4.118) в упомянутых предельных случаях 1 и 2.

Сравнивая формулы (4.33) и (4.118), видим, что интегралы K_l^{\parallel} совпадают с интегралами K_l , которые мы уже вычисляли выше (с. 232). Поэтому рассмотрим только проблему вычисления интегралов K_l^{\perp} и K_l^H .

В пределе сильновырожденного электронного газа для вычисления интересующих нас интегралов воспользуемся формулой (4.35). В случае интегралов K_0^{\perp} и K_0^H достаточно ограничиться первым приближением по параметру разложения $k_B T / \zeta$

в формуле (4.35) и заменить производную $-\partial f_0/\partial \varepsilon$ дельта-функцией $\delta(\varepsilon - \zeta)$:

$$K_0^\perp = \frac{n}{m} \frac{\tau_{\vec{p}}(\zeta)}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}, \quad K_0^H = \omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta) K_0^\perp. \quad (4.128)$$

Для вычисления интегралов K_1^i , K_2^i $i = \{\perp, H\}$, в формуле (4.33) необходимо удержать квадратичный по параметру малости $k_B T/\zeta$ член разложения

$$\begin{aligned} \left| \begin{array}{c} K_1^H \\ K_1^\perp \end{array} \right| &= \frac{\pi^2}{2} \frac{(k_B T)^2}{\zeta} \frac{n}{m} \frac{\tau_{\vec{p}}(\zeta)}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2} \times \\ &\times \left| \begin{array}{c} \omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta) \left[1 + \frac{4/3 r}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2} \right] \\ 1 + \frac{2r}{3} \frac{1 - [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2} \end{array} \right|, \end{aligned} \quad (4.129)$$

$$K_2^i = \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 K_0^i, \quad i = \{\perp, H\}. \quad (4.130)$$

При выводе формулы (4.129) мы предполагали, как и раньше, что

$$\tau_{\vec{p}}(\varepsilon_{\vec{p}}) = \tau_0 (\varepsilon_{\vec{p}}/k_B T)^r,$$

и учли, что

$$\frac{\zeta}{\tau_{\vec{p}}(\zeta)} \frac{d\tau_{\vec{p}}(\zeta)}{d\zeta} = r.$$

В случае невырожденного электронного газа, подчиняющегося статистике Максвелла – Больцмана, целесообразно сразу рассмотреть лишь случай слабых магнитных полей, когда выполняется неравенство $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$, и оставить в интегралах (4.118) лишь первый исчезающий член по параметру $\omega_0 \tau_{\vec{p}}$.

Используя определение среднего $\langle \tau_{\vec{p}}(x) x^k \rangle$ (4.49) и определение концентрации электронов (4.44), после несложных преобразований получаем:

$$\left| \begin{array}{c} K_l^H \\ K_l^\perp \end{array} \right| = \frac{n}{m} (k_B T)^l \times$$

$$\times \left| \begin{array}{c} \omega_0 \langle \tau_{\vec{p}}(x)^2 (x - \zeta/k_B T)^l \rangle \\ \langle \tau_{\vec{p}}(x) (x - \zeta/k_B T)^l \rangle - \omega_0^2 \langle \tau_{\vec{p}}(x)^3 (x - \zeta/k_B T)^l \rangle \end{array} \right|. \quad (4.131)$$

Перейдем теперь к обсуждению некоторых гальваномагнитных и термомагнитных эффектов, используя полученные выражения для интегралов K_l^i .

Эффект Холла

Постоянная Холла R на основании формулы (1.57) определяется недиагональной компонентой тензора электропроводности ρ_{xy} . Учитывая формулы (4.124), (4.125), получаем выражение константы Холла через интегралы K_0^\perp и K_0^H

$$R = \frac{1}{H} \frac{\sigma_H}{\sigma_H^2 + \sigma_\perp^2} = \frac{1}{He^2} \frac{K_0^H}{(K_0^\perp)^2 + (K_0^H)^2}. \quad (4.132)$$

Подстановка в эту формулу результатов (4.128), (4.131) дает

$$R = \frac{1}{enc} \quad (4.133)$$

в случае сильного вырождения и

$$R = \frac{\gamma}{enc}, \quad \gamma = \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)^2 \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle^2} \quad (4.134)$$

для невырожденных полупроводников. Значение параметра γ зависит от механизма рассеяния носителей заряда и варьируется в пределах $\gamma \simeq 1,18 - -1,93$ при изменении значения показателя рассеяния от $r = -1/2$ (рассеяние на акустических фононах) до $r = 3/2$ (рассеяние на заряженных примесях).

Изменение поперечного сопротивления в магнитном поле

В случае металлов точность, с которой вычислялись интегралы K_0^\perp и K_0^H , недостаточна и подстановка результатов (4.128) в формулу (4.125) не дает зависимости сопротивления от магнитного поля. Этот результат можно было бы предсказать заранее, поскольку, как отмечалось в главе 1, изменение сопротивления в магнитном поле связано с тем, что холловское поле компенсирует магнитную составляющую силы Лоренца лишь в среднем, а более быстрые и более медленные электроны движутся по искривленным траекториям, что уменьшает эффективную длину их свободного пробега. Поэтому для получения полевой зависимости величины $\Delta \rho / \rho$ следует, воспользовавшись формулой (4.35), произвести дальнейшее разложение интегралов K_0^\perp , K_0^H по малому параметру $k_B T / \zeta$. Хотя эти вычисления сводятся к элементарным алгебраическим преобразованиям, они достаточно громоздки и мы приведем здесь лишь окончательный результат, а детали вычислений рассмотрим в качестве примера:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\zeta} \right)^2 \frac{[\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}. \quad (4.135)$$

Для невырожденных полупроводниковых материалов рассмотрим лишь случай слабых магнитных полей $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$ и воспользуемся результатами (4.131) для интегралов K_0^\perp и K_0^H . В результате получаем

$$\rho_{xx}(H) = \rho_{xx}(0) \left\{ 1 + \omega_0^2 \left[\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)^3 \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle} - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)^2 \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle^2} \right] \right\}. \quad (4.136)$$

Выражение (4.136) можно записать в более удобной форме, вводя безразмерный параметр

$$T_r = \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)^3 \rangle \langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle - \langle \tau_{\vec{p}}(x)^2 \rangle^2}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle^4}.$$

Тогда для относительного изменения сопротивления в магнитном поле получается достаточно простое выражение

$$\frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_{xx}} = (\omega_0 < \tau_{\vec{p}}(x) >)^2 T_r. \quad (4.137)$$

Из формулы (4.137) следует, что относительное изменение сопротивления в магнитном поле фактически определяется параметром $\omega_0 < \tau_{\vec{p}}(x) >$, поскольку безразмерный фактор T_r слабо зависит от показателя рассеяния r и варьируется в интервале от 0,38 для $r = -1/2$ до $\sim 2,15$ при $r = 3/2$.

Поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена

Поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена определяется недиагональной компонентой тензора дифференциальной термоэдс α_H (4.125). Опуская простые, но достаточно громоздкие вычисления с использованием формул (4.56), (4.57), (4.123), (4.125), приведем лишь итоговый результат, пригодный в условиях сильного вырождения, когда интегралы K_0^\perp , K_0^H вычисляются в нулевом приближении по малому параметру $k_B T / \zeta$, а интегралы K_1^\perp , K_1^H – в первом исчезающем приближении по этому параметру (см. формулу (4.35))

$$Q_{\text{нэ}} = \frac{\alpha_H}{H} = \frac{\beta_H \sigma_\perp - \beta_\perp \sigma_H}{H (\sigma_\perp^2 + \sigma_H^2)} = \frac{k_B}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{\mu_e}{c} \frac{k_B T}{\zeta} r. \quad (4.138)$$

В этой формуле $\mu_e = e \tau_{\vec{p}}(\zeta) / m$ – подвижность электронов ($\mu_e / c = \omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta) / H$). Из приведенного выражения для коэффициента $Q_{\text{нэ}}$ следует, что знак эффекта напрямую определяется знаком показателя рассеяния r . Этот факт позволяет определять экспериментально смену преобладающего механизма рассеяния электронов (например, для рассеяния на нейтральных примесях $r = 3/2$, а для рассеяния на длинноволновых акустических колебаниях $r = -1/2$).

Для невырожденного электронного газа приведем результат, пригодный лишь для случая слабого магнитного поля $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$:

$$Q_{\text{нэ}} = \frac{k_B}{e} \frac{\mu_e}{c} \left[\frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x)^2 x \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle^2} - \frac{\langle \tau_{\vec{p}}(x) x \rangle \langle \tau_{\vec{p}}(x)^3 \rangle}{\langle \tau_{\vec{p}}(x) \rangle^3} \right]. \quad (4.139)$$

Легко показать, что знак квадратной скобки в формуле (4.139) также определяется знаком величины показателя рассеяния r и поэтому смена знака коэффициента Нернста – Эттинсгаузена может свидетельствовать о смене механизма рассеяния электронов вне зависимости от того, вырожден электронный газ или нет.

Продольный эффект Нернста – Эттинсгаузена

Пользуясь определениями (4.125), имеем

$$\alpha_{xx}(H) \equiv \alpha_{\perp} = \beta_{\perp} \rho_{\perp} + \beta_H \rho_H. \quad (4.140)$$

В случае сильного вырождения электронного газа и пределе слабого магнитного поля $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \ll 1$ в результате несложных вычислений получаем

$$\alpha_{xx}(H) - \alpha_{xx}(0) = \frac{k_B}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B T}{\zeta} [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2 r. \quad (4.141)$$

Для невырожденных полупроводниковых материалов в пределе слабых магнитных полей получаем

$$\begin{aligned} \alpha_{xx}(H) - \alpha_{xx}(0) = & -\frac{k_B}{e} [\omega_0 < \tau_{\vec{p}}(x) >]^2 \Gamma(5/2)^2 \times \\ & \times \left\{ \frac{\Gamma(5/2 + 2r)^2}{\Gamma(5/2 + r)^4} - 2 \frac{\Gamma(5/2 + 3r)}{\Gamma(5/2 + r)^3} \right\} r. \end{aligned} \quad (4.142)$$

Продольный эффект Нернста – Эттинсгаузена, так же как и поперечный эффект, пропорционален показателю рассеяния r , однако этот эффект значительно слабее поперечного, поскольку содержит дополнительный малый параметр $\omega_0 < \tau_{\vec{p}}(x) >$ в квадрате.

Задача 4.5

Получить выражение (4.135) для величины $\Delta \rho / \rho$ в условиях предельно сильного вырождения и сильных магнитных полей.

Решение

Заметим, что

$$\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}(0) = - \Delta \sigma_{xx} / \sigma.$$

На основании формул (4.123), (4.125)

$$\Delta \sigma_{xx} = 1/\rho_{\perp} - \sigma = e^2 \left[K_0^{\perp} + \frac{K_0^H K_0^H}{K_0^{\perp}} - K_0 \right].$$

В нулевом приближении по параметру $k_B T / \zeta$ величина $\Delta \sigma_{xx} = 0$. Поэтому нашей задачей является выделение с использованием разложения (4.35) слагаемых, пропорциональных малому параметру $k_B T / \zeta$ в квадрате.

Производя разложение, получаем

$$\begin{aligned} \Delta \sigma_{xx} = e^2 \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left\{ g(\varepsilon) \tau_{\vec{p}}(\varepsilon) \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\varepsilon))^2} + 2 \frac{\omega_0^2 \tau_{\vec{p}}(\varepsilon) \tau_{\vec{p}}(\zeta)}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\varepsilon))^2} - \frac{\omega_0^2 \tau_{\vec{p}}(\zeta)^2}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\varepsilon))^2} - 1 \right] \right\} \Big|_{\varepsilon=\zeta}. \end{aligned} \quad (4.143)$$

В формуле (4.143) введено обозначение

$$g(\varepsilon) = \frac{2(2m)^{1/2} \varepsilon^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Произведя элементарные алгебраические преобразования в квадратной скобке выражения (4.143), приведем ее к виду, удобному для дальнейших вычислений,

$$\Delta \sigma_{xx} = -e^2 \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left\{ \frac{g(\varepsilon) \tau_{\vec{p}}(\varepsilon) \omega_0^2}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\varepsilon))^2} [\tau_{\vec{p}}(\varepsilon) - \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2 \right\} \Big|_{\varepsilon=\zeta}. \quad (4.144)$$

Поскольку в выражении (4.144) стоит разность $[\tau_{\vec{p}}(\varepsilon) - \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2$, которая обращается в нуль при $\varepsilon = \zeta$, получаем

$$\Delta \sigma_{xx} = -e^2 \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \frac{g(\zeta) \tau_{\vec{p}}(\zeta) \omega_0^2}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta))^2} [\tau'_{\vec{p}}(\zeta)]^2.$$

Наконец, учитывая, что

$$\sigma = e^2 K_0 = e^2 g(\zeta) \tau_{\vec{p}}(\zeta), \quad [\tau'_{\vec{p}}(\zeta)]^2 = 1/4 \tau_{\vec{p}}^2(\zeta) / \zeta^2,$$

получаем

$$\frac{\Delta \sigma_{xx}}{\sigma} = -\frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\zeta} \right)^2 \frac{[\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}{1 + [\omega_0 \tau_{\vec{p}}(\zeta)]^2}. \quad (4.145)$$

На этом мы заканчиваем обсуждение различных термогальваномагнитных эффектов. Остались нерассмотренными эффекты Маджи – Риги – Ледюка, Нернста, Эттинсгаузена, Риги – Ледюка и адиабатические эффекты. Вычисление кинетических коэффициентов, характеризующих эти явления, мы предлагаем в качестве задач для самостоятельного решения.

Более полная информация по теории термогальваномагнитных явлений имеется в монографиях [8, 32].

4.2. Гидродинамическое описание системы горячих электронов

§ 10. Переход к гидродинамическому описанию

Для теоретического изучения неравновесных состояний электронного газа не всегда нужно иметь решение сложного интегродифференциального кинетического уравнения, поскольку зачастую вся информация, содержащаяся в этом решении, все равно не используется. Действительно, хорошо известно, что существует важный класс задач физической кинетики, закономерности которого описываются уравнениями гидрогазодинамики [22–25].

В главе 3 достаточно подробно рассмотрена процедура перехода от кинетического описания неравновесной системы к гидродинамическому на примере вывода уравнений Чепмена – Энскога. Применим идеи, развитые в этой главе, для перехода к гидродинамическому описанию системы горячих электронов в полупроводниковых кристаллах. Очевидно, что гидродинамические уравнения существенно более простые по сравнению с кинетическим уравнением, поскольку в них фигурируют некоторые усредненные по импульсу характеристики микрочастиц.

Это позволяет применить гидродинамическое описание для тех случаев, когда решение кинетического уравнения получить не удастся.

Переход к усредненному по импульсам описанию соответствует более грубой, а следовательно, менее полной картине изучаемого явления. Тем не менее идея о возможном сокращении описания системы является чрезвычайно плодотворной и в том или ином виде используется при решении практически всех задач физической кинетики. Например, при выводе кинетического уравнения в методе Боголюбова возникает система зацепляющихся уравнений для s -частичных функций распределения. Эта бесконечная система зацепляющихся уравнений эквивалентна динамическому описанию. Сокращение в описании возникает тогда, когда удастся, используя некоторые приближения, выразить двухчастичную функцию распределения через одночастичную и тем самым замкнуть систему уравнений. Аналогичный подход используется и в методе функций Грина. Система зацепляющихся уравнений движения для всех старых и новых функций Грина эквивалентна полному динамическому описанию. Как показано в главе 1, в большинстве реальных систем реализуется состояние динамического хаоса. В этом случае динамическое описание просто бессмысленно, а имеет смысл огрубленное (усредненное) описание. В методе функций Грина огрубление в описании возникает при расцеплении зацепляющихся уравнений движения для функций Грина (полагается, например, что $n + 1$ -функция Грина выражается через низшие функции Грина).

Физическая причина возможного сокращения описания кроется в том, что по мере роста временного масштаба, на котором исследуется динамика системы, происходит вымирание определенных корреляций между динамическими переменными и хаотическая динамика исходных динамических переменных сменяется закономерной динамикой для усредненных величин. Впервые со всей ясностью идея сокращения в описании была сформулирована в работе Н. Н. Боголюбова [20].

Согласно Боголюбову, в случае газа малой плотности можно выделить четыре стадии эволюции динамической системы и соответственно этому четыре различных способа описания.

Динамическая стадия эволюции соответствует точному механическому описанию системы. Никакого сокращения в описании не происходит. Этой стадии эволюции соответствует временной интервал

$$t < \frac{r_0}{\bar{v}},$$

где r_0 – эффективный радиус взаимодействия в системе, \bar{v} – средняя скорость частиц. Как отмечалось в главе 1, для систем, демонстрирующих динамический хаос, динамическое описание является бессмысленным. Оно пригодно лишь для крайне узкого класса систем, демонстрирующих регулярное движение фазовой точки в фазовом пространстве.

За время $t_1 \approx r_0/\bar{v}$ происходит синхронизация функций распределения и n -частичная функция распределения выражается через одночастичную функцию распределения. Таким образом, *кинетическая стадия* эволюции соответствует описанию системы на языке одночастичной функции распределения. Временной масштаб, характерный для кинетической стадии эволюции, определяется неравенствами

$$\frac{r_0}{\bar{v}} < t < \frac{l}{\bar{v}},$$

где l – длина свободного пробега частиц.

За время l/\bar{v} , которое по порядку величины совпадает с временем релаксации импульса, в системе успевают сформироваться средние, имеющие смысл среднего числа частиц, средней энергии, среднего импульса, т. е. гидродинамические переменные. Поэтому на временах

$$t > \frac{l}{\bar{v}}$$

возникает *гидродинамическая стадия* эволюции системы. На этой стадии система описывается заданием гидродинамических параметров, которые обычно связаны со средними значениями величин, являющихся аддитивными интегралами движения, поскольку именно эти величины обычно являются «долгоживущими» переменными.

Наконец, на временах

$$t > \frac{L}{v},$$

где L – характерный линейный размер системы, наступает *тепловая стадия* эволюции системы. На этой стадии в системе успевают завершиться неравновесные процессы и устанавливается термодинамическое равновесие. Для описания системы достаточно использовать уравнения равновесной термодинамики.

Все сказанное о наличии нескольких стадий эволюции системы и иерархии времен релаксации в полной мере применимо и к газу электронов, взаимодействующих с фононами. Мы хотим получить систему гидродинамических уравнений для описания электронов проводимости при наличии достаточно сильного электрического поля. Полагая, что внешнее электрическое поле приводит не только к появлению среднего дрейфового импульса электронов, но и к изменению средней энергии электронов, введем в качестве гидродинамических параметров температуру кинетических степеней свободы электронов проводимости T_k , связанную со средней кинетической энергией электронов; дрейфовую скорость электронов \vec{v}_d , связанную со средним импульсом электронов, и неравновесный химический потенциал ζ , связанный со средним числом электронов проводимости. Функциональный вид зависимости неравновесной функции распределения от введенных параметров T_k , \vec{v}_d , ζ не является принципиально важным и может быть выбран из соображений удобства. При установлении в системе состояния термодинамического равновесия неравновесная функция распределения должна переходить в равновесную функцию Ферми – Дирака. Учитывая это, запишем неравновесную функцию распределения в виде

$$f_{\vec{k}} = \left\{ \exp \left[\beta_k \varepsilon_{\vec{k} - m\vec{v}_d/\hbar} - \beta \zeta \right] + 1 \right\}^{-1},$$

$$\varepsilon_{\vec{k} - m\vec{v}_d/\hbar} = \frac{\hbar^2 (\vec{k} - m\vec{v}_d/\hbar)^2}{2m}, \quad \beta_k = \frac{1}{k_B T_k}. \quad (4.146)$$

Таким образом, мы ввели пять эффективных параметров T_k , \vec{v}_d , ζ , которые связаны со средними значениями динамических величин, являющихся аддитивными интегралами движения. Такой способ параметризации неравновесной функции распределения согласуется также и с теоремой Гильберта, утверждающей, что если решение кинетического уравнения существует, то оно может быть выражено через первые пять моментов функции распределения. Для нахождения этих параметров необходимо получить пять уравнений баланса, имеющих смысл уравнения баланса энергии, импульса и числа частиц.

Необходимо сделать несколько замечаний относительно применимости понятия температуры электронной подсистемы. Если считать, что равновесие внутри электронной системы устанавливается в основном за счет электрон-электронных столкновений, частоту которых обозначим ν_{ee} , а изменение энергии и импульса электронной системы происходит за счет взаимодействия с длинноволновыми фононами с характерной частотой ν_{ep} , то для того, чтобы можно было говорить об эффективной электронной температуре, отличающейся от температуры фононной системы, необходимо выполнение условия

$$\nu_{ee} \gg \nu_{ep}.$$

В некоторых случаях и это условие оказывается недостаточным. Если, например, электроны взаимодействуют с оптическими фононами, то энергия электронов в каждом акте рассеяния будет изменяться на величину кванта оптического фонона $\hbar\Omega_0$, а в процессе электрон-электронных столкновений – на величину $\simeq k_B T \ll \hbar\Omega_0$. Поэтому электроны могут не успеть термализоваться, несмотря на то что условие $\nu_{ee} \gg \nu_{ep}$ выполняется. В дальнейшем всегда будем предполагать, что условия применимости описания на языке эффективных параметров T_k , \vec{v}_d , ζ выполняются.

§ 11. Уравнение баланса импульса

Символически кинетическое уравнение, которое будем использовать далее в этой главе, можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{поле}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = 0, \quad (4.147)$$

где первое слагаемое в левой части имеет смысл скорости изменения функции распределения за счет действия внешнего электрического поля

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{поле}} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_{\vec{k}}, \quad (4.148)$$

а второе слагаемое представляет собой интеграл столкновений (4.88), который численно равен скорости изменения функции распределения за счет столкновений.

Для получения уравнения баланса импульса умножим уравнение (4.147) на $\hbar \vec{k}$ и просуммируем по \vec{k} и σ . В результате получим уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P} \rangle\right)_{\text{поле}} + \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P} \rangle\right)_{\text{ст}} = 0. \quad (4.149)$$

Первый член в левой части (4.149) равен скорости изменения среднего импульса электронной системы за счет действия внешнего поля, а второй член описывает изменение среднего импульса за счет столкновения с рассеивателями. Используя выражение (4.148), первое слагаемое в формуле (4.149) запишем в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle\right)_{\text{поле}} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar \vec{k}^\alpha \frac{e}{\hbar} E^\beta \nabla_{\vec{k}}^\beta f_{\vec{k}}. \quad (4.150)$$

При составлении уравнения баланса импульса следует ограничиться линейным приближением по дрейфовой скорости \vec{v}_d и линейным приближением по электрическому полю. Это означает, что в формуле (4.150) можно опустить дрейфовую скорость

в выражении для функции распределения, заменив величину $f_{\vec{k}}$ величиной $f_{\vec{k}}^s$, в которой дрейфовая скорость опущена,

$$f_{\vec{k}}^s = \{\exp[\beta_k \varepsilon_{\vec{k}} - \beta \zeta] + 1\}^{-1}.$$

Переходя в формуле (4.150) к интегрированию по энергии, получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle\right)_{\text{поле}} = -eE^\alpha \frac{(2mk_B T_k)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}\left(\frac{\zeta}{k_B T}\right) = -enE^\alpha. \quad (4.151)$$

Рассмотрим теперь второй член в левой части (4.149). Умножая выражение (4.88) на $\hbar \vec{k}$ и суммируя по \vec{k} и σ , получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle\right)_{\text{ст}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, \sigma, \vec{q}, \lambda} \hbar k^\alpha |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \{ [(N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}} (1 - f_{\vec{k}}) - \\ &- N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}})] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}) + [N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}-\vec{q}} (1 - f_{\vec{k}}) - \\ &- (N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}-\vec{q}})] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}) \}. \quad (4.152) \end{aligned}$$

Поскольку суммирование по волновому вектору \vec{k} производится в бесконечных пределах, то при суммировании членов во второй квадратной скобке можно сдвинуть начало отсчета на произвольный вектор \vec{q} , положив $\vec{k} - \vec{q} = \vec{k}'$, $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q}$. После такой замены легко обнаружить, что квадратные скобки в выражении (4.152) равны по модулю, но имеют противоположные знаки, а аргументы δ -функций совпадают между собой. В результате формула заметно упрощается:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle\right)_{\text{ст}} &= -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, \sigma, \vec{q}, \lambda} \hbar q^\alpha |C_{\vec{q}\lambda}|^2 [(N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}} (1 - f_{\vec{k}}) - \\ &- N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}})] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}). \quad (4.153) \end{aligned}$$

Выделим в правой части (4.153) члены, линейные по дрейфовой скорости. Так как дрейфовая скорость содержится в функции распределения, разложим ее в ряд Тейлора, ограничиваясь линейными членами:

$$f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^s - \frac{\partial f_{\vec{k}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \hbar k^\alpha v_d^\alpha. \quad (4.154)$$

Подставляя это разложение для функции распределения в выражение, определяющее скорость изменения среднего импульса электронов за счет столкновений, для правой части (4.153) получаем

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{q}\lambda} \frac{1}{3} (\hbar\vec{q})^2 v_d^\alpha |C_{\vec{q}\lambda}|^2 [(N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}}^s{}' (1 - f_{\vec{k}}^s) + \\ & + N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}}^s f_{\vec{k}+\vec{q}}^s{}'] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}), \quad f_{\vec{k}+\vec{q}}^s{}' = \frac{\partial f_{\vec{k}+\vec{q}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}}. \end{aligned} \quad (4.155)$$

При выводе формулы (4.155) мы учли, что подстановка симметричной части функции распределения $f_{\vec{k}}^s$ и $f_{\vec{k}+\vec{q}}^s$ обращает правую часть (4.153) в нуль, что совершенно ясно из физических соображений и легко может быть доказано из соображений симметрии, если учесть, что под знаком суммы в этом случае оказывается выражение, нечетное по степеням \vec{q} . Отличный от нуля результат возникает лишь при разложении функции $f_{\vec{k}+\vec{q}}^s$, который в соответствии с формулой (4.154) пропорционален $\vec{k} + \vec{q}$, что и дает в итоге члены, пропорциональные q^2 .

Суммируя полученные результаты (4.151), (4.155), сформулируем уравнения баланса импульса. Вводя суммарный дрейфовый импульс электронной системы $\vec{P}_d = \langle \vec{P} \rangle = nm\vec{v}_d$, имеем

$$|e|nE^\alpha = \frac{nm\vec{v}_d}{\tau}, \quad (4.156)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = & -\frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{3nm} \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{q}\lambda} (\hbar\vec{q})^2 |C_{\vec{q}\lambda}|^2 [(N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}}^s{}' (1 - f_{\vec{k}}^s) + \\ & + N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}}^s f_{\vec{k}+\vec{q}}^s{}'] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}). \end{aligned} \quad (4.157)$$

Уравнение баланса импульса (4.156) имеет совершенно ясный смысл: сила, действующая на систему электронов со стороны внешнего электрического поля, равна по величине и противоположна по направлению силе, действующей со стороны решетки. Величина τ , определяемая формулой (4.157), имеет смысл

времени релаксации среднего (полного) импульса электронной системы.

Три уравнения баланса импульса (4.156) содержат в нашем случае пять неизвестных: три компоненты дрейфовой скорости, неравновесную температуру кинетических степеней свободы электронной системы T_k и неравновесный химический потенциал ζ . Если внешнее электрическое поле является достаточно слабым и не приводит к разогреву электронной системы, то температуру и химический потенциал можно считать равновесными параметрами. В этом случае величина $1/\tau$ (4.157) не содержит неизвестные параметры и уравнение баланса импульса (4.156) сразу позволяет найти компоненты дрейфовой скорости, а следовательно, и электропроводность равновесной системы

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m} \tau_0,$$

где τ_0 – время релаксации импульса электронов в условиях равновесия.

Получим выражение для времени релаксации полного импульса равновесной системы. Для этих целей преобразуем формулу (4.157), полагая, что температура и химический потенциал являются равновесными ($T_k = T$, $\zeta = \zeta_0$, ζ_0 – здесь и далее равновесный химический потенциал). Для преобразования этой формулы воспользуемся свойствами равновесной функции распределения Ферми – Дирака f_k^0 и функции Планка $N_{\vec{q}\lambda}$:

$$1 - f_k^0 = f_k^0 e^{\beta(\varepsilon_k - \zeta_0)}, \quad f_k^{0'} = -\beta f_k^0 (1 - f_k^0),$$

$$N_{\vec{q}\lambda} + 1 = N_{\vec{q}\lambda} e^{\beta \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (4.158)$$

С учетом этих результатов преобразуем квадратную скобку формулы (4.157):

$$(N_{\vec{q}\lambda} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}}^{0'} (1 - f_k^0) + N_{\vec{q}\lambda} f_k^0 f_{\vec{k}+\vec{q}}^{0'} =$$

$$= N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}+\vec{q}}^{0'} f_k^0 \left[e^{\beta(\hbar \Omega_{\vec{q}\lambda} + \varepsilon_k - \zeta_0)} + 1 \right] = -\beta N_{\vec{q}\lambda} f_k^0 (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^0). \quad (4.159)$$

При выводе формулы (4.159) мы воспользовались законом сохранения энергии $\hbar \Omega_{\vec{q}\lambda} + \varepsilon_k = \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}$.

Учитывая этот результат, выражение для времени релаксации среднего импульса электронов запишем в виде

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\beta}{3nm} \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{q}\lambda} (\hbar\vec{q})^2 |C_{\vec{q}\lambda}|^2 N_{\vec{q}\lambda} f_{\vec{k}}^0 (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^0) \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}). \quad (4.160)$$

Завершая рассмотрение равновесного случая, вычислим частоту релаксации среднего импульса $\nu_{ep} = 1/\tau_0$ системы электронов для случая квазиупругого рассеяния электронов на акустических фононах. В этом случае энергией фонона $\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}$ в законе сохранения энергии можно пренебречь. Переходя в формуле (4.160) от суммирования по \vec{k} и \vec{q} к интегрированию по \vec{p} , \vec{q} и выполняя суммирование по σ , которое сводится просто к дополнительному умножению результата на два, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{3nm} \frac{2}{(2\pi)^6 \hbar^3} \int d\vec{p} d\vec{q} (\hbar\vec{q})^2 |C_{\vec{q}}|^2 \frac{k_B T}{\hbar s q} \times \\ \times \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_{\vec{p}}^0}{\partial \varepsilon} \right) \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} - \varepsilon) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon). \end{aligned} \quad (4.161)$$

При выводе (4.161) мы воспользовались приближением (4.89) и учли, что при взаимодействии электронов с акустическими колебаниями решетки в методе потенциала деформации вклад дает только взаимодействие с продольными акустическими фононами. По этой причине индекс поляризации в формуле (4.161) опущен.

Рассмотрим подробнее входящий в выражение (4.161) интеграл по импульсам

$$I(q) = \int d\vec{p} \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} - \varepsilon) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon). \quad (4.162)$$

Переходя к интегрированию в сферической системе координат, получаем

$$I(q) = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty p^2 dp \delta\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{p\hbar q}{m} \cos \theta - \varepsilon\right) \delta\left(\frac{p^2}{2m} - \varepsilon\right). \quad (4.163)$$

После интегрирования в формуле (4.163) по импульсу с использованием второй из δ -функций остается только интеграл по переменной $x = \cos \theta$:

$$I(q) = 2\pi m\sqrt{2m\varepsilon} \int_{-1}^1 dx \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \sqrt{2m\varepsilon} \frac{\hbar q}{m} x\right). \quad (4.164)$$

Сделаем в интеграле (4.164) замену переменных, обозначив

$$y = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \sqrt{2m\varepsilon} \frac{\hbar q}{m} x.$$

В новых переменных интеграл (4.164) будет иметь вид

$$I(q) = \frac{2\pi m^2}{\hbar q} \int_{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \sqrt{2m\varepsilon} \frac{\hbar q}{m}}^{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \sqrt{2m\varepsilon} \frac{\hbar q}{m}} dy \delta(y). \quad (4.165)$$

Интеграл (4.165) отличен от нуля только тогда, когда значение $y = 0$ включается в область интегрирования. Это накладывает ограничение на область изменения волновых векторов фононов \vec{q} , взаимодействующих с электронами. Учитывая все сказанное, окончательно для интеграла $I(q)$ получаем простое выражение

$$I(q) = \frac{2\pi m^2}{\hbar q}, \quad 0 < q < \left(\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}. \quad (4.166)$$

Дальнейшие вычисления на основании формулы (4.161) сводятся фактически к интегрированию степенной функции q^3 и сведению интеграла по энергии к интегралу Ферми (4.34). Не будем останавливаться на этих простых вычислениях и приведем сразу результат:

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{2E_0^2(2mk_B T)^{3/2}}{3\pi^2 \rho s^2 \hbar^4} \frac{F_1(\zeta_0/k_B T)}{F_{1/2}(\zeta_0/k_B T)}. \quad (4.167)$$

При записи этой формулы мы воспользовались определением концентрации равновесных электронов

$$n = \frac{(2mk_{\text{B}}T)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} F_{1/2}(\zeta_0/k_{\text{B}}T). \quad (4.168)$$

Перейдем теперь к рассмотрению неравновесного случая. Будем полагать, что $N_{\vec{q}} \gg 1$, поэтому $N_{\vec{q}} + 1 \simeq N_{\vec{q}}$. Это условие накладывает некоторые ограничения на температуру системы. Если учесть формулу (4.166) и положить, что средняя кинетическая энергия электронов $\bar{\varepsilon} \simeq k_{\text{B}}T$, то неравенство в формуле (4.89) можно записать в виде

$$N_{\vec{q}} \simeq \frac{k_{\text{B}}T}{\hbar\Omega_{\vec{q}}} \simeq \frac{k_{\text{B}}T}{s(8mk_{\text{B}}T)^{1/2}} \gg 1, \quad (4.169)$$

или

$$k_{\text{B}}T > 8ms^2. \quad (4.170)$$

Численная оценка показывает, что неравенство (4.170) выполняется в полупроводниковых материалах с эффективной массой $m \sim 0,01m_0$ уже для температур выше 1 К (m_0 – масса свободного электрона).

Если принять, что условие (4.169) выполняется, то выражение для обратного времени релаксации неравновесных электронов (4.157) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{3nm} \frac{2}{(2\pi)^6\hbar^3} \int d\vec{p} d\vec{q} (\hbar\vec{q})^2 |C_{\vec{q}}|^2 \frac{k_{\text{B}}T}{\hbar sq} \times \\ & \times \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_{\vec{p}}^s}{\partial \varepsilon} \right) \delta(\varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} - \varepsilon) \delta(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon). \end{aligned} \quad (4.171)$$

Сравнение формул (4.161) и (4.171) позволяет сразу записать результат

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2E_0^2 (2mk_{\text{B}})^{3/2} T T_k^{1/2}}{3\pi^2 \rho s^2 \hbar^4} \frac{F_1(\zeta/k_{\text{B}}T_k)}{F_{1/2}(\zeta/k_{\text{B}}T_k)}. \quad (4.172)$$

Таким образом, выражения (4.156), (4.172) представляют собой три уравнения баланса импульса, содержащие пять неизвестных параметров \vec{v}_d , T_k , ζ . Для получения замкнутой системы макроскопических уравнений баланса к этим трем уравнениям нужно добавить еще два: уравнение баланса энергии и уравнение баланса числа частиц.

§ 12. Уравнения баланса энергии и числа частиц

Для получения уравнения баланса кинетической энергии необходимо левую и правую части уравнения (4.147) умножить на $\varepsilon_{\vec{k}}$ и просуммировать по \vec{k} и σ . В отличие от уравнения баланса импульса, где мы ограничились линейным приближением по напряженности внешнего электрического поля или дрейфовой скорости, в уравнении баланса энергии будем удерживать квадратичные члены по этим параметрам.

Вводя обозначение

$$\langle E_k \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} f_{\vec{k}}$$

для скорости изменения средней кинетической энергии электронов $\langle E_k \rangle$ за счет поля, получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle \right)_{\text{поле}} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_{\vec{k}}. \quad (4.173)$$

Выделим в выражении $\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_{\vec{k}}$ линейные по дрейфовой скорости члены:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{k}}^{\alpha} f_{\vec{k}} &= \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \nabla_{\vec{k}}^{\alpha} \frac{1}{2m} (\hbar \vec{k} - m \vec{v}_d)^2 = \\ &= \frac{\hbar}{m} (\hbar k^{\alpha} - m v_d^{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} [f_{\vec{k}}^s - f_{\vec{k}}^{s'} \hbar k^{\beta} v_d^{\beta}]. \end{aligned} \quad (4.174)$$

Подставляя выражение (4.174) в формулу (4.173) и учитывая, что нечетные по \vec{k} члены вклад в сумму в правой части

(4.173) не дадут, получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle \right)_{\text{поле}} = -e \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} E^\alpha v_d^\alpha \left[f_{\vec{k}}^{s'} + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 k^2}{m} f_{\vec{k}}^{s''} \right]. \quad (4.175)$$

Для вычисления суммы по \vec{k} в правой части (4.175) заменим, как обычно, суммирование интегрированием. Рассмотрим вклад от первого слагаемого в квадратных скобках формулы (4.175):

$$-e E^\alpha v_d^\alpha \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} = -e E^\alpha v_d^\alpha \frac{2m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon_{\vec{k}}^{3/2} \frac{\partial f_{\vec{k}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} d\varepsilon_{\vec{k}}. \quad (4.176)$$

Производя в интеграле по энергии в правой части (4.176) интегрирование по частям и пользуясь определением концентрации n , получаем

$$-e E^\alpha v_d^\alpha \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} = e E^\alpha v_d^\alpha \frac{3}{2} n. \quad (4.177)$$

Аналогично, выполняя дважды интегрирование по частям, можно найти вклад и второго слагаемого в квадратной скобке выражения (4.175) в скорость изменения средней энергии электронов за счет поля

$$-\frac{1}{3} e E^\alpha v_d^\alpha \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{\partial^2 f_{\vec{k}}^s}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}^2} = -e E^\alpha v_d^\alpha \frac{5}{2} n. \quad (4.178)$$

Суммируя результаты (4.177), (4.178), получаем окончательное выражение для скорости изменения кинетической энергии за счет действия внешнего поля:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle \right)_{\text{поле}} = -e E^\alpha v_d^\alpha n, \quad (4.179)$$

$$n = \frac{(2mk_B T_k)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}(\zeta/k_B T_k). \quad (4.180)$$

Если внешнее электрическое поле не приводит к процессам ударной ионизации электронов донорных примесей и нет других оснований считать, что электрическое поле может привести к изменению концентрации электронов в кристалле, то при включении электрического поля должно выполняться условие

$$\frac{(2mk_{\text{Б}}T)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} F_{1/2}(\zeta_0/k_{\text{Б}}T) = \frac{(2mk_{\text{Б}}T_k)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} F_{1/2}(\zeta/k_{\text{Б}}T_k), \quad (4.181)$$

которое можно рассматривать как уравнение баланса числа частиц.

Получим теперь выражение, которое определяет скорость изменения кинетической энергии электронов за счет взаимодействия с решеткой. Для этого умножим уравнение (4.88) на $\varepsilon_{\vec{k}}$ и просуммируем по \vec{k} и σ . Как и при выводе уравнения баланса импульса, вклады от первой и второй квадратных скобок в правой части (4.88) можно объединить, сдвигая при суммировании вклад от второй квадратной скобки начало отсчета в \vec{k} -пространстве на произвольный вектор \vec{q} , заменив $\vec{k} - \vec{q} \rightarrow \vec{k}$. Тогда с учетом закона сохранения

$$\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} = \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\Omega_{\vec{q}}$$

имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle \right)_{\text{ст}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}\sigma\vec{q}} |C_{\vec{q}}|^2 \hbar\Omega_{\vec{q}} [(N_{\vec{q}} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}} (1 - f_{\vec{k}}) - \\ &\quad - N_{\vec{q}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}})] \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}}). \end{aligned} \quad (4.182)$$

Как будет ясно из дальнейшего анализа, правая часть выражения (4.182) пропорциональна отклонению неравновесной температуры $\delta T_k = T_k - T$ от равновесной. Поскольку отклонение температуры связано с разогревом электронной системы внешним электрическим полем, величина δT_k по меньшей мере пропорциональна квадрату напряженности внешнего электрического поля. По этой причине в квадратных скобках формулы (4.182) можно заменить функции распределения $f_{\vec{k}}$ их симметричными частями $f_{\vec{k}}^s$. Учет второго члена в правой части

разложения (4.154) приводит к явному превышению точности (напомним, что в уравнении баланса энергии мы удерживаем члены, квадратичные по внешнему полю).

С учетом формул, аналогичных формулам (4.158), выражение в квадратных скобках в правой части (4.182) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} I(\vec{k}, \vec{q}) &= (N_{\vec{q}} + 1) f_{\vec{k}+\vec{q}}^s (1 - f_{\vec{k}}^s) - N_{\vec{q}} f_{\vec{k}}^s (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^s) = \\ &= f_{\vec{k}}^s (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^s) N_{\vec{q}} [e^{(\beta - \beta_k)\hbar\Omega_{\vec{q}}} - 1]. \end{aligned} \quad (4.183)$$

Пользуясь малостью параметра $(\beta - \beta_k)\hbar\Omega_{\vec{q}}$, разложим в ряд экспоненту, содержащую этот параметр. Тогда для выражения $I(\vec{k}, \vec{q})$ получаем

$$I(\vec{k}, \vec{q}) = f_{\vec{k}}^s (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^s) N_{\vec{q}} \hbar\Omega_{\vec{q}} \frac{1}{k_B T} \left(1 - \frac{T}{T_k}\right). \quad (4.184)$$

Подставляя этот результат в формулу (4.182) и полагая, что рассеяние электронов на фононах происходит квазиупруго, для скорости изменения средней энергии электронов за счет столкновений с решеткой получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle\right)_{\text{ст}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \beta \sum_{\vec{k}\sigma\vec{q}} |C_{\vec{q}}|^2 (\hbar\Omega_{\vec{q}})^2 N_{\vec{q}} f_{\vec{k}}^s (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^s) \times \\ &\times \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \left(1 - \frac{T}{T_k}\right). \end{aligned} \quad (4.185)$$

Производя простые вычисления, аналогичные вычислениям времени релаксации импульса при рассеянии на продольных акустических фононах, которые подробно рассмотрены выше, получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle E_{\vec{k}} \rangle\right)_{\text{ст}} = \frac{8E_0^2 (k_B T_k)^3 m^4}{\pi^3 \hbar^7 \rho} F_1\left(\zeta/k_B T_k\right) \left(1 - \frac{T}{T_k}\right). \quad (4.186)$$

Собирая результаты (4.179) и (4.186), запишем уравнение баланса энергии электронной подсистемы

$$-eE^\alpha v_d^\alpha n = \frac{8E_0^2 (k_B T_k)^3 m^4}{\pi^3 \hbar^7 \rho} F_1\left(\zeta/k_B T_k\right) \left(1 - \frac{T}{T_k}\right). \quad (4.187)$$

Уравнения (4.156), (4.181) и (4.187) образуют замкнутую систему пяти уравнений для определения компонент дрейфовой скорости, температуры кинетических степеней свободы электронов проводимости и химического потенциала.

§ 13. Решение системы уравнений баланса энергии, импульса и числа частиц. Приложения гидродинамического подхода

В рассматриваемом случае изотропного закона дисперсии и изотропного рассеяния уравнение баланса импульса является в действительности скалярным уравнением, поскольку дрейфовая скорость электронов параллельна вектору напряженности электрического поля. Выражая v_d из уравнения (4.156) и подставляя этот результат в формулу (4.187), получаем

$$Q_0 \frac{\tau}{\tau_0} = \frac{2^{5/2} E_0^2 (k_B T)^{3/2} m^{5/2}}{\pi \rho \hbar^4} \frac{F_1(\zeta/k_B T_k)}{F_{1/2}(\zeta/k_B T_k)} \left(1 - \frac{T}{T_k}\right). \quad (4.188)$$

Для записи этой формулы мы использовали величину Q_0 , имеющую смысл мощности, поглощаемой системой электронов проводимости, в расчете на один электрон

$$Q_0 = \frac{e^2 \tau_0}{m} E^2. \quad (4.189)$$

В выражении (4.188) неравновесный химический потенциал входит только в качестве аргумента интегралов Ферми. Если ограничиться случаем невырожденного электронного газа и воспользоваться приближенным равенством

$$F_p(\zeta/k_B T_k) = \Gamma(p+1) e^{\zeta/k_B T_k}, \quad (4.190)$$

то легко заметить, что в правой части уравнения (4.188) зависимость от химического потенциала ζ пропадает. В левой части уравнения (4.188) стоит отношение τ/τ_0 , которое, согласно формулам (4.167), (4.172), можно записать в виде

$$\frac{\tau}{\tau_0} \simeq \left(\frac{T}{T_k}\right)^{1/2}, \quad (4.191)$$

поскольку в выражениях τ_0 и τ зависимость от химического потенциала исчезнет в случае невырожденного электронного газа. Таким образом, в случае невырожденного электронного газа уравнение (4.188) содержит только один неизвестный параметр – температуру кинетических степеней свободы электронов проводимости T_k – и поэтому легко может быть решено. Подставляя в уравнение (4.188) результаты (4.189), (4.190) и вводя обозначения

$$\frac{T_k}{T} = x, \quad \Gamma = \frac{Q_0 \hbar^4 \rho \pi \Gamma(5/2)}{2^{5/2} E_0^2 m^{5/2} (k_B T)^{3/2}}, \quad (4.192)$$

получаем квадратное уравнение для отыскания неизвестной кинетической температуры

$$x^2 - x - \Gamma = 0, \quad (4.193)$$

которое имеет единственное решение, имеющее физический смысл:

$$T_k = \frac{T}{2} + T \sqrt{1/4 + \Gamma}. \quad (4.194)$$

Оценим величину отклонения неравновесной температуры от равновесной, полагая, что $\Gamma \ll 1$. Разложим корень в формуле (4.194) в ряд и ограничимся линейным членом по Γ . В этом случае, вводя относительное изменение температуры $\delta T_k/T = (T_k - T)/T$, получаем

$$\frac{\delta T_k}{T} \simeq \Gamma. \quad (4.195)$$

Для типичных значений параметров полупроводниковых материалов ($m = 0,07m_0$, m_0 – масса свободного электрона, $\rho = 5,8 \text{ г/см}^3$, $s = 5 \cdot 10^5 \text{ см/с}$, $E_0 = 1,6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$, $T = 4 \text{ К}$), оценка величины Γ по формулам (4.192), (4.189), (4.167) дает $\delta T_k/T \simeq 1,32$.

Зная температуру кинетических степеней свободы электронов проводимости, можно определить и неравновесный химический потенциал ζ . Используя уравнение (4.181) для случая классической статистики Максвелла – Больцмана, получаем

$$\left(\frac{T_k}{T}\right)^{3/2} = \exp\left(\frac{\zeta_0}{k_B T} - \frac{\zeta}{k_B T_k}\right),$$

или, логарифмируя это выражение,

$$\zeta = \zeta_0 \frac{T_k}{T} - \frac{3}{2} k_B T_k \ln\left(\frac{T_k}{T}\right). \quad (4.196)$$

Из формулы (4.196) следует, что химический потенциал неравновесных электронов не зависит от дрейфовой скорости \vec{v}_d в рассматриваемом приближении. В действительности такая зависимость, конечно, имеется, и она может быть легко получена, если удержат в разложении (4.154) члены второго порядка малости по параметру $\hbar k^\alpha v_d^\alpha / k_B T$, но это было бы явным превышением точности.

Таким образом, мы рассмотрели задачу о разогреве электронной системы внешним электрическим полем и нашли выражения для кинетической температуры (4.194), химического потенциала (4.196) и дрейфовой скорости (4.156), входящих в неравновесную функцию распределения (4.146).

Особо необходимо отметить, что величина отклонения температуры электронов T_k от равновесной температуры T не обязательно должна быть малой (фактически при выводе уравнений баланса импульса, энергии и числа частиц малость величины $\delta T_k / T$ не предполагалась).

Совершенно аналогично можно было рассмотреть и случай вырожденного электронного газа (эта задача предлагается читателю для самостоятельного решения).

Перейдем теперь к обсуждению возможных применений развитой здесь теории для решения различных задач физической кинетики.

§ 14. Отрицательное дифференциальное сопротивление

С прикладной точки зрения, важно найти такие условия, при которых разогрев носителей заряда приводил бы к появлению на вольт-амперной характеристике участка с отрицательным значением dJ/dE , где J – плотность электрического тока, E – напряженность электрического поля, приложенная к образцу. Такая ситуация может возникнуть, если вектор плотности

электрического тока \vec{J} антипараллелен вектору напряженности электрического поля \vec{E} и когда вектор $\vec{J} \parallel \vec{E}$, но плотность электрического тока в образце уменьшается с ростом электрического поля. В первом случае принято говорить об *отрицательном сопротивлении*, а во втором – об *отрицательном дифференциальном сопротивлении* (ОДС).

Отрицательное дифференциальное сопротивление может наблюдаться экспериментально в условиях контроля как тока через образец (рис. 30 а), когда большое дополнительное сопротивление R включено в цепь последовательно с образцом, так и в условиях контроля напряжения на образце, когда он включен параллельно большому дополнительному сопротивлению нагрузки R_H (рис 30 б)).

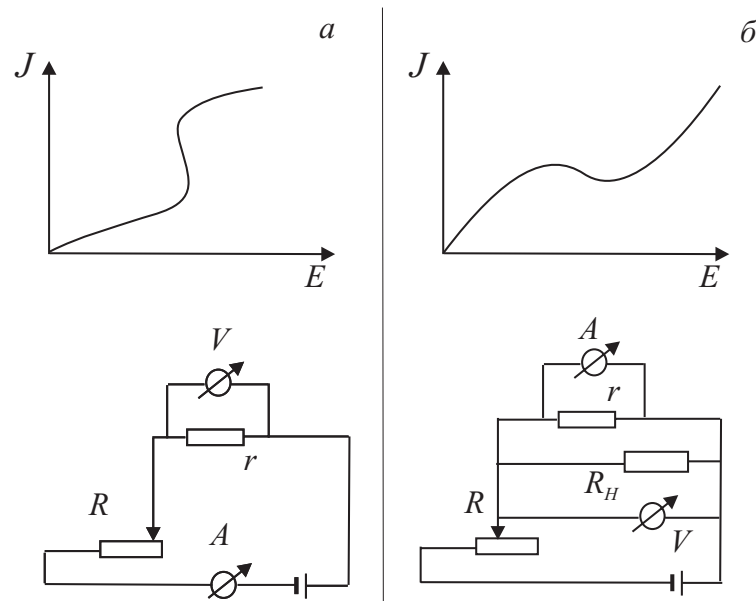


Рис. 30. S-образные (а) и N-образные (б) нелинейные вольт-амперные характеристики и схемы их измерения при контроле тока и напряжения. Образцом является сопротивление r

В первом случае нелинейные вольт-амперные характеристики имеют вид S-образной кривой, а во втором случае – N-образной. Для того чтобы обеспечить контроль тока J , протекающего через образец с сопротивлением r , должно выполняться условие $R \gg r$. Аналогично в случае б должно выполняться условие $R_H \gg r$.

Наиболее просто условия возникновения ОДС можно реализовать в том случае, когда контролируется ток через образец (рис. 30 а). Значение напряженности электрического поля в образце \vec{E} и кинетической температуры T_k в этом случае будет однозначной функцией тока. Мощность P , передаваемая системой электронов в решетку, совпадает с мощностью джоулевых потерь

$$P = \sigma E^2, \quad E = \left(\frac{P}{\sigma} \right)^{1/2}. \quad (4.197)$$

С другой стороны, эта же самая мощность может быть выражена через плотность тока

$$J^2 = \sigma P, \quad J = (\sigma P)^{1/2}. \quad (4.198)$$

В условиях разогрева электронного газа, как следует из формулы (4.172), для случая статистики Максвелла – Больцмана $\sigma \sim \tau \sim T_k^m$, где m – некоторый показатель степени, а мощность, переданная электронами в решетку, согласно (4.187), имеет следующую температурную зависимость:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} < E_{\vec{k}} > \right)_{\text{ст}} \equiv P \sim (T_k - T) T_k^n. \quad (4.199)$$

Подставляя предполагаемую температурную зависимость σ и P в уравнения для напряженности поля E (4.197) и величины тока J (4.198), получаем

$$\begin{aligned} E &\sim [(T_k - T) T_k^{n-m}]^{1/2}, \\ J &\sim [(T_k - T) T_k^{n+m}]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.200)$$

Из формулы (4.200) следует, что если выполняются условия $n - m > 0$ и $n + m > 0$, то E и J растут с возрастанием T_k и, следовательно, dJ/dE остается положительной величиной. Если, однако, $n - m < 0$, а $n + m > 0$, то при возрастании тока, а следовательно, T_k напряженность электрического поля будет уменьшаться, что соответствует участку с отрицательным дифференциальным сопротивлением на вольт-амперной

характеристике. Возникающая при этом вольт-амперная характеристика имеет S-образный вид. В частности, легко видеть, что условия возникновения участка с ОДС выполняются, если релаксация импульса происходит за счет взаимодействия электронов с примесями ($m = 3/2$), а релаксация энергии определяется пьезоэлектрическим рассеянием на акустических фононах ($n = -1/2$).

В действительности явление возникновения ОДС сопровождается развитием неустойчивостей в однородном полупроводниковом кристалле. В частности, в условиях контроля тока через образец возникновение участка с ОДС на вольт-амперной характеристике сопровождается «шнурованием» электрического тока. В плоскости продольного сечения образца возникают один или несколько каналов с более низким значением электрического сопротивления, которые по существу шунтируют образец.

При контроле напряжения на образце возникает неустойчивость другой природы. В образце появляются участки (домены) с высоким и низким значением электрического сопротивления. Все падение напряжения будет приходиться на домен с высоким сопротивлением. Под действием электрического поля эти домены движутся по образцу, благодаря чему возникают периодические электрические колебания. Это явление нашло свое практическое применение для создания генераторов СВЧ-колебаний (диодов Ганна).

Диод Ганна – полупроводниковый прибор, состоящий из однородного полупроводника, генерирующий СВЧ-колебания при приложении постоянного электрического поля. Физической основой, позволяющей реализовать такие свойства в диоде, является эффект Ганна, который заключается в генерации высокочастотных колебаний электрического тока в однородном полупроводнике с N-образной вольт-амперной характеристикой. Эффект Ганна обнаружен американским физиком Дж. Ганном в 1963 г. в кристалле арсенида галлия с электронной проводимостью. При приложении электрического поля $E > 2 - 3$ кВ/см к однородным образцам из арсенида галлия n -типа в образце возникают спонтанные колебания тока. В образце, обычно у катода, возникает небольшой участок сильного поля – «домен», дрейфующий от катода к аноду со скоростью $v_d \simeq 10^7$ см/с и

исчезающий на аноде. Затем у катода формируется новый домен, и процесс периодически повторяется, моменту возникновения домена соответствует падение тока, текущего через образец. Моменту исчезновения домена у анода – восстановление прежней величины тока. Период колебаний тока приблизительно равен пролетному времени, т. е. времени, за которое домен дрейфует от катода к аноду.

С позиций сильнонеравновесной термодинамики, возникновение шнуров электрического тока, или доменов, в однородном полупроводниковом материале является типичным примером самоорганизации и возникновения неравновесных структур.

Можно показать, что если в полупроводнике с S-образной вольт-амперной характеристикой на участке с ОДС возникает локальная флуктуация плотности тока, то эта флуктуация не будет рассасываться, как в обычном материале, а будет только нарастать, что и приведет к возникновению шнура тока. Совершенно аналогично, если в полупроводнике с N-образной вольт-амперной характеристикой в результате флуктуаций возникнет локальная область с большим значением электрического поля, нежели в соседних областях, то эта область не исчезнет, а будет только увеличиваться. В итоге возникнет домен сильного поля. В этом смысле полупроводник, в котором реализованы условия возникновения ОДС, является активной средой.

Дальнейшее обсуждение явлений, возникающих в полупроводниках в результате разогрева электронов проводимости внешним электрическим полем, выходит за рамки нашего курса. Обзор экспериментальных и теоретических работ по горячим электронам можно найти в монографии Конуэлл [27]. Исследованию процессов неустойчивости, возникающей в электронной плазме проводников, посвящены работы [33, 34].

Развитый в этой главе метод эффективных параметров позволяет решать довольно широкий круг задач физической кинетики, связанных с передачей энергии между подсистемами кристалла. Примерами таких задач являются эффект Феера (явление динамической поляризации ядер электрическим током); эффект изменения сопротивления в полупроводниках при насыщении парамагнитного резонанса на примесных центрах,

позволяющий использовать простые электрические схемы детектирования резонанса; эффект Оверхаузера (явление динамической поляризации ядер при насыщении парамагнитного резонанса на свободных электронах в металлах или полупроводниках). Анализ этих задач в полном объеме также далеко выходит за рамки учебного курса. Тем не менее в главе 6, посвященной методу неравновесного статистического оператора, мы применим метод составления уравнений баланса импульса, энергии и числа частиц для интерпретации эффекта Оверхаузера.

Задача 4.6

Получить выражение для обратного времени релаксации горячих электронов, полагая, что рассеяние носителей тока происходит на заряженных центрах с экранированным кулоновским потенциалом.

Решение

Пользуясь схемой переходов электронов между состояниями \vec{k} , $\vec{k}+\vec{q}$, изображенной на рис. 28, запишем скорость изменения функции распределения в состоянии \vec{k} за счет взаимодействия с рассеивателями. Если в качестве гамильтониана взаимодействия с рассеивателями взять гамильтониан (4.81), то для квантово-механической вероятности переходов (по аналогии с выражением (4.87)) получаем:

$$1. W_{\vec{k}+\vec{q}\vec{k}} = \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}} |G_{\vec{q}}|^2 |\langle \vec{k} + \vec{q} | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle_{\text{пр}} \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}),$$

$$2. W_{\vec{k}\vec{k}+\vec{q}} = \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{\vec{q}} |G_{\vec{q}}|^2 |\langle \vec{k} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} + \vec{q} \rangle|^2 \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle_{\text{пр}} \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}).$$

Если учесть определение $\langle \rho_q \rangle$ (4.81), легко заметить, что среднее по состояниям рассеивателей

$$\langle \rho_q \rho_{-q} \rangle_{\text{пр}} = N_i,$$

где N_i – число примесных центров в единице объема.

Для нахождения скорости изменения числа частиц в состоянии \vec{k} под действием столкновений квантово-механические вероятности переходов необходимо умножить на вероятность заполнения начального состояния и вероятность того, что конечное состояние является

незаполненным. В результате подсчета получаем

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{\text{ст}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \sum_{\vec{q}} |G_{\vec{q}}|^2 [f_{\vec{k}+\vec{q}} - f_{\vec{k}}] \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.201)$$

В отличие от случая рассеивания на фононах рассматривать переходы под номерами 3 и 4 в формуле (4.87) смысла нет, поскольку суммирование в формуле (4.201) производится во всем диапазоне возможных значений \vec{q} .

По аналогии с выражением (4.152) построим уравнение баланса импульса

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle \right|_{\text{ст}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \sum_{\vec{k} \sigma \vec{q}} \hbar k^\alpha |G_{\vec{q}}|^2 [f_{\vec{k}+\vec{q}} - f_{\vec{k}}] \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}).$$

Делая во втором слагаемом, пропорциональном $f_{\vec{k}}$, замену индексов суммирования сначала $\vec{k} + \vec{q} \rightarrow \vec{k}$, $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}$, а затем замену $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$, получаем

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle \right|_{\text{ст}} = -\frac{2\pi}{\hbar} N_i \sum_{\vec{k} \sigma \vec{q}} \hbar q^\alpha |G_{\vec{q}}|^2 f_{\vec{k}+\vec{q}} \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.202)$$

Выделим в правой части (4.202) члены, линейные по дрейфовой скорости. Так как дрейфовая скорость содержится в функции распределения, разложим ее в ряд Тейлора, ограничиваясь линейными членами. Подставляя это разложение (см. формулу (4.154)) в выражение, определяющее скорость изменения среднего импульса электронов за счет столкновений, для правой части (4.202), получаем

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{P}^\alpha \rangle \right|_{\text{ст}} = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \sum_{\vec{k} \sigma \vec{q}} \frac{1}{3} (\hbar q)^2 |G_{\vec{q}}|^2 f'_{\vec{k}+\vec{q}} v_d^\alpha \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.203)$$

Учитывая уравнение баланса импульса (4.154), окончательно для обратного времени релаксации импульса горячих электронов получаем

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{3nm} N_i \sum_{\vec{k} \sigma \vec{q}} (\hbar q)^2 |G_{\vec{q}}|^2 f'_{\vec{k}+\vec{q}} \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}). \quad (4.204)$$

Глава 5

ТЕОРИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА НА ВНЕШНЕЕ МЕХАНИЧЕСКОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ

5.1. Электропроводность электронного газа. Метод Кубо

§ 1. Уравнение Лиувилля и его решение

Квантовая система может находиться в чистом или смешанном состоянии. Если система находится в чистом состоянии, то она может быть описана волновой функцией ψ , которая подчиняется уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (5.1)$$

где H — гамильтониан системы, \hbar — постоянная Планка. Квантово-механическое среднее оператора некоторой физической величины A в состоянии, описываемом волновой функцией ψ , определяется выражением $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$. Физические величины, получающиеся в результате усреднения, должны быть действительными. Это приводит к тому, что операторы физических величин являются эрмитовыми и удовлетворяют условию $A^+ = A$, $A^+ = \tilde{A}^*$, где знак тильды означает транспонирование, а звездочка, как обычно, — комплексное сопряжение элементов матрицы. Описание системы на языке волновых функций является наиболее полным с точки зрения квантовой механики и в каком-то смысле соответствует описанию частиц на языке траекторий в классической механике.

Определим теперь понятие смешанного состояния в квантовой теории. Рассмотрим систему, которая является частью некоторой большой системы, находящейся в чистом состоянии.

Пусть совокупность координат x описывает интересующую нас подсистему, а совокупность q – остальные координаты замкнутой системы. Волновая функция $\psi(q, x)$ зависит от переменных x и q и не распадается на произведение функций, зависящих только от x и только от q . По этой причине интересующая нас малая система не имеет волновой функции и не может быть описана с максимально допустимой в квантовой механике полнотой.

Вычислим снова среднее значение оператора A , который относится к малой системе и действует только на переменные x . Обобщая результаты, полученные для чистых состояний, имеем

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(q, x) A \psi(q, x) dq dx. \quad (5.2)$$

Введем более удобное для практических приложений определение среднего (5.2). Определим полный набор собственных функций $\varphi_n(x)$ некоторого оператора, например оператора Гамильтона, для выделенной подсистемы и аналогичный набор $\theta_n(q)$ – для остальной системы. Тогда очевидно, что волновая функция $\psi(q, x)$ может быть разложена в ряд

$$\psi(q, x) = \sum_{n,m} C_{nm} \varphi_n(x) \theta_m(q). \quad (5.3)$$

Подставляя этот результат в выражение (5.2), имеем

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m; i,j} C_{in}^* C_{jm} \int \theta_i^*(q) \theta_j(q) dq \int \varphi_n^*(x) A \varphi_m(x) dx. \quad (5.4)$$

Учитывая ортонормированность собственных функций $\theta_i(q)$ и $\theta_j(q)$, получаем

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m; j} C_n(j)^* C_m(j) A_{nm}. \quad (5.5)$$

Для того чтобы продвинуться дальше, необходимо заметить, что коэффициенты $C_n(j)^*$ и $C_m(j)$ зависят от переменной j , относящейся к большой системе, и поэтому можно записать

$$\sum_j C_n(j)^* C_m(j) = \sum_j W(j) a_n^*(j) a_m(j) = \rho_{mn}. \quad (5.6)$$

Величина ρ_{mn} , введенная выше, носит название матрицы плотности. Физический смысл введенной матрицы плотности проще понять, если рассмотреть диагональные матричные элементы

$$\rho_{nn} = \sum_j W(j) a_n^*(j) a_n(j), \quad (5.7)$$

которые можно легко интерпретировать. Действительно, будем считать, что состояние малой системы является смесью чистых состояний, которые нумеруются индексом j . Величина $W(j)$ тогда имеет смысл вероятности реализации состояния j , а произведение $a_n^*(j) a_n(j)$ – вероятности реализации n -го собственного значения для j -го чистого состояния. Величина

$$\rho_{nn} = \sum_j W(j) a_n^*(j) a_n(j)$$

имеет смысл вероятности для системы находиться в n -м стационарном состоянии, которое может реализоваться в любом из возможных чистых состояний системы. Используя определение (5.6), среднее значение оператора A можно записать достаточно просто:

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m} \rho_{mn} A_{nm}. \quad (5.8)$$

Пусть теперь оператор A , входящий в определение среднего, равен единичному оператору. Среднее значение такого оператора, очевидно, равно единице. Поэтому вместо (5.8) получаем

$$\sum_n \rho_{nn} \equiv \text{Sp}\{\rho\} = 1. \quad (5.9)$$

Последний результат является очевидным, поскольку диагональный матричный элемент матрицы плотности имеет смысл, как это отмечено выше, вероятности нахождения системы в n -м стационарном состоянии. Вероятность находиться в одном из возможных состояний полного набора состояний равна единице.

Уместно, забегаая вперед, сразу привести пример системы, находящейся в контакте с термостатом. Будем считать, что волновые функции $\varphi_n(x)$ являются собственными функциями оператора Гамильтона: $H\varphi_n = E_n\varphi_n$, где E_n – собственные значения энергии системы. В этом случае вероятность для системы,

находящейся в смешанном состоянии, иметь значение энергии E_n определяется распределением Гиббса:

$$\rho_{nn} = \frac{\exp(-E_n/k_B T)}{\sum_m \exp(-E_m/k_B T)}.$$

В квантовой механике чистые и смешанные состояния различаются принципиально. Если система в некоторый момент времени t находилась в чистом состоянии, то, в силу линейности уравнения Шредингера, она и будет оставаться в чистом состоянии на протяжении всей эволюции. В действительности чистые состояния являются идеализацией и, видимо, не могут быть реализованы, если система взаимодействует со своим окружением.

Интересная взаимосвязь чистых и смешанных состояний возникает в связи с проблемой измерения.

Предположим, что мы имеем систему, находящуюся в чистом состоянии, с волновой функцией $\psi = \sum_n C_n U_n$, где U_n — собственные функции, например, оператора энергии. Обычное квантово-механическое среднее

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m} C_n^* C_m \int U_n^*(x) A U_m(x) dx$$

для чистого состояния можно записать, используя определение среднего (5.8). Отсюда получаем простое выражение для компонент матрицы плотности системы в чистом состоянии

$$\rho_{mn} = C_n^* C_m. \quad (5.10)$$

Будем производить измерение энергии в ансамбле таких одинаковых систем. Произведя многократное измерение, очевидно, получим вероятности P_n нахождения системы со значением энергии $E = E_n$. Таким образом, в результате измерения сформируется смешанное состояние, которое описывается другой матрицей плотности, не совпадающей с исходной. Это становится особенно ясным, если снова найти среднее значение оператора

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n \int U_n^*(x) A U_n(x) dx. \quad (5.11)$$

Сравнивая два последних результата, видим, что произошла редукция матрицы плотности, и она потеряла недиагональные элементы, которые приводят в чистом состоянии к интерференции состояний с разными значениями n . Здесь ситуация полностью аналогична случаю, когда в некоторой точке пространства складываются значения векторов напряженности электрического поля для двух когерентных источников света, в то время как для некогерентных источников складываются квадраты интенсивностей (освещенности) и интерференция пропадает.

Таким образом, в процессе измерения чистое состояние заменилось смешанным и произошла потеря информации о системе. Поскольку потеря информации означает возрастание энтропии, то мы сталкиваемся с ситуацией, когда процесс измерения, как и в классической механике, приводит к возникновению необратимого поведения и возрастанию энтропии. Не имея больше возможности останавливаться на принципиальной, но весьма далекой от решения проблеме измерения в квантовой механике, мы отсылаем читателя к монографии И. Пригожина [35], где можно найти ссылки и на другие работы по этой теме.

Найдем уравнение движения, которому подчиняется матрица плотности. Для этого продифференцируем по времени выражение (5.7):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{mn}(t) = \sum_i W(i) \left[\frac{\partial a_n^*(i, t)}{\partial t} a_m(i, t) + a_n^*(i, t) \frac{\partial a_m(i, t)}{\partial t} \right]. \quad (5.12)$$

Для того чтобы найти уравнения, которым удовлетворяют коэффициенты a_n , вспомним, что волновая функция каждого чистого состояния $\psi(i) = \sum_k a_k(i) \psi_k$ в смеси удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(i)}{\partial t} = H \psi(i), \quad (5.13)$$

где ψ_k – собственные функции некоторого оператора, не зависящие от времени. Подставляя значение волновой функции $\psi(i)$ в (5.13), получаем уравнение для коэффициентов a_n :

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial a_k(i)}{\partial t} \psi_k = H \sum_k a_k(i) \psi_k. \quad (5.14)$$

Умножая это уравнение на ψ_m^* и интегрируя с учетом ортонормированности собственных функций ψ_n , получаем

$$i\hbar \frac{\partial a_m(i)}{\partial t} = \sum_k \int \psi_m^* H \psi_k dv a_k(i). \quad (5.15)$$

Уравнение для комплексно-сопряженного коэффициента можно записать по аналогии:

$$-i\hbar \frac{\partial a_n^*(i)}{\partial t} = \sum_k \int \psi_n H^* \psi_k^* dv a_k^*(i). \quad (5.16)$$

Подставляя выражения (5.15), (5.16) в уравнение движения матрицы плотности (5.12) с учетом эрмитовости оператора энергии, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{mn}(t) = \frac{1}{i\hbar} (H_{mk} \rho_{kn} - \rho_{mk} H_{kn}). \quad (5.17)$$

Переходя от матричных обозначений к операторным и используя определение оператора Лиувилля iL

$$iLA = \frac{1}{i\hbar} [A, H], \quad [A, H] = AH - HA, \quad (5.18)$$

получаем уравнение Лиувилля для квантовых систем

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) + iL \rho(t) = 0. \quad (5.19)$$

Уравнение (5.19) позволяет найти значение $\rho(t)$ во все последующие моменты времени, если задано значение $\rho(t_0)$ в некоторый начальный момент времени t_0 .

Следует обратить внимание на то, что уравнение движения для матрицы плотности отличается знаком от уравнения движения оператора в представлении Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt} A(t) = iLA(t), \quad A(t) = \exp(i/\hbar Ht) A \exp(-i/\hbar Ht). \quad (5.20)$$

Уравнение Лиувилля является обратимым во времени, и так же, как и в случае классической механики, его решение давало бы наиболее полное описание системы. Не следует думать, однако, что точное решение уравнения Лиувилля дает правильное описание необратимой динамики макроскопических систем. Проблема выглядит значительно сложнее. В главе 1 неоднократно подчеркивалось, что для классических систем необратимое поведение связано со слабой устойчивостью решений, определяющих эволюцию фазовой точки в фазовом пространстве. В случае квантовых систем пока такой ясности нет, но ситуация представляется аналогичной. Нет никакого смысла стремиться получить точное решение уравнения Лиувилля. Физически осмысленный результат получается лишь в результате некоторого огрубленного (усредненного) описания. По этой причине все современные методы неравновесной статистической механики представляют собой различные варианты построения такого огрубленного описания. В этой и следующих главах постараемся обсудить наиболее известные подходы построения описания неравновесных систем квантово-статистическими методами.

§ 2. Линейный отклик динамической системы на внешнее поле

Рассмотрим реакцию системы, которая описывается гамильтонианом H , на включение внешнего воздействия, задаваемого поправкой к гамильтониану $H_F(t)$:

$$H_F(t) = -AF(t)e^{\epsilon t}, \quad \epsilon \rightarrow +0, \quad (5.21)$$

где A — операторная часть взаимодействия с внешним полем, $F(t)$ — C -числовая функция, характеризующая амплитуду внешнего воздействия. Возмущение типа (5.21), которое может быть задано поправкой к гамильтониану, обычно называют *механическим* возмущением. Существует целый класс внешних воздействий, которые не сводятся к некоторой механической силе и не могут быть записаны в форме (5.21). Такие возмущения принято называть *термическими* возмущениями.

Будем предполагать, что внешнее поле включается в момент времени $t \rightarrow -\infty$. До включения внешнего поля система находилась в равновесном состоянии и описывалась равновесным статистическим оператором

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\zeta N)}, \quad Z = \text{Sp}\{e^{-\beta(H-\zeta N)}\}, \quad (5.22)$$

N – оператор числа частиц. После включения внешнего поля система отклонится от состояния термодинамического равновесия и будет описываться неравновесным статистическим оператором $\rho(t)$. Представляет интерес выяснить, как изменится среднее значение оператора некоторой физической величины B в результате включения внешнего поля.

Для ответа на этот вопрос нужно найти явный вид статистического оператора $\rho(t)$, который удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} + [iL + iL_F(t)]\rho(t) = 0 \quad (5.23)$$

с граничным условием

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho(t) = \rho_0. \quad (5.24)$$

Фигурирующие в уравнении (5.23) операторы iL и $iL_F(t)$ определены соотношениями

$$iL R = \frac{1}{i\hbar} [R, H], \quad iL_F(t) R = \frac{1}{i\hbar} [R, H_F(t)], \quad (5.25)$$

R – произвольный оператор, $[A, B] = AB - BA$.

Получим формальное решение уравнения (5.23), полагая внешнее поле слабым. Для этого запишем $\rho(t)$ в виде

$$\rho(t) = \rho_0 + \Delta \rho(t) \quad (5.26)$$

и линеаризуем уравнение (5.23), считая $H_F(t)$ и $\Delta \rho(t)$ малыми величинами (малость операторных величин следует понимать в

том смысле, что малыми величинами являются матричные элементы в том представлении, где эти операторы диагональны). Линеаризованное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \Delta \rho(t)}{\partial t} + iL \Delta \rho(t) + iL_F(t) \rho_0 = 0. \quad (5.27)$$

Умножим уравнение (5.27) слева на оператор эволюции e^{iLt} , определяемый соотношением

$$e^{iLt} R = e^{i/\hbar Ht} R e^{-i/\hbar Ht}. \quad (5.28)$$

В результате получаем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{iLt} \Delta \rho(t) = -i e^{iLt} L_F(t) \rho_0, \quad (5.29)$$

интегрируя которое в пределах от $-\infty$ до t с учетом граничного условия (5.24), находим решение

$$e^{iLt} \Delta \rho(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{iLt'} L_F(t') \rho_0. \quad (5.30)$$

Чтобы в явном виде найти неравновесный статистический оператор $\rho(t)$, умножим левую и правую части уравнения (5.30) слева на оператор эволюции e^{-iLt} и сделаем в интегральном члене замену переменных, полагая $t' - t = t_1$. Тогда, используя определение (5.26), получаем искомое значение статистического оператора

$$\rho(t) = \rho_0 - i \int_{-\infty}^0 e^{iLt_1} L_F(t + t_1) \rho_0 dt_1, \quad (5.31)$$

или, подставляя выражение (5.21) для оператора $H_F(t)$, другую форму этого результата

$$\rho(t) = \rho_0 + \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t_1} e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, A] F(t + t_1) dt_1. \quad (5.32)$$

Пользуясь полученным результатом, найдем изменение среднего значения $\Delta \langle B \rangle^t$ оператора некоторой физической величины B за счет действия внешней силы

$$\Delta \langle B \rangle^t = \text{Sp}\{B \rho(t)\} - \text{Sp}\{B \rho_0\}. \quad (5.33)$$

Для практических приложений удобно для отклика системы на внешнее воздействие перейти к фурье-представлению, выполняя фурье-преобразование по времени t :

$$\begin{aligned} \Delta \langle B \rangle^t &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \Delta \langle B \rangle^{\omega}, \\ F(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} F(\omega). \end{aligned} \quad (5.34)$$

фурье-образ отклика на внешнее воздействие $\Delta \langle B \rangle^{\omega}$ и фурье-образ внешней силы $F(\omega)$, очевидно, определяются с помощью обратного преобразования Фурье. Используя результаты (5.32), (5.33), получаем

$$\Delta \langle B \rangle^{\omega} = \int_{-\infty}^0 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \text{Sp}\left\{B e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, A]\right\} dt_1 F(\omega). \quad (5.35)$$

Формула (5.35) позволяет исследовать реакцию системы на внешнее поле в том случае, когда механическое возмущение не приводит к развитию термических возмущений в системе. В этом смысле итерационная процедура решения уравнения (5.23) справедлива лишь на первом шаге, поскольку уже поправка второго порядка по $H_F(t)$ является некорректной, если не учитывать индуцированные механической силой термические возмущения, например разогрев электронов, и процессы передачи энергии между различными подсистемами кристалла, как это сделано при анализе уравнений баланса энергии различных подсистем кристалла в предыдущей главе.

Хотя формально, как это сделано в исходной работе Р. Кубо, решение уравнения (5.23) может быть построено в виде ряда по степеням $H_F(t)$, оно может иметь смысл только для импульсного возмущения. В этом случае, если длительность импульса

достаточно мала, систему электронов можно считать изолированной и термические возмущения не учитывать, поскольку для их формирования нужно время порядка времени релаксации энергии в системе, которое, как правило, на один-два порядка больше, нежели время релаксации импульса. Более того, даже если считать, что возмущение является слабым и можно ограничиться линейным приближением по внешней силе, применимость полученного результата (5.35) для анализа реальных физических систем не кажется такой самоочевидной.

Действительно, до включения взаимодействия в момент времени $t \rightarrow -\infty$ система описывалась большим каноническим распределением Гиббса и, следовательно, находилась в контакте с термостатом. После включения взаимодействия статистический оператор $\rho(t)$ удовлетворяет уравнению (5.23), в котором фигурирует только гамильтониан системы и нет гамильтониана термостата. Это означает, что мы произвели отделение системы от термостата в тот самый момент, когда было включено взаимодействие с внешним полем. На практике, конечно, такое отделение реализовать не удастся и поэтому полученное решение справедливо, если различие термодинамических характеристик изолированной системы и системы в термостате можно пренебречь.

В завершение этого параграфа рассмотрим важный вопрос о появлении необратимого характера временной эволюции статистического оператора во времени. В кинетическом уравнении Больцмана необратимость возникла за счет необратимого во времени поведения интеграла столкновений, и, следовательно, оно заведомо является необратимым.

В отличие от кинетического уравнения, уравнение Лиувилля является обратимым во времени, а необратимость привносится с помощью граничного условия (5.24). Именно по этому способу строится необратимое во времени решение уравнения Лиувилля в оригинальной работе Р. Кубо и большинстве изложений этой работы [36]. Того же самого результата можно добиться эквивалентным, но более явным способом, вводя в правую часть уравнения Лиувилля (5.23) бесконечно малый источник $-\epsilon(\rho(t) - \rho_0)$, который можно интерпретировать как

некоторый интеграл столкновений выделенной системы с окружением, за счет которого неравновесное статистическое распределение релаксирует к равновесному (величина $\epsilon \rightarrow 0$ после вычисления средних). Этого оказывается достаточно для получения необратимого во времени решения уравнения Лиувилля и учета хаотизирующего действия термостата. Бесконечно малый источник в правой части уравнения Лиувилля служит просто для того, чтобы снять вырождение относительно операции обращения времени.

Получим решение уравнения Лиувилля с бесконечно малым источником в правой части

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + iL + iL_F(t) \right] \rho(t) = -\epsilon(\rho(t) - \rho_0), \quad (5.36)$$

полагая теперь

$$H_F(t) = -AF(t). \quad (5.37)$$

Покажем, что при таком определении мы снова получим решение (5.32). Для этого, как и раньше, введем поправку $\Delta \rho(t)$, используя соотношение (5.26), и линеаризуем уравнение (5.36) по малым параметрам $H_F(t)$ и $\Delta \rho(t)$. Левая часть линеаризованного уравнения будет совпадать с левой частью уравнения (5.27), а в правой части будет стоять бесконечно малый источник $-\epsilon \Delta \rho(t)$. Умножая это уравнение на $e^{(\epsilon+iL)t}$, запишем линеаризованное уравнение (5.36) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{\epsilon t} e^{iLt} \Delta \rho(t) = -i e^{\epsilon t} e^{iLt} L_F(t) \rho_0. \quad (5.38)$$

Интегрируя это уравнение в пределах от $-\infty$ до t , получаем уравнение, аналогичное уравнению (5.30),

$$e^{\epsilon t} e^{iLt} \Delta \rho(t) = -i \int_{-\infty}^t e^{\epsilon t'} e^{iLt'} L_F(t') dt' \rho_0. \quad (5.39)$$

При выводе уравнения (5.37) мы учли, что

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} e^{\epsilon t} e^{iLt} \Delta \rho(t) = 0$$

в силу конечности параметра ϵ . Оператор $iL_F(t)$ в формулах (5.38), (5.39) определен с помощью гамильтониана (5.37). Умножая уравнение (5.39) на $e^{-(\epsilon+iL)t}$ и производя в интегральном члене замену переменных $t' - t = t_1$, действительно получаем формулу (5.32).

Таким образом, уравнения (5.23) и (5.36) по существу эквивалентны, однако использование уравнения (5.36) физически более оправданно, поскольку в нем, хотя и в идеализированной форме, учитывается взаимодействие с термостатом.

§ 3. Вычисление электропроводности

В качестве примера использования метода Кубо рассмотрим вычисление электропроводности электронов, взаимодействующих с фононами. Пусть система описывается гамильтонианом

$$H(t) = H + H_F(t), \quad H = H_0 + H_{ep}, \quad (5.40)$$

где H_0 – оператор невзаимодействующих электронной и фоновой подсистем

$$H_0 = H_k + H_p, \quad H_k = \frac{P^2}{2m}, \quad P^\alpha = \sum_j^N p_j^\alpha, \quad (5.41)$$

H_{ep} – оператор электрон-фононного взаимодействия, явный вид которого для большинства механизмов электрон-фононного взаимодействия можно задать в форме (4.76); p_j^α – α -проекция оператора импульса j -го электрона. Суммирование в формуле (5.41) ведется по всем электронам в зоне проводимости. Гамильтониан взаимодействия электронов с внешним электрическим полем

$$H_F(t) = -eX^\alpha E^\alpha(t), \quad X^\alpha = \sum_j r_j^\alpha, \quad (5.42)$$

r_j^α – оператор α -проекции координаты j -го электрона, E^α – α -проекция амплитуды внешнего электрического поля.

Вспоминая феноменологическую связь между плотностью электрического тока и напряженностью электрического поля

$J^\alpha(\omega) = \sigma_{\alpha\beta} E^\beta(\omega)$ и результат (5.35), запишем выражение для тензора электропроводности

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{m} \int_{-\infty}^0 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{P^\alpha [\rho_0, X^\beta(t_1)]\} dt_1. \quad (5.43)$$

При выводе этой формулы мы положили $B = J^\alpha = -eP^\alpha/m$. Из выражения (5.43) следует, что электропроводность электронного газа выражается через корреляционную функцию, которая определена для равновесного состояния системы. Физически это означает, что время релаксации среднего импульса электронов, вызывающего направленный дрейф электронов в электрическом поле, определяется теми же самыми процессами, что и время «рассасывания» флуктуаций среднего импульса электронов в равновесном состоянии.

В отличие от кинетического уравнения, где выражение для поправки к функции распределения фактически сразу позволяет вычислить все кинетические коэффициенты, использование формального решения уравнения Лиувилля (5.32) для вычисления кинетических коэффициентов всего лишь приводит нас к проблеме вычисления квантовых корреляционных функций. Таким образом, вместо проблемы решения сложного интегродифференциального кинетического уравнения, в теории Кубо возникает проблема «распутывания» временных корреляционных функций (примером которых может служить корреляционная функция в правой части выражения (5.43)).

Для вычисления электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ воспользуемся методом функций Грина [36, 37].

Поясним, почему используется именно метод функций Грина. Проблема здесь состоит в том, что в формуле (5.43) как в статистическом операторе ρ_0 , так и в операторе эволюции, определяющем временную зависимость оператора координаты электронов $X^\beta(t_1)$, фигурирует полный гамильтониан H , собственные функции и собственные значения которого найти не удастся и поэтому точное вычисление этой корреляционной функции невозможно. Попытка разложения статистического оператора ρ_0 и оператора эволюции e^{iLt_1} в ряд по степеням оператора электрон-фононного взаимодействия H_{ep} в любом конечном порядке теории возмущений приводит к неверному

результату. Из результатов, полученных на основании кинетического уравнения, следует, что $\sigma \sim \tau \sim 1/H_{ep}^2$, а разложение корреляционной функции в ряд по степеням H_{ep} даст некоторую полиномиальную зависимость от константы электрон-фононного взаимодействия.

Правильный результат может получиться лишь в том случае, когда суммируется некоторая бесконечная последовательность членов ряда теории возмущений, сводящаяся к бесконечно убывающей геометрической прогрессии, которая легко поддается суммированию. В методе функций Грина как раз развиты методы диаграммной техники и массового оператора, позволяющие достаточно легко производить такое суммирование бесконечных рядов теории возмущений.

Определяя функцию Грина $G_{\alpha\beta}(t_1)$ соотношением

$$G_{\alpha\beta}(t_1) = \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ P^\alpha e^{iLt_1} [\rho_0, X^\beta] \},$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}, \quad (5.44)$$

запишем выражение для электропроводности, используя определение функции Грина

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t_1} \frac{1}{i\hbar} G_{\alpha\beta}(t_1) dt_1 = \frac{e^2}{m} G_{\alpha\beta}(\omega), \quad (5.45)$$

где $G_{\alpha\beta}(\omega)$ – фурье-трансформа функции Грина (5.44). Поскольку, согласно (5.45), фурье-трансформа функции Грина пропорциональна электропроводности, нашей ближайшей задачей является нахождение величины $G_{\alpha\beta}(\omega)$. Для этой цели составим уравнения движения для функции (5.44). Продифференцируем (5.44) по времени t_1 :

$$\frac{d}{dt_1} G_{\alpha\beta}(t_1) = -\delta(t_1) \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ P^\alpha [\rho_0, X^\beta] \} + \epsilon G_{\alpha\beta}(t_1) + G_{1\alpha\beta}(t_1),$$

$$G_{1\alpha\beta}(t_1) = \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ P^\alpha e^{iLt_1} [\rho_0, \frac{P^\beta}{m}] \}. \quad (5.46)$$

При выводе уравнения движения для функции Грина $G_{\alpha\beta}$ мы воспользовались определением производной от тета-функции

$$\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x)$$

и учли, что

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt_1} e^{iLt_1} [\rho_0, X^\beta] &= e^{iLt_1} iL [\rho_0, X^\beta] = \\ &= e^{iLt_1} [\rho_0, \dot{X}^\beta]; \quad \dot{X}^\beta = \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, H] = \frac{P^\beta}{m}. \end{aligned}$$

Последнее равенство в этой формуле обусловлено тем, что операторы Гамильтона фононов и электрон-фононного взаимодействия коммутируют с оператором координаты электронов.

Легко заметить, что уравнение движения для функции Грина $G_{\alpha\beta}(t_1)$ содержит новую неизвестную величину $G_{1\alpha\beta}(t_1)$, для которой также можно составить уравнение движения. Дифференцируя $G_{1\alpha\beta}(t_1)$ в формуле (5.46) по времени t_1 , получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt_1} G_{1\alpha\beta}(t_1) &= -\delta(t_1) \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\left\{P^\alpha \left[\rho_0, \frac{P^\beta}{m}\right]\right\} + \epsilon G_{1\alpha\beta}(t_1) - G_{2\alpha\beta}(t_1), \\ G_{2\alpha\beta}(t_1) &= \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\left\{\dot{P}^\alpha e^{iLt_1} \left[\rho_0, \frac{P^\beta}{m}\right]\right\}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

При выводе формул (5.47) мы воспользовались тем, что под знаком шпура можно производить циклическую перестановку операторов:

$$\text{Sp}\{ABC\} = \text{Sp}\{CAB\}. \quad (5.48)$$

Это свойство легко доказывается, если воспользоваться определением шпура как суммы диагональных матричных элементов. В нашем случае использование (5.48) дает

$$\text{Sp}\left\{P^\alpha e^{iLt_1} iL \left[\rho_0, \frac{P^\beta}{m}\right]\right\} = -\text{Sp}\left\{\dot{P}^\alpha e^{iLt_1} \left[\rho_0, \frac{P^\beta}{m}\right]\right\}.$$

Уравнение для функции Грина $G_{1\alpha\beta}(t_1)$ также содержит новую функцию Грина $G_{2\alpha\beta}(t_1)$. Таким образом, действительно возникает цепочка «зацепляющихся» уравнений движения для все новых и новых функций Грина и точное нахождение функции $G_{\alpha\beta}(t_1)$ становится невозможным.

Один из возможных подходов для приближенного нахождения функции Грина состоит в том, что на определенном шаге производится искусственное замыкание бесконечной цепочки уравнений движения и функция Грина, возникающая на очередном шаге, выражается через предыдущие функции Грина. Полученная таким образом система уравнений решается уже по возможности точно. Этот метод расщепления функций Грина достаточно широко используется в теории магнетизма. К сожалению, при использовании метода расщепления очень трудно оценить сделанные приближения. Обычно это удается сделать, только сравнивая полученные результаты с результатами расчетов другими методами.

Более обоснованным представляется метод массового оператора, о котором мы упоминали выше. Достоинство этого метода состоит в том, что при его использовании реализуется простая и физически ясная программа. Функция Грина в частотном представлении, как правило, имеет полюса в комплексной плоскости. Поэтому построение теории возмущений для такой функции совершенно бессмысленно. В то же время сами эти полюса могут определяться аналитическими функциями и построение теории возмущения для них вполне возможно.

Рассмотрим, как эту программу можно реализовать на конкретном примере вычисления электропроводности электронного газа. Произведем преобразование Фурье уравнений движения для $G_{\alpha\beta}(t_1)$, $G_{1\alpha\beta}(t_1)$ и т. д. Определяя трансформы Фурье

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} G_{\alpha\beta}(t_1),$$

$$\begin{aligned}
G_{1\alpha\beta}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} G_{1\alpha\beta}(t_1), \\
G_{2\alpha\beta}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} G_{2\alpha\beta}(t_1),
\end{aligned} \tag{5.49}$$

запишем цепочку уравнений движения для функций Грина в частотном представлении

$$\begin{aligned}
(i\omega - \epsilon)G_{\alpha\beta}(\omega) &= -n\delta_{\alpha\beta} + G_{1\alpha\beta}(\omega), \\
(i\omega - \epsilon)G_{1\alpha\beta}(\omega) &= -G_{2\alpha\beta}(\omega), \\
&\dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{5.50}$$

В выражении (5.50) точками обозначены невыписанные явно уравнения движения для функций Грина $G_{2\alpha\beta}(\omega)$ и т. д. При выводе уравнений (5.50) мы учли, что

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{P^\alpha[\rho_0, X^\beta]\} &= \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{[X^\beta, P^\alpha]\rho_0\} = \\
&= \sum_{ij} \text{Sp}\{[x_i^\beta, p_j^\alpha]\rho_0\} = -n\delta_{\alpha\beta}, \\
\frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{P^\alpha[\rho_0, P^\beta]\} &= 0.
\end{aligned}$$

Решение системы уравнений (5.50) будем искать в виде

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{-n\delta_{\alpha\beta}}{i\omega - \epsilon - M_{\alpha\beta}(\omega)}, \tag{5.51}$$

где $M_{\alpha\beta}(\omega)$ — *м а с с о в ы й о п е р а т о р*. Полюса функции Грина (5.51) определяют спектр коллективных возбуждений электронного газа, связанных с флуктуацией среднего импульса электронной системы. Название «массовый оператор» заимствовано из теории элементарных частиц, где энергия элементарных возбуждений является синонимом их массы.

Поскольку есть основания считать поправку к спектру элементарных возбуждений $M_{\alpha\beta}(\omega)$ аналитической функцией, можно попытаться ее найти, используя теорию возмущений. Малым параметром, по которому строится теория возмущений,

является константа электрон-фононной связи. Функция Грина $G_{1\alpha\beta}(\omega)$ пропорциональна первой степени, а $G_{2\alpha\beta}(\omega)$ – второй степени этого параметра (доказательство этого важного факта будет приведено ниже).

Для общности результатов рассмотрим решение формальной системы зацепляющихся уравнений

$$\begin{aligned} LG &= I_1 + G_1, \\ LG_1 &= I_2 + G_2, \end{aligned} \quad (5.52)$$

$$G = \frac{I_1}{L - M}. \quad (5.53)$$

Смысл введенных обозначений в формулах (5.52), (5.53) совершенно очевиден, и каждый член в этих формулах легко может быть сопоставлен соответствующему члену в уравнениях (5.50), (5.51).

Подставляя функцию Грина (5.53) в первое из уравнений цепочки (5.52) и решая полученное уравнение относительно M , находим

$$M = \frac{G_1 L}{I_1 + G_1}. \quad (5.54)$$

Из второго уравнения (5.52) найдем G_1 и подставим в числитель выражения для массового оператора (5.54). В результате, учитывая, что функция I_1 не содержит взаимодействия, а G_1 пропорциональна константе электрон-фононного взаимодействия в первой степени, получаем разложение массового оператора по степеням малого параметра

$$M = \frac{I_2}{I_1} + \frac{G_2}{I_1} - \frac{I_2}{I_1} \frac{G_1}{I_1} + \dots \quad (5.55)$$

При вычислении электропроводности функция $I_1 = -n\delta_{\alpha\beta}$, а $I_2 = 0$, поэтому массовый оператор может быть записан в виде

$$M_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{G_{2\alpha\beta}(\omega)}{n}, \quad (5.56)$$

или в более развернутом виде

$$M_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, P^\beta] \right\}. \quad (5.57)$$

Выясним, какой физический смысл имеет массовый оператор, определенный соотношением (5.51). Для этого вспомним, что, согласно классической теории электропроводности, высокочастотная проводимость может быть записана в виде

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{n}{1/\tau - i\omega}. \quad (5.58)$$

Сравнение формул (5.45), (5.51) и (5.58) показывает, что они совпадают, если считать, что массовый оператор $M_{\alpha\beta}(\omega)$ имеет смысл частоты релаксации импульса. Таким образом, как уже отмечалось выше, массовый оператор функции Грина (5.44) описывает спектр элементарных возбуждений, причем в нашем случае действительная часть массового оператора определяет затухание возбуждений, а мнимая (если она существует) – частоту собственных колебаний среднего импульса электронной системы.

При вычислении массового оператора по формуле (5.57) вновь встает проблема анализа корреляционной функции и, на первый взгляд, может показаться, что никакого прогресса не достигнуто. На самом деле это не так. Во-первых, массовый оператор $M_{\alpha\beta}(\omega)$ имеет смысл частоты релаксации среднего импульса и, как показано в главе 4 (см. формулу (4.160)), пропорционален квадрату константы электрон-фононного взаимодействия.

Во-вторых, в функции Грина $G_{2\alpha\beta}(\omega)$ и массовом операторе $M_{\alpha\beta}(\omega)$ уже набран второй порядок по константе электрон-фононного взаимодействия, поэтому в статистическом операторе ρ_0 и операторе эволюции можно опустить гамильтониан H_{ep} , заменив H на H_0 . Действительно, оператор \dot{P}^α , фигурирующий в правой части (5.57), по определению, равен

$$\dot{P}^\alpha = \frac{1}{i\hbar} [P^\alpha, H_0 + H_{ep}] = \frac{1}{i\hbar} [P^\alpha, H_{ep}] \equiv \dot{P}_{(l)}, \quad (5.59)$$

поскольку гамильтониан H_0 коммутирует с оператором суммарного импульса электронов P^α .

Коммутатор $[\rho_0, P^\beta]$, стоящий под знаком шпура в формуле (5.57), также пропорционален константе взаимодействия электронов с фононами. Это особенно хорошо видно, если использовать тождество Кубо

$$[A, e^{-\beta H}] = \int_0^\beta d\lambda e^{-\lambda H} [H, A] e^{\lambda H} e^{-\beta H}. \quad (5.60)$$

Для доказательства тождества Кубо введем функцию $I(\lambda)$

$$I(\lambda) = [A, e^{-\lambda H}], \quad (5.61)$$

удовлетворяющую уравнению

$$\frac{d}{d\lambda} I(\lambda) = -(A H e^{-\lambda H} - H e^{-\lambda H} A). \quad (5.62)$$

Рассмотрим теперь функцию $I(\lambda) e^{\lambda H}$ и найдем производную по λ от этой функции. Учитывая равенство (5.61), получаем уравнение

$$\frac{d}{d\lambda} (I(\lambda) e^{\lambda H}) = [H, e^{-\lambda H} A e^{\lambda H}] \quad (5.63)$$

с очевидным начальным условием $I(0) = 0$.

Интегрируя уравнение (5.63) в пределах от 0 до β , с учетом начального условия получаем

$$I(\beta) = \int_0^\beta d\lambda e^{-\lambda H} [H, A] e^{\lambda H} e^{-\beta H}, \quad (5.64)$$

что совпадает с формулой (5.60).

Применяя тождество Кубо к коммутатору $[\rho_0, P^\beta]$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, P^\beta] &= \int_0^\beta d\lambda \dot{P}_{(l)}^\beta(i\hbar\lambda) \rho_0, \\ \dot{P}_{(l)}^\beta(i\hbar\lambda) &= e^{-\lambda H} \dot{P}_{(l)}^\beta e^{\lambda H}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Таким образом, мы показали, что в функции Грина $G_{2\alpha\beta}(\omega)$ уже набран второй порядок по взаимодействию и если ограничиться вычислением массового оператора в борновском приближении теории рассеяния, то можно опустить оператор взаимодействия H_{ep} в статистическом операторе и операторе эволюции. Тогда на основании результатов (5.57), (5.59), (5.65) получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \int_0^{\beta} d\lambda < \dot{P}_{(l)}^{\alpha} \dot{P}_{(l)}^{\beta}(t_1 + i\hbar\lambda) >, \\ &< \dots > = \text{Sp} \left\{ \dots \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0} \right\}. \end{aligned} \quad (5.66)$$

В дальнейшем ограничим вычисления случаем статического внешнего поля, полагая частоту $\omega = 0$. Теперь интеграл по времени t_1 можно распространить до $+\infty$, поскольку подынтегральная функция в этом случае является четной функцией аргумента t_1 . Действительно, рассмотрим выражение

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\lambda < \dot{P}_{(l)}^{\alpha} \dot{P}_{(l)}^{\beta}(-t_1 + i\hbar\lambda) > &= \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} \{ \dot{P}_{(l)}^{\alpha}(t_1 - i\hbar\lambda) \dot{P}_{(l)}^{\beta} \rho_0 \} = \\ &= \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} \left\{ \dot{P}_{(l)}^{\beta} \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0} e^{H_0 \lambda} \dot{P}_{(l)}^{\alpha}(t_1) e^{-H_0 \lambda} \right\}. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Вводя новую переменную $\lambda' = \beta - \lambda$, получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\lambda < \dot{P}_{(l)}^{\alpha} \dot{P}_{(l)}^{\beta}(-t_1 + i\hbar\lambda) > &= \int_0^{\beta} d\lambda' < \dot{P}_{(l)}^{\beta} \dot{P}_{(l)}^{\alpha}(t_1 + i\hbar\lambda') > = \\ &= \int_0^{\beta} d\lambda < \dot{P}_{(l)}^{\alpha} \dot{P}_{(l)}^{\beta}(t_1 + i\hbar\lambda) >. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Второе равенство в формуле (5.68) следует из изотропии гамильтониана H_0 относительно вращений в координатном пространстве.

Учитывая последний результат, выражение (5.66) для массового оператора $M_{\alpha\beta}(0) = 1/\tau$ можно записать в виде

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2nm} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-\epsilon|t_1|} \int_0^{\beta} d\lambda < \dot{P}_{(l)}^{\alpha} \dot{P}_{(l)}^{\beta}(t_1 + i\hbar\lambda) >. \quad (5.69)$$

Формула (5.69) для обратного времени релаксации импульса электронов проводимости справедлива для любых механизмов рассеяния, поскольку при ее выводе нигде не использовался явный вид оператора электрон-фононного рассеяния на продольных акустических фононах.

В предыдущей главе мы уже вычисляли время релаксации импульса равновесных электронов $1/\tau_0$ при рассеянии на продольных акустических фононах (см. формулу (4.167)). Интересно сравнить результаты для частоты релаксации среднего импульса, которые получаются при использовании кинетического уравнения и метода линейного отклика на внешнее возмущающее поле (поскольку в этой главе усреднение производится только по равновесному ансамблю, не будем помечать равновесные характеристики дополнительным индексом «0»).

Будем использовать гамильтониан электрон-фононного рассеяния на продольных акустических фононах (4.76), полученный в предыдущей главе, записав его в виде

$$H_{ep}(\vec{r}_j) = \sum_{\vec{q}} C_{\vec{q}} \{ b_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}_j} + b_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \}, \quad |C_{\vec{q}}|^2 = \frac{E_0^2 \hbar q}{2\rho s}. \quad (5.70)$$

Для вычисления корреляционной функции, стоящей в формуле (5.69), удобно перейти к представлению вторичного квантования для электронных переменных. Операторы $\dot{P}_{(l)}^{\alpha}$ и $\dot{P}_{(l)}^{\beta}(t_1 + i\hbar\lambda)$ представляются в виде суммы одночастичных операторов

$$\begin{aligned} \dot{P}_{(l)}^{\alpha} &= \frac{1}{i\hbar} \left[\sum_j P_j^{\alpha}, \sum_i H_{ep}(\vec{r}_i) \right] = \sum_j \dot{P}_{j(l)}^{\alpha}, \\ \dot{P}_{j(l)}^{\alpha} &= \frac{1}{i\hbar} [P_j^{\alpha}, H_{ep}(\vec{r}_j)] = -i \sum_{\vec{q}} C_{\vec{q}} q^{\alpha} \{ b_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}_j} - b_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \}. \end{aligned} \quad (5.71)$$

Поэтому, пользуясь правилом перехода к представлению вторичного квантования для операторов аддитивного типа [38], имеем

$$\begin{aligned} \dot{P}_{(l)}^\alpha = -i \sum_{\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} C_{\vec{q}} q^\alpha \{ b_{\vec{q}} < \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} > - \\ - b_{\vec{q}}^+ < \vec{k}' | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} > \} a_{\vec{k}'\sigma'}^+ a_{\vec{k}\sigma} \delta_{\sigma'\sigma}, \end{aligned} \quad (5.72)$$

где $a_{\vec{k}\sigma}$, $a_{\vec{k}\sigma}^+$ – ферми-операторы рождения и уничтожения электронов с волновым вектором \vec{k} и проекцией спина σ на ось Z ($\sigma = \pm 1/2$).

Усреднение в формуле (5.69) производится одновременно по электронным и фононным состояниям и, поскольку оператор H_0 уже не содержит взаимодействия электронов с фононами, усреднение по электронным и фононным переменным производится независимо. Подставляя результат (5.72) в (5.69) и вычисляя квантово-статистические средние от произведений операторов рождения и уничтожения электронов и фононов, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = \frac{1}{6nm} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} \int_0^\beta d\lambda \sum_{\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} |C_{\vec{q}}|^2 q^2 \{ | < \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} > |^2 \times \\ \times (N_{\vec{q}} + 1) f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}}) e^{i/\hbar(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}})(t + i\hbar\lambda)} + \\ + | < \vec{k}' | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} > |^2 N_{\vec{q}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}}) e^{i/\hbar(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} - \hbar\Omega_{\vec{q}})(t + i\hbar\lambda)} \}. \end{aligned} \quad (5.73)$$

При выводе этого выражения мы воспользовались формулами

$$\begin{aligned} < a_{\vec{k}}^+, a_{\vec{k}} > = f_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad < a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^+ > = (1 - f_{\vec{k}}) \delta_{\vec{k}\vec{k}'}; \\ < a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}} > = 0, \quad < a_{\vec{k}}^+, a_{\vec{k}}^+ > = 0; \\ a_{\vec{k}}^+(t) = a_{\vec{k}}^+ e^{i/\hbar \varepsilon_{\vec{k}} t}, \quad a_{\vec{k}}(t) = a_{\vec{k}} e^{-i/\hbar \varepsilon_{\vec{k}} t} \end{aligned} \quad (5.74)$$

и статистической теоремой Вика – Блоха – Доминисиса [38], согласно которой среднее значение от произвольного числа операторов рождения и уничтожения фермионов для систем с гамильтонианом, который может быть представлен в виде

$$H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma},$$

равно сумме всех возможных полных систем спаривания этого произведения. Под спариванием операторов A_1 и A_2 понимается среднее значение этих операторов

$$\langle \overbrace{A_1 \dots A_2} \rangle = \langle A_1 A_2 \rangle \langle \dots \rangle = \text{Sp}\{A_1 A_2 \rho_0\} \text{Sp}\{\dots \rho_0\},$$

полной системой спаривания называются такие спаривания, при которых не остается ни одного неспаренного оператора. При этом получающемуся произведению средних значений пар операторов рождения (уничтожения) в случае статистики Ферми приписывается знак $(-1)^P$, где P – число перестановок операторов рождения (уничтожения), переводящее исходное расположение операторов в данное. Согласно этой теореме, произведение четырех фермионных операторов можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \underbrace{a_{\vec{k}'\sigma'}^+ a_{\vec{k}\sigma}}_{\text{}} \underbrace{a_{\vec{\mu}'\rho'}^+ a_{\vec{\mu}\rho}}_{\text{}} \rangle &= f_{\vec{k}\sigma} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma'\sigma} f_{\vec{\mu}\rho} \delta_{\vec{\mu}\vec{\mu}'} \delta_{\rho\rho'} + \\ &+ f_{\vec{k}'\sigma'} \delta_{\vec{k}'\vec{\mu}} \delta_{\sigma'\rho} (1 - f_{\vec{k}\sigma}) \delta_{\vec{k}\vec{\mu}'} \delta_{\sigma\rho'}. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Первый член в правой части формулы (5.75), соответствующий линиям спаривания над операторами рождения (уничтожения), вклада не дает, поскольку оператор взаимодействия обычно определяется так, чтобы он не имел диагональных матричных элементов в представлении H_0 . По этой причине в выражении для $1/\tau$ фигурирует только второе слагаемое в правой части формулы (5.75), соответствующее линиям спаривания, изображенным снизу.

Дальнейшее вычисление частоты релаксации импульса электронов по формуле (5.73) уже не представляет большого труда. Выполним сначала интегрирование по t и λ . Пользуясь определением дельта-функции

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} e^{ixt} = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right\},$$

первый из интегралов в фигурной скобке (5.73) запишем в виде

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} \int_0^{\beta} d\lambda e^{i/\hbar(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}})(t+i\hbar\lambda)} = \\ & = 2\pi\hbar \frac{1 - \exp\{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}})\}}{\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}}} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}}) = \\ & = 2\pi\hbar\beta \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}}). \end{aligned} \quad (5.76)$$

Преобразуя аналогичным образом второй интегральный член формулы (5.73) и производя в нем замену индексов суммирования $\vec{k}' \rightarrow \vec{k}$, $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{\beta}{6nm} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\vec{k}\vec{k}'\sigma\sigma'} |C_{\vec{q}}|^2 (\hbar q)^2 \{ | \langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle |^2 \{ (N_{\vec{q}} + 1) \times \\ & \times f_{\vec{k}'} (1 - f_{\vec{k}}) + N_{\vec{q}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'}) \} \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}}) \}. \end{aligned} \quad (5.77)$$

Для доказательства полной идентичности формул (5.77) и (4.160) воспользуемся законом сохранения квазиимпульса

$$\langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle = \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}}$$

и формулами (4.158), согласно которым

$$(N_{\vec{q}} + 1) f_{\vec{k}'} (1 - f_{\vec{k}}) = N_{\vec{q}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'}),$$

если в системе действует закон сохранения энергии

$$\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\Omega_{\vec{q}} = 0.$$

С учетом сделанных выше замечаний выражение для обратного времени релаксации импульса приобретает вид

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\beta}{3nm} \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{q}} (\hbar\vec{q})^2 |C_{\vec{q}}|^2 N_{\vec{q}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}) \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\Omega_{\vec{q}}). \quad (5.78)$$

Это выражение полностью эквивалентно полученному ранее в главе 4 результату (4.160) для обратного времени релаксации среднего импульса равновесных электронов. Некоторое расхождение в обозначениях не должно вводить в заблуждение, поскольку, как уже указывалось, используемое в этой главе обозначение $f_{\vec{k}}$ означает равновесную функцию распределения. Кроме того, мы опустили индекс поляризации фононов λ , полагая сразу, что рассеяние происходит на продольных акустических фононах.

Пример вычисления электропроводности показывает, что в тех случаях, когда может быть применено кинетическое уравнение, результаты этого подхода и теории линейной реакции на внешнее механическое возмущение совпадают между собой. Метод Кубо, однако, обладает большей общностью в том смысле, что формальное выражение для кинетических коэффициентов типа (5.43) сохраняют свой смысл и в области квантующих магнитных полей и не содержат каких-либо предположений о виде спектра электронов и структуре гамильтониана взаимодействия носителей тока с рассеивателями.

Более того, имеется ряд задач физической кинетики, которые достаточно трудно решить, используя метод кинетических уравнений, в то время как теория линейной реакции на внешнее возмущение позволяет без труда получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментом.

Примером такой задачи, рассмотренной в следующем параграфе, может служить вычисление компонент тензора динамической парамагнитной восприимчивости электронного газа и определение времени релаксации поперечных компонент спиновой парамагнитной восприимчивости электронов проводимости.

§ 4. Высокочастотная магнитная восприимчивость

Пусть имеется система электронов, помещенных во внешнее магнитное поле $\vec{H} \parallel Z$. Будем полагать, что амплитуда поля является достаточно малой, так что квантования орбитального движения не происходит. Если кроме статического магнитного поля на систему действует еще и слабое радиочастотное поле \vec{h} ,

поляризованное в плоскости, перпендикулярной оси Z , то гамильтониан интересующей нас системы можно записать в виде

$$H(t) = H + H_F(t), \quad H = H_e + H_s + H_p + H_{ep}, \quad H_e = \frac{P^2}{2m},$$

$$H_s = -g\mu_B S^z |\vec{H}|, \quad H_F(t) = -g\mu_B \vec{S} \vec{h}(t), \quad S^\alpha = \sum_j s_j^\alpha, \quad (5.79)$$

s_j^α – α -проекция оператора спина j -го электрона, g – эффективный фактор спектроскопического расщепления для электронов проводимости, μ_B – магнетон Бора, \vec{S} – оператор полного спина электронов. Гамильтониан H_{ep} описывает взаимодействие электронов с рассеивателями, H_p – гамильтониан рассеивателей. Явный вид этих операторов мы конкретизировать не будем, однако сразу заметим, что оператор H_{ep} , в отличие от оператора электрон-фононного взаимодействия, выведенного нами в главе 4, должен содержать слагаемые, пропорциональные компонентам оператора спина электронов. В случае электрон-фононного и электрон-примесного взаимодействий такая структура оператора H_{ep} возникает при учете в процессах взаимодействия электронов с рассеивателями спин-орбитального вклада.

Пользуясь теорией линейного отклика системы на внешнее воздействие, развитой в §2 настоящей главы, запишем выражение для проекции среднего магнитного момента электронов $\langle \vec{M} \rangle^t \equiv \vec{m}(t)$:

$$m^\alpha(\omega) = \frac{(g\mu_B)^2}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \text{Sp}\{S^\alpha e^{iLt_1} [\rho_0, S^\beta]\} h^\beta(\omega). \quad (5.80)$$

Этот результат непосредственно следует из выражения (5.35), если в него подставить

$$A = B = \vec{M} = g\mu_B \vec{S}, \quad F(\omega) = \vec{h}(\omega).$$

Для дальнейшего преобразования выражения (5.80) воспользуемся тождеством Кубо (5.60), которое теперь запишем

в виде

$$\frac{1}{i\hbar}[\rho_0, S^\beta] = \beta \int_0^1 d\tau \dot{S}^\beta(i\hbar\beta\tau) \rho_0, \quad (5.81)$$

и введем удобное обозначение

$$(A, B) = \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{A B(i\hbar\beta\tau) \rho_0\}. \quad (5.82)$$

В результате получаем

$$m^\alpha(\omega) = \beta(g\mu_B)^2 \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon-i\omega)t_1} (S^\alpha, \dot{S}^\beta(t_1)) h^\beta(\omega); \quad (5.83)$$

$$\dot{S}^\beta = \frac{1}{i\hbar} [S^\beta, H].$$

Уравнение (5.83) фактически определяет тензор магнитной восприимчивости электронного газа, поперечные компоненты которого в круговых переменных

$$m_\pm = m_x \pm im_y; \quad h_\pm = h_x \pm ih_y$$

имеют вид

$$\chi_\pm(\omega) = \beta \frac{(g\mu_B)^2}{2} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon-i\omega)t_1} (S^+, \dot{S}^-(t_1)). \quad (5.84)$$

Как и в случае электропроводности, компоненты тензора парамагнитной восприимчивости $\chi_\pm(\omega)$ выражаются через корреляционную функцию, для вычисления которой можно использовать метод функций Грина.

Если исходить из формулы (5.84), то для вычисления поперечных компонент тензора магнитной восприимчивости целесообразно ввести функцию Грина

$$G_{+-}(t_1) = \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} (S^+, S^-(t_1)). \quad (5.85)$$

Тогда, пользуясь уравнениями движения

$$\dot{S}^\mp = i\omega_s S^\mp + \dot{S}_{(l)}^\mp, \quad \omega_s = \frac{g\mu_B |\vec{H}|}{\hbar}, \quad \dot{S}_{(l)}^\mp = \frac{1}{i\hbar} [S^\mp, H_{ep}], \quad (5.86)$$

можно выразить поперечные компоненты тензора парамагнитной восприимчивости через функции Грина $G_{+-}(\omega)$ и $G_{1+-}(\omega)$

$$\chi_{+-}(\omega) = \beta \frac{(g\mu_B)^2}{2} [G_{1+-}(\omega) + i\omega_s G_{+-}(\omega)], \quad (5.87)$$

где

$$\begin{aligned} G_{1+-}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} G_{1+-}(t_1), \\ G_{+-}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} G_{+-}(t_1), \\ G_{1+-}(t_1) &= \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} (S^+, \dot{S}_{(l)}^-(t_1)). \end{aligned} \quad (5.88)$$

Выбор вида функции Грина не является однозначным. Если исходить из выражения (5.80), то можно выразить поперечные компоненты тензора магнитной восприимчивости электронного газа через коммутаторную функцию Грина

$$\mathfrak{G}_{+-}(t_1) = \theta(-t_1) e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \left\{ S^+ e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, S^-] \right\}, \quad (5.89)$$

фурье-трансформа которой также позволяет определить поперечные компоненты парамагнитной восприимчивости:

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{(g\mu_B)^2}{2} \mathfrak{G}_{+-}(\omega). \quad (5.90)$$

В связи с этой неоднозначностью встает закономерный вопрос: одинаковыми ли будут конечные результаты вычислений, если исходить из разных представлений (5.85) и (5.89) для функции Грина? Ответ на этот вопрос, как мы убедимся ниже, будет отрицательным. При использовании приближенных

методов вычисления функции Грина (5.85) и (5.89) дают качественно различающиеся результаты для магнитной восприимчивости, хотя, конечно, при точном вычислении результат не должен зависеть от вида исходной функции Грина.

Применим развитый в предыдущем параграфе метод массового оператора для нахождения компонент тензора магнитной восприимчивости $\chi_{+-}(\omega)$ исходя из определений (5.85) и (5.89) и выясним, в чем состоят различия в получающихся результатах.

Вначале воспользуемся определением (5.87). Составляя цепочку уравнений движения для функции Грина $G_{+-}(t_1)$ (5.85) и переходя затем к частотному представлению, совершенно аналогично тому, как это было сделано в предыдущем параграфе, получаем

$$\begin{aligned} i(\omega - \omega_s + i\epsilon)G_{+-}(\omega) &= -(S^+, S^-) + G_{1+-}(\omega), \\ i(\omega - \omega_s + i\epsilon)G_{1+-}(\omega) &= -(S^+, \dot{S}_{(l)}^-) - G_{2+-}(\omega), \\ &\dots\dots\dots, \end{aligned} \quad (5.91)$$

$$G_{2+-}(\omega) = \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} (\dot{S}_{(l)}^+, \dot{S}_{(l)}^-(t_1)). \quad (5.92)$$

Система уравнений (5.91) аналогична формальной системе (5.52). Поэтому, вводя массовый оператор $M_{+-}(\omega)$ для функции Грина $G_{+-}(\omega)$ соотношением

$$G_{+-}(\omega) = - \frac{(S^+, S^-)}{i(\omega - \omega_s + i\epsilon) - M_{+-}(\omega)} \quad (5.93)$$

и пользуясь результатами (5.54) (5.55), получаем

$$G_{1+-}(\omega) = - \frac{(S^+, S^-)M_{+-}(\omega)}{i(\omega - \omega_s + i\epsilon) - M_{+-}(\omega)}, \quad (5.94)$$

$$M_{+-}(\omega) = \frac{(S^+, \dot{S}_{(l)}^-)}{(S^+, S^-)} + \frac{G_{2+-}(\omega)}{(S^+, S^-)} + O(H_{ep}^2). \quad (5.95)$$

Последний член в правой части формулы (5.95) означает слагаемые, содержащие константу взаимодействия электронов

с рассеивателями в степени выше, чем вторая. Вычисляя массовый оператор в борновском приближении теории рассеяния, будем учитывать только первые два члена в формуле (5.95) и отбрасывать последний.

Подставляя выражения (5.93) и (5.94) в формулу (5.87) для поперечных компонент тензора парамагнитной восприимчивости электронов проводимости, получаем

$$\chi_{+-}(\omega) = \beta \frac{(g\mu_B)^2}{2} \frac{(S^+, S^-)[i\omega_s + M_{+-}(\omega)]}{i(\omega_s - \omega - i\epsilon) + M_{+-}(\omega)}. \quad (5.96)$$

Для интерпретации смысла членов, входящих в это выражение, найдем парамагнитную восприимчивость исходя из феноменологических уравнений движения магнитного момента, предложенных Блохом в 1946 г. Записанная в декартовой системе координат эта система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}m_x &= \frac{g\mu_B}{\hbar} [\vec{m} \times \vec{\mathcal{H}}]_x - \frac{\delta m_x}{T_2}, \quad \vec{\mathcal{H}} = \vec{H} + \vec{h}, \\ \frac{d}{dt}m_y &= \frac{g\mu_B}{\hbar} [\vec{m} \times \vec{\mathcal{H}}]_y - \frac{\delta m_y}{T_2}, \\ \frac{d}{dt}m_z &= \frac{g\mu_B}{\hbar} [\vec{m} \times \vec{\mathcal{H}}]_z - \frac{\delta m_z}{T_1}, \quad \delta \vec{m} = \vec{m} - \chi_0 \vec{\mathcal{H}}, \end{aligned} \quad (5.97)$$

χ_0 – статическая магнитная восприимчивость системы. Величины T_1 и T_2 имеют смысл времени релаксации продольных и поперечных компонент спиновой намагниченности, \vec{m} – суммарный вектор магнитного момента системы. Предполагая, что геометрия внешних полей осталась прежней, перейдем к циклическим переменным, для чего второе уравнение системы (5.97) умножим на мнимую единицу и сложим с первым уравнением. Тогда получим уравнение, содержащее только одну компоненту намагниченности – m_+ :

$$\frac{d}{dt}m_+ = \frac{g\mu_B}{\hbar} \{m_+ H - m_z h_+\} - \frac{m_+ - \chi_0 h_+}{T_2}. \quad (5.98)$$

Действительно, величина m_z , входящая в формулу (5.98), в случае, когда $h_+ \ll H$ ($H = |\vec{H}|$), может быть записана в виде

$$m_z = \chi_0 H.$$

Производя преобразование Фурье уравнения (5.98), получаем уравнение

$$-i(\omega - \omega_s) m_+(\omega) = i\omega_s \chi_0 h_+ - \frac{m_+}{T_2} + \frac{\chi_0 h_+}{T_2}. \quad (5.99)$$

Отсюда, пользуясь определением магнитной восприимчивости

$$m_+(\omega) = \chi_{+-}(\omega) h_+(\omega),$$

находим

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{\chi_0 (i\omega_s + 1/T_2)}{i(\omega_s - \omega) + 1/T_2}. \quad (5.100)$$

Выражение для поперечной магнитной восприимчивости (5.100), полученное из феноменологических уравнений Блоха, имеет ту же самую структуру, что и формула (5.96), если принять, что роль статической восприимчивости играет величина

$$\chi_0 = \beta \frac{(g\mu_B)^2}{2} (S^+, S^-), \quad (5.101)$$

а роль обратного времени релаксации $\nu_2(\omega)$, зависящего от частоты, играет реальная часть массового оператора

$$\frac{1}{T_2} = \nu_2(\omega) = \text{Re } M_{+-}(\omega).$$

Мнимая часть массового оператора при этом описывает сдвиг частоты зеемановской прецессии $\delta\omega_s$ за счет взаимодействия с рассеивателями

$$\delta\omega_s = \text{Im } M_{+-}(\omega).$$

Интересной особенностью результатов (5.96), (5.100) является то, что они справедливы при высоких и низких частотах ω . В пределе низких частот $\omega \rightarrow 0$ высокочастотная парамагнитная восприимчивость $\chi_{+-}(\omega)$ переходит в статическую восприимчивость χ_0 . Этот предельный переход в область малых частот нарушается, если при вычислении парамагнитной восприимчивости воспользоваться коммутаторной функцией Грина (5.89).

Действительно, составляя цепочку уравнений движения для коммутаторной функции Грина в частотном представлении, имеем

$$\begin{aligned} i(\omega - \omega_s + i\epsilon) \mathfrak{G}_{+-}(\omega) &= \frac{2}{i\hbar} \langle S^z \rangle + \mathfrak{G}_{1+-}(\omega), \\ i(\omega - \omega_s + i\epsilon) \mathfrak{G}_{1+-}(\omega) &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\dot{S}_{(l)}^-, S^+] \rangle - \mathfrak{G}_{2+-}(\omega), \end{aligned} \quad (5.102)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_{1+-}(\omega) &= \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \frac{1}{i\hbar} \langle [\dot{S}_{(l)}^-(t_1), S^+] \rangle, \\ \mathfrak{G}_{2+-}(\omega) &= \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \frac{1}{i\hbar} \langle [\dot{S}_{(l)}^-(t_1), \dot{S}_{(l)}^+] \rangle. \end{aligned} \quad (5.103)$$

Решение системы уравнений (5.102) в борновском приближении теории рассеяния для массового оператора $\mathfrak{M}_{+-}(\omega)$ имеет вид

$$\mathfrak{G}_{+-}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \frac{2 \langle S^z \rangle}{i(\omega - \omega_s + i\epsilon) - \mathfrak{M}_{+-}(\omega)}, \quad (5.104)$$

$$\mathfrak{M}_{+-}(\omega) = \frac{\langle [\dot{S}_{(l)}^-, S^+] \rangle}{2 \langle S^z \rangle} + i\hbar \frac{\mathfrak{G}_{2+-}(\omega)}{2 \langle S^z \rangle}. \quad (5.105)$$

Подставляя результат (5.104) в формулу (5.90) для поперечных компонент тензора магнитной восприимчивости, получаем

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{i}{\hbar} (g\mu_B)^2 \frac{\langle S^z \rangle}{i(\omega_s - \omega - i\epsilon) + \mathfrak{M}_{+-}(\omega)}. \quad (5.106)$$

Для сравнения результатов (5.106) и (5.96) необходимо учесть, что в нулевом порядке по взаимодействию

$$\langle S^z \rangle = \frac{\beta \hbar \omega_s}{2} \langle S^+, S^- \rangle \quad (5.107)$$

и, таким образом, в пределе при $\omega \rightarrow 0$ выражение $\chi_{+-}(\omega)$, определенное с помощью коммутаторной функции Грина, не переходит в статическую восприимчивость χ_0 . Результат (5.106)

для восприимчивости $\chi_{+-}(\omega)$ можно получить из феноменологической системы уравнений Блоха (5.97), предварительно испортив структуру релаксационных членов. Легко заметить, что замена

$$\frac{m_+ - \chi_0 h_+}{T_2} \rightarrow \frac{m_+}{T_2}$$

в уравнении (5.98) немедленно приводит к выражению $\chi_{+-}(\omega)$, имеющему структуру формулы (5.106). Этот факт позволяет лучше понять, в чем состоит различие результатов (5.106) и (5.96).

Магнитная восприимчивость, определенная формулой (5.96), соответствует тому случаю, когда релаксация магнитного момента системы m_+ происходит к равновесному значению магнитного момента $\chi_0 h_+$ в переменном магнитном поле, а формула (5.106) описывает релаксацию магнитного момента к нулевому значению поперечной намагниченности. По этой причине результат (5.106) справедлив только для высоких частот $\omega \sim \omega_s \gg \nu_2$, когда магнитный момент не успевает следовать за полем и можно считать, что релаксация магнитного момента происходит к нулевому значению.

Завершая рассмотрение задачи вычисления парамагнитной восприимчивости электронного газа, докажем соотношение (5.107) и вычислим статическую восприимчивость χ_0 .

Будем исходить из определения корреляционной функции

$$\begin{aligned} (S^+, S^-) &= \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{S^+ \rho_0^\tau S^- \rho_0^{1-\tau}\} = \\ &= \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{S^+ e^{\beta \hbar \omega_s S^z \tau} S^- e^{-\beta \hbar \omega_s S^z (1-\tau)}\}. \end{aligned} \quad (5.108)$$

Пользуясь коммутационными соотношениями для компонент оператора полного спина

$$[S^\mp, S^z] = \pm S^\mp,$$

получаем полезное соотношение

$$S^\mp e^{\beta H_s \tau} = e^{\beta (H_s \mp \hbar \omega_s) \tau} S^\mp, \quad (5.109)$$

с помощью которого выражение (5.108) может быть преобразовано следующим образом:

$$(S^+, S^-) = \langle S^+ S^- \rangle = \frac{1 - \exp\{-\beta \hbar \omega_s\}}{\beta \hbar \omega_s} = \frac{2}{\beta \hbar \omega_s} \langle S^z \rangle. \quad (5.110)$$

При выводе этого соотношения мы снова воспользовались формулой (5.109), полагая

$$\begin{aligned} e^{-\beta \hbar \omega_s} \langle S^+ S^- \rangle &= \text{Sp}\{S^+ S^- \frac{1}{Z} e^{-\beta H_s}\} e^{-\beta \hbar \omega_s} = \\ &= \text{Sp}\{S^- \frac{1}{Z} e^{-\beta H_s} S^+\} e^{-\beta \hbar \omega_s} = \text{Sp}\{S^- S^+ \frac{1}{Z} e^{-\beta H_s}\}, \quad Z = \text{Sp}\{e^{-\beta H_s}\} \end{aligned}$$

и коммутационные соотношения для операторов S^+ , S^-

$$[S^+, S^-] = 2S^z.$$

Теперь не представляет труда вычислить и статическую парамагнитную восприимчивость электронного газа. Пользуясь определением χ_0 , имеем

$$\begin{aligned} \chi_0 &= \frac{\beta (g\mu_B)^2}{2} (S^+; S^-) = \frac{g\mu_B}{H} \langle S^z \rangle, \\ \langle S^z \rangle &= \sum_{\vec{k}\sigma} s_\sigma^z \langle a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\langle a_{\vec{k}\uparrow}^+ a_{\vec{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{\vec{k}\downarrow}^+ a_{\vec{k}\downarrow} \rangle), \quad s_\sigma^z = \pm \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5.111)$$

где стрелками \uparrow и \downarrow обозначена ориентация спинового момента относительно оси Z . Пользуясь формулами (5.74), выразим средние от операторов рождения (уничтожения) электронов через функции заполнения электронов $f_{\vec{k}\uparrow}$ и $f_{\vec{k}\downarrow}$ со спином, ориентированным вдоль магнитного поля и в противоположном направлении соответственно. Полагая параметр $\beta \hbar \omega_s$ малым, разложим функции распределения $f_{\vec{k}\uparrow}$ и $f_{\vec{k}\downarrow}$ по этому параметру с точностью до линейных членов и, переходя затем от суммирования по волновому вектору \vec{k} к интегрированию по

энергии, получаем стандартную формулу статической парамагнитной восприимчивости электронного газа

$$\chi_0 = \frac{2^{1/2} \mu_B^2 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \left(-\frac{\partial f(\varepsilon - \zeta)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (5.112)$$

Для полного вычисления поперечных компонент динамической парамагнитной восприимчивости электронного газа необходимо, вообще говоря, рассмотреть вопрос о вычислении массового оператора, определяемого формулой (5.95), и частоты релаксации поперечных компонент спиновой намагниченности $\nu_2(\omega)$. Во втором порядке по взаимодействию H_{ep} величина $\nu_2(\omega)$ определяется действительной частью функции $G_{2+-}(\omega)$ и может быть легко вычислена. Принципиально эти вычисления ничем не отличаются от вычисления обратного времени релаксации среднего импульса электронов в предыдущем параграфе, но они достаточно громоздки и поэтому мы их здесь не приводим.

5.2. Электропроводность в квантующем магнитном поле

§ 5. Потоки заряда и тепла в квантующем магнитном поле

В основу теории термогальваномагнитных явлений, изложенной в предыдущей главе, было положено кинетическое уравнение Больцмана. При изменении внешних условий, таких как температура образца T , напряженность внешнего магнитного поля H , условия применимости квазиклассического описания могут оказаться нарушенными и подход, основанный на кинетическом уравнении, неприменим. Как показано в § 2 предыдущей главы, если выполняются условия $\hbar\omega_0 \gg k_B T$ и $\omega_0 \tau_{\vec{p}} \gg 1$, то при построении теории явлений переноса следует учитывать квантование орбитального движения электронов в магнитном поле и возникновение дискретных уровней энергии электронов (уровней Ландау). Наличие дискретного спектра электронов в магнитном поле приводит к ряду особенностей, проявляющихся

в термодинамических и кинетических явлениях. Так, в квантующем магнитном поле возможны осцилляции термодинамических характеристик и термогальваномагнитных коэффициентов при изменении внешнего магнитного поля, связанные с прохождением очередного уровня Ландау через уровень Ферми (более подробно об этом см. в следующем параграфе).

Кроме этих, достаточно очевидных различий квазиклассической и квантовой теории термогальваномагнитных явлений, связанных с перестройкой спектра носителей тока, имеются существенные различия в определении потоков заряда и тепла. В предыдущей главе потоки заряда и тепла были определены соотношениями (4.27), (4.28). В квантовой теории аналогами этих формул являются определения

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \text{Sp}\{\hat{\vec{J}} \rho\}, \quad \vec{J}_E = \text{Sp}\{\hat{\vec{J}}_E \rho\}, \\ \hat{\vec{J}} &= \frac{e}{2}(\hat{v}\hat{N} + \hat{N}\hat{v}), \quad \hat{\vec{J}}_E = \frac{1}{2e}(\hat{\vec{J}}\hat{H} + \hat{H}\hat{\vec{J}}), \end{aligned} \quad (5.113)$$

где ρ – статистический оператор, $\hat{\vec{J}}$ и $\hat{\vec{J}}_E$ – операторы плотности электрического тока и плотности потока энергии, \hat{v} – оператор скорости носителей тока, \hat{H} – оператор плотности энергии.

В квантующем магнитном поле эти определения, однако, оказались некорректными. Еще в 50-х гг. прошлого века японские физики Касуя и Накаджима обратили внимание на то, что определенные таким образом поток плотности заряда и поток тепла $\vec{J}_Q = \vec{J}_E - \zeta/e \vec{J}$ приводят к нарушению соотношения Эйнштейна, согласно которому коэффициенты, стоящие перед градиентом электрического потенциала и градиентом химического потенциала (деленного на заряд электрона), должны быть равны, а также нарушению соотношений симметрии Онсагера.

Фактическая причина нарушения соотношений Эйнштейна была вскрыта в работах П. С. Зырянова и В. П. Силина. Они показали, что в случае пространственно-неоднородных систем в объемную плотность потока заряда при наличии квантующего магнитного поля вносит вклад ток ($c \text{ rot } \vec{m}$), обусловленный зависимостью парамагнитной и диамагнитной восприимчивостей электронного газа от химического потенциала и температуры. Поэтому ток проводимости $\vec{J}_{\text{пр}}$, который должен фигурировать

при определении коэффициентов переноса, следует правильно определить, исключив из формулы плотности потока заряда ту часть, которая непосредственно не связана с электропереносом:

$$\vec{J}_{\text{пр}} = \text{Sp}\{\hat{\vec{J}} \rho\} - c \text{ rot } \vec{m}, \quad \vec{B} - \vec{H} = 4\pi\vec{m}. \quad (5.114)$$

Поток тепла в квантующем магнитном поле также требует переопределения, поскольку даже в пространственно-однородном случае вклад в поток тепла дает вектор Пойтинга

$$\frac{c}{4\pi} [\vec{E} \times (\vec{H} - \vec{B})],$$

который следует вычесть из плотности потока энергии, чтобы получить правильное выражение для потока тепла:

$$\vec{J}_Q = \vec{J}_E - \frac{\zeta}{e} \vec{J}_{\text{пр}} - \frac{c}{4\pi} [\vec{E} \times (\vec{H} - \vec{B})]. \quad (5.115)$$

При наличии пространственной неоднородности в правой части формулы (5.115) возникают дополнительные слагаемые, пропорциональные пространственным производным тока намагниченности $c \text{ rot } \vec{m}$

Более подробно с проблемой определения потока заряда и тепла в квантующем магнитном поле и проблемой вычисления термогальваномагнитных коэффициентов можно познакомиться в обзорной работе [39] и монографии [40]. Там же можно найти и необходимые ссылки на оригинальные работы.

В рамках учебного курса нет никакой возможности изложить теорию термогальваномагнитных явлений в квантующем магнитном поле в полном объеме. Мы планируем лишь остановиться на проблеме вычисления диагональных и недиагональных компонент тензора электропроводности, основываясь на теории линейного отклика Кубо. В этом случае компоненты плотности тока намагниченности $c \text{ rot } \vec{m}$ обращаются в нуль и мы возвращаемся к обычному определению тока проводимости (5.113), которым и будем пользоваться в дальнейшем.

§ 6. Динамика движения электрона в квантующем магнитном поле

Рассмотрим движение электронов в кристалле при наличии внешнего магнитного поля \vec{H} , параллельном оси Z , которое задается векторным потенциалом $A = \{-Hy, 0, 0\}$, $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$. Как известно, силы, действующие на частицу в магнитном поле, не являются потенциальными. Однако в электромагнитном поле можно ввести обобщенную потенциальную функцию, зависящую от скорости. Для классической системы функция Лагранжа L свободно движущейся заряженной частицы в электромагнитном поле может быть записана в виде

$$L = \frac{mv^2}{2} - e\varphi + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{v}. \quad (5.116)$$

Обобщенный (канонический) импульс \vec{p} введем соотношением

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (5.117)$$

Поскольку энергия электрона в магнитном поле (без учета спина) есть $mv^2/2$, а функция Гамильтона есть энергия, выраженная через обобщенный импульс, для функции Гамильтона \hat{H} электрона в магнитном поле получаем

$$\hat{H}_0 = \frac{(\vec{p} - e/c \vec{A})^2}{2m}, \quad (5.118)$$

где $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, поскольку при переходе к квантовому описанию именно канонический импульс должен быть заменен оператором $-i\hbar\vec{\nabla}$. Введем понятие кинетического импульса $\vec{p} = \vec{p} - e/c \vec{A}$. Тогда можно записать

$$\hat{H}_0 = \frac{(\mathbf{p})^2}{2m}, \quad \mathbf{p}_x = -i\hbar\nabla_x + \frac{e}{c}Hy, \quad \mathbf{p}_y = -i\hbar\nabla_y, \quad \mathbf{p}_z = -i\hbar\nabla_z. \quad (5.119)$$

Приведем выражения для спектра и собственных функций оператора Гамильтона \hat{H} . Подробности решения этой задачи можно найти в учебных руководствах по квантовой механике:

$$\hat{H}_0 \psi_{n p_z p_x} = \varepsilon_{n p_z} \psi_{n p_z p_x}, \quad \varepsilon_{n p_z} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (5.120)$$

$$\psi_{n p_z p_x} = (4\pi l)^{-1/2} e^{i/\hbar(p_z z + p_x x)} \Phi_n\left(\frac{y - y_0}{l}\right),$$

$$\Phi_n(x) = N_n e^{-x^2/2} H_n(x),$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – номер уровня Ландау (мы решили сохранить традиционное обозначение для нумерации уровней Ландау, хотя ранее этой буквой была обозначена концентрация электронов). $l = (\hbar c / eH)^{1/2}$ – магнитная длина, $y_0 = -c / (eH) p_x$, N_n – нормировочный множитель для собственной функции оператора энергии гармонического осциллятора $\Phi_n(x)$. Как следует из закона дисперсии (5.120), движение в направлении оси Z остается квазисвободным. Квантуется лишь движение в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Найдем коммутационные соотношения для компонент оператора кинетического импульса \vec{p} :

$$[p_x, p_y] = [p_x + \frac{eH}{c} y, p_y] = -\frac{eH}{c} [p_y, y] = i \frac{\hbar^2}{l^2}. \quad (5.121)$$

$$\begin{aligned} [p_x, p_z] = [p_y, p_z] = [p_x, y] = [p_y, x] = [p_y, z] = [p_z, x] = 0, \\ [p_x, x] = [p_y, y] = [p_z, z] = -i\hbar. \end{aligned} \quad (5.122)$$

Интересной особенностью движения электронов в магнитном поле является то, что здесь удастся выделить медленно меняющиеся переменные X, Y – координаты центра лармовской орбиты, которые являются квазиинтегралами движения (коммутируют с гамильтонианом \hat{H}_0) и координаты относительного движения ξ, η :

$$X = x - \xi, \quad Y = y - \eta, \quad \xi = -\frac{c}{eH} p_y, \quad \eta = \frac{c}{eH} p_x. \quad (5.123)$$

Легко проверить, что вновь введенные величины удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\xi, \eta] = il^2, \quad [X, Y] = il^2, \quad (5.124)$$

а остальные коммутаторы равны нулю:

$$[\xi, X] = [\eta, X] = [\xi, Y] = [\eta, Y] = 0.$$

Из основных принципов квантовой механики следует, что если два оператора не коммутируют, то физические величины, им соответствующие, одновременно неизмеримы и удовлетворяют принципу неопределенности. Отсюда следует, что

$$\Delta X \Delta Y \sim l^2,$$

положение центра ларморовской орбиты квантуется и в площадке порядка πl^2 может располагаться лишь один центр.

Получим уравнения движения для операторов X и Y , считая, что гамильтониан задачи имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}$. В дальнейшем в качестве оператора \hat{U} будет использоваться оператор электрон-фононного или электрон-примесного взаимодействий. Сначала рассмотрим уравнения движения для компонент кинетического импульса \mathbf{p}_x и \mathbf{p}_y :

$$\dot{\mathbf{p}}_x = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{p}_x, \hat{H}_0 + \hat{U}] = \frac{i}{\hbar m}[\mathbf{p}_y, \mathbf{p}_x]\mathbf{p}_y + \frac{i}{\hbar}[\hat{U}, \mathbf{p}_x].$$

Используя ранее полученные результаты (5.122), получаем

$$\dot{\mathbf{p}}_x = \frac{eH}{c} \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial \mathbf{p}_y} - \frac{\partial \hat{U}}{\partial x}. \quad (5.125)$$

Совершенно аналогично можно получить и уравнение движения для оператора \mathbf{p}_y :

$$\dot{\mathbf{p}}_y = -\frac{eH}{c} \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial \mathbf{p}_x} - \frac{\partial \hat{U}}{\partial y}. \quad (5.126)$$

Используя определение (5.123) и полученные выше результаты (5.125), (5.126), имеем

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \frac{1}{i\hbar}[x - \xi, \hat{H}_0 + \hat{U}] = \frac{1}{i\hbar}[x, \hat{H}_0] - \frac{1}{i\hbar}[\xi, \hat{H}_0] - \frac{1}{i\hbar}[\xi, \hat{U}] = \\ &= -\frac{1}{i\hbar}[\xi, \hat{U}] = \frac{1}{i\hbar}[X, \hat{U}] = -\frac{c}{eH} \frac{\partial \hat{U}}{\partial y}, \\ \dot{Y} &= \frac{1}{i\hbar}[Y, \hat{U}] = \frac{c}{eH} \frac{\partial \hat{U}}{\partial x}.\end{aligned}\quad (5.127)$$

Таким образом, координаты центра ларморовской орбиты изменяются только под действием потенциала возмущений \hat{U} . Это позволяет считать величины X и Y медленно меняющимися физическими величинами. Наличие медленно меняющихся переменных в квантующем магнитном поле радикальным образом изменяет и методику вычисления кинетических явлений в квантующем магнитном поле.

§ 7. Выражение для компонент тензора электропроводности в квантующем магнитном поле

В квантующем магнитном поле нарушаются условия применимости кинетического уравнения. Поэтому для анализа электропроводности будем использовать выражение (5.43), которое мы получили, используя теорию линейного отклика на слабое механическое возмущение. Применяя для преобразования этого выражения формулу Кубо (5.60) и вводя вместо импульсов P^α операторы тока, определив их выражением $J_\mu = eP^\mu$, получаем

$$\sigma_{\mu\nu} = \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_0^\beta d\lambda e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \text{Sp}\{J_\mu J_\nu(t_1 + i\hbar\lambda)\rho_0\}. \quad (5.128)$$

Делая замену переменных $t_1 \rightarrow -t_1$, получаем окончательно

$$\sigma_{\mu\nu} = \int_0^\infty dt_1 \int_0^\beta d\lambda e^{(i\omega - \epsilon)t_1} \text{Sp}\{J_\mu(t_1)J_\nu(i\hbar\lambda)\rho_0\}. \quad (5.129)$$

Запишем компоненты тока J_μ и J_ν , используя определение координат центра ларморовской орбиты и координат относительного движения, которые далее будут пониматься как суммарные величины для всей системы электронов

$$J_x = e(\dot{\xi} + \dot{X}), \quad J_y = e(\dot{\eta} + \dot{Y}).$$

Для упрощения обозначений и сокращения объема формул введем так называемое скалярное произведение двух операторов Кубо $(A; B(t))$ (см. также формулу (5.82)), которое в квантующем магнитном поле является четной функцией времени, если операторы A и B совпадают (доказательство этого замечательного факта в § 9 настоящей главы):

$$(A, B(t)) = \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Sp}\{AB(t + i\hbar\lambda)\rho_0\}. \quad (5.130)$$

Тогда, используя выражение (5.129), для $\sigma_{xx}(0)$ на нулевой частоте получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(0) &= \int_0^\infty dt_1 e^{-\epsilon t_1} (J_x(t_1), J_x) = \int_0^\infty dt_1 e^{-\epsilon t_1} (J_x, J_x(t_1)) = \\ &= e^2 \int_0^\infty dt_1 e^{-\epsilon t_1} \left\{ (\dot{\xi}, \dot{\xi}(t_1)) + (\dot{\xi}, \dot{X}(t_1)) + (\dot{X}, \dot{\xi}(t_1)) + \right. \\ &\quad \left. + (\dot{X}, \dot{X}(t_1)) \right\}. \end{aligned} \quad (5.131)$$

Покажем, что все члены, кроме последнего, равны нулю. Для доказательства рассмотрим корреляционную функцию

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \dot{\xi}(t)) &= \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \frac{d}{dt} (\dot{\xi}, \xi(t)) = \\ &= -(\dot{\xi}, \xi(0)) + \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \xi(t)) + \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \xi(t)). \end{aligned} \quad (5.132)$$

При получении выражения (5.132) мы выполнили интегрирование по частям. Пользуясь принципом ослабления корреляций, согласно которому корреляция между двумя физическими величинами, взятыми в момент времени t_1 и t_2 , ослабевает с увеличением временного интервала $\Delta t = t_1 - t_2$, получаем

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \xi(t)) \rightarrow e^{-\epsilon t} \text{Sp}\{\dot{\xi}\rho_0\} \text{Sp}\{\xi(t)\rho_0\} \rightarrow 0. \quad (5.133)$$

Для преобразования последнего выражения в формуле (5.132) воспользуемся теоремой Абеля, согласно которой в термодинамическом пределе справедливо равенство

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \xi(t)) &= \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} (\dot{\xi}, \xi(t)) = \text{Sp}\{\dot{\xi}\rho_0\} \text{Sp}\{\xi(t)\rho_0\} = 0. \end{aligned} \quad (5.134)$$

Обратимся, наконец, к преобразованию первого слагаемого во второй строчке формулы (5.132). Сделав замену переменной интегрирования $\tau = \lambda/\beta$ в формуле скалярного произведения (5.130), получим

$$\begin{aligned} -(\dot{\xi}, \xi) &= -\beta \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{\dot{\xi}\rho_0^\tau \xi\rho_0^{1-\tau}\} = -\beta \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{\xi\rho_0^{1-\tau} \dot{\xi}\rho_0^\tau\} = \\ &= -\beta \int_0^1 d\tau' \text{Sp}\{\xi\rho_0^{\tau'} \dot{\xi}\rho_0^{1-\tau'}\} = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{\xi[\rho_0, \xi]\} = -\frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{[\xi, \xi]\rho_0\} = 0. \end{aligned} \quad (5.135)$$

При получении результата (5.135) мы сделали замену переменных $\tau' = 1 - \tau$ и воспользовались формулой Кубо (5.60).

Совершенно аналогично можно доказать, что

$$\int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} (\dot{\xi}, \dot{\eta}(t)) = -(\dot{\xi}, \eta) = \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{[\xi, \eta]\rho_0\} = \frac{n\epsilon}{eH}; \quad (5.136)$$

$$\int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} (\dot{X}, \dot{\xi}(t)) = 0; \quad \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} (\dot{Y}, \dot{\eta}(t)) = 0. \quad (5.137)$$

Равенство нулю корреляционных функций в формуле (5.137) следует из того факта, что коммутаторы $[X, \xi]$ и $[Y, \eta]$ равны нулю.

Теперь можно вернуться к формуле (5.131) и записать результат для $\sigma_{xy}(0)$ и других компонент электропроводности в квантующем магнитном поле. Учитывая результаты (5.134) – (5.137), получаем

$$\sigma_{xy} = \frac{enc}{H} + e^2 \int_0^{\infty} dt_1 e^{-\epsilon t_1} (\dot{X}(t_1), \dot{Y}); \quad (5.138)$$

$$\sigma_{xx} = e^2 \int_0^{\infty} dt_1 e^{-\epsilon t_1} (\dot{X}, \dot{X}(t_1)); \quad (5.139)$$

$$\sigma_{yy} = e^2 \int_0^{\infty} dt_1 e^{-\epsilon t_1} (\dot{Y}, \dot{Y}(t_1)). \quad (5.140)$$

Анализируя полученные результаты, нетрудно заметить, что в квантующем магнитном поле диагональные компоненты σ_{xx} и σ_{yy} отличны от нуля только благодаря процессам рассеяния, поскольку, как следует из уравнений движения для этих величин (5.127), σ_{xx} и σ_{yy} пропорциональны по меньшей мере квадрату константы взаимодействия электронов с рассеивателями. Недиagonalная компонента σ_{xy} содержит не зависящий от процессов рассеяния бесстолкновительный вклад enc/H и квадратичную по константе взаимодействия электронов с рассеивателями поправку. Важно отметить, что компоненты тензора электропроводности в квантующем магнитном поле выражаются через корреляционные функции координат центров ларморовских орбит, которые в борновском приближении теории рассеяния могут быть непосредственно вычислены.

§ 8. Вычисление электропроводности в случае квазиупругого рассеяния на фононах

Рассмотрим вычисление σ_{xx} и σ_{yy} в случае квазиупругого рассеяния на фононах, полагая, что оператором \hat{U} в формулах

(5.127) является гамильтониан электрон-фоонного взаимодействия (4.76).

Чтобы лучше понимать полученные выше результаты для компонент тензора электропроводности в квантующем магнитном поле, полезно сравнить их с результатами, которые дает метод кинетического уравнения в пределе сильного $\omega_0\tau_{\vec{p}} \gg 1$ (но неквантующего) магнитного поля. На основании формул (4.118), (4.121) и (4.128) получаем

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 n}{m} \frac{\omega_0 \tau_{\vec{p}}^2}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \simeq \frac{enc}{H}; \quad (5.141)$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{m} \frac{\tau_{\vec{p}}}{1 + (\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2} \simeq \frac{e^2 n}{m \omega_0^2 \tau_{\vec{p}}}. \quad (5.142)$$

Таким образом, в пределе сильного магнитного поля, если при разложении знаменателя в формуле (5.141) по малому параметру $1/(\omega_0 \tau_{\vec{p}})^2$ оставить только нулевой член разложения, кинетическое уравнение для недиагональной компоненты электропроводности дает тот же самый бесстолкновительный вклад, что и формула (5.138).

Выражение для диагональной компоненты (5.142) позволяет, по крайней мере формально, определить время релаксации импульса в квантующем магнитном поле. Действительно, сравнивая два выражения (5.142) и (5.139), получаем определение для времени релаксации импульса в квантующем магнитном поле:

$$\frac{1}{\tau_{\vec{p}}} = \frac{m \omega_0^2}{n} \int_0^\infty dt_1 e^{-\epsilon t_1} (\dot{X}, \dot{X}(t_1)). \quad (5.143)$$

Проблема вычисления компонент σ_{xx} и σ_{xy} тензора электропроводности в борновском приближении теории рассеяния по существу сводится к квадратурам, поскольку в этом приближении взаимодействием в статистическом операторе и операторе эволюции можно пренебречь и тогда эти операторы имеют только диагональные матричные элементы на классе собственных функций $|\nu\rangle$ оператора \hat{H}_0 . Поскольку корреляционная

функция $(A, B(t))$ является четной функцией временного аргумента t , интегрирование по переменной t_1 в интеграле (5.143) можно распространить до $-\infty$, сделав пределы симметричными. Тогда интегрирование по времени t_1 даст δ -функцию.

Далее квантово-статистическое среднее по электронным и фононным переменным представим в виде

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{\dot{X}\dot{X}(t)\rho_0\} = \sum_{\nu\nu'} \langle \langle \nu' | \dot{X} | \nu \rangle \langle \nu | \dot{X}(t) | \nu' \rangle \rangle_s \times \\ \times f_{\nu'}(1 - f_{\nu}) e^{i/\hbar(\varepsilon'_{\nu} - \varepsilon_{\nu})}. \end{aligned} \quad (5.144)$$

В формуле (5.144) угловые скобки, помеченные индексом s , обозначают квантово-статистическое усреднение по состояниям рассеивателей. При выводе этой формулы мы воспользовались также статистической теоремой Вика – Блоха – Доминисиса (5.75).

Наконец, можно показать (предлагаем это доказательство провести самостоятельно), что

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp}\{\dot{X}\dot{X}(t + i\hbar\lambda)\rho_0\} = \beta \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} \text{Sp}\{\dot{X}\dot{X}(t)\rho_0\}. \quad (5.145)$$

Учитывая сказанное, выражение для компоненты σ_{xx} можно представить в такой форме:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2k_{\text{Б}}T} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \langle \delta(E - \hat{H}_0) \dot{X} (1 - f(\hat{H}_0) \dot{X}(t)) \rangle. \quad (5.146)$$

В этой формуле большие угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают квантово-статистическое среднее по фононным переменным и квантово-механическое среднее по одночастичным электронным состояниям.

Запишем в явном виде операторы \dot{X} и $\dot{X}(t)$. Учитывая, что операторы координаты центра ларморовской орбиты коммути-

руют с гамильтонианом \hat{H}_0 , получаем

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \frac{-il^2}{\hbar} \sum_q q_y \{C_{\vec{q}} b_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} - C_{\vec{q}}^* b_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\}; \\ \dot{X}(t) &= \frac{-il^2}{\hbar} e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \sum_q q_y \{C_{\vec{q}} b_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} e^{-i\Omega_{\vec{q}} t} - \\ &\quad - C_{\vec{q}}^* b_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}} e^{i\Omega_{\vec{q}} t}\} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}.\end{aligned}\quad (5.147)$$

Подставим эти выражения в выражение (5.146):

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \frac{e^2 \pi \hbar}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \sum_{\vec{q}} \frac{l^4}{\hbar^2} q_y^2 |C_{\vec{q}}|^2 \left\{ (N_{\vec{q}} + 1) \times \right. \\ &\times \text{Sp} \{ \delta(E - \hat{H}_0) e^{i\vec{q}\vec{r}} (1 - f(\hat{H}_0)) \delta(E - \hat{H}_0 - \hbar\Omega_{\vec{q}}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \} + \\ &\left. + N_{\vec{q}} \text{Sp} \{ \delta(E - \hat{H}_0) e^{-i\vec{q}\vec{r}} (1 - f(\hat{H}_0)) \delta(E - \hat{H}_0 + \hbar\Omega_{\vec{q}}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \} \right\}.\end{aligned}\quad (5.148)$$

Шпур в формуле (5.148) означает суммирование по полному набору квантовых чисел $\nu = \{n, p_x, p_z, \sigma\}$, характеризующих состояние электрона в квантующем магнитном поле.

Для дальнейшего преобразования выражения (5.148) учтем два тождества

$$\begin{aligned}N_{\vec{q}}[f(E - \hbar\Omega_{\vec{q}}) - f(E)] &= f(E)[1 - f(E - \hbar\Omega_{\vec{q}})]; \\ -[N_{\vec{q}} + 1][f(E + \hbar\Omega_{\vec{q}}) - f(E)] &= f(E)[1 - f(E + \hbar\Omega_{\vec{q}})],\end{aligned}\quad (5.149)$$

которые проверяются непосредственной подстановкой функций распределения. С учетом этих соотношений выражение (5.148) можно переписать в более удобной для дальнейших преобразований форме

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \frac{e^2 2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\vec{q}} l^4 q_y^2 |C_{\vec{q}}|^2 \frac{f(E - \hbar\Omega_{\vec{q}}) - f(E)}{\hbar\Omega_{\vec{q}}} \frac{\hbar\Omega_{\vec{q}}}{k_B T} \times \\ &\times N_{\vec{q}}[N_{\vec{q}} + 1] \text{Sp} \{ \delta(E - \hat{H}_0) e^{i\vec{q}\vec{r}} \delta(E - \hat{H}_0 - \hbar\Omega_{\vec{q}}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \}.\end{aligned}\quad (5.150)$$

При выводе этой формулы при преобразовании второго слагаемого выражения (5.148) сделана замена переменных $E + \hbar\Omega_{\vec{q}} \rightarrow E$.

Полученное выражение справедливо в случае неупругого рассеяния и квазиупругого рассеяния на фононах. В качестве примера рассмотрим упругое рассеяние на фононах. Поскольку нас интересует только принципиальная сторона вопроса, связанная с методикой вычисления кинетических коэффициентов в магнитном поле, ограничимся наиболее простым случаем ультраквантового предела, когда в переносе заряда участвуют только электроны самой нижней подзоны Ландау с номером $n = 0$. В этом случае матричные элементы от операторов экспонент в выражении (5.148) легко вычисляются, и мы имеем

$$| \langle 0, p_z + \hbar q_z, p_x + \hbar q_x | e^{i\vec{q}\vec{r}} | 0, p_z, p_x \rangle |^2 = e^{l^2 q_{\perp}^2 / 2}; \quad q_{\perp} = q_x^2 + q_y^2.$$

При вычислении шпура по электронным переменным суммы удобно заменить интегралами

$$\sum_{\nu\sigma} \rightarrow 2 \frac{L_x L_z}{(2\pi\hbar)^2} \int dp_z \int dp_x \rightarrow \frac{2V}{(2\pi l)^2 \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z. \quad (5.151)$$

Для того чтобы получить последний результат, необходимо учесть кратность вырождения электронных состояний по квантовому числу p_x . Для подсчета этого числа наложим условие цикличности на волновую функцию электрона (5.120) по осям X и Z , т. е. потребуем, чтобы координатам $x + L_x$, $z + L_z$ и x , z соответствовала одна и та же функция. Если учесть реальный вид волновой функции (5.120), то это требование приводит к условию

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z,$$

где n_x и n_z — некоторые целые числа. По оси Y не будем налагать условие цикличности, но потребуем, чтобы решение (5.120) существовало только тогда, когда координата центра ларморовской орбиты y_0 находится в области

$$0 < |y_0| < L_y, \quad (5.152)$$

где L_y – размер образца по оси Y (легко проверить, что y_0 – это одна из координат центра ларморовской орбиты и $y_0 = Y$). Таким образом, максимальное значение координаты центра ларморовской орбиты $|y_0|^{\max} = L_y$. Так как $|y_0| = c/(eH)p_x$, найдем максимальное значение квантового числа p_x : $p_x = \hbar/l^2 L_y$. Тогда интеграл по p_x в формуле (5.151) равен $\hbar/l^2 L_y$ и мы получаем последний результат в этой формуле.

Суммирование по волновому вектору фононов также следует заменить интегрированием в цилиндрической системе координат

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \int_{-\infty}^\infty dq_z. \quad (5.153)$$

Учитывая сделанные замечания, выражение для статической проводимости σ_{xx} в случае квазиупругого рассеяния запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & \frac{2\pi e^2 l^4}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \int_{-\infty}^\infty dq_z \int_{-\infty}^\infty dE q_y^2 |C_{\vec{q}}|^2 \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \times \\ & \times \left(\frac{k_B T}{\hbar \Omega_{\vec{q}}} \right) \frac{2}{(2\pi l)^2 \hbar} \int_{-\infty}^\infty dp_z \delta(\varepsilon_{0p_z} - E) \delta(\varepsilon_{0p_z + \hbar q_z} - E) e^{-l^2 q_\perp^2 / 2}. \end{aligned} \quad (5.154)$$

В целях дальнейшего преобразования выражения (5.154) рассмотрим интеграл

$$I = \int_{-\infty}^\infty dq_z \int_{-\infty}^\infty dp_z q^t \delta(\varepsilon_{0p_z} - E) \delta(\varepsilon_{0p_z + \hbar q_z} - E). \quad (5.155)$$

Из закона сохранения энергии следует, что

$$\frac{(p_z + \hbar q_z)^2}{2m} = \frac{(p_z)^2}{2m}.$$

Поэтому участвующие в рассеянии фононы имеют квазиимпульс $\hbar q_z \simeq p_z$, что позволяет легко оценить продольную составляющую волнового вектора фононов, участвующих в рассеянии,

$$q_z \simeq \frac{\sqrt{2mk_B T}}{\hbar} \sim \lambda^{-1} \simeq 10^7 \text{ см}^{-1}$$

для температур, при которых реально проводится эксперимент.

Перпендикулярная составляющая q_{\perp} волнового вектора фононов, участвующих в рассеянии, лимитируется обрезаящим фактором

$$e^{-l^2 q_{\perp}^2 / 2},$$

поэтому можно считать, что $q_{\perp} \simeq 1/l$ и перпендикулярная составляющая волнового вектора фононов, участвующих в рассеянии, по порядку величины совпадает с обратной магнитной длиной. Поскольку в квантующем поле магнитная длина l меньше длины волны электрона λ , будем считать, что выполняется условие $\lambda \gg l$. В силу сделанных выше оценок, следует, что $q_{\perp} \gg q_z$ и $q \simeq q_{\perp}$. Таким образом, интегралы, входящие в выражение I (5.155), могут быть достаточно просто вычислены:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_z q^t \delta\left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_0}{2} - E\right) \times \\ \delta\left(\frac{p_z \hbar q_z}{m} + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2m}\right) = q_{\perp}^t \frac{2m}{\hbar} \frac{1}{E - \hbar\omega_0}. \quad (5.156)$$

При выполнении интегрирования дельта-функций полезно использовать известную формулу

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_i \delta(x - x_i) \left\{ \left| \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=x_i} \right\}^{-1}, \quad (5.157)$$

где x_i — это корни уравнения $\varphi(x) = 0$.

Подставляя результат (5.156) в формулу (5.154), получаем следующее выражение для диагональной статической электропроводности

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 l^2 k_B T m C'}{4\pi^3 \hbar^4 s} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \frac{1}{E - \hbar\omega_0/2} \int_0^{\infty} dq_{\perp}^2 q_{\perp}^{t+1} e^{-l^2 q_{\perp}^2 / 2}. \quad (5.158)$$

При получении этого результата мы использовали обозначение

$$|C_{\vec{q}}|^2 = C' q^t, \quad C' = \frac{E_0^2 \hbar}{2\rho s}.$$

Для упрощения дальнейших вычислений рассмотрим только случай сильновырожденного электронного газа. Тогда интеграл по энергии вычисляется элементарно, если воспользоваться аппроксимацией

$$\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \simeq \delta(E - \zeta).$$

Интеграл по q_{\perp} , очевидно, сводится к гамма-функции. Поэтому дальнейшее интегрирование не представляет проблем, и мы сразу получаем

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 l^2 k_B T m C'}{4\pi^3 \hbar^4 s} \frac{1}{\zeta - \hbar\omega_0/2} \left(\frac{2}{l^2}\right)^{\frac{t+3}{2}} \Gamma\left(\frac{t+3}{2}\right). \quad (5.159)$$

Характерной особенностью полученного результата является наличие расходимости в том случае, когда уровень Ферми пересекает подуровень Ландау. Эта особенность возникает из-за того, что в квантующем магнитном поле плотность состояний электронов в пространстве энергий имеет корневую особенность на дне каждой подзоны Ландау. Особенно интересные эффекты в квантующем магнитном поле возникают в двумерном металле, который легко реализуется в полевом транзисторе. Нобелевская премия по физике дважды присуждалась за исследование квантового эффекта Холла: в 1985 г. за открытие этого явления и в 1998 г. за открытие и интерпретацию дробного квантового эффекта Холла. Не имея возможности подробнее остановиться на этой интересной теме, отсылаем читателя к специальной литературе [41].

Задача 5.1

Получить выражение для плотности состояний в пространстве энергий для электронов проводимости в квантующем магнитном поле.

Решение

Ввести понятие плотности состояний в пространстве энергий проще всего, используя соотношение

$$\sum_{n, p_x, p_z, \sigma} \rightarrow \int_0^{\infty} g(E) dE, \quad (5.160)$$

смысл которого состоит в том, что полное число состояний электронов, которое определяется суммой в выражении (5.160), может быть записано также в виде интеграла от плотности состояний $g(E)$ по всем возможным значениям энергии. При таком определении плотность состояний – это число состояний электронов, попадающих в интервал энергий от E до $E + dE$ в кристалле, объем которого равен единице. Чтобы определить число состояний, воспользуемся полученным ранее результатом (5.151), добавив к нему суммирование по квантовому числу n

$$\sum_{n p_x p_z \sigma} \rightarrow \frac{2}{(2\pi l)^2 \hbar} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d p_z. \quad (5.161)$$

Для нахождения плотности состояний в формуле (5.161) следует перейти от интегрирования по p_z к интегрированию по энергии, воспользовавшись определением спектра энергии электронов в квантовом магнитном поле (5.120):

$$E_{n p_z} = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_0(n + 1/2).$$

Производя такую замену переменных интегрирования и сравнивая затем выражения (5.160) и (5.161), получаем

$$g(E) = \frac{2\sqrt{2m}}{(2\pi l)^2 \hbar} \sum_n \frac{1}{\sqrt{E - \hbar\omega_0(n + 1/2)}}. \quad (5.162)$$

В этой формуле, как и везде ранее, полагается единичный объем образца. Суммирование по n производится по всем подзонам Ландау, лежащим ниже уровня Ферми. Формула (5.162) справедлива, если $E > \hbar\omega_0/2$, а в интервале энергий $0 < E < \hbar\omega_0/2$ плотность состояний равна нулю.

На рис. 31 приведен график плотности состояний электронов в магнитном поле (кривая b). По оси абсцисс отложена энергия E в единицах $\hbar\omega_0/2$, а по оси ординат – величина

$$g(E) \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{2}} \left\{ \frac{2\sqrt{2m}}{(2\pi l)^2 \hbar} \right\}^{-1}.$$

На кривой a для сравнения приведен график плотности состояний электронов в отсутствие магнитного поля.

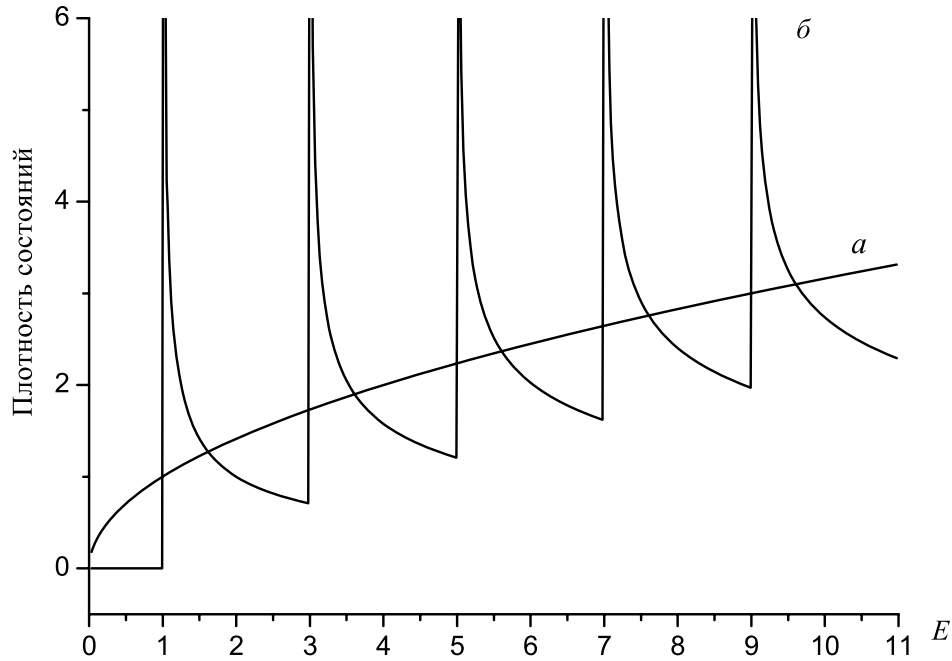


Рис. 31. Плотность состояний электронов проводимости в квантующем магнитном поле

Полученный результат указывает на наличие особенности в плотности состояний на дне каждой подзоны Ландау. В действительности из-за столкновительного уширения уровней Ландау плотность состояний на дне подзон не растет до бесконечности, оставаясь конечной величиной.

§ 9. Свойства симметрии корреляционных функций

Аддитивные законы сохранения и правила отбора для средних

Наличие аддитивных законов сохранения приводит к дополнительным правилам отбора для средних.

Пусть состояние системы определяется двумя квантовыми числами \vec{k} и σ и в этой системе сохраняется полное число частиц

$$N = \sum_{\vec{k}, \sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma}; \quad [N, H] = 0,$$

где H – полный гамильтониан системы. Тогда гамильтониан H и статистический оператор ρ_0 инвариантны относительно преобразования

$$U = e^{i\varphi N}; \quad H = U^+ H U, \quad \rho_0 = U^+ \rho_0 U, \quad (5.163)$$

где φ – произвольное вещественное число. Применяя это преобразование к операторам рождения (уничтожения) частиц, получаем

$$U^+ a_{\vec{k}\sigma} U = e^{i\varphi} a_{\vec{k}\sigma}, \quad U^+ a_{\vec{k}\sigma}^+ U = e^{-i\varphi} a_{\vec{k}\sigma}^+. \quad (5.164)$$

Рассмотрим квантово-статистическое среднее произвольно-го числа операторов рождения (уничтожения) частиц

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{a_{\vec{k}\sigma}^+ \dots a_{\vec{k}'\sigma'} \dots \rho_0\} &= \text{Sp}\{a_{\vec{k}\sigma}^+ \dots a_{\vec{k}'\sigma'} \dots U^+ \rho_0 U\} = \\ &= \text{Sp}\{U(a_{\vec{k}\sigma}^+ \dots a_{\vec{k}'\sigma'} \dots) U^+ \rho_0\} = e^{i\varphi n} \text{Sp}\{a_{\vec{k}\sigma}^+ \dots a_{\vec{k}'\sigma'} \dots \rho_0\}, \end{aligned} \quad (5.165)$$

где n – разность между числом операторов рождения и уничтожения частиц. Сравнивая первое и последнее выражения в формуле (5.165), замечаем, что поскольку преобразования являются тождественными, то должно выполняться условие $n = 0$, т. е. число операторов рождения должно совпадать с числом операторов уничтожения под знаком шпура. В противном случае это квантово-статистическое среднее равно нулю, если выполняется закон сохранения частиц.

Рассмотренный подход можно применить и при наличии других законов сохранения. В частности, рассмотрим правила отбора, которые накладывает однородность пространства на свойства квантово-статистических средних.

Если пространство однородно, то при отсутствии внешних сил сохраняется импульс системы

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k}\sigma} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma}$$

и, следовательно, гамильтониан системы и статистический оператор коммутируют с оператором полного импульса. Поэтому

можно определить оператор канонического преобразования U , оставляющий инвариантными гамильтониан и статистический оператор ρ_0 ,

$$U = e^{i\vec{\varphi}\vec{P}}; \quad H = U^+ H U, \quad \rho_0 = U^+ \rho_0 U, \quad (5.166)$$

где $\vec{\varphi}$ – произвольный вектор.

Рассмотрим снова квантово-статистическое среднее от произвольного набора операторов рождения (уничтожения) частиц. Повторяя проведенные выше выкладки (5.165) с оператором канонического преобразования, определенным формулой (5.166), получаем условие

$$e^{i\vec{\varphi}\hbar(\vec{k}+\dots-\vec{k}'+\dots)} = 1. \quad (5.167)$$

Если это условие не выполняется, то

$$\text{Sp}\{a_{\vec{k}\sigma}^+ \dots a_{\vec{k}'\sigma'} \dots \rho_0\} = 0.$$

Это условие имеет простой физический смысл: если в системе сохраняется полный импульс частиц, то суммарный квазиимпульс рожденных частиц должен быть равен суммарному квазиимпульсу частиц уничтоженных. Аналогичные правила отбора можно получить и при наличии других законов сохранения (например момента количества движения, спина и т. д.).

Роль вырождения энергетических уровней в статистической физике

Из квантовой механики хорошо известно, что при наличии вырождения энергетических уровней приемы вычисления средних для операторов динамических величин существенно усложняются. Казалось бы, в статистической механике вырожденные и невырожденные состояния рассматриваются совершенно одинаково. Однако в действительности это совсем не так. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим проблему вычисления продольной компоненты тензора статической магнитной восприимчивости χ_{zz} . Используя результаты теории линейного отклика

(5.80), выражение для продольной статической восприимчивости электронного газа запишем следующим образом:

$$\chi_{zz} = \frac{(g\mu_B)^2}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{S^z e^{iLt_1} [\rho_0, S^z]\}. \quad (5.168)$$

Если гамильтониан H_0 , который входит в определение равновесного статистического оператора ρ_0 , не зависит от поперечных компонент спина S^+ , S^- , то статистический оператор коммутирует с оператором S^z и мы получаем неразумный результат: $\chi_{zz} = 0$. Казалось бы, этот результат непосредственно следует из условия сохранения z -компоненты полного спина. В действительности мы имеем здесь дело со случаем вырождения энергетических уровней в квантовой статистической механике и средние от операторов динамических величин должны заменяться квазисредними. *К в а з и с р е д н и е* определяются следующим образом:

1) производится замена гамильтониана H_0 на гамильтониан $H_0 + uH'$, где добавка выбирается таким образом, чтобы снять вырождение;

2) вычисляются интересующие нас квантово-статистические средние;

3) после выполнения термодинамического предельного перехода выполняется предельный переход $u \rightarrow 0$.

Таким образом, правильно вычисленным значением среднего для произвольного динамического оператора A является предел

$$\langle A \rangle = \lim_{u \rightarrow 0} \text{Sp}\left\{A \frac{1}{Z} e^{-\beta(H_0 + uH')}\right\}. \quad (5.169)$$

Вернемся теперь к анализу проблемы вычисления продольной магнитной восприимчивости с позиций квазисредних. Будем полагать, что в гамильтониан введена бесконечно малая поправка, которая снимает вырождение относительно поворотов вокруг оси Z в пространстве спинов. В этом случае уже

нельзя считать априори, что $[\rho_0, S^z] = 0$. Поэтому для преобразования этого коммутатора воспользуемся формулой Кубо (5.81) и запишем его в следующем виде:

$$\frac{1}{i\hbar}[\rho_0, S^z] = \beta \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \dot{S}^z \rho_0^{1-\tau}. \quad (5.170)$$

Подставляя это выражение в формулу (5.168), получаем

$$\chi_{zz} = \beta(g\mu_B)^2 \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{S^z \dot{S}^z(t_1 + i\hbar\beta\tau)\rho_0\}. \quad (5.171)$$

Выполняя в этом выражении интегрирование по частям по переменной t_1 , получаем

$$\begin{aligned} \chi_{zz} = & \beta(g\mu_B)^2 \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{S^z S^z(i\hbar\beta\tau)\rho_0\} - \\ & - \beta(g\mu_B)^2 \int_0^1 d\tau \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{S^z S^z(t_1 + i\hbar\beta\tau)\rho_0\}. \end{aligned} \quad (5.172)$$

Используя теорему Абеля

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 dt e^{\epsilon t} f(t) = \lim_{t \rightarrow -\infty} f(t)$$

для преобразования второго слагаемого в последней формуле, окончательно получаем

$$\begin{aligned} \chi_{zz} = & \beta(g\mu_B)^2 \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{S^z S^z(i\hbar\beta\tau)\rho_0\} - \\ & - \beta(g\mu_B)^2 \text{Sp}\{S^z \rho_0\} \text{Sp}\{S^z \rho_0\}. \end{aligned} \quad (5.173)$$

Используя стандартное обозначение

$$\text{Sp}\{S^z \rho_0\} = \langle S^z \rangle,$$

полученный результат запишем более компактно:

$$\chi_{zz} = \beta(g\mu_B)^2 \int_0^1 d\tau \langle (S^z - \langle S^z \rangle)(S^z(i\hbar\beta\tau) - \langle S^z \rangle) \rangle. \quad (5.174)$$

Для газа невзаимодействующих электронов $H_0 = -g\mu_B S^z H$, поэтому $S^z(i\hbar\beta\tau) = S^z$. Тогда полученный результат допускает дальнейшее упрощение, и мы получаем формулу, совпадающую с классическим определением магнитной восприимчивости

$$\chi_{zz} = \beta(g\mu_B)^2 \langle \Delta S^z \Delta S^z \rangle, \quad (5.175)$$

где $\Delta S^z = S^z - \langle S^z \rangle$.

Свойства симметрии корреляционных функций при операциях пространственного вращения, комплексного сопряжения и обращения времени

Свойства симметрии корреляционных функций при операциях пространственного вращения, комплексного сопряжения и обращения времени рассмотрим на примере корреляционной функции, определяющей компоненты электропроводности в квантующем магнитном поле:

$$\sigma_{\mu\nu} = \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} I_{\mu\nu}(t),$$

$$I_{\mu\nu}(t) = \int_0^\beta d\lambda \langle J_\mu(t) J_\nu(i\hbar\lambda) \rangle. \quad (5.176)$$

Рассмотрим вначале свойства симметрии корреляционной функции $I_{\mu\nu}(t)$ при операциях пространственного вращения системы координат. Если гамильтониан системы инвариантен относительно вращения вокруг выделенной оси, то корреляционная функция $I_{\mu\nu}(t)$ при таких преобразованиях координат преобразуется как произведение компонент импульса $P_\mu P_\nu$.

В частности, если магнитное поле $H = 0$, для кристаллов кубической симметрии получаем

$$\begin{aligned} I_{xx}(t) &= I_{yy}(t) = I_{zz}(t), \\ I_{xy}(t) &= I_{yz}(t) = I_{xz}(t) = 0. \end{aligned} \quad (5.177)$$

Таким образом, в этом случае все диагональные компоненты равны между собой, а недиагональные обращаются в нуль.

Во внешнем магнитном поле применение этого же принципа приводит к такому результату:

$$I_{xx}(t) = I_{yy}(t); \quad I_{xy}(t) = -I_{yx}(t), \quad (5.178)$$

а все остальные недиагональные компоненты равны нулю. Несколько слов следует сказать относительно компоненты $I_{zz}(t)$ в квантующем магнитном поле. Поскольку в этом случае движение вдоль оси Z остается квазисвободным, для вычисления продольной составляющей тензора электропроводности следует использовать методику, развитую в § 3 настоящей главы.

Найдем соотношения, которым удовлетворяет корреляционная функция $I_{\mu\nu}(t)$ при операции комплексного сопряжения. Если корреляционная функция по своему смыслу является действительной величиной, то при операции комплексного сопряжения могут получиться дополнительные соотношения, которым должна удовлетворять корреляционная функция.

Рассмотрим вначале применение операции комплексного сопряжения к шпуру двух операторов

$$\begin{aligned} (\text{Sp}\{AB\})^* &= \left(\sum_{nm} \langle n|A|m \rangle \langle m|B|n \rangle \right)^* = \\ &= \sum_{nm} \int \psi_n A^* \psi_m^* d\tau_1 \int \psi_m B^* \psi_n^* d\tau_2 = \text{Sp}\{B^+ A^+\}. \end{aligned} \quad (5.179)$$

В формуле (5.179) B^+ означает эрмитово-сопряженный оператор.

Применяя найденное соотношение для корреляционной функции $I_{\mu\nu}(t)$, получаем

$$\begin{aligned} I_{\mu\nu}(t)^* &= \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Sp} \{ (J_\nu(i\hbar\lambda)\rho_0)^+ J_\mu(t)^+ \} = \\ &= \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Sp} \{ \rho_0 J_\nu(-i\hbar\lambda) J_\mu(t) \}. \end{aligned} \quad (5.180)$$

При выводе этого соотношения мы учли, что статистический оператор ρ_0 является самосопряженным оператором и $\rho_0^+ = \rho_0$. Оператор тока также является самосопряженным оператором и поэтому он удовлетворяет соотношению

$$J_\alpha(t + i\hbar\lambda)^+ = J_\alpha(t - i\hbar\lambda).$$

Выполняя в последнем интеграле формулы (5.180) замену переменных интегрирования $\lambda - \beta = \lambda'$, получаем

$$I_{\mu\nu}(t)^* = I_{\mu\nu}(t). \quad (5.181)$$

Таким образом, мы показали, что корреляционная функция $I_{\mu\nu}(t)$ является действительной величиной.

Рассмотрим свойства симметрии корреляционных функций относительно операции обращения времени.

Симметрия движения по отношению к изменению знака времени проявляется в квантовой механике в том, что если функция ψ есть волновая функция некоторого стационарного состояния, то обращенная во времени волновая функция, которую мы обозначим как ψ_- , описывает также некоторое возможное состояние с той же энергией.

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (5.182)$$

Если гамильтониан инвариантен относительно операции обращения времени, то, обращая время, получаем другое уравнение

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = H\psi_-, \quad (5.183)$$

которое очень походит на уравнение, комплексно сопряженное уравнению (5.182),

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H^* \psi^*. \quad (5.184)$$

Сравнивая уравнения (5.183) и (5.184), попробуем определить оператор, который бы играл роль оператора обращения времени. Пусть имеется некоторый унитарный оператор O , удовлетворяющий условиям

$$OH^* = HO, \quad O^{-1}O = 1, \quad O^{-1} = O^+.$$

Поддействуем этим оператором на уравнение (5.184)

$$-i\hbar \frac{\partial O\psi^*}{\partial t} = HO\psi^*. \quad (5.185)$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (5.183), находим, что

$$O\psi^* \equiv K\psi = \psi_-.$$

Величину $K = OK_0$, где K_0 – оператор комплексного сопряжения, можно назвать оператором обращения времени.

Явный вид оператора O зависит от конкретного выбора гамильтониана. Если оператор Гамильтона имеет вид

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - g\mu_B \vec{\sigma} \text{rot } \vec{A} + V(\vec{r}), \quad (5.186)$$

то оператор O можно выбрать в виде

$$O = i\sigma_y O_A,$$

где оператор O_A изменяет знак векторного потенциала и направление магнитного поля на противоположное.

Легко проверить, что для оператора $O = i\sigma_y O_A$ выполняется свойство $OH^* = HO$ для гамильтониана (5.186). Для первого и третьего слагаемого гамильтониана (5.186) выполнение свойства $OH^* = HO$ очевидно. Для того чтобы убедиться в

выполнении этого свойства для второго слагаемого гамильтониана (5.186), достаточно заметить, что

$$i\sigma_y \vec{\sigma} = -\vec{\sigma} i\sigma_y,$$

поскольку матрицы Паули

$$\sigma_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

антикоммутируют:

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0, \quad \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0,$$

и выполняется очевидное соотношение $i\sigma_y \sigma_y^* = -\sigma_y i\sigma_y$.

Таким образом, в интересующем нас случае оператор обращения времени K имеет вид

$$K = OK_0 = i\sigma_y O_A K_0; \quad K_0^{-1} = K_0, \quad O^{-1} = O^+, \quad (5.187)$$

причем оператор K_0 производит операцию комплексного сопряжения, а оператор O_A меняет знак $A \rightarrow -A$ или $H \rightarrow -H$.

Найдем свойства симметрии корреляционных функций, которые возникают благодаря инвариантности гамильтониана относительно операции обращения времени. Сначала рассмотрим матричный элемент оператора

$$\begin{aligned} & \langle \psi_n | K^{-1} A K | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | (O^+ A O)^* | \psi_m \rangle = \\ & = \langle \psi_n^* | O^+ A O | \psi_m^* \rangle^* = \langle O \psi_n^* | A | O \psi_m^* \rangle^* = \langle K \psi_n | A | K \psi_m \rangle^*. \end{aligned} \quad (5.188)$$

Таким образом, мы доказали, что

$$\langle \psi_n | K^{-1} A K | \psi_m \rangle = \langle K \psi_n | A | K \psi_m \rangle^*.$$

Обобщая этот результат, для шпура двух операторов запишем следующее соотношение:

$$(\text{Sp}\{AB\})_H^* = (\text{Sp}\{A^\times B^\times\})_{-H}. \quad (5.189)$$

При выводе формулы (5.189) мы учли, что численное значение шпура не зависит от того, по какой полной системе собственных функций он вычисляется: ψ или ψ_- и воспользовались

обозначением $K^{-1}AK = A^\times$. Нижний индекс H или $-H$ у корреляционных функций служит лишь для напоминания (операция смены знака направления магнитного поля включена в оператор обращения времени).

Используя последовательно соотношения (5.179) и (5.189), получим еще одно полезное соотношение

$$(\text{Sp}\{AB\})_H = (\text{Sp}\{B^{+\times} A^{+\times}\})_{-H}. \quad (5.190)$$

Применяя соотношение (5.190) к корреляционной функции $I_{\mu\nu}(t)$, получаем

$$I_{\mu\nu}(t)_H = \int_0^\beta d\lambda \text{Sp}\left\{(J_\nu(-t + i\hbar\lambda)\rho_0)^{+\times} J_\mu^{+\times}\right\}_{-H}, \quad \rho_0^{+\times} = \rho_0, \\ (J_\nu(-t + i\hbar\lambda))^{+\times} = -J_\nu(t - i\hbar\lambda), \quad J_\mu^{+\times} = -J_\mu. \quad (5.191)$$

Тогда

$$I_{\mu\nu}(t)_H = \int_0^\beta d\lambda (\text{Sp}\{\rho_0 J_\nu(t - i\hbar\lambda) J_\mu\})_{-H} = \\ = \int_0^\beta d\lambda (\text{Sp}\{J_\nu J_\mu(-t + i\hbar\lambda)\rho_0\})_{-H} = I_{\nu\mu}(t)_{-H} \quad (5.192)$$

Соотношение (5.192), если учесть определение (5.176), позволяет записать соотношение симметрии Онсагера для компонент тензора электропроводности в магнитном поле

$$\sigma_{\mu\nu}(H) = \sigma_{\nu\mu}(-H). \quad (5.193)$$

Обобщая этот результат, для компонент обобщенной восприимчивости χ_{AB} , получаем

$$\chi_{AB}(H) = \varepsilon_A \varepsilon_B \chi_{BA}(-H), \quad (5.194)$$

где величины ε_A и ε_B равны ± 1 в зависимости от четности операторов A и B при операции обращения времени.

Из соотношений (5.192), (5.193) следует, что диагональные компоненты тензора электропроводности могут содержать лишь четные степени магнитного поля.

Используя свойства симметрии операторов тока относительно операции обращения времени, запишем еще одно полезное соотношение

$$I_{\mu\nu}(t)_H = I_{\mu\nu}(-t)_{-H}. \quad (5.195)$$

Для доказательства этого соотношения рассмотрим корреляционную функцию $I_{\mu\nu}(t)_H$:

$$\begin{aligned} I_{\mu\nu}(t)_H &= \int_0^\beta d\lambda (\text{Sp}\{J_\mu J_\nu(-t + i\hbar\lambda)\rho_0\})_H = \\ &= \int_0^\beta d\lambda (\text{Sp}\{(J_\mu J_\nu(t + i\hbar\lambda)\rho_0)^\times\})_{-H} = \\ &= \int_0^\beta d\lambda \left(\sum_m \langle \psi_m^* | O^+ J_\mu J_\nu(t + i\hbar\lambda)\rho_0 O | \psi_m^* \rangle \right)_{-H}^* = \\ &= \int_0^\beta d\lambda \left(\sum_m \langle K\psi_m | J_\mu J_\nu(t + i\hbar\lambda)\rho_0 | K\psi_m \rangle \right)_{-H}^* = \\ &= \int_0^\beta d\lambda (\text{Sp}\{J_\mu J_\nu(t + i\hbar\lambda)\rho_0\})_{-H}^* = I_{\mu\nu}(-t)_{-H}^*. \end{aligned} \quad (5.196)$$

Учитывая равенство (5.181), легко получаем результат (5.195). Поскольку диагональные компоненты корреляционной функции $I_{\mu\nu}(t)$ четны по магнитному полю, то отсюда следует, что

$$I_{xx}(t) = I_{xx}(-t), \quad I_{yy}(t) = I_{yy}(-t), \quad I_{zz}(t) = I_{zz}(-t). \quad (5.197)$$

Глава 6

МЕТОД НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА

6.1. Неравновесный и квазиравновесный статистические операторы

§ 1. Квазиравновесное распределение

В этой главе будет рассмотрен метод неравновесного статистического оператора (НСО), который идейно связан с методом проекционных операторов Мори. Метод НСО активно развивался в работах Д. Н. Зубарева и В. П. Калашникова. Достаточно полный обзор ранних работ этих авторов по методу НСО содержится в книгах [36, 37]. Для знакомства с методом можно рекомендовать также монографию Г. Рёпке [42], в которой, к сожалению, приведено слишком мало примеров применения метода НСО для решения прикладных задач. Обзор более поздних работ, содержащих современное развитие этого достаточно перспективного метода, можно найти в книге [43].

Мы не претендуем на то, чтобы дать достаточно полный и современный обзор работ по использованию метода НСО для решения задач физической кинетики. Нашей целью является желание обратить внимание читателей, и в первую очередь студентов, на простой, современный, сравнимый по общности с кинетическим уравнением метод НСО, который, тем не менее, еще не нашел должного практического применения.

Эволюцию во времени неравновесного состояния макроскопической системы можно описать с помощью неравновесного статистического оператора $\rho(t, 0)$, удовлетворяющего уравнению Лиувилля (5.19):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\rho(t, 0) = 0, \quad iLA = \frac{1}{i\hbar}[A, H] \equiv \dot{A}. \quad (6.1)$$

В уравнении (6.1) величина $\rho(t, 0)$ имеет два временных аргумента. Первый временной аргумент описывает зависимость статистического оператора от времени t , связанную с явной зависимостью параметров от величины t . Например, это может быть зависимость температуры, дрейфовой скорости и т. д. от времени. Вторым временным аргументом t – это обычная гайзенберговская зависимость оператора от времени, при этом, поскольку $\rho(t)$ является интегралом движения,

$$\rho(t, t) = \exp\{iLt\}\rho(t, 0) = \rho(0, 0). \quad (6.2)$$

Уравнение Лиувилля в этих обозначениях можно записать также в виде

$$\frac{d\rho(t, t)}{dt} = 0. \quad (6.3)$$

Если в начальный момент времени t_0 статистический оператор известен и равен $\rho(t_0, 0)$, то решение задачи Коши для НСО определяется выражением

$$\rho(t, 0) = \exp\{-iL(t - t_0)\}\rho(t_0, 0), \quad (6.4)$$

а временная зависимость средних для оператора некоторой физической величины A имеет вид

$$\langle A \rangle^t = \text{Sp}\{A\rho(t, 0)\} = \text{Sp}\{\rho(t_0, 0) \exp\{iL(t - t_0)\}A\}. \quad (6.5)$$

При выводе последнего соотношения мы воспользовались циклической перестановочностью операторов под знаком шпура и выражением (5.20) для оператора гайзенберговской эволюции. Следует отметить, что приведенные выше соотношения относятся к частному случаю систем, гамильтониан которых не зависит от времени.

Формулы (6.2) – (6.5) соответствуют точному динамическому описанию системы, которое, как это следует из результатов предыдущих глав, является ненаблюдаемым для систем со слабой устойчивостью. Предположим, что начиная с некоторого момента времени τ , которое порядка времени размешивания в системе, измеримыми величинами для исследуемой системы

будут средние значения $\langle P_n \rangle^t$ некоторой совокупности операторов P_n . По этой причине можно предполагать, что по истечении времени τ в системе исчезнет память о начальном распределении $\rho(t_0, 0)$ и эволюция системы будет определяться только ее общими статистическими свойствами.

Тогда для рассмотрения достаточно далекой асимптотики $t \gg \tau$ можно вообще не рассматривать те корреляции, которые распадаются за время $t \simeq \tau$. Эта идея, высказанная Н. Н. Боголюбовым, лежит в основе метода НСО. Если мы её примем, то истинное начальное условие для уравнения Лиувилля

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \rho(t) = \rho(t_0)$$

(которое, кстати, мы все равно не знаем) можно без ущерба заменить идеализированным условием, состоящим в том, что и в начальный момент времени НСО считается функционалом только от тех же переменных $\langle P_n \rangle^t$, которые оказываются долгоживущими или измеримыми на временах $t \gg \tau$. Поэтому, как следует из решения уравнения Лиувилля (6.4), $\rho(t, 0)$ будет функционалом от $\langle P_n \rangle^t$ и во все последующие моменты времени.

Обсудим теперь другое важнейшее положение излагаемого метода. Пусть мы имеем систему, состояние которой на интересующем нас этапе эволюции описывается набором средних (измеримых) величин $\langle P_n \rangle^t$. Наряду с неравновесным статистическим оператором $\rho(t, 0)$ введем квазиравновесный статистический оператор $\bar{\rho}(t, 0)$, эквивалентный НСО в том смысле, что средние значения операторов P_n равны между собой во все моменты времени для равновесного и квазиравновесного распределений:

$$\langle P_n \rangle^t = \text{Sp}\{P_n \rho(t, 0)\} = \text{Sp}\{P_n \bar{\rho}(t, 0)\}. \quad (6.6)$$

Условие (6.6) является новым предположением и не следует из той программы построения теории необратимых явлений, которая обсуждалась в предыдущей главе. Мы отложим выяснение физического смысла этого условия и рассмотрим его несколько позже в этой главе после вывода явного выражения для квазиравновесного распределения. Сейчас лишь отметим, что

условие (6.6) позволяет построить термодинамику неравновесной системы.

Смысл квазиравновесного распределения будет выясняться по мере изложения. Исходя из того, что такое распределение ввести можно и что это распределение будет некоторым функционалом от средних значений наблюдаемых величин $\langle P_n \rangle^t$, будем считать, что распределение $\bar{\rho}(t, 0)$ является функционалом от наблюдаемых средних $\langle P_n \rangle^t$, взятых в один и тот же момент времени t . Тогда, считая, что $\bar{\rho}(t, 0)$ зависит от времени только через зависимость средних $\langle P_n \rangle^t$ от времени, получаем

$$\frac{\partial \bar{\rho}(t, 0)}{\partial t} = \sum_n \frac{\partial \bar{\rho}(t, 0)}{\partial \langle P_n \rangle^t} \frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t. \quad (6.7)$$

Уравнение (6.7) позволяет дать еще одну интерпретацию операторов P_n . Эти операторы являются базисными операторами в гильбертовом пространстве и эволюция во времени любого оператора может быть выражена через эволюцию совокупности базисных операторов. Из уравнения (6.7) следует, что квазиравновесное распределение не удовлетворяет уравнению Лиувилля. Выражение для производной по времени для величин $\langle P_n \rangle^t$ можно получить, если воспользоваться уравнением (6.6). Дифференцируя это уравнение по времени с учетом уравнения Лиувилля (5.19), получаем

$$\frac{\partial \langle P_n \rangle^t}{\partial t} = \langle \dot{P}_n \rangle^t. \quad (6.8)$$

При выводе последнего выражения мы воспользовались определением оператора Лиувилля (5.18) и учли, что

$$\langle \dot{P}_n \rangle^t = -\text{Sp}\{P_n iL\rho(t, 0)\} = \text{Sp}\{\dot{P}_n \rho(t, 0)\}. \quad (6.9)$$

Уравнение (6.8) можно рассматривать как обобщенное кинетическое уравнение. В частности, это уравнение может иметь смысл уравнения для одночастичной функции распределения, если величина $P_k = a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}$, где $a_{\vec{k}}^+$, $a_{\vec{k}}$ – операторы рождения и уничтожения частицы, например электрона, в некотором состоянии \vec{k} .

Для того чтобы сделать еще один шаг в понимании смысла введенного квазиравновесного распределения, вычислим энтропию системы, предполагая, что квазиравновесный ансамбль систем удалось приготовить. Определим энтропию квазиравновесной системы выражением

$$S(t) = -\text{Sp}\{\bar{\rho}(t, 0) \ln \bar{\rho}(t, 0)\}, \quad (6.10)$$

а величину

$$\hat{S}(t) = -\ln \bar{\rho}(t, 0) \quad (6.11)$$

будем называть оператором энтропии.

Найдем производство энтропии в системе. Термин «производство энтропии» заимствован из феноменологической термодинамики необратимых процессов [5] и означает производную по времени от среднего значения энтропии системы. Для равновесных систем производство энтропии равно нулю, а для неравновесной – положительно. Дифференцируя уравнение (6.10) по времени, получаем

$$\dot{S}(t) = -\frac{d}{dt}\text{Sp}\{\rho(t, 0) \ln \bar{\rho}(t, 0)\} = \text{Sp}\{\dot{\hat{S}}(t, 0)\rho(t, 0)\}, \quad (6.12)$$

$$\dot{\hat{S}}(t, 0) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\hat{S}(t, 0). \quad (6.13)$$

При выводе формулы (6.12) мы учли, что, как это будет показано в следующем параграфе, $\ln \bar{\rho}(t, 0)$ является линейным по операторам P_n , и поэтому

$$\text{Sp}\{\bar{\rho}(t, 0) \ln \bar{\rho}(t, 0)\} = \text{Sp}\{\rho(t, 0) \ln \bar{\rho}(t, 0)\}.$$

Величину $\dot{\hat{S}}(t, 0)$ будем называть оператором производства энтропии.

Поскольку $S(t)$ также является функционалом от $\langle P_n \rangle^t$, то, используя выражение (6.8), получаем

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} = \sum_n \frac{\delta S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t} \langle \dot{P}_n \rangle^t. \quad (6.14)$$

Вводя обозначение

$$\frac{\delta S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t} \equiv F_n(t), \quad (6.15)$$

для производства энтропии получаем простое уравнение

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} = \sum_n F_n(t) \langle \dot{P}_n \rangle^t, \quad (6.16)$$

которое совпадает по форме с производством энтропии в феноменологической неравновесной термодинамике Онсагера [5]. Знак δ в формуле (6.15) означает функциональную производную. Согласно Онсагеру, производство энтропии в системе равно сумме произведений обобщенной термодинамической силы на сопряженный термодинамический поток. Выражение (6.16) как раз имеет такую структуру и позволяет интерпретировать величину $F_n(t)$ как обобщенную термодинамическую силу, а $\langle \dot{P}_n \rangle^t$ – как обобщенный термодинамический поток.

§ 2. Экстремальные свойства квазиравновесного распределения и термодинамика квазиравновесного ансамбля

Интересно выяснить, каким должен быть явный вид квазиравновесного распределения. Ясно, что определение $\bar{\rho}(t)$ может быть неоднозначным, поскольку пока к этому распределению предъявляется одно требование, оно должно быть функционалом от $\langle P_n \rangle^t$. Выражение (6.10), задающее связь квазиравновесного распределения с энтропией, позволяет однозначным образом определить $\bar{\rho}(t)$. Именно потребуем, чтобы $\bar{\rho}(t)$ удовлетворял максимуму информационной энтропии

$$S(t) = -\text{Sp}\{\bar{\rho}(t, 0) \ln \bar{\rho}(t, 0)\}$$

при дополнительных условиях: а) как бы ни варьировалось распределение, наблюдаемые средние значения базисных операторов должны оставаться неизменными:

$$\text{Sp}\{P_n \bar{\rho}(t, 0)\} = \langle P_n \rangle^t; \quad (6.17)$$

б) при вариации распределения должно сохраняться условие нормировки

$$\text{Sp}\{\bar{\rho}(t, 0)\} = 1. \quad (6.18)$$

Условия экстремальности выражения (6.10) совместно с ограничениями (6.17), (6.18), накладываемыми на возможные вариации $\bar{\rho}(t, 0)$, ставят задачу на условный экстремум функционала $S(t)$.

Хорошо известно, что задача на условный экстремум функционала $S(t)$ с помощью введения лагранжевых множителей может быть сведена к задаче на безусловный экстремум некоторого другого функционала $\mathcal{L}(\bar{\rho}(t))$:

$$\mathcal{L} = -\text{Sp}\{\bar{\rho} \ln \bar{\rho}\} - \sum_n F_n(t) \text{Sp}\{\bar{\rho} P_n\} - [\phi(t) - 1] \text{Sp}\{\bar{\rho}\}. \quad (6.19)$$

В выражении (6.19) $F_n(t)$ и $[\phi(t) - 1]$ — лагранжевы множители. Вычисляя вариацию по $\bar{\rho}$ левой и правой частям выражения (6.19), получаем

$$\delta \mathcal{L} = -\text{Sp}\{[\ln \bar{\rho} + \sum_n F_n(t) P_n + \phi(t)] \delta \bar{\rho}\}. \quad (6.20)$$

Из условия экстремальности следует, что $\delta \mathcal{L} = 0$. Поэтому, учитывая, что величина $\delta \bar{\rho}$ является произвольной, а шпур в правой части формулы (6.20) все равно должен быть равен нулю, имеем

$$\ln \bar{\rho} + \sum_n F_n(t) P_n + \phi(t) = 0. \quad (6.21)$$

Из формулы (6.21) уже легко получить явный вид квазиравновесного статистического оператора:

$$\bar{\rho}(t) = \exp\{-[\phi(t) + \sum_n F_n(t) P_n]\}. \quad (6.22)$$

В выражении (6.22) лагранжевы множители еще не определены, и для их нахождения необходимо использовать уравнения

(6.17), (6.18). Чтобы лучше понять смысл параметров, входящих в определение (6.22), сравним его с каноническим распределением Гиббса

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta(H - \zeta N)\}. \quad (6.23)$$

В этом выражении Z — статистическая сумма, ζ — химический потенциал системы, H и N — операторы Гамильтона и числа частиц, β — обратная температура в энергетических единицах.

Из сравнений формул (6.22), (6.23) следует, что равновесное распределение — это распределение с заданным значением энергии и числа частиц, а квазиравновесное — это распределение с заданным значением средних $\langle P_n \rangle^t$. Величина $\phi(t)$ в выражении (6.22) носит название функционала Масье — Планка и, как и статистическая сумма Z , определяется условием нормировки

$$\phi(t) = \ln \text{Sp}\{\exp\{-\sum_n P_n F_n(t)\}\}. \quad (6.24)$$

Выбор параметров P_n и функций $F_n(t)$ зависит от конкретной задачи. В частном случае гидродинамического режима, когда измеримыми величинами являются энергия системы, дрейфовый импульс и число частиц, набор операторов P_n и сопряженных им термодинамических функций $F_n(t)$ может быть выбран следующим образом:

Операторы	H	\vec{P}	N
Термодинамические функции	$\beta(t)$	$\beta(t)m\vec{V}(t)$	$\beta(t)\zeta(t)$

Здесь \vec{P} — оператор суммарного импульса частиц системы, \vec{V} — их дрейфовая скорость, m — масса.

Перейдем теперь к построению термодинамики квазиравновесного распределения.

Используя определения (6.10) и (6.22), запишем выражение для энтропии системы

$$S(t) = \phi(t) + \sum_n \langle P_n \rangle^t F_n(t). \quad (6.25)$$

Это уравнение можно рассматривать как преобразование Лежандра – переход от одного термодинамического потенциала к другому (от $\phi(t)$ к $S(t)$) для неравновесной системы. Это становится совершенно очевидным, если произвести вариацию функционала Масье – Планка (6.24):

$$\begin{aligned}\delta\phi(t) &= \delta \ln \text{Sp}\{\exp\{-\sum_n P_n F_n(t)\}\} = \\ &= -[\text{Sp}\{\exp\{-\sum_n P_n F_n(t)\}\}]^{-1} \sum_m \text{Sp}\{P_m \delta F_m(t) \times \\ &\quad \times \exp\{-\sum_n P_n F_n(t)\}\} = -\sum_m \langle P_m \rangle^t \delta F_m(t).\end{aligned}\quad (6.26)$$

Последнее выражение в правой части формулы (6.26) записано с учетом соотношений (6.6), (6.22), (6.24).

С другой стороны, используя определение энтропии (6.25) и явный вид квазиравновесного распределения (6.22), получаем

$$\delta S(t) = \delta\phi(t) + \sum_n (\delta \langle P_n \rangle^t F_n(t) + \langle P_n \rangle^t \delta F_n(t)). \quad (6.27)$$

Подставляя в эту формулу значение $\delta\phi(t)$, определяемое выражением (6.26), получаем

$$\delta S(t) = \sum_n F_n(t) \delta \langle P_n \rangle^t. \quad (6.28)$$

Соотношения (6.26), (6.28) можно интерпретировать следующим образом: при записи энтропии роль независимых переменных играют величины $\langle P_n \rangle^t$, а при записи функционала Масье – Планка – величины $F_n(t)$.

Полученные результаты позволяют обобщить соотношения Гиббса – Гельмгольца на случай неравновесной термодинамики. Вычисляя функциональную производную от функционала Масье – Планка и используя уравнение (6.26), имеем

$$\langle P_m \rangle^t = -\frac{\delta\phi(t)}{\delta F_m(t)}. \quad (6.29)$$

Подставляя этот результат в выражение для энтропии, получаем обобщение соотношений Гиббса – Гельмгольца на случай неравновесной термодинамики:

$$S(t) = \phi(t) - \sum_m \frac{\delta \phi(t)}{\delta F_m(t)} F_m(t). \quad (6.30)$$

Эта формула выражает энтропию системы через функционал Масье – Планка. Легко можно получить и обратное соотношение. Действительно, из выражения для вариации энтропии получаем

$$F_n(t) = \frac{\delta S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t}. \quad (6.31)$$

Тогда формула для энтропии вновь дает

$$\phi(t) = S(t) - \sum_m \frac{\delta S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t} \langle P_n \rangle^t. \quad (6.32)$$

Отличие этих соотношений от их равновесных аналогов сводится только к замене частных производных на функциональные.

Для понимания смысла квазиравновесного распределения $\bar{\rho}(t)$ очень важно выяснить, можно ли использовать это распределение для описания неравновесных процессов?

Вычислим производство энтропии в квазиравновесном состоянии. Усредняя оператор производства энтропии (6.13) по квазиравновесному распределению, получаем

$$\langle \dot{S}(t) \rangle_q^t = \text{Sp} \{ \bar{\rho}(t) [\dot{\phi}(t) + \sum_n \dot{P}_n F_n(t) + \sum_n P_n \dot{F}_n(t)] \}. \quad (6.33)$$

Учитывая соотношение (6.26), получаем

$$\dot{\phi}(t) = - \sum_m \langle P_m \rangle^t \dot{F}_m(t).$$

Подставляя этот результат в выражение (6.33), находим

$$\begin{aligned} \langle \dot{S}(t) \rangle_q^t &= \text{Sp} \{ \bar{\rho}(t) \sum_n [(P_n - \langle P_n \rangle^t) \dot{F}_n(t) + \dot{P}_n F_n(t)] \} = \\ &= \sum_n (\text{Sp} \{ \bar{\rho}(t) P_n \} - \langle P_n \rangle^t) \dot{F}_n(t) + \text{Sp} \{ \bar{\rho}(t) i L \hat{S}(t) \} = 0. \end{aligned} \quad (6.34)$$

При выводе последнего соотношения мы учли, что $\bar{\rho}(t)$ и оператор энтропии $\hat{S}(t)$ коммутируют между собой, и поэтому

$$\text{Sp}\{\bar{\rho}(t)iL\hat{S}(t)\} = 0.$$

Таким образом, производство энтропии в квазиравновесном состоянии равно нулю. Это означает, что в квазиравновесном состоянии отсутствуют потоки и такое распределение не может описать неравновесное состояние системы. Суммируя все сказанное, можно заметить, что квазиравновесное распределение характеризует ансамбль, в котором имеющиеся термодинамические силы как бы скомпенсированы некими причинами и поэтому термодинамические потоки не развиваются.

Можно встать и на такую точку зрения. Квазиравновесное распределение описывает только что сформированный неравновесный ансамбль частиц, эволюция которого только начинается, поэтому термодинамические потоки еще не развились. Очевидно, что квазиравновесное распределение можно использовать в качестве начального условия для истинного неравновесного распределения, что мы и предполагаем сделать в дальнейшем.

В завершение параграфа найдем связь между вторыми функциональными производными от потенциалов $S(t)$ и $\phi(t)$ и корреляционными функциями по квазиравновесному состоянию:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\langle P_m \rangle^t}{\delta F_n(t)} &= -\frac{\delta^2\phi(t)}{\delta F_n(t)\delta F_m(t)} = \\ &= \frac{\delta}{\delta F_n(t)} \text{Sp}\{P_m \exp\{-[\phi(t) + \sum_k P_k F_k(t)]\}\}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Сделаем небольшое математическое отступление и вычислим производную по параметру от операторной экспоненты. Рассмотрим вначале более простой вопрос о разложении экспоненты

$$\exp\{(A+B)t\}$$

в степенной ряд. Здесь A и B – не коммутирующие между собой операторы, а t – некоторый параметр. Введем обозначения:

$$\exp\{(A+B)t\}, \equiv D(t) \equiv G(t) \exp(At).$$

Составим уравнение движения для функции $D(t)$:

$$\frac{dD(t)}{dt} = (A+B)D(t) = \frac{dG(t)}{dt} \exp(At) + G(t)A \exp(At). \quad (6.36)$$

Оператор A коммутирует с операторной экспонентой $\exp(At)$. Поэтому второе равенство в выражении (2.36) можно записать в виде

$$(A+B)D(t) = \frac{dG(t)}{dt} \exp(At) + D(t)A.$$

$A+B$ тоже коммутирует с $D(t)$ и поэтому

$$(A+B)D(t) = D(t)(A+B).$$

Подставляя этот результат в формулу (6.36) и сокращая одинаковые члены, получаем

$$\begin{aligned} D(t)B &= \frac{dG(t)}{dt} \exp(At), \\ \text{или} \quad \frac{dG(t)}{dt} &= \exp\{(A+B)t\} B \exp\{-At\}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Учитывая, что $\exp\{(A+B)t\} = G(t) \exp(At)$ и используя последнее уравнение, получаем

$$d \ln G(t_1) = \exp(At_1) B \exp(-At_1) dt_1.$$

Интегрируя это дифференциальное уравнение с учетом граничного условия $G(0) = 1$, $\ln G(0) = 0$, получаем

$$G(t) = \exp\left\{\int_0^t \exp(A\lambda) B \exp(-A\lambda) d\lambda\right\}, \quad (6.38)$$

$$\exp\{(A+B)t\} = \exp\left\{\int_0^t \exp(A\lambda) B \exp(-A\lambda) d\lambda\right\} \exp(At).$$

Если оператор B мал (малость оператора понимается как малость соответствующих матричных элементов) и можно обойтись первыми членами разложения, то вместо (6.38) получаем

$$\begin{aligned} G(t) &= 1 + \int_0^t \exp(A\lambda) B \exp(-A\lambda) d\lambda; \quad \exp\{(A+B)t\} = \\ &= \exp(At) + \int_0^t \exp(A\lambda) B \exp(-A\lambda) d\lambda \exp(At). \end{aligned} \quad (6.39)$$

На основании этой формулы выведем правило дифференцирования операторной экспоненты по параметру. Используя определение производной, имеем

$$\begin{aligned} &\frac{d}{d\lambda_2} \exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2) = \\ &= \lim_{\Delta\lambda_2 \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\lambda_2} [\exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2 + P_2\Delta\lambda_2) - \exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2)]. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Считая, что $P_2\Delta\lambda_2$ есть малый оператор, и полагая $t = 1$, на основании формулы (6.39) получаем

$$\begin{aligned} &\exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2 + P_2\Delta\lambda_2) = \exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2) + \\ &+ \int_0^1 \exp[(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2)\lambda] P_2\Delta\lambda_2 \exp[-(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2)\lambda] d\lambda. \end{aligned} \quad (6.41)$$

С учетом этого результата в итоге имеем

$$\begin{aligned} &\frac{d}{d\lambda_2} \exp(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2) = \\ &= \int_0^1 \exp[(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2)\lambda] P_2 \exp[-(P_1\lambda_1 + P_2\lambda_2)(\lambda - 1)] d\lambda. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Возвратимся снова к формуле (6.35). С помощью выражения (6.42), найдем функциональную производную:

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta F_n(t)} \exp\left\{-\sum_k P_k F_k(t)\right\} = \\ & = -\int_0^1 \exp\left[-\sum_k P_k F_k(t)\tau\right] P_n \exp\left[\sum_k P_k F_k(t)(\tau-1)\right] d\tau. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Далее, действуя аналогично с учетом того, что

$$\exp(-\phi(t)) = [\text{Sp}\{\exp(-\sum_k P_k F_k(t))\}]^{-1},$$

получаем

$$\frac{\delta}{\delta F_n(t)} \exp(-\phi(t)) = \frac{\text{Sp}\{P_n \exp(-\sum_k P_k F_k(t))\}}{[\text{Sp}\{\exp(-\sum_k P_k F_k(t))\}]^2}.$$

Суммируя последние результаты, получаем выражение для функциональной производной среднего значения базисного оператора

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta F_n(t)} \text{Sp}\{P_m \bar{\rho}(t)\} = \\ & = \langle P_n \rangle^t \langle P_m \rangle^t - \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{P_m \bar{\rho}(t)^\tau P_n \bar{\rho}(t)^{1-\tau}\}. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Наконец, определяя скалярное двух операторов соотношением

$$(P_n, P_m)_q^t = \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{(P_m - \langle P_m \rangle^t) \bar{\rho}(t)^\tau (P_n - \langle P_n \rangle^t) \bar{\rho}(t)^{1-\tau}\},$$

получаем

$$\frac{\delta \langle P_m \rangle_q^t}{\delta F_n(t)} = -(P_m, P_n)_q^t. \quad (6.45)$$

Подведем некоторые итоги. Исходя из принципа экстремальности информационной энтропии построено выражение

для квазиравновесного статистического оператора (6.22). Смысл этого распределения состоит в том, что оно описывает только что приготовленный ансамбль неравновесных систем, в котором еще не началась эволюция и не развились потоки.

Ключевым для понимания метода НСО является соотношение (6.6), устанавливающее равенство средних значений базисных операторов P_n , вычисленных с использованием неравновесного и квазиравновесного распределений. Истолковать это соотношение можно следующим образом. К моменту времени, когда сформировался квазиравновесный ансамбль, единственным набором величин, измеримых в неравновесной системе, был набор переменных P_n . В дальнейшем эволюция системы происходит так, что новых медленно меняющихся динамических переменных не появляется, и средние значения $\langle P_n \rangle^t$ операторов P_n медленно эволюционируют благодаря зависимости от времени сопряженных термодинамических сил $F_n(t)$.

Что касается термодинамических сил $F_n(t)$, то они формируются в ходе реальной эволюции системы и будут зависеть от неравновесных процессов, протекающих в системе. Нахождение термодинамических сил $F_n(t)$ будет темой подробного обсуждения в параграфе, посвященном линейным релаксационным уравнениям в методе НСО.

Полученные результаты позволяют построить также термодинамику неравновесной системы. Однако до сих пор нам неизвестен явный вид квазиравновесного распределения, поэтому в следующем параграфе мы сформулируем уравнение движения для НСО, что позволит восстановить явный вид квазиравновесного распределения и развить термодинамику неравновесной системы.

§ 3. Граничные условия и уравнение Лиувилля для НСО

Рассмотрим неравновесную систему, состояние которой на достаточно больших временах описывается набором макроскопических переменных $\langle P_n \rangle^t$. Как уже неоднократно отмечалось, это означает, что только эти величины являются измеримыми в данной системе и что сделанное предположение не нарушает общности рассмотрения. Чаще всего набор величин

P_n — это набор гидродинамических квазиинтегралов движения таких, как энергия, дрейфовый импульс, число частиц и т. д. Однако в качестве величин P_n могут выступать и более мелко-структурные переменные, например числа заполнения квантовых состояний.

Будем предполагать, что в момент времени t_0 , который для удобства будет отнесен на отрицательную бесконечность (конечно, имеется в виду «физическая бесконечность», т. е. времена, значительно большие, нежели некоторое характерное для данной системы время размешивания, за которое «вымирают» несущественные для дальнейшей эволюции корреляции), приготовлен квазиравновесный ансамбль систем, описываемый квазиравновесным распределением $\bar{\rho}(t)$.

Сформулируем начальное условие для неравновесного статистического оператора $\rho(t)$. Будем полагать, что в момент времени t_0 неравновесный и квазиравновесный статистические операторы совпадают.

Сформулируем теперь условие, позволяющее записать неравновесный статистический оператор в виде некоторого функционала от квазиравновесного распределения. Мы уже отмечали, что квазиравновесный статистический оператор $\bar{\rho}(t)$ не удовлетворяет уравнению Лиувилля и под действием оператора эволюции будет трансформироваться в отличие от неравновесного распределения $\rho(t)$, которое является интегралом движения.

Будем считать, что если приготовить квазиравновесное распределение, а затем предоставить системе возможность эволюционировать, то квазиравновесное распределение $\bar{\rho}(t)$ через некоторое время порядка времени размешивания трансформируется в неравновесное распределение $\rho(t)$.

На языке математики это последнее условие и сформулированное выше граничное условие для НСО с учетом введенных ранее определений (6.2) – (6.4) можно записать в виде

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp(it_1 L) \bar{\rho}(t + t_1, 0) = \lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp(it_1 L) \rho(t + t_1, 0). \quad (6.46)$$

Уравнение (6.46) не только позволяет выразить НСО $\rho(t)$ через квазиравновесное распределение $\bar{\rho}(t)$, но и вносит необратимость в поведение величины $\rho(t)$. Действительно, достаточно в этом уравнении устремить $t_1 \rightarrow +\infty$, чтобы теория описывала

не возрастание, а убывание энтропии в системе. Причина этого понятна. В уравнении (6.46) квазиравновесное распределение, сформированное в момент времени $t_0 = -\infty$, в ходе эволюции трансформируется в неравновесное распределение при $t > t_0$. Иначе говоря, направление спонтанно текущего процесса задано и меньшему значению времени соответствует более упорядоченное состояние. Если положить $t_0 = +\infty$, то система с течением времени будет переходить из менее упорядоченного в более упорядоченное состояние, что и соответствует уменьшению энтропии с течением времени. Применяя теорему Абеля, согласно которой

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} f(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t) f(t) dt, \quad (6.47)$$

если этот предел существует, перепишем уравнение (6.46) в следующем виде:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) \bar{\rho}(t + t_1, t_1) dt_1 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) \rho(t + t_1, t_1) dt_1. \quad (6.48)$$

Уравнение (6.48) допускает интересную интерпретацию. По существу, формула (6.48) утверждает, что сглаженные (усредненные) по достаточно большому промежутку времени статистические операторы $\rho(t + t_1, t_1)$ и $\bar{\rho}(t + t_1, t_1)$ равны между собой. Часто сглаживание, определяемое формулой (6.48), называют взятием инвариантной части. Очевидно, что $\rho(t + t_1, t_1) = \rho(t)$, поэтому

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) \bar{\rho}(t + t_1, t_1) dt_1 = \rho(t). \quad (6.49)$$

Из уравнений (6.48), (6.49) следует, что в ходе эволюции квазиравновесное распределение трансформируется в неравновесное распределение. В этом, собственно, и состоит физический смысл уравнения (6.48). Результат (6.49) можно получить

и другим путем. Интегрируя правую часть уравнения (6.48) по частям, получаем

$$\begin{aligned} & \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \bar{\rho}(t + t_1, 0) = \\ & = \rho(t, 0) - \lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp(\epsilon t_1) \rho(t + t_1, t_1) - \\ & - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + iL \right) \rho(t + t_1, 0). \end{aligned} \quad (6.50)$$

Потребуем, чтобы последний интеграл в формуле (6.50) обращался в нуль. Это требование выполняется автоматически, если $\rho(t, 0)$ является точным интегралом движения. В действительности, как мы выясним чуть позже, $\rho(t, 0)$ не является интегралом уравнения Лиувилля в строгом смысле этого слова, но то выражение для $\rho(t, 0)$, которое мы получим, также обеспечивает равенство нулю интеграла

$$\int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + iL \right) \rho(t + t_1, 0). \quad (6.51)$$

Далее,

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp(\epsilon t_1) \rho(t + t_1, t_1) = 0,$$

поскольку величина ϵ в этой формуле является конечной и должна стремиться к нулю после выполнения термодинамического предела и вычисления средних. Поэтому выражение (6.50) по существу является определением неравновесного статистического оператора:

$$\rho(t, 0) = \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \bar{\rho}(t + t_1, 0). \quad (6.52)$$

Найдем теперь уравнение движения, которому удовлетворяет НСО (6.52). Для этого продифференцируем уравнение (6.52)

по времени t :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iL t_1) \frac{d}{dt} \bar{\rho}(t + t_1, 0) = \\ &= \epsilon \exp(\epsilon t_1) \exp(iL t_1) \bar{\rho}(t + t_1, 0) \Big|_{-\infty}^0 - \epsilon \rho(t, 0) - iL \rho(t). \end{aligned} \quad (6.53)$$

Учитывая, что при $t_1 \rightarrow -\infty$, $\exp \epsilon t_1 \rightarrow 0$, получаем уравнение Лиувилля, содержащее бесконечно малый источник в правой части:

$$\frac{\partial \rho(t, 0)}{\partial t} + iL \rho(t, 0) = -\epsilon(\rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)). \quad (6.54)$$

Необходимо отметить, что равенство нулю выражения (6.51) выполняется, в чем легко убедиться, если вспомнить формулу (6.48).

Следует сказать несколько слов о смысле бесконечно малых источников в правой части уравнения движения НСО (6.54). Как известно, уравнение Лиувилля (5.19) является обратимым во времени. Вместе с тем мы хорошо знаем, что в реальных системах имеется спонтанное нарушение симметрии динамических уравнений относительно операции обращения времени. Таким образом, в исправленных с учетом второго закона термодинамики динамических уравнениях должно быть снято вырождение состояний, связанное с симметрией относительно операции обращения времени.

Более последовательно интерпретировать возникновение источников в правой части уравнения (6.54) в духе идеологии квазисредних Н. Н. Боголюбова (см. §8 главы 5). Очевидно, что с этих позиций все средние, которые вычисляются при использовании метода НСО, являются квазисредними, а член $-\epsilon(\rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0))$, снимающий вырождение уравнения Лиувилля относительно операции обращения времени, в некотором идеализированном виде учитывает контакт системы с термостатом, приводящий к релаксации неравновесного распределения, если систему предоставить самой себе. Тогда величина ϵ может быть интерпретирована как обратное время релаксации неравновесного распределения к квазиравновесному.

§ 4. Линейные релаксационные уравнения в методе НСО

Практическое решение задач с использованием метода НСО начнем с наиболее простого случая, когда слабонеравновесное состояние системы можно описать в рамках гидродинамического подхода набором средних значений термодинамических координат $\langle P_n \rangle^t$ или набором сопряженных им термодинамических сил $F_n(t)$ (6.31).

Рассмотрим для такой системы задачу определения спектра гидродинамических возбуждений. Иначе говоря, поставим задачу определения времен затухания связанных флуктуаций средних значений

$$\delta \langle P_n \rangle^t = \langle P_n \rangle^t - \langle P_n \rangle_0^t,$$

где

$$\langle P_n \rangle_0^t = \text{Sp}\{P_n \rho_0\},$$

ρ_0 – равновесное распределение Гиббса. Поскольку неравновесность является слабой, естественно предположить, что система уравнений, описывающая связанную релаксацию отклонений $\delta \langle P_n \rangle^t$, должна быть линейной.

Для построения линейных релаксационных уравнений относительно величин $\delta \langle P_n \rangle^t$ необходимо получить линейные разложения статистических операторов $\bar{\rho}(t, 0)$, $\rho(t, 0)$.

Произведем вначале разложение квазиравновесного статистического оператора $\bar{\rho}(t, 0)$. Для упрощения записи примем следующее соглашение: величины P , $\langle P \rangle^t$, $F(t)$ будем понимать как вектор-столбцы с компонентами P_n , $\langle P_n \rangle^t$, $F_n(t)$ соответственно. Тогда квазиравновесное распределение (6.22) можно записать в виде

$$\bar{\rho}(t) = \exp(-\hat{S}(t, 0)), \quad \hat{S}(t, 0) = \phi(t) + P^+ F(t). \quad (6.55)$$

Производя разложение $\hat{S}(t, 0)$, имеем

$$\begin{aligned} \hat{S}(t, 0) &= \hat{S}_0 + \delta \hat{S}(t, 0), \quad \delta \hat{S}(t, 0) = \delta \phi(t) + P^+ \delta F(t), \quad (6.56) \\ \delta \phi(t) &= \ln \text{Sp}\{\exp[-P^+(F_0 + \delta F(t))]\} - \ln \text{Sp}\{\exp[-P^+ F_0]\}. \end{aligned}$$

Величины, отмеченные нижним индексом 0, относятся к равновесной системе.

Для того чтобы найти приращение функционала $\delta\phi(t)$, необходимо произвести разложение операторной экспоненты в последнем из равенств выражения (6.56) по малому параметру $P^+\delta F(t)$.

Используя формулу (6.39) для разложения операторной экспоненты и учитывая, что под знаком шпура операторные экспоненты можно циклически переставить, получаем

$$\delta\phi(t) = -\text{Sp}\{P^+\rho_0\}\delta F(t), \quad \rho_0 = \exp(-S_0). \quad (6.57)$$

Подставляя результат (6.57) во второе равенство выражения (6.56), получаем

$$\delta\hat{S}(t) = -\Delta P^+\delta F(t), \quad \Delta P^+ = P^+ - \text{Sp}\{P^+\rho_0\}. \quad (6.58)$$

Пользуясь этим представлением, выражение (6.55) для квазиравновесного распределения запишем в виде

$$\bar{\rho}(t) = \exp[-\hat{S}_0 - \delta\hat{S}(t, 0)]. \quad (6.59)$$

Производя вновь разложение операторной экспоненты (6.59) с использованием формулы (6.39), получаем

$$\bar{\rho}(t) = \rho_0 - \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \Delta P^+ \rho_0^{1-\tau} \delta F(t). \quad (6.60)$$

Произведем аналогичное разложение неравновесного статистического оператора $\rho(t, 0)$. Интегрируя это уравнение по частям, получаем

$$\rho(t) = \bar{\rho}(t) - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iL t_1) \left(\frac{\partial}{\partial t} + iL \right) \bar{\rho}(t + t_1, 0). \quad (6.61)$$

Подставим в уравнение (6.61) полученный ранее результат для разложения квазиравновесного распределения (6.60).

В итоге, выполняя простые преобразования, получаем

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \rho_0 - \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \Delta P^+ \rho_0^{1-\tau} \delta F(t) + \\ & + \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(i L t_1) \times \\ & \times \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \{ \Delta \dot{P}^+ \delta F(t + t_1) + \Delta P^+ \delta \dot{F}(t + t_1) \} \rho_0^{1-\tau}. \end{aligned} \quad (6.62)$$

Выражение (6.62) позволяет решить поставленную задачу и получить систему линейных релаксационных уравнений для флуктуаций термодинамических параметров $\delta \langle P_n \rangle^t$. Для этого необходимо лишь воспользоваться условием (6.6):

$$\langle P_n \rangle^t = \text{Sp} \{ P_n \rho(t, 0) \} = \text{Sp} \{ P_n \bar{\rho}(t, 0) \}.$$

Однако более удобная и красивая запись этих уравнений получается, если перейти к фурье-представлению. Определим фурье-трансформы величин $\delta \langle P_n \rangle^t$, $\delta \rho(t) = \rho(t) - \rho_0$, $\delta \bar{\rho}(t) = \bar{\rho}(t) - \rho_0$, $\delta F(t)$ следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \delta \langle P \rangle^t &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \exp(-i\omega t) \delta \langle P \rangle^\omega, \\ \delta F(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \exp(-i\omega t) \delta \langle F(\omega) \rangle, \\ \delta \rho(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \exp(-i\omega t) \delta \rho(\omega), \\ \delta \bar{\rho}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \exp(-i\omega t) \delta \bar{\rho}(\omega). \end{aligned} \quad (6.63)$$

Тогда, используя очевидное соотношение

$$\delta \langle P \rangle^\omega = \text{Sp} \{ P \delta \bar{\rho}(\omega) \} = \text{Sp} \{ P \delta \rho(\omega) \}, \quad (6.64)$$

из первой части равенства сразу получаем важный результат

$$\delta\langle P \rangle^\omega = -(P, P^+) \delta F(\omega); \quad (P, P^+) = \int_0^1 d\tau \langle \Delta P \Delta P^+ (i\hbar\beta\tau) \rangle. \quad (6.65)$$

Далее, используя определения $\delta\rho(t)$ и $\delta\bar{\rho}(t)$, получаем

$$\begin{aligned} \delta\rho(\omega) = \delta\bar{\rho}(\omega) + \int_{-\infty}^0 \exp[(\epsilon - i\omega)t_1] \exp(iLt_1) dt_1 \times \\ \times \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \Delta(\dot{P}^+ - i\omega P^+) \rho^{1-\tau} \delta F(\omega). \end{aligned} \quad (6.66)$$

Если в этом выражении провести интегрирование по t_1 , то вместо (6.66) получается простое выражение для $\delta\rho(\omega)$, удобное для практических приложений:

$$\delta\rho(\omega) = \delta\bar{\rho}(\omega) + \int_0^1 d\tau \frac{1}{\epsilon - i\omega + iL} \rho_0^\tau \Delta(\dot{P}^+ - i\omega P^+) \rho^{1-\tau} \delta F(\omega). \quad (6.67)$$

В этом выражении операторная резольвента понимается как некоторый бесконечный ряд.

Теперь можно построить линейные релаксационные уравнения. Из общих соображений ясно, что во временном представлении такие уравнения при учете запаздывания должны иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\langle P \rangle^t = \int_{-\infty}^t T(t - t_1) \delta\langle P \rangle^{t_1} dt_1, \quad (6.68)$$

где $T(t - t_1)$ — некоторое ядро. Аналогичные уравнения можно записать и для отклонений $\delta F(t)$.

Уравнения типа (6.68) легко получить из условия

$$\text{SP}\{\text{P}\delta\bar{\rho}(\omega)\} - \text{SP}\{\text{P}\delta\rho(\omega)\} = 0.$$

Подставляя полученные ранее результаты для $\delta\rho(\omega)$ и $\delta\bar{\rho}(\omega)$, имеем

$$\int_0^1 d\tau \text{Sp}\{P \frac{1}{\epsilon - i\omega + iL} \rho_0^\tau (\Delta \dot{P}^+ - i\omega P^+) \rho_0^{1-\tau}\} F(\omega) = 0. \quad (6.69)$$

Вводя для сокращения записи корреляционные функции

$$\begin{aligned} (A, B)^\omega &= \int_0^1 \text{Sp}\{\Delta A \frac{1}{\epsilon - i\omega + iL} \rho_0^\tau \Delta B \rho_0^{1-\tau}\} d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp[(\epsilon - i\omega)t_1] (A, B(t_1)), \end{aligned} \quad (6.70)$$

получаем уравнение для отклонений термодинамических сил $\delta F(\omega)$

$$i\omega(P, P^+)^\omega \delta F(\omega) - (P, \dot{P}^+)^\omega \delta F(\omega) = 0. \quad (6.71)$$

Необходимо напомнить, что уравнение (6.71) матричное и величина $\delta F(\omega)$ является вектор-столбцом.

Для дальнейшего анализа удобно ввести так называемую транспортную матрицу

$$\bar{T}(\omega) = \frac{1}{(P, P^+)^\omega} (P, \dot{P}^+)^\omega. \quad (6.72)$$

Тогда система линейных релаксационных уравнений принимает простой вид

$$[i\omega - \bar{T}(\omega)] \delta F(\omega) = 0. \quad (6.73)$$

Совершенно аналогичное уравнение можно получить и для величин $\delta\langle P \rangle^\omega$. Для этого необходимо, пользуясь уравнением

$$\delta\langle P \rangle^\omega = -(P, P^+) \delta F(\omega)$$

(см. формулу (6.65)), выразить $\delta F(\omega)$ через $\delta\langle P \rangle^\omega$ и подставить этот результат в уравнение (6.72). Тогда дисперсионное уравнение для $\delta\langle P \rangle^\omega$ будет иметь вид

$$[i\omega - T(\omega)]\delta\langle P \rangle^\omega = 0,$$

$$\bar{T}(\omega) = \frac{1}{(P, P^+)} T(\omega)(P, P^+). \quad (6.74)$$

Уравнения (6.73) и (6.74) позволяют решить задачу о связанной релаксации гидродинамических возбуждений в слабонеравновесной системе. Поскольку системы уравнений (6.73) или (6.74) однородны, то спектр элементарных возбуждений ищется из условия равенства нулю детерминанта системы

$$\det|T(\omega) - i\omega| = 0. \quad (6.75)$$

Естественно, более правильным при решении такой задачи является переход к нормальным координатам. Нормальные координаты вводятся таким образом, чтобы в новых переменных транспортная матрица была диагональной.

Примеры рассмотрения коллективных гидродинамических возбуждений в многочастичных системах приведены в монографии Д. Форстера [44]. По этой причине не будем обсуждать модельные системы и ограничимся рассмотрением принципиальных вопросов, позволяющих развить методику вычисления компонент транспортной матрицы.

Определим матричную функцию Грина релаксационных уравнений (6.73), (6.74) соотношениями

$$\{T(\omega) - i\omega + \epsilon\}G(\omega) = 1,$$

$$\{\bar{T}(\omega) - i\omega + \epsilon\}\bar{G}(\omega) = 1. \quad (6.76)$$

Явное определение функций Грина $\bar{G}(\omega)$ через корреляционные функции $(P, P^+)^\omega$ и (P, P^+) может быть легко получено, если воспользоваться определением для $\bar{T}(\omega)$ (6.72). Выполняя интегрирование по частям в числителе формулы (6.72), получаем

$$\bar{T}(\omega) = \frac{1}{(P, P^+)^\omega} \{(P, P^+) + i(\omega + i\epsilon)(P, P^+)^\omega\}. \quad (6.77)$$

Подставляя этот результат в выражение (6.76), получаем

$$\overline{G}(\omega) = \frac{1}{(P, P^+)} (P, P^+)^\omega. \quad (6.78)$$

Аналогично определяется и функция

$$G(\omega) = (P, P^+)^\omega \frac{1}{(P, P^+)}. \quad (6.79)$$

Из определения (6.76) следует, что введенные функции Грина (6.78), (6.79) являются действительно функциями Грина релаксационных уравнений в строгом смысле этого слова, а их полюса совпадают со спектром нормальных мод системы.

Подведем некоторые итоги и наметим дальнейшие шаги решения поставленной задачи определения спектра гидродинамических возбуждений в системе, состояние которой определяется набором динамических параметров P_n .

Полученные выше результаты решают скорее формальную задачу, поскольку явное вычисление полюсов функций Грина (6.78), (6.79) представляет собой достаточно сложную самостоятельную проблему. Обычно для определения полюсов функции Грина используются либо метод массового оператора, либо методы, основанные на диаграммной технике. Следует отметить, что использование диаграммной техники для вычисления функций Грина, входящих в кинетические коэффициенты, приводит, на наш взгляд, к неоправданному усложнению теории. Кроме того, ясно, что все результаты, которые можно получить с помощью диаграммной техники, можно получить и с помощью метода массового оператора, тогда как обратное утверждение является неверным.

Здесь мы продемонстрируем другой метод анализа функций Грина, который известен как метод Мори [45].

Объединение метода НСО для построения статистического оператора и обобщенных релаксационных уравнений с методом проекционных операторов Мори для вывода уравнений движения корреляционных функций или уравнений движения операторов динамических величин позволяет говорить о создании нового метода решения задач физической кинетики, основанного

на последовательном использовании идеологии проекционных операторов.

§ 5. Почему приходится вводить операторы проектирования?

Начиная построение теории необратимых явлений, естественно взять за основу динамическое уравнение Лиувилля (5.19). Но в этом случае сразу встаёт вопрос: каким образом нужно развивать теорию, чтобы в результате получить необратимое поведение системы?

Еще со времен первой основополагающей работы Больцмана хорошо известно, что для неравновесной системы можно найти неубывающую функцию

$$H_B = - \int d\vec{p} f(\vec{p}, t) \ln(f(\vec{p}, t)), \quad (6.80)$$

которая с точностью до множителя, определяющего размерность, совпадает со статистической энтропией системы. В выражении (6.80) $f(\vec{p}, t)$ – одночастичная функция распределения, \vec{p} – импульс частицы. Величина $f(\vec{p}, t)$ удовлетворяет уравнению Больцмана. Это уравнение не является динамическим и больше похоже на феноменологическое уравнение диффузии в фазовом пространстве. Можно попробовать обобщить определение (6.80), используя функционал

$$S = - \int dp dq \rho(t) \ln(\rho(t)), \quad (6.81)$$

где ρ – статистический оператор, а интегрирование ведется по всей поверхности постоянной энергии (классический случай). Определим функционал еще более общего вида

$$S' = \int dp dq \rho(t) M(p, q), \quad (6.82)$$

где $M(p, q)$ – некоторая функция достаточно общего вида. Если величина S' является неубывающей функцией (функцией Ляпунова), то производная $dS'/dt \geq 0$. Для вычисления этой производной запишем формальное решение уравнения (5.19) в виде

$$\rho(t) = \exp(-iLt)\rho(0), \quad (6.83)$$

где $\rho(0)$ – статистический оператор в начальный момент времени (сразу после приготовления ансамбля). Из определений (5.19), (5.20) следует также, что $d\rho(t)/dt = 0$. По этой причине, дифференцируя (6.82) по времени, имеем

$$\frac{dS'}{dt} = \int dp dq \rho(t) iLM(p, q) \geq 0. \quad (6.84)$$

В этом уравнении мы воспользовались определением

$$d/dt M(p, q) = iLM(p, q) \equiv \{M(p, q), H(p, q)\},$$

справедливым для классической механики (роль оператора iL играет скобка Пуассона $\{A, B\}$). Введем обозначение

$$iLM(p, q) = D(p, q),$$

где величина $D(p, q)$ может быть просто функцией или оператором, действующим на переменные p, q . Можно показать, что если $D(p, q)$ является просто функцией переменных p, q , то функцию Ляпунова нельзя определить соотношением (6.82).

Действительно, рассмотрим частный случай равновесной системы. Тогда $\rho(0) = \text{const}$, поскольку мы предполагаем, что система эргодична. Если $D(p, q)$ есть функция переменных p, q , то для состояния термодинамического равновесия $dS'/dt = 0$, и из (6.82) следует

$$\frac{dS'}{dt} = \int dp dq D(p, q) = 0, \quad (6.85)$$

что, в силу произвольности системы, сразу приводит нас к заключению, что $D(p, q) = 0$ и, следовательно, функционал, определенный соотношением (6.82), не существует, если $D(p, q) = iLM(p, q)$ является обычной функцией переменных p, q .

Из результата (6.85), полученного Пригожиным [46], следует важный вывод. Если мы хотим построить функцию Ляпунова исходя из первых принципов в классической теории, мы вынуждены предположить, что величина $M(p, q)$, входящая в уравнение (6.82), должна быть оператором. Поскольку

$D(p, q) = iLM(p, q) \neq 0$, то, согласно идеологии, развитой в квантовой теории, следует, что энергия системы и величина $M(p, q)$ не могут быть измерены одновременно.

Интерпретировать этот факт можно следующим образом: оставаясь в рамках представлений о траекториях частицы, необратимого поведения системы получить нельзя и функцию Ляпунова построить не удастся. Отказ от понятия траекторий производится так же, как и в квантовой механике, — введением новой операторной величины (в квантовой механике это оператор импульса, в теории необратимых явлений — оператор $M(p, q)$, тесно связанный с оператором микроскопической энтропии).

В квантовом случае, когда величины H , $\rho(t)$ сами являются операторами, функцию Ляпунова можно попробовать ввести, обобщив соотношения (6.81), (6.82):

$$S' = -k \text{Sp}\{\rho(t) \ln \rho(t)\}, \quad (6.86)$$

или в более общем виде

$$S' = \text{Sp}\{\rho(t) M \rho(t)\}. \quad (6.87)$$

Совершенно ясно, однако, что первое из приведенных соотношений не может быть функцией Ляпунова в силу того, что $d\rho/dt = 0$, и поэтому $dS'/dt = 0$.

Выражение (6.87) может играть роль функции Ляпунова лишь в том случае, если величина M есть некоторый супероператор, т. е. оператор, действующий не на функции, а на операторы. Кроме того, оператор M не должен коммутировать с оператором Гамильтона и, пожалуй, самое главное, оператор M должен быть нефакторизуемым оператором, т. е. не должен сохранять различия между чистыми и смешанными состояниями в квантовой механике.

Напомним, что все другие квантово-механические операторы, действуя на волновую функцию системы в чистом состоянии, оставляют её в чистом состоянии.

Условие нефакторизуемости является менее очевидным и требует некоторых пояснений.

Ясно, что описание системы на языке волновых функций является наиболее полным в квантовой теории, и при таком описании необратимого поведения не возникает. В системах,

для которых характерно необратимое поведение, различие между чистыми и смешанными состояниями утрачивается. Это не означает, что уравнение Шредингера перестаёт быть справедливым. В этих системах различия между чистыми и смешанными состояниями перестают быть наблюдаемыми. Развиваемая точка зрения принадлежит И. Пригожину [46] и интенсивно развивалась им и его сотрудниками.

Проведенный выше анализ позволяет заключить, что ни в рамках классической, ни в рамках квантовой механики необратимое поведение ввести не удастся, если не сделать существенных дополнительных предположений, выходящих за рамки стандартной классической или квантовой теории. Отсюда, в частности, следует, что непосредственно из динамических уравнений, не внося новых физических идей, необратимое поведение системы получить не удастся. Причина этого состоит не в том, что необратимое поведение систем противоречит динамике, а в том, что динамическое описание является недостаточно развитым и на существующем этапе приспособлено лишь для описания интегрируемых систем в классической механике и систем, находящихся в чистом состоянии, в квантовой механике.

Отмеченный результат не является новым. Так или иначе это осознавали все создатели теории явлений переноса начиная с Л. Больцмана, вводя свои способы обобщения динамики на случай неинтегрируемых систем. Так, Больцман использовал гипотезу о столкновениях (Stosszahlansatz), согласно которой предполагается, что перед каждым столкновением состояния пары сталкивающихся частиц не являются коррелированными и описываются одночастичными функциями распределения.

Несколько иные аргументы использовал Н. Н. Боголюбов при выводе кинетического уравнения Больцмана из системы для s -частичных функций распределения (см. [17, 20]). Основная идея Боголюбова состоит в том, что можно выделить несколько характерных масштабов времени, на которых систему следует описывать с помощью принципиально различных подходов.

Если принять, что частица имеет характерный размер R_0 и характерную скорость v , то на временах $t \approx \tau_{st} = R_0/v$ система может быть описана только динамическим образом.

Следующий временной масштаб связан с временем свободного пробега частицы. Если обозначить среднее расстояние между частицами буквой $l \gg R_0$, то время свободного пробега $\tau = l/v \gg \tau_{st}$. Кинетическая стадия эволюции наступает тогда, когда $\tau \leq t \gg \tau_{st}$. На этих временах, согласно Боголюбову, двухчастичная и все следующие функции распределения являются некоторыми функционалами одночастичной функции распределения. Именно эта идея позволяет замкнуть цепочку уравнений Боголюбова и получить уравнение для одночастичной функции распределения. Ясно, что подход Боголюбова основан на предположении, что начиная с некоторого момента времени точная динамика системы, учитывающая все корреляции, становится несущественной. Эта же идея лежит и в основе гипотезы Больцмана о столкновениях; по существу, это просто попытки учесть специфику динамики неинтегрируемых систем, демонстрирующих неустойчивость.

Начиная с работы Р. Цванцига [47] для получения необратимой динамики широко используется метод операторов проектирования, который позволяет разделить статистический оператор на две ортогональные в некотором смысле части (обсуждение свойств операторов проектирования отложим до следующего параграфа, ограничиваясь качественными замечаниями). Для проекции статистического оператора $\mathcal{P}\rho(t)$, которую Цванциг назвал «*р е л е в а н т н о й*», т. е. актуальной, имеющей отношение к делу частью, удается получить обратимое во времени уравнение движения, которое обычно называют *master equation*, или, как принято в нашей литературе, *основным кинетическим уравнением*. Величина $(1 - \mathcal{P})\rho(t)$ достаточно быстро осциллирует и её обычно не учитывают при вычислении средних. Этот метод построения описания неравновесных систем изложен в главе 8.

Другой подход, основанный на применении операторов проектирования, использовал Мори [45]. Он разработал метод построения уравнений движения для операторов физических величин, в котором предполагается, что динамика произвольного оператора должна определяться динамикой некоторого набора базисных операторов. В этом случае для проекции оператора $\mathcal{P}A(t)$ удается получить обратимое во времени уравнение движения, которое напоминает уравнение Ланжевена для броуновской частицы.

Не вдаваясь в детали определения и практического использования проекционных операторов, которые будут подробно обсуждаться в следующих параграфах, отметим лишь явные преимущества построения теории необратимых явлений с использованием методики операторов проектирования. Во-первых, это простота и компактность вывода основных уравнений теории, которую отметил еще Цванциг. Во-вторых, и это главное, метод операторов проектирования позволяет построить новые динамические уравнения, которые описывают необратимую и негамильтонову эволюцию динамических величин.

Для возникновения необратимости необходимо найти подходящий механизм, который нарушал бы инвариантность обычного динамического описания относительно обращения времени. Интересующее нас нарушение симметрии должно быть внутренним, т. е. не связанным с существованием новых взаимодействий. В то же время этот механизм должен быть универсальным. Иначе говоря, он должен иметь место и в классических, и в квантовых системах.

Такая общая и внутренняя причина нарушения симметрии может иметь место, если в действительности реализуются не все возможные состояния или начальные условия, допустимые при динамическом описании, а лишь некоторый ограниченный набор, обладающий асимметрией требуемого типа. Эта идея, по существу, является новым постулатом теории, который эквивалентен включению второго начала термодинамики в число основных уравнений динамики (см. монографию [46]).

Интересно отметить, что такая формулировка второго начала термодинамики высказывалась еще в 1909 г. Ритцем, который считал, что второе начало термодинамики выражает некий принцип, позволяющий исключить некоторые решения динамических уравнений из числа реализуемых.

Последовательное выполнение программы построения теории необратимых процессов как динамической теории, пригодной для описания систем со слабой устойчивостью или «внутренне случайных систем», для которых реализуется состояние со спонтанно нарушенной симметрией, проще всего осуществляется именно с использованием методики проекционных операторов, развитой специально для отбора существенных для эволюции состояний.

Можно даже высказать более смелую мысль. Развивая метод операторов проектирования, мы делаем шаг в сторону создания новой динамики, в которой второе начало термодинамики возведено в ранг динамического принципа, отбирающего из всех возможных решений физически реализуемые.

§ 6. Метод проекционных операторов Мори

Как следует из приведенных выше результатов, исследование динамики гидродинамических флуктуаций приводит к проблеме вычисления корреляционных функций базисных операторов, т. е. динамических переменных, измеримых, с одной стороны, а с другой – достаточных для описания существа рассматриваемых физических явлений. Вычисление этих корреляционных функций является сложной самостоятельной проблемой. По существу, мы продвинулись вперед только в том смысле, что удалось свести задачу о релаксации в слабонеравновесной системе к исследованию корреляционных функций, определенных для равновесного состояния.

Принципиальная возможность такого сведения, или, иначе, возможность выразить кинетические коэффициенты слабонеравновесной системы через равновесные корреляционные функции, хорошо известна и является утверждением флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ).

Физическая причина справедливости ФДТ кроется в том, что микроскопические процессы, вызывающие релаксацию в неравновесной системе и рассасывание флуктуаций в равновесной системе, одни и те же.

Теперь нужно сделать следующий шаг и разработать процедуру вычисления равновесных корреляционных функций операторов, входящих в базисный набор. По существу, это несколько иная постановка той же задачи, что уже обсуждалась в § 5, где мы анализировали причины, по которым оказывается удобным введение операторов проектирования.

Существует много различных определений проекционных операторов, которые используются для построения уравнений движения динамических переменных. Начнем знакомство с техникой операторов проектирования с методики, предложенной Мори (см. работу [45]).

Метод операторов проектирования Мори исходит из простой идеи, что любой динамический оператор $A(t)$ можно разделить на две составляющие: одна из них будет выражаться через базисные операторы и s -числовые функции, а другая часть представляет собой остаток:

$$\begin{aligned} A(t) &= \mathcal{P}A(t) + QA(t), \quad Q = (1 - \mathcal{P}), \\ \mathcal{P}A(t) &= (A(t), P^+)(P, P^+)^{-1}P, \quad \mathcal{P}^2 = \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (6.88)$$

Скалярное произведение двух операторов определено так же, как и раньше (см. формулу (6.65)):

$$(A, B) = \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{\Delta A \rho_0^\tau \Delta B \rho_0^{1-\tau}\}. \quad (6.89)$$

Совершенно ясно, что такое разделение является точным и его можно произвести всегда. Весь смысл разделения состоит в том, что операторы $\mathcal{P}A(t)$ и $QA(t)$ имеют совершенно разный характер временной зависимости. Операторы P и P^+ являются квазиинтегралами движения, т. е. почти сохраняющимися величинами, и меняются во времени благодаря лишь относительно слабым возмущениям основного гамильтониана. Величина $QA(t)$, наоборот, быстро осциллирует с характерным для атомных масштабов периодом. Именно этот факт позволяет разделить медленную эволюцию оператора и быстрые осцилляции, которые могут определять лишь процессы с характерным атомным масштабом частоты.

Следует сказать несколько слов о том, какой смысл вкладывается в понятия «медленная эволюция» и «быстрая эволюция» операторов. Дело в том, что уравнение движения для корреляционной функции получается из операторного уравнения, если все его члены умножить справа на некоторый не зависящий от времени оператор и затем вычислить среднее по равновесному состоянию. Поэтому поведение оператора и поведение корреляционных функций оказываются сопоставимыми.

Смысл оператора проектирования очень легко понять, если воспользоваться геометрической аналогией, представленной на рис. 32 для случая, когда имеется лишь только один оператор в наборе P .

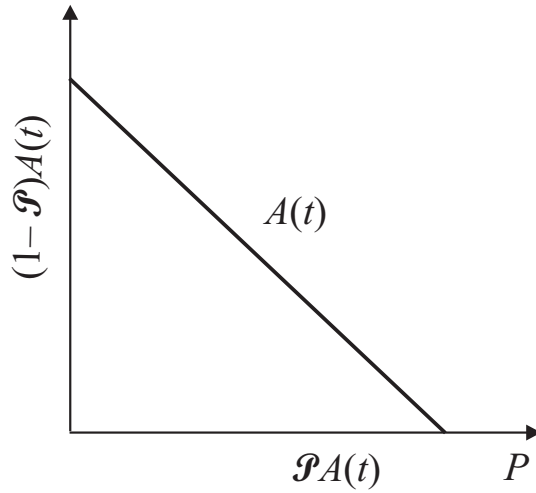


Рис. 32. Геометрический смысл оператора проектирования

Используя определение оператора проектирования (6.88), легко доказать, что выполняется важнейшее условие проектирования вектора на оси ортогонального базиса: операторы $PA(t)$ и $(1 - PA(t))$ ортогональны в смысле скалярного произведения (6.89):

$$(PA(t), (1 - P)A^+(t)) = 0. \quad (6.90)$$

Для доказательства соотношения (6.90) рассмотрим действие оператора проектирования на сопряженный оператор $A^+(t)$. Используя определение оператора проектирования Мори (6.88), получаем

$$\begin{aligned} PA^+(t) &= (PA(t))^+ = \left((A(t), P^+) \frac{1}{(P, P^+)} P \right)^+ = \\ &= P^+ \frac{1}{(P, P^+)} (A(t), P^+)^+ = P^+ \frac{1}{(P, P^+)} (P, A^+(t)). \end{aligned} \quad (6.91)$$

Последнее равенство в формуле (6.91) получается немедленно, если вспомнить, что $\text{Sp}\{AB\}^+ = \text{Sp}\{B^+A^+\}$. Теперь доказательство соотношения (6.90) сводится просто к учету формулы (6.91) и выполнению алгебраических преобразований в выражении (6.90).

Необходимо подчеркнуть, что оператор Q также является идемпотентным проекционным оператором и для него выполняется условие $Q^2 = Q$.

Рассмотрим уравнение движения для оператора P , принадлежащего набору базисных операторов:

$$\frac{d}{dt}P(t) = iLP(t). \quad (6.92)$$

Поддействуем на это уравнение оператором $Q = (1 - \mathcal{P})$. Поскольку оператор $(1 - \mathcal{P})$ не зависит от времени, его можно переставить с оператором дифференцирования по времени. Вводя обозначение $QP(t) = (1 - \mathcal{P})P(t) = P'(t)$, получаем

$$\frac{d}{dt}P'(t) = QiL(1 - \mathcal{P})P(t) + QiL\mathcal{P}P(t). \quad (6.93)$$

Для упрощения формул удобно ввести обозначение

$$\mathcal{P}P(t) = (P(t), P^+)(P, P^+)^{-1}P = \Theta(t)P,$$

$$\Theta(t) = (P(t), P^+)(P, P^+)^{-1}. \quad (6.94)$$

С учетом этих определений уравнение (6.93) перепишем в виде

$$\frac{d}{dt}P'(t) - (1 - \mathcal{P})iLP'(t) = \Theta(t)(1 - \mathcal{P})\dot{P}(t). \quad (6.95)$$

Уравнение (6.95) можно легко проинтегрировать. Для этого умножим его слева на операторную экспоненту

$$\exp\{-(1 - \mathcal{P})iLt\}.$$

Тогда первые два члена в уравнении (6.95) можно объединить в один, и интегрирование в пределах от 0 до t дает

$$P'(t) = \int_0^t dt_1 \Theta(t_1) \exp\{(1 - \mathcal{P})iL(t - t_1)\}(1 - \mathcal{P})\dot{P}(t_1). \quad (6.96)$$

Этот результат носит промежуточный характер и будет использован несколько позже.

Рассмотрим уравнение движения для корреляционной функции $\Theta(t)$ (6.94). Используя вновь соотношение

$$iLP(t_1) = iL\mathcal{P}P(t_1) + iL(1 - \mathcal{P})P(t_1), \quad (6.97)$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt_1}\Theta(t_1) &= \left(\frac{d}{dt_1}P(t_1), P^+\right)(P, P^+)^{-1} = \\ &= (\dot{P}, P^+(-t_1))(P, P^+)^{-1} = (\mathcal{P}\dot{P}, P^+(-t_1))(P, P^+)^{-1} + \\ &\quad + ((1 - \mathcal{P})\dot{P}, P^+(-t_1))(P, P^+)^{-1}, \end{aligned} \quad (6.98)$$

или

$$\frac{d}{dt_1}\Theta(t_1) = i\Omega\Theta(t_1) + ((1 - \mathcal{P})\dot{P}, P^+(-t_1))(P, P^+)^{-1}, \quad (6.99)$$

где $i\Omega$ — так называемая матрица частот, $i\Omega = (\dot{P}, P^+)(P, P^+)^{-1}$.

Рассмотрим скалярное произведение $((1 - \mathcal{P})\dot{P}, P^+(-t_1))$. Поскольку для произвольных операторов C и B выполняется равенство

$$((1 - \mathcal{P})C, \mathcal{P}B^+) = 0,$$

то скалярное произведение можно записать в виде

$$((1 - \mathcal{P})\dot{P}, (1 - \mathcal{P})P^+(-t_1)).$$

С учетом результата (6.96) уравнение движения для корреляционной функции запишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\Theta(t) &= i\Omega\Theta(t) + \\ &+ \int_0^{-t} dt_1 ((1 - \mathcal{P})\dot{P}, (\exp\{-i(1 - \mathcal{P})L(t + t_1)\}(1 - \mathcal{P})\dot{P})^+) \times \\ &\quad \times \Theta(t_1)^+(P, P^+)^{-1}. \end{aligned} \quad (6.100)$$

Рассмотрим корреляционную функцию

$$\Theta(t_1)^+ = \frac{1}{(P, P^+)^+} \int_0^1 \text{Sp}\{P(t_1)\rho_0^\tau P^+ \rho_0^{1-\tau}\}^+ d\tau.$$

Учитывая свойства симметрии корреляционных функций при операции эрмитова сопряжения и приведенное выше выражение, получаем

$$\Theta(t_1)^+ = \frac{1}{(P, P^+)}(P(-t_1), P^+).$$

Наконец, сделаем замену переменных в интеграле, вводя новую переменную $s = t_1 + t$, и определим величину случайной силы f соотношением $f = (1 - \mathcal{P})\dot{P}$. С учетом всех сделанных замечаний вместо уравнения (6.100) получаем

$$\frac{d}{dt}\Theta(t) = i\Omega\Theta(t) - \int_0^t ds(f, f^+(-s))\frac{1}{(P, P^+)}\Theta(t-s). \quad (6.101)$$

Если учесть, что $\Theta(t) = (P(t), P^+)(P, P^+)^{-1}$, то можно легко получить и уравнение движения динамической переменной $P(t)$:

$$\frac{d}{dt}P(t) = i\Omega P(t) - \int_0^t ds\Sigma(s)P(t-s), \quad (6.102)$$

где $\Sigma(s)$ — так называемая функция памяти, которая учитывает предысторию развития системы на времена $0 < s < t$:

$$\Sigma(s) = (f, f^+(-s))(P, P^+)^{-1}. \quad (6.103)$$

Подведем некоторые итоги и обсудим физический смысл полученных результатов. По своему виду уравнения (6.101), (6.102) напоминают уравнения Ланжевена для броуновской частицы и описывают немарковскую динамику исследуемых величин P_n . Важно подчеркнуть, что временная эволюция функции памяти

$$\begin{aligned} \Sigma(s) &\sim (f, f^+(-s)) = \\ &= \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{(1 - \mathcal{P})\dot{P}\rho_0^\tau[\exp\{-(1 - \mathcal{P})iLs\}(1 - \mathcal{P})\dot{P}]^+\rho_0^{1-\tau}\} \end{aligned}$$

является негамильтоновой и определяется лишь частью оператора Гамильтона, из которой исключены с помощью оператора проектирования Q члены, определяющие медленную эволюцию динамических переменных.

Отметим, что произведенное выделение быстро изменяющегося ядра интегральных уравнений (6.101), (6.102) произведено точно. До сих пор не делалось никаких предположений о слабости взаимодействия в системе.

Наконец, обсудим смысл использования «тождественных» преобразований, которые мы выполнили при получении уравнений (6.101), (6.102). Это представляется необходимым сделать уже сейчас, поскольку у читателей наверняка давно созрел простой вопрос: какой смысл заниматься тождественными преобразованиями динамических уравнений, вводя операторы проектирования, поскольку при этом ничего нового получиться не может?

На самом деле это достаточно сложный вопрос, и для ответа на него вновь придется обратиться к проблеме описания систем, демонстрирующих необратимое поведение, которая уже обсуждалась в главе 1 и в настоящей главе.

Представляется разумным несколько упростить задачу, рассмотрев ситуацию марковского предела, которая возникает, если считать, что коррелятор случайных сил (6.103) имеет δ -образную временную зависимость. В случае рассмотрения, например, электропроводности такая ситуация возникает, если характерное время взаимодействия частиц при столкновении много меньше времени между столкновениями (напомним читателю, что кинетическое уравнение Больцмана для случая газа малой плотности также является марковским уравнением).

Подставляя в выражение (6.102) значение $\Sigma(s) = \Gamma\delta(s)$, получаем уравнение движения оператора в марковском пределе

$$\frac{d}{dt}P(t) = i\omega P(t) - \gamma P(t). \quad (6.102a)$$

При записи этого выражения мы выделили действительную и мнимую части

$$\omega = \text{Re } \Omega + \text{Im } \Gamma; \quad \gamma = \text{Re } \Gamma + \text{Im } \Omega.$$

Смысл уравнения (6.102a) очевиден. Если $\Gamma = 0$, то динамическая величина $P(t)$ осциллирует с характерной частотой ω . Если величина $\Gamma \neq 0$, то на прецессию накладывается затухание и величина γ имеет смысл обратного времени затухания.

Именно в этом разделении динамического уравнения на слагаемое, описывающее прецессию, и слагаемое, описывающее затухание, и состоит основной смысл использования операторов проектирования. При этом следует заметить, что временная эволюция случайных сил, входящих в функцию памяти, не является гамильтоновой, поскольку она определяется только частью функции Гамильтона ортогональной в некотором смысле набору базисных операторов.

Поскольку в качестве базисных операторов выбираются, как правило, гидродинамические квазиинтегралы движения, то проводимое с помощью операторов проектирования разделение динамического уравнения движения для физической величины $P(t)$ на регулярную и диссипативную составляющие, по существу, реализует все ту же идею выделения двух разных временных масштабов эволюции, которая позволила Н. Н. Боголюбову вывести кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения.

Возникновение затухания в уравнении движения для динамической переменной на квантовом языке можно интерпретировать несколько иначе. Если спектр элементарных возбуждений характеризуется действительным значением энергии или частоты, то элементарное возбуждение хорошо определено и существует в неизменном виде сколь угодно долго. Такая система не является диссипативной. Если же элементарное возбуждение хорошо определить не удастся и в спектре элементарных возбуждений есть мнимая часть, то возникает некий аналог соотношения неопределенностей, только теперь это соотношение неопределенностей связано с тем, что выделить подсистему из окружения не удалось, система находится в смешанном состоянии и является частью некоторой другой системы. По этой причине фазовая поверхность постоянной энергии размывается в некий слой толщиной ΔE , и мы не можем точно указать значение энергии системы, а это означает, как указывалось ранее, потерю информации о системе, а следовательно, её необратимое поведение.

Вернемся вновь к дальнейшему анализу уравнений движения, полученных методом проекционных операторов Мори.

Наиболее просто уравнения (6.101), (6.102) выглядят, если, выполнив преобразования Лапласа, записать их для лапласовских образов функций $\Theta(t)$ и $P(t)$. Отсылая читателей за подробностями к специальной литературе (см. [48]), приведем лишь основные соотношения, которые необходимы для выполнения преобразований Лапласа уравнений (6.101), (6.102).

Прямое и обратное преобразования Лапласа функции $f(x)$ определяются выражениями

$$\begin{aligned} f(s) &= \int_0^{\infty} f(x)e^{-sx}dx, \\ f(x) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C-i\infty}^{C+i\infty} f(s)e^{sx}ds. \end{aligned} \quad (6.104)$$

Во второй формуле (6.104) интегрирование ведется вдоль линии на комплексной плоскости s , для которой $\operatorname{Re} s = C$.

Для преобразования уравнения (6.101), (6.102) нам потребуются еще формулы преобразований Лапласа для производной функции $f'(x)$ и для свертки двух функций:

$$g(x) = \int_0^x dt f_1(t)f_2(x-t).$$

Приведем эти формулы без доказательства [48]:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dx e^{-sx} f'(x) &= sf(s) - f(0), \\ g(s) &= f_1(s)f_2(s). \end{aligned} \quad (6.105)$$

Теперь можно записать и результат, который получается, если применить соотношения (6.104), (6.105) и произвести пре-

образование Лапласа уравнений (6.101), (6.102):

$$\Theta(z) = \frac{\Theta(0)}{z - i\Omega + \Sigma(z)}, \quad (6.106)$$

$$P(z) = \frac{P(0)}{z - i\Omega + \Sigma(z)}, \quad (6.107)$$

$$\Sigma(z) = \int_0^\infty dt e^{-zt} (f, [f(-t)]^+) (P, P^+)^{-1}. \quad (6.108)$$

Полученные выражения, по существу, не нуждаются в комментарии. Действительно, по структуре выражение (6.106) очень напоминает фурье-образ автокорреляционной функции, который получается в стандартной схеме записи уравнений движения для функций Грина с последующим использованием метода массового оператора, а величины Ω и Σ соответствуют действительной и мнимой частям массового оператора.

Точно так же, как и в случае метода массового оператора, можно произвести разложение корреляционной функции в цепную дробь. Для этого достаточно для функции $\Sigma(z)$ проделать преобразования, приведшие нас от формулы (6.94) к формуле (6.106). Таким образом, мы «спустимся на этаж ниже». Этот «спуск» на самом деле означает учёт более тонких корреляций в системе и, естественно, может быть продолжен дальше. Фактически получается, что при этом подходе бесконечная цепочка зацепляющихся уравнений записывается в виде разложения в цепную дробь.

Практическая польза подхода, основанного на применении проекционных операторов Мори для вычисления функций Грина, состоит в том, что для функции памяти $\Sigma(z)$ при правильном выборе динамических переменных сразу получается выражение, содержащее взаимодействие по крайней мере во второй степени. По этой причине при вычислении кинетических коэффициентов в борновском приближении теории рассеяния сразу можно опустить взаимодействие с рассеивателями (фононами, примесями и др.) в статистическом операторе и операторах эволюции, и тогда величина $\Sigma(z)$ сразу может быть вычислена.

В следующем параграфе мы продемонстрируем использование метода проекционных операторов Мори и метода НСО

в простейших случаях для вычисления электропроводности и магнитной восприимчивости системы свободных электронов в проводящих кристаллах.

Совершенно аналогично можно в принципе найти и полюса функций Грина (6.78) и (6.79), определяющие спектр гидродинамических возбуждений в системе, хотя здесь, как уже отмечалось, предварительно необходимо перейти к нормальным координатам, в которых матричная функция Грина становится диагональной.

§ 7. Использование проекционных операторов Мори для вычисления электропроводности

Формальное выражение для электропроводности, известное как формула Кубо [36], можно получить двумя способами. Во-первых, электропроводность может быть определена как отклик системы на внешнее высокочастотное электрическое поле. При другом способе определения электропроводность связывает между собой флуктуации дрейфового импульса электронной системы и флуктуации внутреннего электрического поля. В нашем случае оба этих подхода приводят к одинаковым результатам, и мы легко можем это продемонстрировать, используя результаты настоящей главы.

Получим вначале выражение для электропроводности в виде отклика системы на внешнее электрическое поле. Интересующую нас формулу можно было бы получить совсем просто, не привлекая метод НСО, а ограничиваясь теорией линейной реакции Кубо на внешнее механическое возмущение (см. § 3). Однако, имея в виду в дальнейшем рассмотрение более сложного случая – линейной реакции неравновесной системы на слабое измерительное поле, мы используем и для этой простой задачи метод НСО.

Рассмотрим неравновесную систему, описываемую гамильтонианом H , на которую действует возмущение, задаваемое гамильтонианом H_v . Явный вид этого гамильтониана будет определен позднее. В частности, нас будет интересовать случай, когда возмущение связано со взаимодействием с внешним электрическим или магнитным полем.

Уравнение Лиувилля (6.54) для НСО можно записать теперь в виде

$$\frac{\partial \rho(t, 0)}{\partial t} + (iL + iL_v)\rho(t, 0) = -\epsilon(\rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)), \quad (6.109)$$

где L_v — оператор Лиувилля, соответствующий части оператора Гамильтона H_v .

Преобразуем уравнение (6.109) в эквивалентное ему интегральное уравнение. Вычитая из левой и правой частей уравнения (6.109) выражение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\bar{\rho}(t, 0),$$

запишем его в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + iL + \epsilon\right)\delta\rho(t, 0) &= -\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\bar{\rho}(t, 0) - iL_v\rho(t, 0), \\ \delta\rho(t, 0) &= \rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0). \end{aligned} \quad (6.110)$$

Вводя оператор эволюции $\exp(iLt)$ с гамильтонианом H и умножая первое из уравнений (6.110) на множитель

$$\exp(\epsilon t) \exp(iLt),$$

запишем левую часть уравнения (6.110) в виде полной производной по времени

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \exp(\epsilon t) \exp(iLt) \delta\rho(t, 0) &= \\ &= -\exp(\epsilon t) \exp(iLt) \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\bar{\rho}(t, 0) + iL_v\rho(t, 0) \right]. \end{aligned} \quad (6.111)$$

Полагая, что

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \exp(\epsilon t) \exp(iLt) \delta\rho(t, 0) = 0,$$

проинтегрируем уравнение (6.111) по времени в пределах от $-\infty$ до t :

$$\begin{aligned} \rho(t, 0) = \bar{\rho}(t, 0) - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \times \\ \times \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} \bar{\rho}(t + t_1) + iL\bar{\rho}(t + t_1) + iL_v \rho(t + t_1) \right\}. \end{aligned} \quad (6.112)$$

Для вывода этой формулы результат интегрирования уравнения (6.111) необходимо умножить слева на $\exp(-\epsilon t) \exp(-iLt)$ и сделать замену переменных в интеграле, положив $t_1 - t \rightarrow t_1$.

По существу, это и есть искомое интегральное уравнение. Если оператор взаимодействия H_v не фигурирует явно в базисных операторах P_n , что предполагается в дальнейшем, то уравнение (6.112) допускает простую интерпретацию.

Поскольку первые два члена под интегралом в формуле (6.112) зависят от H_v лишь неявно через параметры $F_n(t)$, то они описывают так называемые термические возмущения, в то время как третий член, содержащий явно взаимодействие H_v , описывает механическое возмущение.

Последнее утверждение является очевидным, если рассмотреть случай, когда величины F_n равны своим равновесным значениям, а операторы P_n коммутируют с гамильтонианом. В этом случае выражение (6.112) совпадает с результатом, который дает теория линейной реакции Кубо.

Уравнение (6.112) можно записать в другой форме, которая и будет в дальнейшем использоваться. Для этого необходимо заметить, что

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(t, 0) - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \times \\ \times \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} \bar{\rho}(t + t_1) + iL\bar{\rho}(t + t_1) \right\} = \\ = \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \bar{\rho}(t + t_1). \end{aligned} \quad (6.113)$$

Этот результат получается простым интегрированием по частям интеграла в левой части (6.113), поскольку

$$\exp(iLt_1) \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} \bar{\rho}(t + t_1) + iL\bar{\rho}(t + t_1) \right\} = \frac{d}{dt_1} \exp(iLt_1) \bar{\rho}(t + t_1).$$

Вводя обозначение

$$\rho^0(t, 0) = \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) \bar{\rho}(t + t_1), \quad (6.114)$$

запишем интегральное уравнение для НСО в окончательном виде

$$\rho(t, 0) = \rho^0(t, 0) - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \exp(iLt_1) iL_v \bar{\rho}(t + t_1). \quad (6.115)$$

Распределение $\rho^0(t, 0)$ получается из квазиравновесного распределения $\bar{\rho}(t, 0)$ в результате эволюции с гамильтонианом H свободной от возмущения системы, в то время как распределение $\rho(t)$ – в результате эволюции с полным гамильтонианом $H + H_v$. Следует отметить, что распределения не являются на самом деле независимыми, поскольку $\rho^0(t, 0)$ зависит от точных значений функций $F_n(t)$, которые должны определяться из обобщенных кинетических уравнений (6.8).

Теперь можно вернуться к задаче вычисления электропроводности. Будем считать, что до включения электрического поля система находилась в равновесии и $\rho^0(t, 0)$ равно ρ_0 – равновесному распределению Гиббса. Кроме того, ограничимся линейным приближением по электрическому полю при вычислении отклика системы и заменим в интеграле (6.115) $\bar{\rho}(t, 0)$ на ρ_0 . Далее в качестве оператора H_v возьмем оператор взаимодействия электронов с однородным внешним электрическим полем $E(t)$:

$$H_F(t) = -e \sum_j X_j^\alpha E^\alpha(t). \quad (6.116)$$

Суммирование по j ведется по координатам X_j всех электронов, индекс α означает проекцию на оси декартовой системы

координат. Найдем среднее значение электрического тока $J^\alpha(t)$ в системе, вычислив среднее:

$$J^\alpha(t) = \text{Sp}\left\{e \frac{P^\alpha}{m} \rho(t, 0)\right\} = \frac{e^2}{m} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\epsilon t_1) \times \\ \times \text{Sp}\left\{P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, X^\beta(t_1)]\right\} E^\beta(t + t_1), \quad P^\alpha = \sum_j p_j^\alpha, \quad (6.117)$$

где p_j — импульс j -го электрона. Выполняя преобразование Фурье уравнения (6.117) и учитывая феноменологическое определение тензора электропроводности

$$J^\alpha(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega) E^\beta(\omega),$$

получаем хорошо известное выражение для электропроводности:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{m} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp[(\epsilon - i\omega)t_1] \text{Sp}\left\{P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, X^\beta(t_1)]\right\}. \quad (6.118)$$

Прямое вычисление электропроводности в конечном порядке теории возмущения не представляется возможным, поскольку в этом случае получается физически неразумный результат. Действительно, проводимость системы на нулевой частоте должна быть обратно пропорциональна эффективной константе взаимодействия электронов с рассеивателями, что получается только в том случае, если отсуммировать бесконечный ряд (например бесконечно убывающую геометрическую прогрессию). По этой причине для вычисления электропроводности по формуле (6.118) обычно используют метод массового оператора.

Покажем, что точно такой же результат получается и при использовании метода операторов проектирования Мори. Преобразуем вначале выражение (6.118), используя формулу Кубо (5.60):

$$\frac{1}{i\hbar} [\rho_0, X^\alpha] = \frac{\beta}{m} \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau P^\alpha \rho_0^{1-\tau}, \quad (6.119)$$

β – обратная температура в энергетических единицах. Подставляя результат (6.119) в выражение (6.118), получаем выражение для проводимости, записанное с использованием скалярного произведения Мори:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2\beta}{m^2} \int_{-\infty}^0 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} (P^\alpha, P^\beta(t_1)) dt_1. \quad (6.120)$$

Для того чтобы воспользоваться результатами (6.106), (6.107) при вычислении компонент тензора электропроводности, выберем в качестве базисных операторов P_n , фигурирующих в формуле (6.106), декартовы компоненты оператора суммарного импульса электронов P^α и введем вместо частоты комплексную переменную z соотношением $\epsilon - i\omega = z$. В результате вместо (6.120) получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(z) &= \frac{e^2\beta}{m^2} \int_{-\infty}^0 \exp\{(zt_1)\} (P^\alpha, P^\beta(t_1)) dt_1 = \\ &= \frac{e^2\beta}{m^2} \int_0^\infty \exp\{(-zt_1)\} (P^\alpha(t_1), P^\beta) dt_1 = \frac{e^2\beta}{m^2} \Theta(z) (P^\alpha, P^\beta). \end{aligned} \quad (6.121)$$

Для получения второго из равенств в формуле (6.121) в интеграле сделана замена переменных $t_1 \rightarrow -t_1$.

Теперь, используя выражение (6.106) для корреляционной функции $\Theta(z)$ и переходя обратно к переменной ω , можно записать выражение для электропроводности:

$$\sigma_{\alpha\beta}(z) = \frac{e^2\beta}{m^2} \frac{\Theta(0)(P^\alpha, P^\beta)}{z - i\Omega + \Sigma(z)}. \quad (6.122)$$

Для того чтобы сравнить результат (6.122) с выражением, которое получается при использовании метода массового оператора (5.51), необходимо заметить, что $\Theta(0) = 1$, $\Omega = 0$. Первое из этих равенств просто следует из определения корреляционной функции $\Theta(t)$ (6.94). Для доказательства второго рассмотрим

вначале корреляционную функцию (P^α, P^β) в числителе формулы (6.122)

$$\begin{aligned} (P^\alpha, P^\beta) &= \beta \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{P^\alpha \rho_0^\tau P^\beta \rho_0^{1-\tau}\} = \\ &= m \text{Sp}\{P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [\rho_0, X^\beta]\} = m \text{Sp}\{\frac{1}{i\hbar} [X^\beta, P^\alpha] \rho_0\} = mn\delta_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (6.123)$$

где n – концентрация электронов. Повторяя аналогичные выкладки для матрицы частот $i\Omega$ с учетом её определения (см. формулу (6.99)), получаем

$$i\Omega \sim \text{Sp}\{\frac{1}{i\hbar} [P^\beta, P^\alpha] \rho_0\} = 0.$$

Наконец, для функции памяти, которая в данном случае является ничем иным, как обратным временем релаксации полного импульса электронной системы, получаем

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) &= \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} \times \\ &\times ((1 - \mathcal{P})\dot{P}^\alpha, \exp\{(1 - \mathcal{P})iLt_1\}(1 - \mathcal{P})\dot{P}^\beta). \end{aligned} \quad (6.124)$$

Для сравнения приведем выражение для обратного времени релаксации, полученное с использованием метода функций Грина (см § 3 гл. 5):

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} (\dot{P}^\alpha, \exp\{iLt_1\} \dot{P}^\beta). \quad (6.125)$$

Из приведенных формул (6.124), (6.125) хорошо видно, что все их различие состоит в отсутствии операторов проектирования в последнем выражении. Естественно, встаёт вопрос: какое из приведенных выражений является правильным? Вопрос весьма актуален, поскольку формулы типа (6.125) для времен релаксации достаточно широко распространены в литературе.

Более того, хорошо известно, что эти формулы часто дают результаты, неплохо совпадающие с экспериментом.

Можно утверждать, что выражение (6.125) для времени релаксации полного импульса электронной системы является правильным лишь в борновском приближении. В этом легко можно убедиться. Во-первых, если оператор \dot{P}^α пропорционален взаимодействию, то в борновском приближении формулы (6.124) и (6.125) просто совпадают. Действительно, в этом случае операторы проектирования в формуле (6.124) могут быть опущены, так как их учет привел бы к удержанию членов четвертого порядка по взаимодействию и выше (доказать это мы предлагаем читателю самостоятельно).

Можно показать, что в постоянном электрическом поле при $\omega = 0$ точное значение обратного времени релаксации, определяемое выражением (6.125), точно равно нулю, поэтому эта формула является, строго говоря, неверной.

Действительно, рассмотрим диагональные компоненты тензора электропроводности на нулевой частоте:

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{e^2\beta}{m^2} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (P^\alpha, P^\alpha(t_1)). \quad (6.126)$$

С другой стороны,

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{e^2 n \tau}{m}; \quad \frac{1}{\tau} = \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (\dot{P}^\alpha, \dot{P}^\alpha(t_1)). \quad (6.127)$$

Произведем дважды интегрирование по частям в формуле (6.127) для $1/\tau$. Интегрируя первый раз, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} \frac{d}{dt_1} (\dot{P}^\alpha, P^\alpha(t_1)) = \\ & = \frac{1}{nm} (\dot{P}^\alpha, P^\alpha) - \frac{\epsilon}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (\dot{P}^\alpha, P^\alpha(t_1)). \end{aligned} \quad (6.128)$$

Поскольку корреляционная функция $(\dot{P}^\alpha, P^\alpha) = 0$, интегрируя второй раз по частям, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (\dot{P}^\alpha, \dot{P}^\alpha(t_1)) = \\ & = \frac{\epsilon}{nm} (P^\alpha, P^\alpha) - \frac{\epsilon^2}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (P^\alpha, P^\alpha(t_1)). \end{aligned} \quad (6.129)$$

Поскольку все корреляционные функции, стоящие в правой части равенства (6.129), конечны, а умножаются они на параметры ϵ или ϵ^2 , которые после выполнения термодинамического предельного перехода

$$n \rightarrow \infty, \quad V \rightarrow \infty, \quad \frac{n}{V} \rightarrow \text{const}$$

(n — число частиц в системе, V — объем) должны быть устремлены к нулю, видим, что из формулы (6.129) следует равенство нулю и обратного времени релаксации.

Физическая причина полученного результата достаточно очевидна. Из § 5 настоящей главы следует, что необратимое поведение не появляется само собой вследствие каких-либо математических ухищрений. Возникновение необратимости связано с тем, что реализуются не все возможные состояния, допускаемые динамическими уравнениями, а лишь ограниченный набор состояний, приводящий к возникновению необратимого во времени поведения.

Конечно, возникает несколько вопросов. Во-первых, почему правильный результат получается при использовании операторов проектирования, а не стандартного метода функций Грина? Этот вопрос становится более актуальным, если мы напомним, что при выводе уравнения движения для корреляционной функции $\Theta(t)$ (6.99) выполнялись, по существу, только тождественные преобразования.

Во-вторых, почему недостаточно того факта, что НСО удовлетворяет необратимому во времени уравнению? Не должны ли отсюда сразу получаться правильные выражения для кинетических коэффициентов?

Проще ответить на второй вопрос. Необратимое во времени уравнение для НСО обеспечивает всего лишь правильную структуру кинетических коэффициентов или обобщенных кинетических уравнений. Более того, правильное вычисление кинетических коэффициентов связано с проблемой вычисления равновесных или неравновесных (с ними мы столкнемся позже) корреляционных функций. Это совсем другая, хотя и близкая по духу задача.

Что касается первого вопроса, то, по существу, это тот же основной вопрос, который мы неоднократно обсуждали с разных сторон: как ввести те динамические переменные, на языке которых можно описать необратимое поведение?

Метод операторов проектирования позволяет выделить в уравнении движения оператора полного импульса члены, описывающие прецессию, и члены, описывающие затухание (см. уравнение (6.103а)). Оказывается, этого достаточно для получения правильного результата. Можно строго доказать, что при определении обратного времени релаксации в форме (6.125) член Γ , описывающий затухание, учитывается дважды с разными знаками и поэтому точно компенсируется. Краткую схему доказательства этого любопытного факта мы приведем в конце следующего параграфа.

§ 8. Связь линейного варианта метода НСО и метода Мори

Рассмотрим теперь вопрос о том, как можно развить дальше подход, основанный на использовании транспортной матрицы $T(\omega)$ и функций Грина $G(\omega)$ (6.79), (6.85), введенных ранее. Нашей задачей будет получение вместо обобщенных уравнений движения для средних (6.68) в методе НСО уравнений движения в форме Мори (6.102).

Сравнивая выражения (6.68) и (6.102), можно заметить, что они будут совпадать по структуре, если удастся транспортную матрицу $T(\omega)$ представить в виде $T(\omega) = i\Omega + \Sigma(\omega)$. Различие в значении нижнего предела в интеграле не существенно, поскольку связано с выбором начального момента времени.

Для доказательства возможности такого представления выполним ряд тождественных преобразований, по существу, повторяющих вывод уравнения (6.102) в методе Мори.

Для сокращения записи введем обозначение

$$P^+(E) = \frac{1}{iL - iE} P^+, \quad iE = i\omega - \epsilon,$$

и рассмотрим тождество

$$i(L - E)P^+(E) = P^+. \quad (6.130)$$

Поддействуем на левую и правую части этого тождества поочередно операторами проектирования \mathcal{P} и $(1 - \mathcal{P})$. Действуя оператором \mathcal{P} с учетом тождества

$$P^+(E) = \mathcal{P}P^+(E) + (1 - \mathcal{P})P^+(E),$$

имеем

$$(-iE + \mathcal{P}iL)\mathcal{P}P^+(E) + \mathcal{P}iL(1 - \mathcal{P})P^+(E) = P^+. \quad (6.131)$$

При выводе этого равенства учтено, что $\mathcal{P}P^+ = P^+$.

Действуя оператором $(1 - \mathcal{P})$, находим

$$(-iE + (1 - \mathcal{P})iL)(1 - \mathcal{P})P^+(E) = -(1 - \mathcal{P})iL\mathcal{P}P^+(E). \quad (6.132)$$

Из уравнения (6.132) найдем величину $(1 - \mathcal{P})P^+(E)$. Умножая слева уравнение (6.132) на величину $(-iE + (1 - \mathcal{P})iL)^{-1}$, получаем

$$(1 - \mathcal{P})P^+(E) = -\frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL}(1 - \mathcal{P})iL\mathcal{P}P^+(E).$$

Подставляя этот результат в уравнение (6.131), находим

$$\begin{aligned} & (-iE + \mathcal{P}iL)\mathcal{P}P^+(E) - \\ & - \mathcal{P}iL \frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL} (1 - \mathcal{P})iL\mathcal{P}P^+(E) = P^+. \end{aligned} \quad (6.133)$$

Рассмотрим теперь действие оператора проектирования \mathcal{P} на величину $P^+(E)$. Исходя из определения оператора проектирования Мори (6.88), (6.91) имеем

$$\begin{aligned}\mathcal{P}P^+(E) &= P^+ \frac{1}{(P, P^+)} (P, P^+(E)) = P^+ \overline{G}(E), \\ (P, P^+(E)) &= \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} \times \\ &\times \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{P, \rho_0^\tau \exp(iLt_1) P^+ \rho_0^{1-\tau}\}. \quad (6.134)\end{aligned}$$

При выводе равенства (6.134) использовано определение функции Грина (6.78). Далее,

$$\mathcal{P}iLP^+ = P^+ i\overline{\Omega}; \quad i\overline{\Omega} = (P, P^+)^{-1} (P, \dot{P}^+).$$

Умножая уравнение (6.133) слева скалярно (в смысле скалярного произведения Мори) на P , получаем

$$\begin{aligned}& (P, P^+) (-iE + i\overline{\Omega}) \overline{G}(E) - \\ & - (P, \mathcal{P}iL \frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL} (1 - \mathcal{P})iLP^+) \overline{G}(E) = (P, P^+). \quad (6.135)\end{aligned}$$

Используя определение проекционного оператора, преобразуем второй член в левой части уравнения к виду

$$(P, P^+) \frac{1}{(P, P^+)} (P, iL \frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL} (1 - \mathcal{P})iLP^+) \overline{G}(E).$$

Сокращая в левой и правой частях одинаковый сомножитель (P, P^+) , получаем

$$\begin{aligned}& [-iE + i\overline{\Omega} + \overline{\Sigma}(E)] \overline{G}(E) = 1; \quad (6.136) \\ \overline{\Sigma}(E) &= \frac{1}{(P, P^+)} (\dot{P}, \frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL} (1 - \mathcal{P})iLP^+).\end{aligned}$$

Если теперь учесть, что, в силу определения оператора проектирования,

$$(\mathcal{P}A, (1 - \mathcal{P})B) = 0$$

для любых операторов A и B , то выражение для функции памяти может быть записано в виде, совпадающем с определением Мори (6.108):

$$\bar{\Sigma}(E) = \frac{1}{(P, P^+)}(f, \frac{1}{-iE + (1 - \mathcal{P})iL}f^+), \quad f = (1 - \mathcal{P})\dot{P}. \quad (6.137)$$

Различие определений для $\bar{\Sigma}(E)$ (6.137) и (6.103) не является существенным и связано просто с некоторым различием обозначений.

Из выражения (6.136) и уравнений (6.77) для транспортной матрицы видно, что действительно транспортную матрицу можно представить в виде $\bar{T}(\omega) = i\bar{\Omega} + \bar{\Sigma}(\omega)$.

Теперь вернемся к проблеме правильной записи частот релаксации и в общих чертах наметим путь доказательства того, что выражения для обратного времени релаксации типа (6.125) при строгом рассмотрении неверны, хотя и очень широко используются в литературе для вычисления частот релаксации в борновском случае. Определим новый проекционный оператор $\mathcal{P}(E)$ соотношением

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(E)A &= (A, P^+)^E \frac{1}{(P, P^+)^E} P, \\ \mathcal{P}(E)A^+ &= P^+ \frac{1}{(P, P^+)^E} (P, A^+)^E, \end{aligned} \quad (6.138)$$

$$\begin{aligned} (A, B^+)^E &= \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} \times \\ &\times \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{A, \rho_0^\tau \exp(iLt_1)B^+ \rho_0^{1-\tau}\}. \end{aligned} \quad (6.139)$$

С учетом определений (6.138), (6.139), (6.72), (6.76) легко проверить справедливость равенств

$$\mathcal{P}(E)\dot{P} = -T(E)P, \quad \mathcal{P}(E)\dot{P}^+ = P^+\bar{T}(E)$$

и доказать, что выражение для $\bar{\Sigma}(E)$ может быть записано в форме

$$\bar{\Sigma}(E) = \frac{1}{(P, P^+)} ([1 - \mathcal{P}(E)]\dot{P}, [1 - \mathcal{P}(E)]\dot{P}^+)^E. \quad (6.140)$$

Доказательство соотношения (6.140) предоставляем читателю в качестве упражнения.

Полученные результаты позволяют несколько иначе записать выражение для обратного времени релаксации (6.125) на нулевой частоте. Используя определения (6.139), (6.123), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = \Sigma'(\epsilon) &= (\dot{P}, \dot{P}^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)} = (\mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}, \mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)} + \\ &+ ([1 - \mathcal{P}(\epsilon)]\dot{P}, [1 - \mathcal{P}(\epsilon)]\dot{P}^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)}. \end{aligned} \quad (6.141)$$

Здесь $\mathcal{P}(\epsilon)$ – проекционный оператор $\mathcal{P}(E)$ при $\omega = 0$.

Связь выражения (6.141) с обратным временем релаксации очевидна. Достаточно просто заменить P, P^+ компонентам оператора полного импульса электронов P^{α} .

Вначале покажем, что

$$(\mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}, \mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)} = -(i\Omega + \Gamma).$$

Для этого воспользуемся соотношениями

$$\mathcal{P}(\epsilon)\dot{P} = -T(\epsilon)P, \quad \mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}^+ = P^+\bar{T}(\epsilon),$$

которые легко доказать, если применить определения (6.138) и формулы (6.72), (6.76). Тогда

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}, \mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)} &= -T(\epsilon)(P, P^+)^{\epsilon} \bar{T}(\epsilon) \frac{1}{(P, P^+)} = \\ &= -T(\epsilon)(P, P^+)^{\epsilon} \frac{1}{(P, P^+)} (P, P^+) \bar{T}(\epsilon) \frac{1}{(P, P^+)} = -T(\epsilon)G(\epsilon)T(\epsilon). \end{aligned}$$

При выводе этого соотношения мы учли, что матрицы $\overline{T}(\epsilon)$ и $T(\epsilon)$ связаны соотношением (6.74). Поскольку в полной аналогии с (6.136) можно записать

$$[\epsilon + i\Omega + \Sigma'(\epsilon)]G(\epsilon) = 1,$$

то отсюда следует, что

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(\epsilon)T(\epsilon) = 1,$$

и мы получаем искомое соотношение

$$(\mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}, \mathcal{P}(\epsilon)\dot{P}^+)^\epsilon (P, P^+)^{-1} = -(i\Omega + \Sigma'(\epsilon)).$$

С другой стороны, как следует из соотношения (6.140), последнее слагаемое в правой части (6.141) есть просто $\Sigma'(\epsilon)$. Складывая эти два результата, находим

$$\Sigma'(\epsilon) = (\dot{P}, \dot{P}^+)^\epsilon \frac{1}{(P, P^+)} = -i\Omega.$$

Иначе говоря, формулы такого типа не содержат затухания вообще. Этот же результат мы получили и в предыдущем параграфе прямым интегрированием для частного случая, когда базисными операторами были компоненты полного импульса электронной системы.

§ 9. Высокочастотная восприимчивость

Рассмотрим еще один пример применения методики операторов проектирования и получим выражение для поперечных компонент тензора парамагнитной восприимчивости электронной системы.

Будем считать, что на систему с гамильтонианом

$$H = H_e + H_s + H_{ep}, \quad H_e = P^2/2m, \quad H_s = -g\mu_B S^z H^z$$

в некоторый момент времени начинает действовать внешнее возмущение с гамильтонианом $H_F(t)$. Здесь H_e, H_s есть гамильтонианы кинетических и зеемановских степеней свободы

электронов проводимости. H_{ep} — гамильтониан взаимодействия электронов с рассеивателями. g — фактор спектроскопического расщепления, μ_B — магнетон Бора,

$$S^\alpha = \sum_{i=1}^n s_i^\alpha,$$

n — число электронов проводимости.

Гамильтониан взаимодействия системы с переменным магнитным полем $H_F(t)$ запишем в виде

$$H_F(t) = -g\mu_B S^\alpha h^\alpha(t),$$

где $h^\alpha(t)$ — вектор индукции высокочастотного магнитного поля.

Найдем магнитный момент m^α системы электронов, возникший в результате отклика на высокочастотное поле $h^\alpha(t)$.

Используя, как и в § 7, интегральное уравнение для НСО (6.115) и полагая, что $\rho^0(t, 0) = \rho_0$, получаем для трансформы Фурье высокочастотного магнитного момента следующее уравнение:

$$m^\alpha(\omega) = \frac{(g\mu_B)^2}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} \times \\ \times \text{Sp}\{S^\alpha \exp(iLt_1)[\rho_0, S^\beta]\} h^\beta(\omega). \quad (6.142)$$

Используя снова формулу Кубо (6.119) (роль оператора X^β теперь играет S^β) и вводя круговые компоненты соотношениями $m_\pm = m^x \pm i m^y$, $h_\pm = h^x \pm i h^y$, получаем

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{\beta(g\mu_B)^2}{2} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} (S^+, \dot{S}^-(t_1)), \\ \dot{S}^- = i\omega_s S^- + \dot{S}_{(l)}^-, \quad \dot{S}_{(l)}^- = \frac{1}{i\hbar} [S^-, H_{ep}], \quad (6.143)$$

ω_s — частота зеемановской прецессии электронного спина. Очевидно, что соотношение (6.143) можно записать в виде

$$\chi_{+-}(\omega) = \frac{\beta(g\mu_B)^2}{2} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon - i\omega)t_1\} \frac{d}{dt_1}(S^+, S^-(t_1)). \quad (6.144)$$

Точно так же, как и в случае электропроводности, введем обозначение $\epsilon - i\omega = z$ и сделаем замену переменных под знаком интеграла $t_1 \rightarrow -t_1$. В этих обозначениях выражение (6.144) можно представить в виде

$$\chi_{+-}(z) = -\frac{\beta(g\mu_B)^2}{2} \int_0^{\infty} dt_1 \exp\{-zt_1\} \frac{d}{dt_1} \Theta(t_1)(S^+, S^-). \quad (6.145)$$

Функция $\Theta(t_1)$, появившаяся в этом выражении, определена в соответствии с формулой (6.94) и для нашего случая имеет вид

$$\Theta(t_1) = (S^+(t_1), S^-) \frac{1}{(S^+, S^-)}.$$

Теперь, используя обобщенное уравнение Ланжевена для корреляционной функции $\Theta(t_1)$ (6.101), имеем

$$\begin{aligned} \chi_{+-}(z) = & -\frac{\beta(g\mu_B)^2}{2} \int_0^{\infty} dt_1 \exp\{-zt_1\} [i\Omega \Theta(t_1) - \\ & - \int_0^{t_1} ds (f, f^+(-s)) \frac{1}{(P, P^+)} \Theta(t_1 - s)] (S^+, S^-), \quad (6.146) \\ f = & (1 - \mathcal{P})\dot{S}^+, \quad i\Omega = (\mathcal{P}\dot{S}^+, S^-) \frac{1}{(S^+, S^-)}. \end{aligned}$$

Выполняя преобразования Лапласа в уравнении (6.146) с учетом определений (6.105), получаем

$$\chi_{+-}(z) = \frac{\beta(g\mu_B)^2}{2} \frac{(S^+, S^-)[\Sigma(z) - i\Omega]}{z - i\Omega + \Sigma(z)}; \quad (6.147)$$

$$\Sigma(z) = \int_0^{\infty} dt_1 \exp(-zt_1) \times \\ \times ((1 - \mathcal{P})\dot{S}^+, \exp\{-(1 - \mathcal{P})iLt_1\}(1 - \mathcal{P})\dot{S}^-) \frac{1}{(S^+, S^-)}. \quad (6.148)$$

Выражение (6.147) для поперечных компонент тензора магнитной восприимчивости полностью совпадает с результатом, полученным с помощью уравнений Блоха (5.100), если учесть, что для нашего случая $i\Omega = -i\omega_s$, а функция памяти определяет обратное время релаксации поперечных компонент электронного спина.

§ 10. Определение неравновесных параметров в методе НСО

Наше рассмотрение метода НСО является неполным, поскольку мы не обсудили до сих пор главный вопрос о том, как можно определить неравновесные параметры $F_n(t)$, которые задают квазиравновесное и неравновесное распределение.

Естественно, проблему отыскания неравновесных параметров можно рассматривать в общем виде, не конкретизируя вид системы. Однако, учитывая ограниченный объем книги, рассмотрим сразу такой физический эффект, который, с одной стороны, является достаточно типичным, а с другой — достаточно простым, чтобы анализ можно было довести до конца.

Остановим свой выбор на эффекте Оверхаузера, который состоит в том, что при насыщении магнитного резонанса на свободных электронах в металлах или полупроводниках происходит усиление сигнала ядерного магнитного резонанса.

Эффект Оверхаузера является типичным эффектом и находит достаточно простое объяснение при использовании в качестве параметров $F_n(t)$ эффективных температур зеемановских подсистем электронов проводимости и ядер.

С физической точки зрения, природа эффекта Оверхаузера весьма проста. Поскольку магнитные подсистемы электронов проводимости и ядер взаимодействуют преимущественно между собой, то их суммарный магнитный момент сохраняется. При насыщении парамагнитного резонанса на электронах

проводимости магнитный момент электронной системы будет уменьшаться, и поэтому должен увеличиться магнитный момент ядерной системы. Увеличение магнитного момента ядерной системы проявляется как понижение эффективной температуры ядер, что и приводит к увеличению сигнала ядерного магнитного резонанса.

Очень похожим является эффект Феера, который состоит в явлении поляризации ядер постоянным электрическим током в полупроводниках. Природа этого эффекта точно такая же. Энергия «закачивается» здесь в кинетические степени свободы электронов, а затем в процессах рассеяния с переворотом спина электронов передается в термостат.

Можно подметить еще одну особенность эффектов Феера и Оверхаузера. По существу, оба они – пример реализации обычной холодильной машины. Если температура спиновой системы T_s больше температуры кинетических степеней свободы электронов проводимости T_k , то в каждом элементарном акте рассеяния с участием спинов электронов, ядер и кинетических степеней свободы энергия передается из зеемановской системы электронов в кинетические степени свободы, но при этом отбирается некоторая энергия и у зеемановской системы ядер. В случае эффекта Феера энергия передается из подсистемы кинетических степеней свободы в термостат, и при этом из законов сохранения энергии и импульса следует, что в каждом акте рассеяния несколько больше вероятность изменить ориентацию спина у ядер, находящихся с ориентацией спина вдоль поля, а не наоборот. Это, собственно, и приводит к явлению динамической поляризации ядер.

Существует еще несколько эффектов, которые можно прекрасно интерпретировать в рамках метода эффективных температур. Это эффекты, в которых при насыщении магнитного резонанса (на электронах проводимости, донорных примесях или ферромагнитного резонанса в магнитных полупроводниках) наблюдается изменение электрического сопротивления в окрестности резонанса, причем кривая изменения сопротивления точно воспроизводит кривую резонансного поглощения высокочастотной энергии в образце. Конечно, хотя эффект не

очень велик и составляет в лучшем случае (для ферромагнитных полупроводников) величину порядка 30 %, он позволяет детектировать резонанс по изменению электрического сопротивления.

Следует особо подчеркнуть, что в этом случае речь идет о повышении температуры не всего образца, а лишь кинетических степеней свободы электронов проводимости.

После этого краткого качественного обсуждения перейдем к подробному описанию эффекта Оверхаузера.

Рассмотрим простейший случай, когда неоднородностью электромагнитного СВЧ-поля в объеме образца можно пренебречь. Далее, будем считать, что реализуется достаточно простой случай, когда подсистема длинноволновых фононов, взаимодействующих с электронами, остается в состоянии термодинамического равновесия.

Для описания неравновесной системы методом НСО необходимо задать гамильтониан системы и выбрать набор неравновесных параметров, ее характеризующих. Представим гамильтониан системы в виде

$$H(t) = H + H_F(t),$$

$$H = H_e + H_s + H_p + H_n + H_{ep} + H_{en}. \quad (6.149)$$

Гамильтонианы H_e , H_s были определены ранее,

$$H_n = -\hbar\omega_n I^z, \quad I^\alpha = \sum_j I_j^\alpha,$$

ω_n — зеемановская частота прецессии ядерных спинов в статическом магнитном поле \vec{H} , I^α — компонента полного спина ядерной системы, суммирование ведется по всем ядрам со спином \vec{I}_j , H_{en} — гамильтониан контактного электронно-ядерного

взаимодействия, который в представлении вторичного квантования по электронным переменным можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 H_{en} &= \sum_{\nu'\sigma',\nu\sigma} U_{en\nu'\nu}^{\alpha} S_{\sigma'\sigma}^{\alpha} a_{\nu'\sigma'}^{+} a_{\nu\sigma}, \\
 U_{en\nu'\nu}^{\alpha} &= \sum_{\vec{q}} J_{\vec{q}} \langle \nu' | e^{i\vec{q}\vec{x}} | \nu \rangle I_{-\vec{q}}^{\alpha}, \\
 I_{-\vec{q}}^{\alpha} &= \sum_j I_j^{\alpha} e^{i\vec{q}\vec{x}_j},
 \end{aligned} \tag{6.150}$$

$J_{\vec{q}}$ – фурье-образ контактного взаимодействия электронов проводимости с магнитным ядром, \vec{x}_j – координата ядра со спином I_j^{α} .

Наконец, гамильтониан H_{ep} представляет собой гамильтониан электрон-фононного взаимодействия, явный вид которого приведен в главе 4.

Переменное электромагнитное поле с частотой ω и амплитудой $h(t)$ будем считать поляризованным в плоскости, перпендикулярной направлению статического поля \vec{H} . В этом случае гамильтониан взаимодействия зеемановских степеней свободы электронов проводимости с внешним полем будет совпадать с гамильтонианом $H_F(t)$, использованным в предыдущем параграфе. Вводя циркулярные компоненты, запишем гамильтониан $H_F(t)$ в виде

$$H_F(t) = -\frac{\hbar\omega_s}{2}(S^{+}e^{i\omega t} + S^{-}e^{i\omega t}). \tag{6.151}$$

Здесь ω_s – частота зеемановской прецессии электронного спина в переменном магнитном поле.

Рассмотрим поведение системы электронов проводимости, фононов и ядерных спинов на временах, больших времени установления равновесия внутри каждой из подсистем. В этом случае справедливо описание подсистем в терминах эффективных неравновесных температур.

Запишем оператор энтропии (6.11) для рассматриваемой системы в виде

$$\begin{aligned}
 S(t, 0) &= \phi(t) + \beta_k(t)(H_e - \zeta(t)N) + \beta_s(t)(H_s + H_F(t)) + \\
 &+ \beta_n(t)(H_n + H_{en}) + \beta(H_p + H_{ep}).
 \end{aligned} \tag{6.152}$$

В формуле (6.152) $\beta_k(t)$, $\beta_s(t)$, $\beta_n(t)$ – обратные температуры кинетических, спиновых степеней свободы электронов проводимости и ядерных спинов соответственно; β – обратная равновесная температура; $\zeta(t)$ – неравновесный химический потенциал. Рассматриваемая нами схема взаимодействия подсистем кристалла представлена на рис. 33.

Здесь прямоугольниками обозначены выделенные в кристалле подсистемы: S и k – подсистемы спиновых и кинетических степеней свободы электронов проводимости, n – подсистема ядерных спинов, а T (термостат) – все остальные равновесные степени свободы кристалла. Стрелки обозначают каналы передачи энергии между подсистемами, а фигурная стрелка изображает накачку радиочастотной (Рч) энергии в подсистему S .

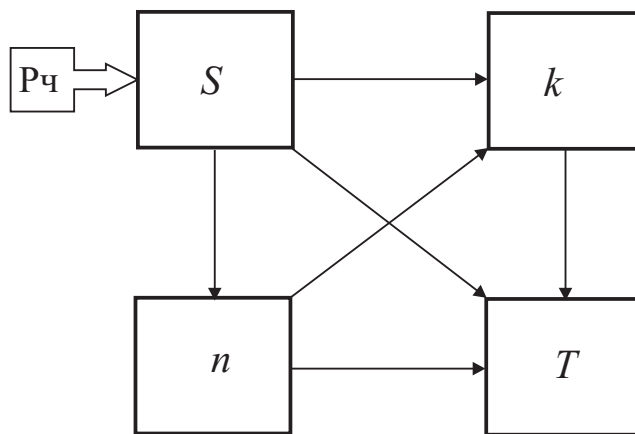


Рис. 33. Схема взаимодействия подсистем кристалла в эффекте Оверхаузера

Из приведенной схемы видно, что в принципе может существовать прямой канал передачи энергии из подсистемы n в термостат, но этот процесс мы не будем учитывать. Точно так же и подсистема S может передавать свою энергию в термостат (фононную систему, которая предполагается равновесной) напрямую и в результате электрон-фононного взаимодействия с переворотом спина и участием кинетических степеней свободы кристалла. Хотя прямой канал передачи энергии возможен и соответствующая стрелка изображена на рис. 33, не будем его учитывать из-за чрезвычайной неэффективности. В этом смысле стрелка, соединяющая подсистемы S и T , лишь напоминает

о том, что система электронных спинов может сбрасывать свою энергию в термостат и без участия подсистемы k .

Для построения системы уравнений баланса энергий подсистем S , k , n , которые в нашем случае будут играть роль обобщенных кинетических уравнений (6.8), необходимо записать выражение для НСО.

Воспользуемся интегральным уравнением для НСО (6.115), полученным нами в § 7. Естественно считать амплитуду радиочастотного поля h малой и ограничиться в уравнениях баланса энергии подсистем членами не выше второго порядка по этому параметру. В этом случае интегральное уравнение для НСО можно записать в виде

$$\begin{aligned}\rho(t, 0) &= \rho^0(t, 0) - i \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} \exp\{iLt_1\} L_F(t + t_1) \rho_0, \\ \rho^0(t, 0) &= \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} \exp\{iLt_1\} \bar{\rho}(t + t_1, 0), \\ \bar{\rho}(t, 0) &= \exp\{-S(t, 0)\}.\end{aligned}\quad (6.153)$$

Причина, по которой в правой части первого уравнения формулы (6.153) неравновесное распределение заменено равновесным, состоит в том, что отклонение неравновесных параметров от их равновесных значений будет второго порядка малости по взаимодействию с внешним электромагнитным полем. Поскольку сам этот член уже содержит первый порядок малости по полю, то отклонением термодинамических параметров от равновесия в этом члене можно пренебречь.

Второе уравнение в выражении (6.153) преобразуем, используя результат (6.62). Как следует из выражения для энтропии (6.152), термодинамические координаты P_n и термодинамические силы F_n мы выбрали следующим образом:

P_n	H_k	$H_s + H_F(t)$	$H_n + H_{en}$	N
$F_n(t)$	$\beta_k(t)$	$\beta_s(t)$	$\beta_n(t)$	$\beta_k(t)\zeta(t)$

Следуя формуле (6.62), найдем уравнения движения для базисных операторов системы с гамильтонианом H . Обозначая, как и раньше, $\dot{A} = \frac{1}{i\hbar}[A, H]$, имеем

$$\begin{aligned}\dot{N} &= 0, & \dot{H}_k &= \dot{H}_{k(p)} + \dot{H}_{k(n)}, \\ \dot{H}_{i(m)} &= \frac{1}{i\hbar}[H_i, H_{em}], & i &= k, s, \quad m = p, n, \\ \dot{H}_s &= \dot{H}_{s(p)} + \dot{H}_{s(n)}, \\ \dot{H}_n + \dot{H}_{en} &= -\dot{H}_{k(n)} - \dot{H}_{s(n)}.\end{aligned}\tag{6.154}$$

Подставим полученные результаты в формулу (6.62). Учитывая снова тот факт, что отклонения обратных температур $\delta\beta_k$, $\delta\beta_s$, $\delta\beta_n$ и химического потенциала $\delta\zeta$ от равновесных значений пропорциональны второму порядку по взаимодействию, и предполагая, что реализуется стационарный режим, при котором термодинамические параметры δF_n от времени не зависят и поэтому $\delta\dot{F}_n(T) = 0$, перепишем формулу (6.62) в виде

$$\begin{aligned}\rho^0(t, 0) &= \rho_0 - \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \delta S(t, 0) \rho_0^{1-\tau} + \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} \times \\ &\times \int_0^1 d\tau \exp\{iLt_1\} \rho_0^\tau \frac{d}{dt_1} \delta S(t + t_1, 0) \rho_0^{1-\tau},\end{aligned}\tag{6.155}$$

$$\begin{aligned}\delta S(t, 0) &= \Delta\{\beta H_F(t) + \delta\beta_k(H_k - \zeta_0 N) - \delta\zeta\beta N + \delta\beta_s H_s + \\ &+ \delta\beta_n(H_n + H_{en})\}, \\ \frac{d}{dt_1} \delta S(t + t_1, 0) &= \Delta\{\beta \frac{\partial}{\partial t_1} H_F(t + t_1) + \delta\beta_k(\dot{H}_{k(p)} + \\ &+ \dot{H}_{k(n)}) + \delta\beta_s(\dot{H}_{s(p)} + \dot{H}_{s(n)}) - \delta\beta_n(\dot{H}_{k(n)} + \dot{H}_{s(n)})\}.\end{aligned}\tag{6.156}$$

Построим теперь с помощью НСО (6.155) систему макроскопических уравнений баланса энергии подсистем, которые будут использоваться в дальнейшем для отыскания неравновесных температур подсистем кристалла.

Найдем уравнения движения для операторов энергии подсистем S , k , n относительно полного гамильтониана $H(t) =$

$= H + H_F(t)$. Ясно, что для систем k и n уравнения движения будут совпадать с уравнениями (6.154). Уравнение движения для подсистемы S следует записать в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(H_s + H_F(t)) &= \frac{1}{i\hbar}[H_s + H_F(t), H(t)] + \frac{\partial}{\partial t}H_F(t) = \\ &= \dot{H}_{s(p)} + \dot{H}_{s(n)} - \frac{i\hbar\omega_s\omega}{2}(S^+ \exp\{i\omega t\} - S^- \exp\{-i\omega t\}). \end{aligned}$$

Усредняя операторные уравнения движения энергии подсистем S , k , n с учетом того, что в стационарном случае средние значения энергий подсистем не будут зависеть от времени и поэтому в левой части выражения (6.8) частная производная по времени равна нулю, получаем

$$\delta\beta_k L_{kk(p)} + \delta\beta_s L_{ks(p)} = 0; \quad (6.157)$$

$$\delta\beta_k L_{sk(p)} + \delta\beta_s L_{ss(p)} + Q_s = 0; \quad (6.158)$$

$$-\delta\beta_k L_{ek(n)} - \delta\beta_s L_{es(n)} + \delta\beta_n L_{ee(n)} = 0. \quad (6.159)$$

Корреляционные функции, которые появились в уравнениях баланса, имеют вид

$$L_{ij(m)} = \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} (\dot{H}_{i(m)}, \dot{H}_{j(m)}(t_1)), \quad (6.160)$$

$$i, j = k, s, e, \quad m = p, n,$$

$H_e = H_k + H_s$. Величина Q_s в уравнении (6.158) имеет смысл поглощенной спиновой системой электронов Рч-мощности и выражается через поперечные компоненты высокочастотной магнитной восприимчивости $\chi_{+-}(\omega)$ (6.143), вычисление которых рассмотрено в предыдущем параграфе:

$$Q_s = \omega \operatorname{Im} \chi_{+-}(\omega) |h|^2. \quad (6.161)$$

Отметим, что при выводе связанной системы уравнений баланса (6.157), (6.158) мы пренебрегли слабым электронно-ядерным взаимодействием, не существенным с точки зрения кинетики электронной системы.

Решение системы уравнений (6.157), (6.158) позволяет выразить поправки к температурам неравновесных подсистем через корреляционные функции $L_{ij}(m)$ и поглощенную мощность Q_s . Мы не будем вычислять корреляционные функции $L_{ij}(m)$, поскольку это потребовало бы более глубокого обсуждения механизмов рассеяния электронов в проводящих кристаллах, что выходит за рамки настоящего учебного пособия, и запишем решение системы (6.157), (6.158) в общем виде:

$$\begin{aligned}\delta\beta_k &= Q_s \frac{L_{ks(p)}}{L_{kk(p)}L_{ks(p)} - L_{ks(p)}^2}, \\ \delta\beta_s &= -Q_s \frac{L_{kk(p)}}{L_{kk(p)}L_{ks(p)} - L_{ks(p)}^2}, \\ \delta\beta_n &= -\delta\beta_k \frac{L_{ek(n)}}{L_{ee(n)}} - \delta\beta_s \frac{L_{es(n)}}{L_{ee(n)}}.\end{aligned}\quad (6.162)$$

Из решения (6.162) видно, что эффект Оверхаузера проявляется в изменении температуры ядерных спинов при закачке Рч-энергии в подсистему S . Полный анализ полученного решения с обсуждением всех возможных режимов реализации эффекта Оверхаузера и оценка численных значений для отклонения эффективных температур от равновесных значений интересны для самостоятельного решения.

Система уравнений (6.162) позволяет найти значения температур неравновесных подсистем S , k , n . Неравновесный химический потенциал можно найти из условия постоянства числа электронов

$$\text{Sp}\{N\bar{\rho}\} = \text{Sp}\{N\rho_0\},$$

где N — оператор числа частиц.

Таким образом, на примере эффекта Оверхаузера мы продемонстрировали возможность построения обобщенных кинетических уравнений и определение параметров, задающих квазиравновесное и неравновесное распределения.

6.2. Гидродинамические моды и сингулярность динамических корреляционных функций

§ 11. Спиновая диффузия

Явление спиновой диффузии связано с тем, что время релаксации продольной и поперечной компонент спина электронов проводимости в проводящих кристаллах зачастую оказывается на несколько порядков больше, чем время релаксации импульса. Так, время релаксации спина в металле $T_s \simeq 10^{-9}$ с, тогда как время релаксации импульса $\tau_{\vec{p}} \simeq 10^{-12}$ с. Это приводит к тому, что ориентация спина сохраняется на протяжении многих актов рассеяния электронов. Поэтому если в какой-либо точке пространства возникло отклонение намагниченности электронов проводимости от состояния равновесия, то возникает движение спиновой намагниченности в пространстве, которое естественно назвать *с п и н о в о й д и ф ф у з и е й*.

Если предположить, что мы интересуемся поведением системы на временах, больших $\tau_{\vec{p}}$, но меньших T_s , то можно считать, что ориентация спина сохраняется и нас интересует только движение частиц, переносящих магнитный момент. Тогда, если ввести понятие плотности магнитного момента

$$M^\alpha(\vec{r}, t) = \sum_i g\mu_B S_i^\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)),$$

то для этой величины можно записать макроскопическое уравнение неразрывности

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{M}^\alpha(\vec{r}, t) \rangle + \text{div} \langle \vec{J}_{M^\alpha}(\vec{r}, t) \rangle &= 0, \\ \vec{J}_{M^\alpha} &= \sum_i g\mu_B S_i^\alpha \left\{ \frac{\vec{p}_i(t)}{m}, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \right\}, \\ \{A, B\} &= \frac{1}{2}(AB + BA). \end{aligned} \quad (6.163)$$

Очевидно, что уравнение неразрывности (6.163) не дает полного описания динамики магнитного момента системы, а накладывает лишь некоторое ограничение. Для того чтобы найти

временное поведение $M^\alpha(\vec{r}, t)$, необходимо еще одно уравнение, связывающее \vec{J}_{M^α} и $M^\alpha(\vec{r}, t)$. Так как имеется тенденция к выравниванию магнитного момента, то такую связь можно попробовать найти, используя феноменологический закон Фика:

$$\langle \vec{J}_{M^\alpha}(\vec{r}, t) \rangle = -D \vec{\nabla} \langle M^\alpha(\vec{r}, t) \rangle. \quad (6.164)$$

В выражении (6.164) средние вычисляются по неравновесному распределению.

Подставляя этот результат в уравнение неразрывности (6.163), получаем замкнутое выражение для компонент плотности магнитного момента системы

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{M}^\alpha(\vec{r}, t) \rangle - D \nabla^2 \langle M^\alpha(\vec{r}, t) \rangle = 0, \quad (6.165)$$

которое позволяет найти значение компонент плотности средней намагниченности в произвольный момент времени, если известна начальная плотность намагниченности.

Предполагая, что среда является неограниченной, произведем преобразование Фурье уравнения (6.165) по переменной \vec{r} и преобразование Лапласа по времени t :

$$\begin{aligned} \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, t) \rangle &= \int d\vec{r} \langle \vec{M}^\alpha(\vec{r}, t) \rangle e^{-i\vec{k}\vec{r}}, \\ \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, z) \rangle &= \int_0^\infty dt \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, t) \rangle e^{izt}. \end{aligned} \quad (6.166)$$

Производя фурье-трансформу уравнения диффузии (6.165), получаем простое уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, t) \rangle + Dk^2 \langle M^\alpha(\vec{k}, t) \rangle = 0, \quad (6.167)$$

решение которого запишем следующим образом:

$$\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, t) \rangle = \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, 0) \rangle e^{-Dk^2 t}. \quad (6.168)$$

В этом выражении $\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, 0) \rangle$ – фурье-образ плотности намагниченности в начальный момент времени $t = 0$. Подставим последний результат в определение $\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, z) \rangle$ (6.166):

$$\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, z) \rangle = \int_0^\infty dt \langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, 0) \rangle e^{-Dk^2 t} e^{izt}$$

и, выполняя интегрирование по временному аргументу, получаем

$$\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, z) \rangle = -\frac{\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, 0) \rangle}{iz - Dk^2} = i \frac{\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, 0) \rangle}{z + iDk^2}. \quad (6.169)$$

Найденный результат можно интерпретировать следующим образом: процесс диффузии приводит к появлению полюса функции $\langle \vec{M}^\alpha(\vec{k}, z) \rangle$ на отрицательной мнимой полуоси

$$z = -iDk^2.$$

Возникновение этой особенности можно трактовать как следствие возникновения в системе коллективных возбуждений, которые принято называть гидродинамическими модами.

Гидродинамический мод принято называть синусоидальную при $k \rightarrow 0$ коллективную флуктуацию, затухающую с характерным временным масштабом:

$$\tau = \frac{1}{Dk^2}.$$

В отличие от распространяющихся мод, имеющих действительную и мнимую части спектра коллективных возбуждений, гидродинамическая мода может иметь лишь мнимую составляющую спектра, однако время жизни возбуждения стремится к бесконечности при $k \rightarrow 0$.

Свяжем коэффициент спиновой диффузии D с корреляционной функцией спинов. Введем корреляционную функцию спинов

$$S_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) = \text{Sp}\{M^\alpha(\vec{r}, t)M^\beta(0, 0)\rho_0\}. \quad (6.170)$$

В формуле (6.170) средние представляют собой величины, вычисленные с использованием равновесного распределения ρ_0 , и поэтому

$$\text{Sp}\{M^\alpha(\vec{r}, t)\rho_0\} = 0.$$

Таким образом, функция $S_{\alpha\beta}(\vec{r}, t)$ описывает флуктуации. Будем предполагать, что функция $S_{\alpha\beta}(\vec{r}, t)$ быстро убывает с увеличением \vec{r} и t в соответствии с принципом ослабления корреляций. Поэтому можно использовать преобразование Фурье

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{r} S_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}. \quad (6.171)$$

Величина $S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ имеет смысл спектральной плотности флуктуаций спиновой намагниченности и является вещественной положительной величиной. Далее будем считать, что гамильтониан системы инвариантен относительно операций пространственного вращения и обращения времени. В этом случае функция $S_{\alpha\beta}(\vec{r}, t)$ будет четной функцией \vec{r} и t и диагональной по индексам α и β .

Определим функцию $\tilde{S}(\vec{k}, \omega)$ с помощью преобразования Лапласа

$$\tilde{S}(\vec{k}, \omega) = \int_0^{\infty} dt S(\vec{k}, t) e^{i\omega t} \quad (6.172)$$

и найдем связь функций $\tilde{S}(\vec{k}, \omega)$ и $S(\vec{k}, \omega)$. Для этого рассмотрим комплексно сопряженную функцию

$$\left\{ \tilde{S}(\vec{k}, \omega) \right\}^* = \int_0^{\infty} dt S(\vec{k}, t) e^{-i\omega t}.$$

Делая в последнем интеграле замену переменных $t \rightarrow -t$ и учитывая четность функции $S(\vec{k}, t)$, получаем

$$\left\{ \tilde{S}(\vec{k}, \omega) \right\}^* = \int_{-\infty}^0 dt S(\vec{k}, t) e^{i\omega t}. \quad (6.173)$$

Отсюда следует, что для действительных $z = \omega$

$$\tilde{S}(\vec{k}, \omega) + \left\{ \tilde{S}(\vec{k}, \omega) \right\}^* = S(\vec{k}, \omega),$$

или

$$2\text{Re } \tilde{S}(\vec{k}, \omega) = S(\vec{k}, \omega). \quad (6.174)$$

Определим функцию $\tilde{S}(\vec{k}, \omega)$ исходя из общих принципов гидродинамического описания системы в предположении, что уравнение диффузии (6.165), определенное для средних, остается справедливым и на операторном уровне:

$$\frac{\partial}{\partial t} M^\alpha(\vec{r}, t) - D \nabla^2 M^\alpha(\vec{r}, t) = 0. \quad (6.175)$$

Умножая справа это уравнение на оператор $M^\beta(0, 0)$ и усредняя по равновесному распределению, получаем уравнение для функции $S(\vec{r}, t)$, которая, как отмечалось выше, диагональна по индексам α, β :

$$\frac{\partial}{\partial t} S(\vec{r}, t) - D \nabla^2 S(\vec{r}, t) = 0. \quad (6.176)$$

Сделанное предположение означает, что спонтанные равновесные флуктуации, описываемые функцией $S(\vec{r}, t)$, релаксируют в соответствии с теми же самыми диффузионными уравнениями, что и неравновесные флуктуации величины $\langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle$. Эту гипотезу выдвинул Онсагер еще в 1931 г., и до сих пор не найдено эмпирических фактов, ее опровергающих.

Уравнение (6.176) решается точно так же, как и уравнение (6.165) для неравновесных средних $\langle \vec{M}(\vec{r}, t) \rangle$, и поэтому сразу получаем

$$\tilde{S}(\vec{k}, z) = i \frac{\tilde{S}(\vec{k}, 0)}{z + iDk^2}. \quad (6.177)$$

Следует помнить, что в этой формуле $\tilde{S}(\vec{k}, 0)$ – это $\tilde{S}(\vec{k}, t = 0)$. Ниже покажем, что

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \tilde{S}(\vec{k}, 0) = \frac{1}{\beta} \chi,$$

где χ – статическая магнитная восприимчивость системы. Поэтому в пределе малых \vec{k} справедливо следующее представление:

$$\tilde{S}(\vec{k}, z) = i \frac{\beta^{-1} \chi}{z + i D k^2}. \quad (6.178)$$

Используя полученный ранее результат (6.174), согласно которому $2\text{Re } \tilde{S}(\vec{k}, \omega) = S(\vec{k}, \omega)$, находим представление в длинноволновом приближении для функции $S(\vec{k}, \omega)$:

$$S(\vec{k}, \omega) = 2\text{Re } \tilde{S}(\vec{k}, \omega) = \frac{2}{\beta} \chi \frac{D k^2}{\omega^2 + (D k^2)^2}. \quad (6.179)$$

Этот результат является достаточно важным и может быть легко проверен экспериментально, поскольку величина $S(\vec{k}, \omega)$ тесно связана со структурным фактором, определяющим рассеяние частиц на флуктуациях магнитного момента. Используя последний результат, можно также определить коэффициент спиновой диффузии D , выражая его через корреляционную функцию операторов магнитного момента в равновесном состоянии. Действительно, используя выражение (6.179), нетрудно заметить, что, выполняя в правильном порядке предельные переходы $k \rightarrow 0$, а затем $\omega \rightarrow 0$, получаем

$$\begin{aligned} \beta \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow 0} \omega^2 k^{-2} S(\vec{k}, \omega) &= 2 D \chi, \\ D &= \beta \frac{1}{2\chi} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow 0} \omega^2 k^{-2} S(\vec{k}, \omega). \end{aligned} \quad (6.180)$$

Таким образом, нам удалось выразить коэффициент спиновой диффузии через корреляционную функцию спиновых флуктуаций в равновесном состоянии. Полученный результат можно рассматривать как еще одно подтверждение флуктуационно-диссипационной теоремы в формулировке Кубо.

§ 12. Флуктуационно-диссипационная теорема

Флуктуационно-диссипационная теорема (ФДТ) устанавливает связь корреляционных функций операторов физических величин или соответствующих спектральных функций с мнимой частью обобщенной восприимчивости, которая, как известно, описывает реакцию системы на внешнее возмущение, т. е. является характеристикой диссипативных процессов в системе. Иначе говоря, ФДТ устанавливает, что механизмы релаксации флуктуации динамических переменных в равновесном состоянии и механизмы, определяющие релаксационное поведение систем при наличии внешних воздействий, управляются одними и теми же физическими законами.

Существует несколько вариантов формулировки ФДТ. Наиболее известны формулировки ФДТ Кубо и Каллена – Велтона. Формулировка Кубо по сути сводится к тому, что кинетические характеристики, такие как электропроводность, магнитная восприимчивость и др., могут быть выражены через корреляционные функции операторов динамических величин в равновесном состоянии. С примерами реализации ФДТ в этой форме мы уже неоднократно встречались ранее (см. формулы (2.11), (5.43), (5.84), (6.180)).

Более общим является вариант ФДТ в форме Каллена – Велтона, который был сформулирован ими в 1951 г. как обобщение теоремы Найквиста о шумах в электрических цепях.

Для конкретности будем формулировать ФДТ Каллена – Велтона на примере тензора магнитной восприимчивости $\chi_{\alpha\beta}$, определяемого соотношением

$$m^{\alpha}(\omega) = \chi_{\alpha\beta}(\omega) h^{\beta}(\omega),$$

явный вид которого легко может быть получен из формулы (5.80):

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \langle [M^{\alpha}, M^{\beta}(t_1)] \rangle_0. \quad (6.181)$$

В этой формуле $\langle A B \rangle_0 = \text{Sp}\{A B \rho_0\}$, $M^{\alpha} = g\mu_B S^{\alpha}$.

Наряду с фурье-образом тензора магнитной восприимчивости определим спектральную интенсивность $f_{\alpha\beta}(\omega)$ и ее классический аналог $g_{\alpha\beta}(\omega)$, сохраняющий свой смысл при переходе к классическому случаю

$$f_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle [M^\alpha, M^\beta(t_1)] \rangle_0, \quad (6.182)$$

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle \{M^\alpha, M^\beta(t_1)\} \rangle_0, \quad (6.183)$$

где

$$\{AB\} = \frac{1}{2}(AB + BA),$$

и найдем взаимосвязь функций $\chi_{\alpha\beta}(\omega)$, $f_{\alpha\beta}(\omega)$ и $g_{\alpha\beta}(\omega)$. Для этого рассмотрим вначале выражение

$$(\chi_{\beta\alpha}(\omega))^* = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon+i\omega)t_1} \left(\langle [M^\beta, M^\alpha(t_1)] \rangle_0 \right)^*. \quad (6.184)$$

Учитывая эрмитовость операторов физических величин (см. формулу (5.179)), легко показать, что

$$\left(\langle [M^\beta, M^\alpha(t_1)] \rangle_0 \right)^* = \langle [M^\alpha, M^\beta(-t_1)] \rangle_0.$$

Подставляя этот результат в выражение (6.184) и производя замену переменных $t_1 \rightarrow -t_1$, получаем

$$(\chi_{\beta\alpha}(\omega))^* = \frac{-i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt_1 e^{-(\epsilon+i\omega)t_1} \langle [M^\alpha, M^\beta(t_1)] \rangle_0. \quad (6.185)$$

Сравнивая теперь результаты (6.181), (6.182) и (6.185), получаем взаимосвязь функции спектральной интенсивности $f_{\alpha\beta}(\omega)$ с компонентами тензора магнитной восприимчивости $\chi_{\alpha\beta}(\omega)$

$$f_{\alpha\beta}(\omega) = \chi_{\alpha\beta}(\omega) - (\chi_{\beta\alpha}(\omega))^*. \quad (6.186)$$

Найдем теперь связь функций $f_{\alpha\beta}(\omega)$ и $g_{\alpha\beta}(\omega)$. Для этого необходимо выяснить, чем различаются выражения

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0 \quad \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\beta(t_1) M^\alpha \rangle_0.$$

Рассмотрим интеграл

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \text{Sp}\{M^\alpha e^{i/\hbar H t_1} M^\beta e^{-i/\hbar H t_1} \rho_0\} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \text{Sp}\{M^\alpha \frac{1}{Z} e^{-\beta H} e^{i/\hbar H(t_1 - i\hbar\beta)} M^\beta e^{-i/\hbar H(t_1 - i\hbar\beta)}\}. \end{aligned}$$

Выполняя в последнем интеграле замену переменных $t_1 - i\hbar\beta \rightarrow t_1$ и учитывая, что при этом $e^{-i\omega t_1} \rightarrow e^{-i\omega t_1} \cdot e^{\beta\hbar\omega}$, получаем

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0 = \\ &= e^{\beta\hbar\omega} \int_{-\infty + i\hbar\beta}^{\infty + i\hbar\beta} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\beta(t_1) M^\alpha \rangle_0. \end{aligned} \quad (6.187)$$

Полюса подынтегральной функции в выражении (6.187) лежат на действительной оси, поэтому можно сдвинуть контур интегрирования вниз на величину $i\hbar\beta$. Тогда вместо (6.187) имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0 = e^{\beta\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\beta(t_1) M^\alpha \rangle_0. \quad (6.188)$$

Проверить равенство (6.188) и тем самым возможность сдвига контура интегрирования проще всего, полагая, что нам известны собственные функции полного гамильтониана H . В этом

случае при интегрировании по времени t_1 в левой и правой частях (6.188) возникают дельта-функции и равенство (6.188) становится очевидным. Поскольку значение шпура произвольной совокупности операторов не зависит от того, какая полная система собственных функций используется для вычисления матричных элементов, можно считать соотношение доказанным.

Подставляя результат (6.188) в определение функций $f_{\alpha\beta}(\omega)$ и $g_{\alpha\beta}(\omega)$, получаем

$$f_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0; \quad (6.189)$$

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega}) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0. \quad (6.190)$$

Объединяя эти два результата, получаем искомую взаимосвязь функций $f_{\alpha\beta}(\omega)$ и $g_{\alpha\beta}(\omega)$:

$$f_{\alpha\beta}(\omega) = 2 \frac{i}{\hbar} \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{1 + e^{-\beta\hbar\omega}} g_{\alpha\beta}(\omega). \quad (6.191)$$

Вспоминая взаимосвязь функции $f_{\alpha\beta}(\omega)$ с мнимой частью магнитной восприимчивости (6.186), можно выразить спектральную интенсивность симметризованной корреляционной функции $g_{\alpha\beta}(\omega)$ через мнимую часть тензора магнитной восприимчивости

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\hbar}{2i} \frac{1 + e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \cdot \left(\chi_{\alpha\beta}(\omega) - (\chi_{\beta\alpha}(\omega))^* \right). \quad (6.192)$$

Если умножить числитель и знаменатель последнего выражения на $e^{\beta\hbar\omega/2}$ и ввести обозначение

$$\frac{1}{2i} \left(\chi_{\alpha\beta}(\omega) - (\chi_{\beta\alpha}(\omega))^* \right) = \text{Im} \chi_{\alpha\beta}^s,$$

которое имеет смысл мнимой части симметричной составляющей тензора магнитной восприимчивости, то выражение (6.192) можно представить в компактной форме

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \hbar \cdot \text{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \cdot \text{Im} \chi_{\alpha\beta}^s(\omega). \quad (6.193)$$

Выражение (6.193) и является формулировкой ФДТ Каллена – Велтона. Результаты (6.193) и (6.186) остаются в силе и в пространственно неоднородном случае, когда функции $f_{\alpha\beta}(\vec{k}\omega)$, $g_{\alpha\beta}(\vec{k}\omega)$, $\chi_{\alpha\beta}(\vec{k}\omega)$ зависят от волнового вектора \vec{k} и частоты ω .

В предыдущем параграфе была введена еще одна функция $S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$. Установим ее связь с функциями $f_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ и $\chi_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$. Для простоты рассмотрим вначале пространственно однородный случай. Тогда, используя определения (6.171) и (6.170) и полагая $\vec{k} = 0$, получаем

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i\omega t_1} \langle M^\alpha(t_1) M^\beta \rangle_0 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(-t_1) \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\omega t_1} \langle M^\alpha M^\beta(t_1) \rangle_0. \end{aligned}$$

При записи последнего равенства в этой формуле сделана замена переменных $t_1 \rightarrow -t_1$. С учетом этого результата выражения (6.189), (6.190) перепишем следующим образом:

$$f_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) S_{\alpha\beta}(\omega); \quad (6.194)$$

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega}) S_{\alpha\beta}(\omega). \quad (6.195)$$

Поскольку соотношения (6.194), (6.195) непосредственно обобщаются на пространственно неоднородный случай, учитывая (6.193), получаем

$$g_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega}) S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega) = \hbar \cdot \text{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \cdot \text{Im } \chi_{\alpha\beta}^s(\vec{k}, \omega).$$

Отсюда в пределе малых частот $\beta\hbar\omega \ll 1$ следует простое равенство

$$\text{Im } \chi_{\alpha\beta}^s(\vec{k}, \omega) = \frac{\beta\omega}{2} S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega). \quad (6.196)$$

Наконец, подставляя в это выражение значение функции $S_{\alpha\beta}(\vec{k}, \omega)$ (6.179), справедливое в пределе малых \vec{k} , получаем представление для мнимой части магнитной восприимчивости

$$\text{Im } \chi_{\alpha\beta}^s(\vec{k}, \omega) = \chi \frac{Dk^2 \omega}{\omega^2 + (Dk^2)^2}, \quad (6.197)$$

справедливое в длинноволновом приближении $\vec{k} \rightarrow 0$. В связи с полученным результатом важно пояснить, что структура мнимой части магнитной восприимчивости (6.197) «навязана» законами сохранения и свойствами симметрии рассматриваемой системы и не зависит от конкретного вида гамильтониана системы.

Задача 6.1

Доказать, что

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} S(\vec{k}, t = 0) = 1/\beta \cdot \chi,$$

где χ – статическая восприимчивость в пространственно однородном случае.

Решение

Будем исходить из определения

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} S(\vec{k}, t = 0) = \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \int d\vec{r} \text{Sp}\{M(\vec{r})M(0)\rho_0\}e^{-i\vec{k}\vec{r}},$$

где M – намагниченность системы вдоль направления внешнего магнитного поля с амплитудой h . Далее, $M(0) = \sum_i M_i$;

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \int d\vec{r} M(\vec{r})e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \int d\vec{r} \sum_i M_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \sum_i M_i.$$

Таким образом,

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} S(\vec{k}, t = 0) = \text{Sp}\{M_{\Pi}M_{\Pi}\rho_0\},$$

где M_{Π} – полный магнитный момент образца.

Магнитная восприимчивость образца в феноменологической термодинамике определяется соотношением

$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial h} \langle M \rangle^h.$$

Если считать, что гамильтониан системы H во внешнем поле h можно представить в виде $H = H_0 - hM_{\text{п}}$, то среднюю намагниченность можно вычислить, используя усреднение по равновесному ансамблю

$$\langle M \rangle^h = \frac{\text{Sp}\{M_{\text{п}} \exp[-\beta(H_0 - hM_{\text{п}})]\}}{\text{Sp}\{\exp[-\beta(H_0 - hM_{\text{п}})]\}}.$$

Вычислим производную по h . В данном случае это можно сделать без особого труда, поскольку полный магнитный момент сохраняется и, следовательно, коммутирует с гамильтонианом H_0 . В итоге получаем

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial h} \langle M \rangle^h = \beta \cdot [\langle M_{\text{п}}^2 \rangle_0 - \langle M_{\text{п}} \rangle_0^2] = \beta \cdot \text{Sp}\{M_{\text{п}} M_{\text{п}} \rho_0\}.$$

Последнее равенство в этом выражении следует из того факта, что в отсутствие спонтанной намагниченности $\langle M_{\text{п}} \rangle_0 = 0$. Таким образом, мы доказали, что действительно

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} S(\vec{k}, t = 0) = 1/\beta \cdot \chi.$$

§ 13. Дальние корреляции и медленные моды

В § 11 этой главы на примере явления спиновой диффузии рассмотрены условия возникновения гидродинамических мод, т. е. слабозатухающих в пределе $k \rightarrow 0$ коллективных возбуждений. Показано, в частности, что если динамическая переменная удовлетворяет некоторому закону сохранения и является квазиинтегралом движения, то соответствующая автокорреляционная функция в комплексной плоскости z будет иметь гидродинамический полюс. Обобщим эти результаты, используя метод операторов проектирования Мори, развитый в § 6 – 9 главы 6.

Определим автокорреляционную функцию операторов $A(\vec{k}, t)$ $A(\vec{k}', t')$ соотношением

$$\begin{aligned} C_{AA}(\vec{k}, t) &= (A(\vec{k}, t), A^+(\vec{k}, 0)) = \\ &= \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp} \{ \Delta(A(\vec{k}, t) \rho_0^\tau \Delta A^+(\vec{k}, 0) \rho_0^{1-\tau}) \}. \end{aligned} \quad (6.198)$$

В силу однородности пространства, как следует из формулы (5.168) в § 8 главы 5, отличными от нуля будут лишь такие средние, для которых $\vec{k} = \vec{k}'$. Будем считать оператор A самосопряженным. Тогда $A^+(\vec{k}) = A(-\vec{k})$.

Произведем преобразование Лапласа корреляционной функции $C_{AA}(\vec{k}, t)$ по переменной t , определив корреляционную функцию $C_{AA}(\vec{k}, z)$:

$$C_{AA}(\vec{k}, z) = \int_0^\infty dt C_{AA}(\vec{k}, t) e^{-zt}. \quad (6.199)$$

Как следует из § 6 настоящей главы, для функции $C_{AA}(\vec{k}, z)$, которая отличается от функции $\Theta(z)$ (6.106) только множителем вида $(A, A^+)^{-1}$ и дополнительной зависимостью от \vec{k} , повторяя выкладки, приведшие нас от (6.94) к (6.106), можно получить представление

$$C_{AA}(\vec{k}, z) = \frac{\beta^{-1} \chi_{AA}(\vec{k})}{z + \mathfrak{S}_A(\vec{k}, z) \cdot [\chi_{AA}(\vec{k})]^{-1}}, \quad (6.200)$$

где

$$\mathfrak{S}_A(\vec{k}, z) = \beta \left((1 - \mathcal{P}) \dot{A}(\vec{k}), \frac{1}{z - (1 - \mathcal{P})iL} (1 - \mathcal{P}) \dot{A}^+(\vec{k}) \right). \quad (6.201)$$

В формулах (6.200), (6.201) использовано определение

$$C_{AA}(\vec{k}, t = 0) = \langle A(\vec{k}) A^+(\vec{k}) \rangle = \beta^{-1} \chi_{AA}(\vec{k}).$$

Кроме того, для простоты мы положили, что

$$i\Omega = (\dot{A}(\vec{k}), A^+(\vec{k}))(A(\vec{k}), A^+(\vec{k}))^{-1} = 0.$$

Если величина $A(\vec{k}, t)$ была бы сохраняющейся величиной, то функция $\mathfrak{S}_A(\vec{k}, z)$, как это показано в § 11, была бы пропорциональна k^2 и мы имели бы гидродинамический полюс. В этом легко убедиться, если считать, что $A(\vec{k})$ является единственным базисным оператором, удовлетворяющим уравнению движения

$$\dot{A}(\vec{k}) = a \cdot A(\vec{k}) + i\vec{k} \vec{J}_A(\vec{k}),$$

где a – некоторый c -числовой коэффициент, а $\vec{J}_A(\vec{k})$ – вектор потока, связанный с физической величиной A . Тогда, поскольку коррелятор случайных сил $\mathfrak{S}_A(\vec{k}, z)$ содержит конструкцию $(1 - \mathcal{P})\dot{A}(\vec{k})$, составляющая $a \cdot A(\vec{k})$ вклада не даст. Поэтому $(1 - \mathcal{P})\dot{A}(\vec{k}) \sim k$ и

$$\mathfrak{S}_A(\vec{k}, z) \sim k^2.$$

Если

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \mathfrak{S}_A(\vec{k}, z) \cdot [\chi_{AA}(\vec{k})]^{-1} \neq 0$$

и остается конечной величиной при $\vec{k} \rightarrow 0$, то это будет означать, что корреляционная функция $C_{AA}(0, t)$ будет удовлетворять уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C_{AA}(0, t) &= -\frac{C_{AA}(0, t)}{\tau_A}, \\ \tau_A^{-1} &= \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \mathfrak{S}_A(\vec{k})[\chi_{AA}(\vec{k})]^{-1}, \end{aligned} \quad (6.202)$$

демонстрируя обычное релаксационное поведение. Действительно, если выполнить трансформу Лапласа уравнения (6.202) с использованием соотношения (6.105), получаем

$$-C_{AA}(0, 0) + z C_{AA}(0, z) = \frac{1}{\tau_A} C_{AA}(0, z),$$

или

$$C_{AA}(0, z) = \frac{C_{AA}(0, 0)}{z + \tau_A^{-1}}.$$

Предположим теперь, что несохраняющаяся величина имеет статические корреляции бесконечно большого радиуса и

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \chi_{AA}(\vec{k}) \sim \frac{M_0}{R_A k^2},$$

где M_0 и R_A – некоторые константы. Очевидно, что в этом случае

$$\mathfrak{S}_A(\vec{k}, z) \cdot [\chi_{AA}(\vec{k})]^{-1} \sim k^2$$

и мы вновь будем иметь гидродинамический полюс.

Представляет интерес выяснить, в каких системах возможно возникновение $1/k^2$ сингулярностей статической восприимчивости. В первую очередь рассмотрим изотропный ферромагнитный материал. Хорошо известно, что в ферромагнетике возникает спонтанное упорядочение магнитных моментов образца, в результате которого они в простейшем случае выстраиваются вдоль некоторого направления, которое можно выбрать за ось Z . В действительности это направление в образце ничем не выделено. Возможна лишь очень слабая анизотропия образца, приводящая к тому, что спонтанная намагниченность ориентирована именно вдоль этого направления.

Если теперь вдоль оси X приложить внешнее поле $h_x(\vec{r})$, то под действием этого поля возникнет отличная от нуля намагниченность $M_x(\vec{r})$. Производя фурье-преобразование материального уравнения, получаем

$$\langle M_x(\vec{k}) \rangle = \chi_{xx}(\vec{k}) h_x(\vec{k}).$$

Рассмотрим в этом уравнении переход $k \rightarrow 0$. Очевидно, что в этом предельном случае

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \langle M_x(\vec{k}) \rangle = M_0 = \chi_{xx} h_x,$$

где M_0 – равновесный магнитный момент образца. Поскольку поворот вектора спонтанной намагниченности не связан с

какой-либо работой, то такой поворот будет происходить и в бесконечно малом поле. Этот факт дает основание заключить, что $\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \chi_{xx}(\vec{k}) \rightarrow \infty$.

К тем же самым выводам можно прийти, используя другую аргументацию. Если нужна лишь очень малая энергия на поворот вектора спонтанной намагниченности в некоторой локальной области образца, то для создания синусоидальной в пространстве флуктуации намагниченности с очень большой длиной волны нужно затратить лишь бесконечно малую энергию, поскольку она связана с магнитным взаимодействием областей с разной ориентацией магнитного момента. А если такая флуктуация возникла, то она будет очень медленно затухать, поскольку в каждой из областей спиновая ориентация является равновесной. Единственным взаимодействием, вызывающим процессы релаксации, будет взаимодействие областей с разной ориентацией намагниченности.

Таким образом, можно считать, что расходимость $\chi_{xx}(\vec{k})$ связана со статическими корреляциями большого радиуса, которые, в свою очередь, обусловлены спонтанным нарушением симметрии в основном состоянии. Обсудим более подробно, что имеют в виду, когда говорят о нарушении симметрии в основном состоянии. Рассмотрим систему спинов, взаимодействие которых описывается гамильтонианом Гейзенберга

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \vec{S}_i \vec{S}_j. \quad (6.203)$$

Хорошо известно, что в этой системе сохраняется полный спин, поэтому

$$\left[\sum_i \vec{S}_i, H \right] = 0.$$

Полагая, что результирующий магнитный момент направлен вдоль оси Z , вычислим среднее значение z -компоненты полного спина

$$\begin{aligned} \langle \sum_i S_i^z \rangle_0 &= \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \left\{ \left[\sum_i S_i^x, \sum_j S_j^y \right] \rho_0 \right\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \left\{ \left[\sum_i S_i^x, \rho_0 \right] \sum_j S_j^y \right\} \neq 0. \end{aligned} \quad (6.204)$$

Из этого результата следует, что равновесный статистический оператор

$$\rho_0 \neq \frac{1}{Z} e^{-\beta H}.$$

Более правильно считать, что

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} \mathcal{P}_Z e^{-\beta H},$$

т. е. из всех возможных состояний с данной энергией отбираются состояния, для которых суммарный спиновый момент ориентирован вдоль оси Z . В частности, можно считать, что операция проектирования, выделяющая Z -направление, состоит в том, что

$$\rho_0 \rightarrow \frac{1}{Z} \exp\left\{-\beta\left(H - \sum_i S_i^z h\right)\right\},$$

где h – бесконечно малый параметр. В этом случае z -компонента полного спина коммутирует с ρ_0 , а x - и y -компоненты не коммутируют. Внешнее поле h , каким бы малым оно ни было, придает несколько больший статистический вес состояниям, в которых суммарный спин вдоль оси Z отличен от нуля. В ферромагнитном состоянии этого вполне достаточно, чтобы выстроить все спины параллельно оси Z .

Сингулярность $\chi_{xx}(\vec{k})$ связана именно с нарушенной симметрией (магнитные моменты выстроены вдоль оси Z , хотя гамильтониан системы инвариантен относительно вращений). Именно поэтому поворот результирующего магнитного момента происходит в бесконечно слабом поле h , приложенном вдоль оси X , что и приводит к сингулярности $\chi_{xx}(\vec{k})$. При этом, поскольку $\chi_{xx}(\vec{k})$ является четной функцией k ($\chi_{xx}(\vec{r})$ зависит только от $|\vec{r}|$), эта особенность имеет вид $1/k^2$.

Интересно отметить, что $\chi_{zz}(\vec{k})$ не имеет какой-либо особенности в своем поведении, поскольку увеличение магнитного момента вдоль оси Z при приложении бесконечно малого поля вдоль этой оси также будет бесконечно малым.

Обсуждаемый здесь результат квадратичной сингулярности статической восприимчивости в системах со спонтанно нарушенной симметрией носит название теоремы об $1/k^2$ – расходимости Боголюбова. В следующем параграфе на качественном

уровне рассмотрим основные идеи доказательства теоремы Боголюбова на примере статической магнитной восприимчивости. Более полное рассмотрение обсуждаемого вопроса можно найти в монографиях [44, 49].

§ 14. Неравенство Боголюбова и теорема об $1/k^2$ -расходимости

Приведем несколько упрощенный вывод неравенства Боголюбова и теоремы о сингулярности статических компонент обобщенной восприимчивости в системах с нарушенной симметрией основного состояния на примере статической магнитной восприимчивости. Установим сначала дисперсионные соотношения Крамерса – Кронига и правило сумм, связывающее действительную и мнимую части обобщенной восприимчивости.

Обобщенную восприимчивость определим как отклик значения оператора физической величины B на внешнее воздействие, определяемое возмущением $-A^+ F$:

$$\begin{aligned}\delta\langle B(\vec{k}, \omega) \rangle &= \chi_{BA}(\vec{k}, \omega) F(\vec{k}, \omega), \\ \chi_{BA}(\vec{k}, \omega) &= \chi'_{BA}(\vec{k}, \omega) + i\chi''_{BA}(\vec{k}, \omega),\end{aligned}\tag{6.205}$$

где $\chi'_{BA}(\vec{k}, \omega)$ и $\chi''_{BA}(\vec{k}, \omega)$ – действительная и мнимая части тензора обобщенной восприимчивости. Предположим теперь, что

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} \chi_{BA}(\vec{k}, \omega) \rightarrow 0.\tag{6.206}$$

Если это не так, то следует произвести перенормировку обобщенной восприимчивости, например, вычитая из $\chi_{BA}(\vec{k}, \omega)$ значение $\chi_{BA}(\vec{k}, \infty)$, чтобы предельный переход (6.206) был справедлив и для этого случая. В этом случае есть все основания считать, что $\chi_{BA}(\vec{k}, \omega)$ является аналитической функцией в комплексной плоскости z . Тогда на основании теоремы Коши для аналитических функций

$$\int_C dz \frac{\chi_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega} = 0,\tag{6.207}$$

если контур интегрирования выбран так, что полюс резольвенты обходится по участку окружности с центром в точке ω , лежащей на действительной оси – так, как показано на рис. 34.

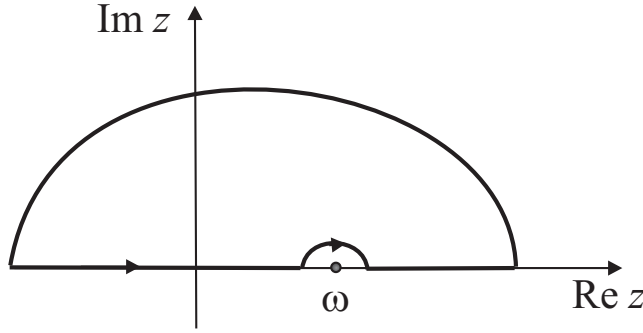


Рис. 34. Контур обхода полюса резольвенты в уравнении (6.207)

Пусть радиус окружности, по которой обходится полюс, будет ρ . Тогда интеграл по контуру можно записать в виде суммы трех интегралов

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{\omega-\rho} dz \frac{\chi_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega} + \int_{\omega+\rho}^{\infty} dz \frac{\chi_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega} + \right. \\ \left. + \chi_{BA}(\vec{k}, \omega) \int_{\pi}^0 \frac{i\rho e^{i\varphi} d\varphi}{\rho e^{i\varphi}} \right\}, \quad z - \omega = \rho e^{i\varphi}, \quad dz = i\rho e^{i\varphi} d\varphi. \quad (6.208)$$

Выполняя предельный переход, находим соотношение

$$i\pi \chi_{BA}(\vec{k}, \omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\chi_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega}, \quad (6.209)$$

из которого, разделяя действительную и мнимую части, легко получить соотношения Крамерса – Кронига:

$$\chi'_{BA}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\chi''_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega}; \quad (6.210)$$

$$\chi''_{BA}(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\chi'_{BA}(\vec{k}, z)}{z - \omega}. \quad (6.211)$$

В формулах (6.209)– (6.211) символ P используется для обозначения главного значения интеграла.

Соотношения Крамерса – Кронига позволяют сформулировать правило сумм для компонент тензора обобщенной восприимчивости. Полагая $\omega = 0$ и учитывая, что

$$\operatorname{Re} \chi_{BA}(\vec{k}, 0) = \chi_{BA}(\vec{k}),$$

получаем

$$\chi_{BA}(\vec{k}) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\chi''_{BA}(\vec{k}, z)}{z}. \quad (6.212)$$

Таким образом, статическая обобщенная восприимчивость может быть найдена в результате интегрирования мнимой части восприимчивости по всему частотному интервалу.

Покажем теперь, что обобщенная статическая восприимчивость $\chi_{BA}(\vec{k})$ определяется «скалярным» произведением Кубо (Мори) двух операторов A и B , определенным ранее (5.82), (6.89):

$$\chi_{BA}(\vec{k}) = \beta(B(\vec{k}), A^+(\vec{k})) = \beta \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{B(\vec{k})\rho_0^\tau A^+(\vec{k})\rho_0^{1-\tau}\}. \quad (6.213)$$

Для доказательства будем исходить из формулы линейного отклика (5.35), положив в ней $\omega = 0$ и выполнив ряд тождественных преобразований (см. также формулы (5.43), (5.80), (6.118)):

$$\chi_{BA}(\vec{k}) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \operatorname{Sp}\{[\rho_0, B(\vec{k}, t)] A^+(\vec{k})\}. \quad (6.214)$$

Воспользуемся тождеством Кубо (5.81)

$$\frac{i}{\hbar} [\rho_0, B(\vec{k}, t)] = -\beta \frac{d}{dt} \int_0^1 d\tau B(\vec{k}, t + i\hbar\beta\tau) \rho_0$$

для преобразования выражения в правой части формулы (6.214). Интегрируя затем интеграл по переменной t в этой формуле по частям, получаем

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(\vec{k}) = & -\beta \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{B(\vec{k}, t + i\hbar\beta\tau)\rho_0 A^+(\vec{k})\} \Bigg|_{t=0}^{t=\infty} - \\ & -\epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \beta \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{B(\vec{k}, t + i\hbar\beta\tau)\rho_0 A^+(\vec{k})\}. \end{aligned} \quad (6.215)$$

Если воспользоваться теоремой Абеля

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} f(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t)$$

и принципом ослабления корреляций, то легко показать, что второе слагаемое в правой части (6.215) равно нулю (полагаем, что операторы B и A определены таким образом, что их равновесное среднее равно нулю). Подстановка верхнего предела $t = \infty$ в первое слагаемое правой части (6.215), в силу принципа ослабления корреляций, также дает нулевой результат. При подстановке нижнего предела $t = 0$ получаем искомый результат

$$\chi_{BA}(\vec{k}) = \beta \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{B(\vec{k}, i\hbar\beta\tau)\rho_0 A^+(\vec{k})\}. \quad (6.216)$$

Правая часть в формуле (6.216) совпадает с правой частью формулы (6.213), в чем легко убедиться, сделав в формуле (6.216) замену переменных $\tau - 1 \rightarrow \tau'$.

Далее, поскольку корреляционная функция

$$(A, B) = \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp}\{A\rho_0^\tau B\rho_0^{1-\tau}\}$$

обладает всеми свойствами скалярного произведения, то для векторов A и B в гильбертовом пространстве выполняется неравенство Шварца

$$(A, A) \cdot (B, B) \geq |(A, B)|^2. \quad (6.217)$$

Если теперь учесть, что обобщенная статическая восприимчивость, согласно (6.213), может быть записана в виде скалярного произведения Кубо операторов A и B , и правило сумм (6.212), то неравенство Шварца (6.217) запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{AA}(\vec{k}, \omega)}{\omega} \cdot \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{BB}(\vec{k}, \omega)}{\omega} &\geq \\ &\geq \left| \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{AB}(\vec{k}, \omega)}{\omega} \right|^2. \end{aligned} \quad (6.218)$$

Выражение (6.218) представляет собой одну из форм записи неравенства Боголюбова для корреляционных функций. Воспользуемся этим выражением для демонстрации того, что

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \chi_{AA}(\vec{k}) \sim \frac{1}{k^2}.$$

В выражении (6.218) операторы $A(\vec{k})$ и $B(\vec{k})$ могут быть произвольными. Выберем в качестве оператора $A(\vec{k})$ оператор $M_x(\vec{k})$, а в качестве оператора $B(\vec{k})$ – оператор $\dot{M}_y(\vec{k})$.

Поэтому неравенство Шварца для этого частного случая можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{M_x M_x}(\vec{k}, \omega)}{\omega} &\geq \\ &\geq \left| \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{\dot{M}_y M_x}(\vec{k}, \omega)}{\omega} \right|^2 \cdot \left[\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \chi''_{\dot{M}_y \dot{M}_y}(\vec{k}, \omega) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (6.219)$$

При записи результата во втором сомножителе в правой части (6.219) мы воспользовались представлением (6.186) для мнимой части обобщенной восприимчивости и выполнили двухратное интегрирование по частям по временному аргументу t . Можно показать, что с учетом принципа ослабления корреляций

$$\chi''_{M_y M_y}(\vec{k}, \omega) = \omega^2 \chi''_{M_y M_y}(\vec{k}, \omega).$$

Преобразуем первый сомножитель в правой части неравенства (6.219). Используя правило сумм (6.212) и формулу (6.186), имеем

$$\begin{aligned} \chi_{M_y M_x}(\vec{k}) &= \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\chi''_{M_y M_x}(\vec{k}, \omega)}{\omega} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \frac{i\omega}{\hbar\omega} \langle [M_y(\vec{k}), M_x(\vec{k}, t)] \rangle_0 = \frac{g\mu_B}{\hbar} \langle M_z \rangle_0, \end{aligned} \quad (6.220)$$

где $\langle M_z \rangle_0 \equiv M_0$ – вектор магнитного момента в равновесном состоянии. При получении этого выражения мы воспользовались определением дельта-функции

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} = \delta(t)$$

и представлением (6.186) для мнимой части обобщенной восприимчивости. Тогда, выполняя интегрирование по частям по временному аргументу t с учетом принципа ослабления корреляций, получаем

$$\chi''_{M_y M_x}(\vec{k}, \omega) = i\omega \chi''_{M_y M_x}(\vec{k}, \omega).$$

Кроме этого, мы учли правила коммутации фурье-компонент спина

$$\begin{aligned} [S^\alpha(\vec{k}), S^\beta(\vec{k}')] &= \sum_{i,j} [S_i^\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_i}, S_j^\beta e^{i\vec{k}'\vec{r}_j}] = \\ &= \sum_i [S_i^\alpha, S_i^\beta] e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}_i} = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma(\vec{k} + \vec{k}'). \end{aligned} \quad (6.221)$$

Соотношение (6.220) можно рассматривать как вариант записи правила сумм для компонент тензора магнитной восприимчивости. Здесь $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – единичный антисимметричный тензор третьего ранга.

Таким образом, первый сомножитель в правой части неравенства (6.219) не содержит зависимости от k и пропорционален квадрату равновесной намагниченности M_0 .

Преобразуем теперь второй сомножитель правой части неравенства (6.219). Во временном представлении компоненты вектора полной намагниченности удовлетворяют уравнению неразрывности

$$\frac{\partial}{\partial t} M_y(\vec{r}, t) + \text{div } \vec{J}_{M_y}(\vec{r}, t) = 0.$$

Выполняя фурье-преобразование этого уравнения, имеем

$$i\omega M_y(\vec{k}, \omega) + i\vec{k} \vec{J}_{M_y}(\vec{k}, \omega) = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\omega^2 \chi''_{M_y M_y}(\vec{k}, \omega) = k_i k_j \chi''_{J_{M_y}^i J_{M_y}^j}(\vec{k}, \omega).$$

Наконец, выполняя предельный переход $k \rightarrow 0$ в неравенстве (6.219) с учетом правила сумм (6.212), получаем искомый результат

$$\lim_{k \rightarrow 0} \chi_{M_x M_x}(\vec{k}, \omega) \geq \frac{M_0^2}{k^2 \cdot Const}. \quad (6.222)$$

В этой формуле константа определяется корреляционной функцией токов намагниченности.

На этом мы закончим краткое знакомство с доказательством теоремы об $1/k^2$ -сингулярности. Осталось подчеркнуть, что использование концепции нарушенной симметрии при выводе формулы (6.222) состоит в том, что компоненты статической восприимчивости $\chi_{M_y M_x}$ и $\chi_{M_x M_x}$ ведут себя по-разному в пределе $k \rightarrow 0$: первая остается конечной, а вторая расходится как $1/k^2$.

Обобщая полученные результаты, можно утверждать, что есть два механизма возникновения гидродинамических мод. Первый из них связан с наличием сохраняющихся физических величин (квазиинтегралов движения). Примером может служить рассмотренное выше явление спиновой диффузии. Второй механизм связан со спонтанным нарушением симметрии в основном состоянии. В этом случае также возникают длинноволновые гидродинамические моды, долгоживущие при $k \rightarrow 0$, но природа их возникновения несколько иная.

Если исходная группа симметрии является непрерывной (например инвариантность относительно трансляций или поворотов), то в результате фазового перехода, спонтанно нарушающего исходную симметрию, может возникнуть ветвь возбуждений, для которой характерно обращение энергии возбуждения в нуль в длинноволновом пределе. На это явление впервые обратил внимание Голдстоун, и высказанное им утверждение часто называют теоремой Голдстоуна. Согласно этой теореме, в релятивистской системе с нарушенной симметрией и соответствующим вырожденным вакуумным состоянием должны существовать частицы с нулевой массой.

Если искусственно перенести эту теорему на случай нерелятивистских систем, то ее формулировка звучала бы так: в системе с нарушенной симметрией должна существовать ветвь элементарных возбуждений без энергетической щели. Впоследствии выяснилось, что в такой формулировке теорема неубедительна и имеются некоторые контрпримеры. Поэтому в работе Р. Ланге «Нерелятивистский аналог теоремы Голдстоуна» (перевод этой работы см. в сборнике [50]) сформулированы некоторые ограничения на характер взаимодействия между частицами в такой системе. В частности, оказалось, что далекодействующее кулоновское взаимодействие может препятствовать возникновению гидродинамических мод.

Примерами голдстоуновских мод в твердых телах могут служить магноны в ферромагнитных (антиферромагнитных) материалах (сферическая симметрия исходного гамильтониана нарушается спонтанной ориентацией магнитного момента),

три ветви акустических фононов (инвариантность относительно бесконечно малых трансляций атомов по трем взаимно перпендикулярным направлениям нарушена в результате их упорядочения в кристаллическую решетку), сверхтекучий гелий (нарушенной в данном случае является калибровочная инвариантность [44]).

Теорема Голдстоуна содержит лишь общее утверждение, что при нарушении непрерывной симметрии можно ожидать появления длинноволновой ветви, не содержащей щели в спектре при $k \rightarrow 0$. Она не исключает, что такие моды могут появиться и по другим причинам. Поскольку в длинноволновом пределе, когда длина волны становится очень большой, применимо гидродинамическое описание возбуждений, то моды Голдстоуна есть не что иное, как гидродинамические моды. Как указывалось выше, гидродинамическое поведение основано на существовании сохраняющихся величин. Наличие голдстоуновских мод также можно связать с сохраняющимися величинами, в качестве которых выступают генераторы преобразования той симметрии, которая нарушается при фазовом переходе. Например, в случае магнонов генератором преобразований может служить оператор вращений спиновых моментов в координатном пространстве на бесконечно малый угол. Поскольку гамильтониан системы в модели Гейзенберга инвариантен относительно бесконечно малых вращений в координатном пространстве, этот оператор является сохраняющейся величиной.

Более полная информация по вопросам, затронутым в § 13, 14, содержится в работе Д. Форстера [44].

Глава 7

ОТКЛИК СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ НА СЛАБОЕ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЕ ПОЛЕ

§ 1. Постановка задачи. Граничное условие для НСО

В настоящее время хорошо разработана теория линейной реакции равновесной системы на внешнее возмущение механического типа (см. главу 5). Эта теория успешно применяется для решения задач физической кинетики в системах, состояние которых слабо возмущается внешним воздействием. При таком подходе кинетические коэффициенты выражаются через равновесные корреляционные функции, для вычисления которых могут быть использованы современные методы статистической механики (см. главы 5 и 6).

Ситуация радикальным образом меняется, если нужно найти отклик системы, которая уже является неравновесной, на дополнительное слабое измерительное поле. До сих пор такие задачи решаются исключительно с использованием метода кинетических уравнений [27] (см. также главу 4), а методы неравновесной статистической механики практически не используются.

В настоящей главе сформулирована теория линейного отклика неравновесной системы на слабое измерительное поле, имеющая правильный предельный переход к случаю слабонеравновесных систем и позволяющая выразить кинетические коэффициенты через корреляционные функции, которые вычисляются с использованием неравновесного распределения. В качестве примера приведен расчет коэффициента электропроводности сильнонеравновесной системы электронов и показано

совпадение этих результатов с известными результатами вычисления кинетических коэффициентов для неравновесных систем, полученных на основе кинетического уравнения в главе 4.

Будем считать, что до включения измерительного поля система уже находилась в неравновесном состоянии, которое описывалось НСО $\rho^0(t, 0)$. В отличие от метода построения НСО в предыдущей главе, в этом параграфе мы познакомим читателя с альтернативной формой записи НСО, предложенной Д. Н. Зубаревым [36]:

$$\begin{aligned}\rho^0(t, 0) &= \exp\{-\overline{\Phi(t)} - \overline{P^+ F(t)}\} \equiv \exp\{-\overline{S_0(t, 0)}\}, \\ \overline{\Phi(t)} &= \ln \text{Sp}\{\exp\{-\overline{P^+ F(t)}\}\}, \quad \overline{S_0(t, 0)} = \overline{\Phi(t)} + \overline{P^+ F(t)}, \\ \overline{P^+ F(t)} &= \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{\epsilon t_1\} \exp\{iL t_1\} P^+ F(t + t_1).\end{aligned}\quad (7.1)$$

Использованные при записи формулы (7.1) обозначения совпадают с обозначениями, принятыми в главе 6. По-прежнему оператор P^+ обозначает вектор-столбец базисных операторов, а $F(t)$ — вектор-строку сопряженных им термодинамических сил.

В методике построения НСО, которая рассматривалась в предыдущей главе, операции временного сглаживания подвергался квазиравновесный статистический оператор $\rho_q(t, 0) = \exp\{-S(t, 0)\}$, а в альтернативном подходе (7.1) НСО строится как каноническое распределение квазиинтегралов движения и, таким образом, сглаживанию подвергается оператор энтропии. В работах В. П. Калашникова и Д. Н. Зубарева показано, что два этих метода построения неравновесного статистического распределения полностью эквивалентны [43].

Возможность записи НСО в форме (7.1) легко аргументировать, если переформулировать схему построения НСО, изложенную в предыдущей главе.

Действительно, как было показано, важную роль в построении НСО играет граничное условие, которому должен удовлетворять статистический оператор в момент включения внешних воздействий (этот момент отнесен в $-\infty$). В данном случае роль граничного условия сводится к тому, что с помощью него отбирается определенный тип решения уравнения Лиувилля, в котором временная зависимость физических величин будет

функционалом квазиинтегралов движения, исходно включенных в квазиравновесное распределение ρ_q . Эта идея представляется достаточно продуктивной и используется в физической кинетике достаточно давно (вспомните метод решения кинетического уравнения методом моментов). Чтобы построить НСО в форме (7.1), вместо граничного условия (6.46) следует записать аналогичные условия для $\ln \rho^0(t, 0)$

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp\{it_1 L\} \ln \rho_q(t + t_1, 0) = \lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp\{it_1 L\} \ln \rho^0(t + t_1, 0). \quad (7.2)$$

Повторяя выкладки, которые привели нас от (6.46) к (6.52), можно получить запись НСО в форме (7.1).

Обращаем внимание на то, что в этой главе мы ввели другое обозначение для квазиравновесного распределения — $\rho_q(t, 0)$, поскольку черта сверху здесь используется для обозначения операции временного сглаживания (см. формулу (7.1)).

Найдем уравнение Лиувилля для НСО (7.1). Применяя теорему Абеля (6.47), запишем граничное условие (7.2) в интегральной форме

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) e^{iL t_1} \ln \rho_q(t + t_1, 0) dt_1 = \\ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) e^{iL t_1} \ln \rho^0(t + t_1, 0) dt_1. \end{aligned}$$

Используя введенные обозначения для операции временного сглаживания (7.1), этот результат можно записать более компактно:

$$\overline{\ln \rho_q(t, 0)} = \overline{\ln \rho^0(t, 0)}. \quad (7.3)$$

Выполняя интегрирование по частям в правой части

уравнения (7.3)

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) e^{iL t_1} \ln \rho^0(t + t_1, 0) dt_1 = \\
 & = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 e^{iL t_1} \ln \rho^0(t + t_1, 0) \frac{d}{dt_1} \exp(\epsilon t_1) dt_1 = \\
 & = \ln \rho^0(t, 0) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) e^{iL t_1} \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} + iL \right\} \ln \rho^0(t + t_1, 0) dt_1,
 \end{aligned}$$

потребуем, чтобы $\ln \rho^0(t, 0)$ удовлетворял уравнению Лиувилля в том смысле, что

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} + iL \right\} \ln \rho^0(t + t_1) = 0. \quad (7.4)$$

Тогда получаем

$$\overline{\ln \rho^0(t, 0)} = \ln \rho^0(t, 0). \quad (7.5)$$

Необходимо отметить, что равенство (7.4), как и аналогичное равенство нулю интеграла (6.51), является постулатом теории. Этот постулат приводит к тому, что НСО (7.1) удовлетворяет не уравнению Лиувилля, а уравнению с бесконечно малым источником в правой части, в идеализированной форме учитывающему контакт системы с термостатом после включения взаимодействия и отбирающему запаздывающие решения уравнения Лиувилля.

Обращает на себя внимание тот факт, что операция временного сглаживания (7.1), примененная к величине $\ln \rho^0(t, 0)$, оставляет ее без изменения, т.е. эта операция обладает свойствами оператора проектирования (в том смысле, что повторное проектирование не изменяет результата).

Сравнивая (7.3) и (7.5), находим явное выражение для НСО:

$$\overline{\ln \rho_q(t, 0)} = \ln \rho^0(t, 0). \quad (7.6)$$

Таким образом, мы показали, как может быть построено НСО в альтернативной форме (7.1). Осталось получить уравнение движения, которому оно удовлетворяет.

Для этих целей продифференцируем по времени t левую и правую части уравнения (7.6). В результате получаем

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 \exp(\epsilon t_1) e^{iL t_1} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho_q(t + t_1, 0) dt_1 = \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho^0(t, 0).$$

В левой части этого уравнения можно заменить производную по t на производную по t_1 и затем выполнить интегрирование по частям. Тогда с учетом результата (7.6) легко получаем уравнение движения для $\ln \rho^0(t, 0)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL \right) \ln \rho^0(t, 0) = -\epsilon (\ln \rho^0(t, 0) - \ln \rho_q(t, 0)). \quad (7.7)$$

Заметим, что в этом варианте метода НСО уравнению (7.7) с источниками в правой части удовлетворяет не НСО $\rho^0(t, 0)$, а его логарифм $\ln \rho^0(t, 0)$.

Полученный результат (7.7) согласуется с исходным предположением (7.4), и условие (7.4) выполняется автоматически, если принять во внимание уравнение движения (7.7) и граничные условия (7.3). Таким образом, уравнения (7.7) и (7.4) по существу являются тождественными.

В этой главе мы полагаем, что неравновесное распределение $\rho^0(t, 0)$ уже известно и не рассматриваем вопрос о нахождении величин $F(t)$ и средних значений базисных операторов P^+ . Способ нахождения этих величин обсуждался в § 10 предыдущей главы.

Пусть на систему, неравновесное состояние которой задается распределением (7.1), действует дополнительное механическое возмущение $H_{\mathcal{F}}(t) = -A^+ \mathcal{F}(t)$, где A^+ — некоторый оператор, $\mathcal{F}(t)$ — напряженность поля внешних сил, реакцию на воздействие которых нужно определить. Будем полагать, что это возмущение включается в момент времени $t = -\infty$ (естественно, что бесконечность в данном контексте понимается как величина, которая много больше характерных релаксационных временных масштабов задачи).

Под воздействием этого возмущения в системе возникает новое неравновесное состояние, которое уже не может быть в общем случае описано в терминах старого базисного набора операторов P^+ , и для его описания требуется расширить этот набор, добавив в него новые операторы \mathcal{M}^+ и новые термодинамические параметры $\varphi(t)$.

Сформулируем граничное условие, которому удовлетворяет статистический оператор $\rho(t, 0)$, описывающий новое неравновесное состояние системы при $t \rightarrow -\infty$.

Ясно, что нельзя просто перенести на этот случай граничное условие (7.2), сформулированное выше (см. также выражение (6.46) в предыдущей главе), поскольку в пределе при $t \rightarrow -\infty$ неравновесное распределение $\rho(t, 0)$ должно перейти в другое неравновесное распределение $\rho^0(t, 0)$, а не в квазиравновесное, как это было ранее.

Для формулировки подходящего условия рассмотрим свободную релаксацию распределения $\rho(t, 0)$ при выключении внешнего воздействия $\mathcal{F}(t)$ в некоторый момент времени (без каких-либо ограничений можно считать, что $t \rightarrow -\infty$).

При выключении внешнего воздействия термические возмущения, которые описываются функциями $\varphi(t)$, не обращаются сразу в нуль, а медленно меняются с некоторым характерным временем релаксации τ . Рассматривая $\mathcal{M}^+\varphi(t)$ как некоторое внутреннее поле, которое действует на систему, запишем уравнение, которому будет удовлетворять $\ln \bar{\rho}(t, 0)$ при $t \rightarrow -\infty$, т. е. сразу после выключения возмущения $H_{\mathcal{F}}(t) = -A^+\mathcal{F}(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \ln \bar{\rho}(t, 0) + \frac{1}{i\hbar} [\ln \bar{\rho}, H + \mathcal{M}^+\varphi(t)] = \\ = -\epsilon (\ln \bar{\rho}(t, 0) - \ln \rho^0(t, 0)). \end{aligned} \quad (7.8)$$

Уравнение (7.8) записано по аналогии с уравнением (7.7), если принять, что внутреннее поле, которое, безусловно, есть, действует как поправка к гамильтониану. В действительности уравнение (7.8) является постулатом теории, и к его обоснованию мы вернемся несколько позже.

Пользуясь методикой, изложенной в главе 6 (см. вывод формулы (6.115) в § 7 предыдущей главы), уравнение (7.8) для логарифма НСО можно преобразовать в интегральное уравнение,

итерируя которое по малому параметру $\mathcal{M}^+\varphi(t)$, в линейном приближении получаем

$$\overline{S(t, 0)} = \overline{S_0(t, 0)} - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} [\mathcal{M}^+, \overline{S_0(t + t_1, 0)}] \varphi(t), \quad (7.9)$$

где

$$\overline{S_0(t, 0)} = -\ln \rho^0(t, 0); \quad \overline{S(t, 0)} = -\ln \bar{\rho}(t, 0).$$

При записи выражения (7.9) мы учли, что, по предположению, функции $\varphi(t)$ являются медленно изменяющимися функциями времени t и поэтому пренебрегли зависимостью ее от t_1 . Запишем теперь интересующее нас граничное условие, полагая, что в пределе при $t \rightarrow -\infty$ истинное распределение должно совпадать с тем результатом, который мы получили, решая уравнение (7.8)

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp\{iLt_1\} \rho(t + t_1, 0) = \lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \exp\{iLt_1\} \exp\{\overline{-S(t + t_1, 0)}\}, \quad (7.10)$$

где величина

$$\bar{\rho}(t, 0) \equiv \exp\{\overline{-S(t, 0)}\}$$

в дальнейшей теории играет такую же роль, какую выполняло квазиравновесное распределение в предыдущей главе.

Поскольку нас интересуют лишь линейные по параметру $\mathcal{M}^+\varphi(t)$ члены, то выражение для распределения $\bar{\rho}(t, 0)$ можно разложить в ряд по этому параметру, ограничившись линейным приближением. В итоге получается выражение, которое мы и будем использовать:

$$\bar{\rho}(t, 0) = \rho^0(t, 0) - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} [\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1, 0)] \varphi(t). \quad (7.11)$$

Следует обратить внимание на то, что распределение (7.11) не является квазиравновесным и похожее обозначение $\bar{\rho}(t, 0)$ не должно вводить в заблуждение.

Результат (7.11) можно получить значительно проще. Мы выбрали столь длинный путь лишь для того, чтобы иметь возможность познакомить читателя с альтернативным вариантом метода НСО.

Получим теперь результат (7.11) в рамках метода НСО, развитого в предыдущей главе. Естественно, при таком изложении неизбежны некоторые повторения, но надеемся, что и они будут полезны для читателя.

Рассмотрим неравновесную систему с распределением

$$\rho^0(t, 0) = \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} \rho_q(t + t_1),$$

где

$$\rho_q(t, 0) = \exp\{-S_0(t, 0)\}, \quad S_0(t, 0) = \Phi(t) + P^+ F(t).$$

Если на систему действует внешнее поле, задаваемое поправкой к гамильтониану $H_{\mathcal{F}}(t) = -A^+ \mathcal{F}(t)$, то в системе сформируется новое неравновесное состояние, которое описывается расширенным набором базисных операторов. Пусть при этом в число базисных операторов добавляются операторы \mathcal{M}^+ , а к термодинамическим силам $F(t)$ добавятся новые силы $\varphi(t)$. Будем считать, что новое распределение задается оператором $\rho(t, 0)$.

Встает вопрос, как найти вид НСО $\rho(t, 0)$. Метод, развитый в главе 6, как это уже отмечалось ранее, на этот случай непосредственно не обобщается, поскольку при выключении внешнего измерительного поля неравновесное распределение останется (хотя и несколько видоизменится), так как в системе есть другие возмущения, определяющие исходное неравновесное состояние.

Мы можем воспользоваться лишь общей методологией метода НСО для вывода распределения $\rho(t, 0)$. Для этого нам необходимо правильно записать аналог выражения (6.46), задающего граничное условие для НСО.

Для получения такого граничного условия рассмотрим эволюцию системы после выключения в момент времени $t = -\infty$

внешнего поля, отклик на которое мы ищем. Обозначим статистическое распределение системы, возникающее после выключения поля, величиной $\bar{\rho}(t, 0)$. Будем считать, что уравнение, которому удовлетворяет распределение $\bar{\rho}(t, 0)$, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}(t, 0) + \frac{1}{i\hbar} [\bar{\rho}(t, 0), H + \mathcal{M}^+ \varphi(t)] = \\ = -\epsilon (\bar{\rho}(t, 0) - \rho^0(t, 0)). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Если произвести линеаризацию уравнения (7.12) по малому параметру $\mathcal{M}^+ \varphi(t)$ и записать формальное решение (более подробно эта процедура формального решения описана в § 2 главы 5), то получаем

$$\bar{\rho}(t, 0) = \rho^0(t, 0) - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} [\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1, 0)] \varphi(t),$$

что полностью совпадает с выражением (7.11). Как и раньше, функция $\varphi(t)$ считается медленно меняющейся по сравнению с операторным ядром $[\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1, 0)]$, и поэтому мы пренебрегли зависимостью величины $\varphi(t + t_1)$ от t_1 .

Рассмотрим, какие есть основания для записи уравнений (7.8), (7.12). Мы отыскиваем такое распределение $\bar{\rho}(t, 0)$, из которого в результате эволюции с полным гамильтонианом $H + H_{\mathcal{F}}(t) = H - A^+ \mathcal{F}(t)$ возникает неравновесное распределение $\rho(t, 0)$, содержащее новые параметры $\mathcal{M}^+ \varphi(t)$. По этой причине $\bar{\rho}(t, 0)$ удовлетворяет уравнению, в которое добавлено внутреннее поле $\mathcal{M}^+ \varphi(t)$. Таким образом, получающееся решение для $\bar{\rho}(t, 0)$ будет функционалом полного набора неравновесных параметров.

Поскольку конечный физический результат не должен быть чувствительным к виду конкретной функциональной зависимости $\bar{\rho}(t, 0)$ от параметров P^+ и \mathcal{M}^+ , мы выбрали $\bar{\rho}(t, 0)$ так, чтобы выполнялся естественным образом переход к результатам теории линейного отклика для равновесной системы, с одной стороны, а с другой стороны – распределение $\bar{\rho}(t, 0)$ обладало нужными для построения нового НСО свойствами.

Развиваемый ниже подход линейного отклика исходно неравновесной системы на слабое измерительное поле можно построить другим способом, более формально, вообще не решая проблемы построения НСО $\rho(t, 0)$ (этот подход будет продемонстрирован позднее).

После того как мы обсудили граничное условие для НСО (7.10), запишем уравнение Лиувилля, которому будет удовлетворять это распределение:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(t) \right) \rho(t, 0) = -\epsilon (\rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)). \quad (7.13)$$

Вывод уравнения (7.13) совершенно аналогичен выводу уравнения (6.54).

Учитывая, что

$$iL(t)B = (iL + iL_{\mathcal{F}})B = \frac{1}{i\hbar} [B, H + H_{\mathcal{F}}(t)],$$

воспользуемся интегральным уравнением для НСО (6.115) и ограничимся при его решении линейными членами по малой поправке $H_{\mathcal{F}}(t)$, описывающей взаимодействие системы с внешним полем. В результате получаем простое выражение

$$\rho(t, 0) = \rho^1(t, 0) - \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} iL_{\mathcal{F}} \rho^1(t + t_1, 0),$$

где
$$\rho^1(t, 0) = \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} \bar{\rho}(t + t_1, 0). \quad (7.14)$$

В следующем параграфе мы, используя выражение (7.14), построим выражение для линейного отклика неравновесной системы и выразим обобщенную восприимчивость системы через неравновесные корреляционные функции, вычисление которых производится с помощью статистического оператора, описывающего исходное неравновесное распределение.

§ 2. Обобщенная восприимчивость неравновесной системы

Определим отклик неравновесной системы как изменение среднего значения базисного оператора \mathcal{M}

$$\Delta\langle\mathcal{M}\rangle_t = \text{Sp}\{\mathcal{M}\bar{\rho}(t, 0)\} - \text{Sp}\{\mathcal{M}\rho^0(t, 0)\}, \quad (7.15)$$

где $\rho^0(t, 0)$ — статистическое распределение, описывающее исходный неравновесный процесс.

Если подставить в формулу (7.15) выражение (7.11) для $\bar{\rho}(t, 0)$, то отклик можно записать в виде

$$\Delta\langle\mathcal{M}\rangle_t = -\langle\mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t \varphi(t). \quad (7.16)$$

При записи этого выражения мы ввели новое «скалярное» произведение операторов по неравновесному состоянию системы, которое является обобщением скалярного произведения Мори и переходит в него для случая равновесного распределения

$$\langle\mathcal{B}, \mathcal{M}^+\rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{\mathcal{B} e^{iLt_1} [\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1, 0)]\}. \quad (7.17)$$

где \mathcal{B} и \mathcal{M} — некоторые операторы.

Формула (7.16) определяет отклик системы на внутреннее поле $\varphi(t)$, а нас интересует отклик на внешнее приложенное поле $\mathcal{F}(t)$. Для того чтобы найти интересующий нас отклик, необходимо выразить $\varphi(t)$ через $\mathcal{F}(t)$.

Связь этих функций легко можно получить из условия

$$\text{Sp}\{\mathcal{M}[\rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)]\} = 0,$$

которому, в соответствии с общими идеями метода НСО, удовлетворяет набор базисных операторов \mathcal{M} .

Найдем выражение для разности $\Delta\rho(t, 0) = \rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)$. Для этого проинтегрируем выражение $\rho^1(t, 0)$ в формуле (7.14)

по частям. В результате получаем

$$\begin{aligned}\rho^1(t, 0) &= \int_{-\infty}^0 \exp\{iLt_1\} \bar{\rho}(t + t_1, 0) \frac{d}{dt_1} \exp\{\epsilon t_1\} dt_1 = \\ &= \bar{\rho}(t, 0) - \int_{-\infty}^0 \exp\{(\epsilon + iL)t_1\} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + iL \right\} \bar{\rho}(t + t_1, 0) dt_1.\end{aligned}$$

Подставим в последний интеграл выражение для $\bar{\rho}(t + t_1, 0)$ (7.11) и учтем, что для НСО $\rho^0(t + t_1, 0)$ выполняется условие, аналогичное условию (7.4) для $\ln \rho^0(t + t_1, 0)$. Тогда, производя элементарные выкладки, получаем

$$\begin{aligned}\rho^1(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_2} e^{iL(t_1+t_2)} \times \\ &\times \{ [\dot{\mathcal{M}}^+, \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)] \varphi(t + t_1) + \\ &+ [\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)] \dot{\varphi}(t + t_1) \}.\end{aligned}$$

Следовательно, для величины $\Delta\rho(t, 0) = \rho(t, 0) - \bar{\rho}(t, 0)$ получаем

$$\begin{aligned}\Delta\rho(t, 0) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_2} e^{iL(t_1+t_2)} \times \\ &\times \{ [\dot{\mathcal{M}}^+, \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)] \varphi(t + t_1) + \\ &+ [\mathcal{M}^+, \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)] \dot{\varphi}(t + t_1) \} - \\ &- \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon+iL)t_1} [A^+, \rho^0(t + t_1, 0)] \mathcal{F}(t + t_1).\end{aligned}\quad (7.18)$$

Для продолжения исследования удобно перейти от временного к частотному представлению. Будем считать, что функция $\mathcal{F}(t)$ изменяется по гармоническому закону. Поскольку нас интересует линейное приближение, то можно принять, что и $\varphi(t)$ будут изменяться также по гармоническому закону. Вводя обозначения

$$\mathcal{F}(t) = \mathcal{F}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad \varphi(t) = \varphi(\omega) e^{-i\omega t}$$

$$\langle \mathcal{M} \rangle_t^\omega = \text{Sp}\{\mathcal{M}\rho^0(t)\}e^{-i\omega t},$$

из условия $\text{Sp}\{\mathcal{M}\Delta\rho(t)\} = 0$ с учетом (7.18) получаем связь между $\varphi(\omega)$ и $\mathcal{F}(\omega)$:

$$\begin{aligned} [\langle \mathcal{M}, \dot{\mathcal{M}}^+ \rangle_t^\omega - i\omega \langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+ \rangle_t^\omega] \varphi(\omega) = \\ = [\langle \mathcal{M}, \dot{A}^+ \rangle_t^\omega + \epsilon \langle \mathcal{M}, A^+ \rangle_t^\omega] \mathcal{F}(\omega). \end{aligned} \quad (7.19)$$

Появившаяся в выражении (7.19) корреляционная функция, зависящая от частоты, имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+ \rangle_t^\omega = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon' t_2} \times \\ \times \text{Sp}\{\mathcal{M}e^{iL(t_1+t_2)}[\mathcal{M}^+, \rho^0(t+t_1+t_2, 0)]\}. \end{aligned} \quad (7.20)$$

В формуле (7.20) ϵ и ϵ' стремятся к нулю после выполнения термодинамического предельного перехода. При выводе уравнения связи (7.19) мы преобразовали последний член уравнения (7.18) с помощью тождества

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon + iL)t_1} [\dot{A}, \rho^0(t+t_1, 0)] = \frac{1}{i\hbar} [A, \rho^0(t, 0)] - \\ - \epsilon \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon + iL)t_1} [A, \rho^0(t+t_1, 0)], \end{aligned} \quad (7.21)$$

которое легко доказывается, если считать $\rho^0(t, 0)$ точным интегралом уравнения Лиувилля. Действительно, преобразуем последний интеграл в формуле (7.21):

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{iLt_1} [A, \rho^0(t+t_1, 0)] \frac{d}{dt_1} e^{\epsilon t_1} dt_1 = \frac{1}{i\hbar} [A, \rho^0(t, 0)] - \\ - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon + iL)t_1} \left\{ \frac{\partial}{\partial t_1} + iL \right\} [A, \rho^0(t+t_1, 0)]. \end{aligned}$$

Если учесть, как уже указывалось, что $\rho^0(t + t_1, 0)$ удовлетворяет равенству, аналогичному (7.4), то тождество (7.21) из последнего соотношения получается незамедлительно. Тождество (7.21) можно считать обобщением тождества Кубо на случай сильнонеравновесных систем.

Полученные результаты (7.16) и (7.19) позволяют построить выражение для изменения среднего значения базисного оператора \mathcal{M} в результате включения внешнего поля $\mathcal{F}(\omega)$

$$\Delta\langle\mathcal{M}\rangle_t^\omega = \chi_{\mathcal{M}A}(t, \omega)\mathcal{F}(\omega) \quad (7.22)$$

и определить компоненты обобщенной восприимчивости

$$\chi_{\mathcal{M}A}(t, \omega) = \chi_{\mathcal{M}\mathcal{M}}(t, 0) \frac{\langle\mathcal{M}, \dot{A}^+\rangle_t^\omega + \epsilon\langle\mathcal{M}, A^+\rangle_t^\omega}{\langle\mathcal{M}, \dot{\mathcal{M}}^+\rangle_t^\omega - i\omega\langle\mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega}. \quad (7.23)$$

$\chi_{\mathcal{M}\mathcal{M}}(t, 0)$ представляет собой статический адмиттанс и выражается через неравновесную корреляционную функцию

$$\chi_{\mathcal{M}\mathcal{M}}(t, 0) = -\langle\mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t. \quad (7.24)$$

Совершенно аналогично можно записать и выражение для изменения среднего значения некоторого другого оператора B , не принадлежащего к набору базисных операторов:

$$\Delta\langle B\rangle_t = \text{Sp}\{B[\rho(t, 0) - \rho^0(t, 0)]\}.$$

Очевидно, что эту величину можно записать следующим образом:

$$\text{Sp}\{B[\rho(t, 0) - \rho^0(t, 0)]\} = \text{Sp}\{B\Delta\rho(t, 0)\} + \text{Sp}\{B[\bar{\rho}(t, 0) - \rho^0(t, 0)]\}.$$

Учитывая, что величина $\Delta\rho(t, 0)$ определяется соотношением (7.18), а величина $\bar{\rho}(t, 0) - \rho^0(t, 0)$ — соотношением (7.11), используя определение корреляционной функции (7.20), получаем

$$\begin{aligned} \Delta\langle B\rangle_t^\omega = & -[\langle B, \mathcal{M}^+\rangle_t - \langle B, \dot{\mathcal{M}}^+\rangle_t^\omega + \\ & + i\omega\langle B, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega]\varphi(\omega) - [\langle B, \dot{A}^+\rangle_t^\omega + \epsilon\langle B, A^+\rangle_t^\omega]\mathcal{F}(\omega). \end{aligned}$$

Подставляя в последнюю формулу значение $\varphi(\omega)$, найденное из выражения (7.19), получаем

$$\Delta\langle B\rangle_t^\omega = \chi_{BA}(t, \omega)\mathcal{F}(\omega), \quad (7.25)$$

а обобщенная восприимчивость $\chi_{BA}(t, \omega)$ в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(t, \omega) = & -\epsilon\langle B, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega \cdot \left[\langle \mathcal{M}, \dot{\mathcal{M}}^+\rangle_t^\omega - i\omega\langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega \right]^{-1} \times \\ & \times \left[\langle \mathcal{M}, \dot{A}^+\rangle_t^\omega + \epsilon\langle \mathcal{M}, A^+\rangle_t^\omega \right] - \left[\langle B, \dot{A}^+\rangle_t^\omega + \epsilon\langle B, A^+\rangle_t^\omega \right]. \end{aligned} \quad (7.26)$$

При записи формулы (7.26) мы воспользовались соотношением

$$\langle B, \dot{\mathcal{M}}^+\rangle_t^\omega = \langle B, \mathcal{M}^+\rangle_t - (\epsilon - i\omega)\langle B, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega,$$

которое легко проверяется интегрированием левой части по частям.

Интересно, что, несмотря на особую роль операторов \mathcal{M} в излагаемой теории, выражение для динамической восприимчивости $\chi_{\mathcal{M}A}(t, \omega)$ легко получается из формулы (7.26), если в последней просто заменить оператор B на оператор \mathcal{M} . Действительно, если положить $B = \mathcal{M}$, то из приведенной выше последней формулы следует, что

$$\epsilon\langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega = \langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t - \langle \mathcal{M}, \dot{\mathcal{M}}^+\rangle_t^\omega + i\omega\langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega.$$

Если подставить полученный результат для $\epsilon\langle \mathcal{M}, \mathcal{M}^+\rangle_t^\omega$ в формулу (7.26), то сразу видно что, если оператор B совпадает с оператором \mathcal{M} , то обобщенная восприимчивость $\chi_{BA}(t, \omega)$ переходит в обобщенную восприимчивость $\chi_{\mathcal{M}A}(t, \omega)$.

Завершая этот параграф, необходимо сравнить результаты (7.23), (7.26) с известными результатами, которые получаются для отклика равновесных систем.

Покажем, что скалярное произведение операторов, определенное нами соотношением (7.17), переходит в случае равновесного распределения в обычное скалярное произведение Мори (6.89). Чтобы в этом убедиться, достаточно преобразовать

(7.17), воспользовавшись тождеством Кубо, и затем произвести интегрирование по частям:

$$\langle B, \mathcal{M}^+ \rangle = \beta \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ B e^{iL t_1} \rho_0^\tau \dot{\mathcal{M}}^+ \rho_0^{1-\tau} \} = \beta(B, \mathcal{M}^+),$$

где β – обратная температура. Последнее соотношение справедливо, если операторы B и \mathcal{M} удовлетворяют принципу ослабления корреляций:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ B e^{iL t_1} \mathcal{M}^+ \} = \langle B \rangle_0 \langle \mathcal{M}^+ \rangle_0.$$

Это требование, по-видимому, не является слишком жестким ограничением на природу операторных величин B и \mathcal{M} для систем с «перемешиванием», в которых только и возможны релаксационные явления. Кроме того, мы полагаем, что $\langle B \rangle_0 = \langle \mathcal{M}^+ \rangle_0 = 0$.

Итак, мы показали, что скалярное произведение (7.17) переходит в обычное скалярное произведение операторов Мори, если неравновесное распределение $\rho^0(t, 0)$ заменить на равновесное ρ_0 .

Для того чтобы доказать, что выражения (7.23), (7.26) имеют правильный предельный переход к случаю линейного отклика равновесных систем, необходимо вывести формулы линейного отклика заново, пользуясь стандартной методикой НСО, рассмотренной в главе 6. Поскольку это не представляет никаких проблем и является прекрасным упражнением, мы предлагаем читателям решить эту задачу самостоятельно, указав лишь на то, что получающийся результат для изотермического отклика равновесной системы имеет точно такую же структуру, как и формула (7.23), отличаясь лишь заменой скалярного произведения (7.17) на скалярное произведение (6.89).

§ 3. Оператор проектирования для неравновесных систем. Магнитная восприимчивость

Рассмотрим применение общих формул теории линейного отклика неравновесных систем (7.23), (7.26) для вычисления магнитной восприимчивости.

Пусть на систему магнитных моментов \vec{M} действует переменное магнитное поле $\vec{B}(t)$. Для перехода к этому случаю в общих формулах предыдущего раздела следует произвести замены:

$$A^+ \mathcal{F}(t) \rightarrow M^+ B(t); \quad \mathcal{M} \varphi(t) \rightarrow M^+ b(t),$$

где M — операторный вектор-столбец с компонентами полного магнитного момента электронов, B — вектор-строка, составленная из компонент вектора магнитной индукции внешнего электромагнитного поля. Для простоты пренебрегаем пространственной неоднородностью электромагнитного поля.

Аналогично определено и произведение $M^+ b(t)$, где внутреннее неравновесное поле $b(t)$ представляет собой индуцированное внешним полем термическое возмущение, связанное с намагниченностью системы $m(t) = \Delta \langle M \rangle_t$ соотношением (7.16):

$$m(t) = -\langle M, M^+ \rangle_t b(t) \quad \text{или} \quad m(t, \omega) = -\langle M, M^+ \rangle_t b(\omega). \quad (7.27)$$

Определим динамическую магнитную восприимчивость соотношением

$$m(t, \omega) = \chi(t, \omega) B(\omega).$$

Для этого воспользуемся формулами (7.19) и (7.27). Подставляя в формулу (7.19) $\mathcal{M} = M$, $\varphi(\omega) = b(\omega)$ и выражая $b(\omega)$ с помощью формулы (7.27) $b(\omega) = -\langle M, M^+ \rangle_t^{-1} m(t, \omega)$, получаем

$$\begin{aligned} -[\langle M, \dot{M}^+ \rangle_t^\omega - i\omega \langle M, M^+ \rangle_t^\omega] \langle M, M^+ \rangle_t^{-1} \cdot m(t, \omega) = \\ = [\langle M, \dot{M}^+ \rangle_t^\omega + \epsilon \langle M, M^+ \rangle_t^\omega] B(\omega). \end{aligned}$$

Последняя формула позволяет легко определить выражение для компонент тензора магнитной восприимчивости

$$\chi(t, \omega) = \chi(t, 0) \frac{1}{\overline{T}(t, \omega) - i\omega} [\overline{T}(t, \omega) + \epsilon], \quad (7.28)$$

где мы снова, как и в случае отклика равновесных систем (см. формулу (6.72)), ввели в рассмотрение транспортную матрицу

$$\bar{T}(t, \omega) = \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle_t^\omega} \langle M, \dot{M}^+ \rangle_t^\omega \quad (7.29)$$

и статическую магнитную восприимчивость системы

$$\chi(t, 0) = -\langle M, M^+ \rangle_t. \quad (7.30)$$

Зависимость магнитной восприимчивости от времени t связана с временной зависимостью исходного неравновесного распределения.

Введенная формулой (7.29) транспортная матрица играет в неравновесном случае точно такую же роль, как и в случае отклика равновесной системы. В частности, в режиме свободной релаксации, когда амплитуда внешнего магнитного поля равна нулю, транспортная матрица определяет спектр нормальных мод системы (6.75). В полной аналогии с равновесным случаем (6.76) – (6.79) можно ввести и неравновесную функцию Грина соотношением

$$\bar{G}(t, \omega) = \frac{1}{\bar{T}(t, \omega) - i\omega + \epsilon} = \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle_t^\omega} \langle M, M^+ \rangle_t^\omega. \quad (7.31)$$

Таким образом, дальнейшая проблема вычисления магнитной восприимчивости сводится к нахождению транспортной матрицы $\bar{T}(t, \omega)$ или функции Грина $\bar{G}(t, \omega)$, что, в свою очередь, требует применения техники операторов проектирования, пригодной для использования в случае неравновесных систем.

Такой оператор проектирования можно построить по аналогии с оператором проектирования Мори (6.88), (6.91), просто заменив скалярное произведение операторов Мори скалярным произведением, определенным соотношением (7.17). В итоге получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_t A &= \langle A, M^+ \rangle_t \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle_t} M, \\ \mathcal{P}_t A^+ &= M^+ \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle_t} \langle M, A^+ \rangle_t, \\ \mathcal{P}_t(1 - \mathcal{P}_t)A &= 0, \quad \mathcal{P}_t M = M, \quad \mathcal{P}_t^2 M = M. \end{aligned} \quad (7.32)$$

В определении (7.32) индекс t у оператора проектирования указывает на то, что такой оператор в общем случае будет зависеть от времени, поскольку от времени зависит исходное неравновесное распределение. В дальнейшем будем считать, что исходное неравновесное распределение является стационарным, и опустим нижний индекс t как у оператора проектирования, так и у корреляционных функций.

Поскольку введенное скалярное произведение (7.17) при переходе к равновесию превращается в скалярное произведение Мори, то и проекционные операторы (7.32) в равновесном случае переходят в проекционные операторы (6.88). Поэтому наша задача существенно упрощается и фактически сводится к повторению выкладок, которые мы проделали в § 8 предыдущей главы. В них просто следует заменить оператор P^+ на M^+ и равновесное скалярное произведение операторов его неравновесным аналогом. В результате снова получаем

$$\begin{aligned}\bar{T}(\omega) &= i\bar{\Omega} + \bar{\Sigma}(\omega), \\ i\bar{\Omega} &= \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle} \langle M, \mathcal{P}\dot{M}^+ \rangle, \\ \bar{\Sigma}(\omega) &= \frac{1}{\langle M, M^+ \rangle} \langle f, \frac{1}{-i\omega + \epsilon + (1 - \mathcal{P})iL} f^+ \rangle, \end{aligned} \quad (7.33)$$

где $f = (1 - \mathcal{P})\dot{M}$.

Заканчивая рассмотрение проблемы вычисления магнитной восприимчивости неравновесной системы, можно подвести некоторые итоги.

Структура компонент тензора магнитной восприимчивости в неравновесном случае осталась, по существу, без изменений. Изменилось лишь определение скалярного произведения двух операторов. Так, для поперечной парамагнитной восприимчивости электронного газа из приведенных формул снова получаются выражения, имеющие точно такую же структуру, как равновесная восприимчивость, определяемая соотношениями (6.147), (6.148), отличаясь от них лишь видом скалярного произведения операторов и некоторыми обозначениями.

Вычисление неравновесных корреляционных функций представляет определенный интерес, и мы займемся их анализом на примере неравновесной электропроводности, которая будет

рассматриваться ниже, поскольку в этом случае имеются хорошо известные результаты, полученные методом кинетического уравнения, которые мы подробно обсуждали в § 11 главы 4, что позволяет произвести детальное сравнение результатов двух различных методик.

§ 4. Электропроводность сильнонеравновесной системы

Рассмотрим пример использования развитой методики вычисления линейного отклика неравновесной системы для частного случая вычисления электропроводности.

В этом случае в общих формулах § 2 этой главы следует сделать замены:

$$A^+ \rightarrow eX^\alpha, \quad \mathcal{F}(t) \rightarrow E^\alpha(t),$$

$$\mathcal{M} \rightarrow eP^\beta/m, \quad \varphi(t) \rightarrow \beta V^\beta(t).$$

Использованные здесь обозначения совпадают с аналогичными обозначениями § 7 предыдущей главы.

Для упрощения записи, где это возможно, не будем выписывать индексы тензорных величин, поскольку при конкретных вычислениях все равно будем рассматривать случай изотропного закона дисперсии и изотропного рассеяния электронов, при котором отличны от нуля лишь диагональные компоненты тензора электропроводности.

Используя уравнение (7.23), находим

$$\sigma(\omega) = -\frac{e^2}{m} \langle P, P^+ \rangle \frac{\langle P, \dot{X}^+ \rangle^\omega + \epsilon \langle P, X^+ \rangle^\omega}{\langle P, \dot{P}^+ \rangle^\omega - i\omega \langle P, P^+ \rangle^\omega}.$$

Учитывая, что $\dot{X}^+ = P^+/m$ и принимая во внимание теорему Абеля и принцип ослабления корреляций, имеем

$$\begin{aligned} \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_2} \text{Sp}\{[P, X^+(t_1 + t_2)] \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)\} = \\ = \lim_{t_2 \rightarrow -\infty} \text{Sp}\{[P, X^+(t_1 + t_2)] \rho^0(t + t_1 + t_2, 0)\} = 0. \end{aligned}$$

Тогда, если оператор P определен так, что его неравновесное среднее равно нулю, получаем, что

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \langle P, X^+ \rangle^\omega = 0.$$

Подставляя эти результаты в формулу для электропроводности, получаем

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= -\frac{e^2}{m^2} \frac{\langle P, P^+ \rangle}{\bar{T}(\omega) - i\omega}, \\ \bar{T}(\omega) &= \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle_\omega} \langle P, \dot{P}^+ \rangle^\omega. \end{aligned} \quad (7.34)$$

При записи выражения (7.34) считаем, что величины P, P^+ представляют собой вектор-строку и вектор-столбец, составленные из декартовых компонент оператора полного импульса электронов.

Используя методику проекционных операторов (см. § 8 предыдущей главы и формулу (6.137)), транспортную матрицу $\bar{T}(\omega)$ можно записать в виде суммы частотной матрицы и функции памяти: $\bar{T}(\omega) = i\bar{\Omega} + \bar{\Sigma}(\omega)$, причем

$$\begin{aligned} i\bar{\Omega} &= \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle} \langle P, \mathcal{P}\dot{P}^+ \rangle, \\ \bar{\Sigma}(\omega) &= \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle} \langle f, \frac{1}{-i\omega + \epsilon + (1 - \mathcal{P})iL} f^+ \rangle, \\ \mathcal{P}A^+ &= P^+ \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle} \langle P, A^+ \rangle, \quad f = (1 - \mathcal{P})\dot{P}. \end{aligned} \quad (7.35)$$

Формулы, приведенные выше, являются достаточно общими и справедливы для любого стационарного неравновесного распределения.

Для дальнейшего изложения конкретизируем выбор исходного неравновесного распределения. Будем считать, что это распределение характеризуется обратными температурами $\beta_k, \beta_s, \beta_p$ подсистем кристалла k, S, P (смысл обозначений подсистем k, S см. в § 10 предыдущей главы; P означает подсистему

длинноволновых фононов) и задается квазиравновесным распределением следующего вида:

$$\begin{aligned}\rho_q &= \exp\{-\Phi - \beta_k H_k - \beta_s H_s - \beta_p H_p + \beta \zeta N\}, \\ \Phi &= \ln \text{Sp}\{\exp(-\beta_k H_k - \beta_s H_s - \beta_p H_p + \beta \zeta N)\}, \\ H_k &= \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}, \quad H_s = - \sum_{\vec{p}, \sigma} \hbar \omega_s \sigma a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}, \\ H_p &= \sum_{\vec{q}, \lambda} \hbar \Omega_{q, \lambda} (b_{q, \lambda}^+ b_{q, \lambda} + 1/2), \quad \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}, \quad \omega_s = \frac{g \mu_B H}{\hbar}.\end{aligned}\tag{7.36}$$

Здесь $a_{\vec{p}\sigma}^+$, $a_{\vec{p}\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии с импульсом \vec{p} и проекцией спина $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ на ось Z . $b_{\vec{q}, \lambda}^+$, $b_{\vec{q}, \lambda}$ — операторы рождения и уничтожения фононов с волновым вектором \vec{q} и поляризацией λ . $\hbar \Omega_{q, \lambda}$ — энергия фонона, g — фактор спектроскопического расщепления, μ_B — магнетон Бора, H — напряженность классического магнитного поля.

Перейдем к анализу матрицы частот и функции памяти, определяемых выражениями (7.35)). Легко показать, что числитель частотной матрицы $\langle P, \mathcal{P} \dot{P}^+ \rangle = 0$. Поскольку в рассматриваемом случае базисными операторами являются компоненты оператора полного импульса системы электронов P^α , получаем

$$\begin{aligned}i\bar{\Omega} &= \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle} \langle P, \mathcal{P} \dot{P}^+ \rangle = \frac{1}{\langle P^\alpha, P^\beta \rangle} \langle P^\alpha, \mathcal{P} \dot{P}^\beta \rangle = \\ &= \frac{1}{\langle P^\alpha, P^\beta \rangle} \langle P^\alpha, \dot{P}^\beta \rangle.\end{aligned}$$

Хотя в этой формуле мы оставили тензорные индексы α и β , следует иметь в виду, что, в силу изотропии пространства, отличными от нуля могут быть только диагональные компоненты тензора электропроводности. Теперь легко доказать, что числитель в последней формуле равен нулю. Достаточно вспомнить определение корреляционной функции $\langle P^\alpha, \dot{P}^\beta \rangle$

и тождество (7.21).

$$\begin{aligned}\langle P^\alpha, \dot{P}^\beta \rangle &= \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\dot{P}^\beta, \rho^0(t+t_1, 0)]\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}\{P^\alpha [P^\beta, \rho^0(t, 0)]\} - \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \times \\ &\times \text{Sp}\{P^\alpha e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [P^\beta, \rho^0(t+t_1, 0)]\} = 0.\end{aligned}$$

В последнем выражении первый член равен нулю, так как компоненты оператора полного импульса коммутируют между собой. Второй равен нулю в силу того, что любые два оператора, взятые в разные моменты времени, коммутируют между собой, если разность времен стремится к бесконечности (предполагается, что операторы удовлетворяют принципу ослабления корреляций).

Рассмотрим корреляционную функцию

$$\begin{aligned}\langle P^\alpha, P^\beta \rangle &= \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [P^\beta, \rho^0(t+t_1, 0)]\} = \\ &= m \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [\dot{X}^\beta, \rho^0(t+t_1, 0)]\} = \\ &= m \text{Sp}\{P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0(t, 0)]\} - \\ &- \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha e^{iLt_1} \frac{m}{i\hbar} [\dot{X}^\beta, \rho^0(t+t_1, 0)]\} = -nm.\end{aligned}$$

Будем анализировать электропроводность в борновском приближении теории рассеяния. Это означает, что при вычислении обратного времени релаксации полного импульса электронной системы (или функции памяти $\bar{\Sigma}$) нужно ограничиться лишь членами второго порядка по взаимодействию с рассеивателями

(фононами например). В этом случае операторы проектирования в функции памяти можно опустить, поскольку их удержание означало бы учет членов четвертого порядка по взаимодействию и выше.

Сделаем еще одно упрощение и ограничимся вычислением статической электропроводности, положив $\omega = 0$. Это приближение в действительности хорошо работает при условии, когда частота внешнего электрического поля $\omega \ll 1/\tau$, что в обычных материалах хорошо выполняется вплоть до частот оптического диапазона. Кроме того, как указывалось выше, исходное неравновесное распределение предполагается стационарным и не зависящим от времени через макропараметры $\beta_k, \beta_s, \beta_p$. Поэтому в дальнейшем мы будем полагать $\rho^0(t + t_1 + t_2, 0) = \rho^0$.

Подставляя полученные результаты в формулу (7.34) для компонент тензора электропроводности, получаем

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}; \quad \frac{1}{\tau} = \bar{\Sigma} = -\frac{1}{n m} \times \quad (7.37)$$

$$\times \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_1 + \epsilon' t_2} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL(t_1+t_2)} \frac{1}{i\hbar} [\dot{P}^\beta, \rho^0] \},$$

$$\dot{P}^\alpha = \frac{1}{i\hbar} [P^\alpha, H], \quad iLA = \frac{1}{i\hbar} [A, H_k + H_s + H_p + H_{el}],$$

где H_{el} — гамильтониан взаимодействия с рассеивателями.

В выражении для обратного времени релаксации неравновесной системы (7.37) уже набран второй порядок по степеням взаимодействия H_{el} , поскольку коммутатор оператора полного импульса коммутирует с гамильтонианами подсистем k, S и гамильтонианом фононов:

$$[P^\alpha, H_k + H_s + H_p + H_{el}] = [P^\alpha, H_{el}].$$

По этой причине статистический оператор $\rho^0(t, 0)$ можно заменить на квазиравновесное распределение (7.36), при записи которого мы предусмотрительно опустили гамильтониан электрон-фононного взаимодействия, и в операторах эволюции опустить гамильтониан взаимодействия H_{el} . Поэтому формула (7.37) может непосредственно использоваться для вычисления обратного времени релаксации неравновесной системы.

Забегаая вперед, отметим, что в следующей главе будет получено выражение для обратного времени релаксации неравновесной системы, отличающееся по форме записи от (7.37). Поэтому целесообразно сразу преобразовать выражение (7.37) к тому виду, который получается в методе основного кинетического уравнения (см. главу 8).

Во первых, используя тождество (7.21), представим интеграл в выражении (7.37) в следующей форме:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_1 + \epsilon' t_2} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iL(t_1+t_2)} \frac{1}{i\hbar} [\dot{P}^\beta, \rho^0] \right\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon t_1 + \epsilon' t_2} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha \frac{d}{dt_2} e^{iL(t_1+t_2)} [P^\beta, \rho^0] \right\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iLt_1} [P^\beta, \rho^0] \right\}. \end{aligned}$$

При выводе этого уравнения мы учли принцип ослабления корреляций.

Далее учтем, что неравновесное распределение в стационарном случае удовлетворяет уравнению Лиувилля (7.13)

$$iL \rho_0 = -\epsilon(\rho^0 - \rho_q),$$

а $P^\beta/m = iLX^\beta$, и запишем $1/\tau$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma} = & -\frac{1}{n} \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iLt_1} iL[X^\beta, \rho^0] \right\} + \right. \\ & \left. + \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iLt_1} [X^\beta, (\rho^0 - \rho_q)] \right\} \right\}. \end{aligned}$$

Используя теорему Абеля и принцип ослабления корреляций, можно доказать, что второе слагаемое в последнем выражении обращается в нуль, поскольку

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \text{Sp} \{ [\dot{P}^\alpha(-t_1), X^\beta] \rho^0 \} = \lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \text{Sp} \{ [\dot{P}^\alpha(-t_1), X^\beta] \rho_q \} = 0.$$

Поэтому обратное время релаксации можно разбить на два слагаемых:

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_1 + \bar{\Sigma}_2,$$

$$\bar{\Sigma}_1 = -\frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} iL_v \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \}; \quad (7.38)$$

$$\bar{\Sigma}_2 = -\frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} iL_0 \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \}. \quad (7.39)$$

Первое слагаемое в правой части последнего выражения под знаком шпура содержит второй порядок по взаимодействию, и поэтому в нем в борновском приближении теории рассеяния следует опустить взаимодействие в операторах эволюции и неравновесном статистическом операторе ρ^0 .

Во втором слагаемом второй порядок по взаимодействию может быть набран за счет удержания взаимодействия с рассеивателями либо в операторе временной эволюции $\exp(iL t_1)$, либо в статистическом операторе ρ^0 . Если опустить взаимодействие в операторе ρ^0 , то это распределение превращается в ρ_q , и тогда

$$iL_0[X^\beta, \rho^0] = iL_0[X^\beta, \rho_q] \sim iL_0 \frac{\beta_k P^\beta}{m} \rho_q = 0,$$

поскольку операторы P^β и ρ_q коммутируют с гамильтонианом H_0 и $\bar{\Sigma}_2$ в этом случае будет равно нулю.

Если оставить взаимодействие в статистическом операторе и опустить его в операторе эволюции, то выражение для $\bar{\Sigma}_2$ можно представить в такой форме:

$$\bar{\Sigma}_2 = -\frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha \frac{d}{dt_1} e^{iL_0 t_1} \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \}.$$

Выполняя опять в этом выражении интегрирование по частям, получаем

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_2 = & -\frac{1}{n} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \right\} + \\ & + \epsilon \frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha e^{iL_0 t_1} \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Равенство нулю первого слагаемого становится очевидным, если перестроить коммутатор $\dot{P}^\alpha = iLP^\alpha$:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \right\} = & -\text{Sp} \left\{ P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [P^\beta, \rho^0] \right\} + \\ & + \epsilon \text{Sp} \left\{ P^\alpha \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, (\rho^0 - \rho_q)] \right\} \end{aligned}$$

и учесть, что $[P^\alpha, P^\beta] = 0$,

$$\frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ [P^\alpha, X^\beta] \rho^0 \} = \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ [P^\alpha, X^\beta] \rho_q \},$$

в силу условия нормировки.

Равенство интегрального члена в формуле (7.40) нулю следует из того факта, что после применения теоремы Абеля (опуская несущественные константы) его можно записать в форме

$$\lim_{t_1 \rightarrow -\infty} \text{Sp} \{ [\dot{P}^\alpha(-t_1), X^\beta] \rho^0 \} = 0.$$

Хотя эволюция оператора \dot{P}^α в этом выражении определяется гамильтонианом H_0 , не содержащим взаимодействия, оператор \dot{P}^α инвариантен при такой эволюции и принцип ослабления корреляций применим к этой ситуации в полной мере.

Таким образом, мы доказали, что обратное время релаксации для неравновесной системы можно представить в форме (7.38).

Прежде чем приступить к непосредственным вычислениям обратного времени релаксации неравновесной системы по формуле (7.38), следует еще раз обратить внимание на условие ее применимости. Безусловно правильным является выражение

(7.35) для функции памяти, содержащее операторы проектирования. Если их отбросить, то правильное выражение для обратного времени релаксации получается только в борновском приближении теории рассеяния. Более того, можно показать, что, как и в случае линейной реакции равновесной системы, при отбрасывании операторов проектирования в (7.35) и учете эволюции системы с полным гамильтонианом функция памяти точно равна нулю. В свете изложенного в главах 5 и 6 материала этот результат не должен вызывать удивления, поскольку точная гамильтонова динамика не может привести к возникновению необратимого поведения.

Как следует из выражения (7.38), вычисление неравновесной электропроводности свелось к вычислению обратного времени релаксации. Будем считать, что сопротивление определяется рассеянием электронов на фононах. Не конкретизируя излишне механизм электрон-фононного взаимодействия, запишем гамильтониан H_{ep} в представлении вторичного квантования по электронным переменным в виде (4.76):

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q}, \lambda, \vec{p}', \vec{p}, \sigma} (U_{\vec{p}' \vec{p}}^{\vec{q} \lambda} b_{\vec{q} \lambda} + U_{\vec{p}' \vec{p}}^{-\vec{q} \lambda} b_{\vec{q} \lambda}^+) a_{\vec{p}' \sigma}^+ a_{\vec{p} \sigma},$$

где матричные элементы $U_{\vec{p}' \vec{p}}^{\vec{q} \lambda}$ определены соотношением

$$U_{\vec{p}' \vec{p}}^{\vec{q} \lambda} = C_{\vec{q} \lambda} \langle \vec{p}' | e^{i\vec{q} \vec{r}} | \vec{p} \rangle,$$

$|\vec{p}\rangle$ – нормированная система собственных функций электронов проводимости, $C_{\vec{q} \lambda}$ – константа электрон-фононной связи.

Покажем, что обратное время релаксации (7.38) для фононного механизма рассеяния дает точно такой же результат (4.157), который мы получили из кинетического уравнения.

Используя тождество Кубо (5.81), запишем выражение для обратного времени релаксации в форме, которую будем использовать для дальнейших вычислений:

$$\bar{\Sigma}_1 = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{et_1} \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iLt_1} iL_v \rho_q^\tau \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, S^0] \rho_q^{1-\tau} \}.$$

В этой формуле

$$S^0 = \Phi + \beta_k H_k + \beta_s H_s + \beta_p H_p - \beta \zeta N$$

– оператор энтропии неравновесной системы, $\rho_q = \exp\{-S^0\}$. Поскольку для рассматриваемого случая

$$\frac{1}{i\hbar} [X^\beta, S^0] = \frac{\beta_k}{i\hbar} [X^\beta, H_k] = \frac{\beta_k}{m} P^\beta$$

и оператор P^β коммутирует с оператором ρ_q , интегрирование по переменной τ может быть легко выполнено, мы получаем

$$\bar{\Sigma}_1 = \frac{\beta_k}{n m} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} \frac{1}{i\hbar} (P^\beta \rho_q H_{ep} \rho_q^{-1} - H_{ep} P^\beta) \rho_q \}.$$

При выводе этой формулы мы учли, что в нашем случае

$$iL_v A = \frac{1}{i\hbar} [A, H_{ep}].$$

Переходя к представлению вторичного квантования по электронным переменным, перепишем выражение для шпура в последнем выражении:

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} \frac{1}{i\hbar} (P^\beta \rho_q H_{ep} \rho_q^{-1} - H_{ep} P^\beta) \rho_q \} = \\ & = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\nu' \nu \mu' \mu \kappa} \left\{ \langle \dot{P}_{(ep)}^\alpha{}_{\nu' \nu}(-t_1) P_\kappa^\beta H_{ep \mu' \mu} (i\hbar\beta) \rangle_{\text{pacc}} \times \right. \\ & \quad \times \langle a_{\nu'}^+(-t_1) a_\nu(-t_1) a_\kappa^+ a_\kappa a_\mu^+ (i\hbar\beta) a_\mu (i\hbar\beta) \rangle - \\ & \quad - \langle \dot{P}_{(ep)}^\alpha{}_{\nu' \nu}(-t_1) H_{ep \mu' \mu} P_\kappa^\beta \rangle_{\text{pacc}} \times \\ & \quad \left. \times \langle a_{\nu'}^+(-t_1) a_\nu(-t_1) a_\mu^+ a_\mu a_\kappa^+ a_\kappa \rangle \right\}. \quad (7.41) \end{aligned}$$

Здесь индексы $\nu', \nu, \mu', \mu, \kappa$ использованы для обозначения квантовых чисел, характеризующих состояние электронов ($\vec{p}\sigma$), а большие угловые скобки означают усреднение по состояниям рассеивателей (фононов), $A(i\hbar\beta) = \rho_q A \rho_q^{-1}$.

Используя статистическую теорему Вика – Блоха – Доминиса [38] (см. также (5.75)), выразим средние значения шести операторов рождения (уничтожения) электронов в последней формуле через функции распределения Ферми – Дирака. Учитывая лишь отличные от нуля спаривания, имеем

$$\begin{aligned} < a_{\nu'}^+ a_{\nu} a_{\kappa}^+ a_{\mu} > = f_{\nu'}(1 - f_{\nu})^2 \delta_{\nu'\mu} \delta_{\nu\kappa} \delta_{\kappa\mu'} - \\ - f_{\nu'}^2(1 - f_{\nu}) \delta_{\nu'\kappa} \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu\mu'} = f_{\nu'}(1 - f_{\nu})(1 - f_{\nu} - f_{\nu'}) \delta_{\nu'\mu} \delta_{\nu\mu'}. \end{aligned} \quad (7.42)$$

Аналогично

$$< a_{\nu'}^+ a_{\nu} a_{\mu}^+ a_{\kappa} > = f_{\nu'}(1 - f_{\nu})(1 - f_{\nu} - f_{\nu'}) \delta_{\nu'\mu} \delta_{\nu\mu'}. \quad (7.43)$$

Если операторы рождения (уничтожения) электронов зависят от времени, то эту зависимость следует явно выделить, пользуясь коммутационными соотношениями

$$a_{\nu'}^+(t_1 + i\hbar\beta) a_{\nu}(t_1 + i\hbar\beta) = a_{\nu'}^+ a_{\nu} e^{i/\hbar(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_{\nu})t_1 - \beta_k(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_{\nu})}.$$

Учитывая, что в формуле (7.41)

$$\dot{P}_{(ep)\nu'\nu}^{\alpha}(t_1) = -i \sum_{\vec{q}, \lambda} q^{\alpha} \{ U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda} e^{-i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} - U_{\nu'\nu}^{-\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda}^+ e^{i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} \},$$

для функции памяти получаем такой результат

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_1 = & \frac{\beta_k}{nm i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \sum_{\nu'\nu \vec{q}\lambda} -iq^{\alpha} \left\langle \left\{ U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda} e^{i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1 - \beta\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}} - \right. \right. \\ & \left. \left. - U_{\nu'\nu}^{-\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda}^+ e^{-i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1 + \beta\hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}} \right\} \left\{ U_{\nu\nu'}^{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda} + U_{\nu\nu'}^{-\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda}^+ \right\} \right\rangle_{\text{расс}} \times \\ & \times \left\{ [P_{\nu}^{\beta}(1 - f_{\nu}) - P_{\nu'}^{\beta} f_{\nu'}] \cdot e^{\beta_k(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_{\nu})} - [P_{\nu'}^{\beta}(1 - f_{\nu'}) - P_{\nu}^{\beta} f_{\nu}] \right\} \times \\ & \times f_{\nu'}(1 - f_{\nu}) \cdot e^{i/\hbar(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_{\nu'})t_1}. \end{aligned}$$

Следует отметить, что в этом выражении мы заранее учли, что при усреднении по состояниям рассеивателей, которое сведется к вычислению квантово-статистических средних операторов

рождения (уничтожения) фононов, возникнут правила отбора:

$$\begin{aligned} \langle b_{\vec{q}\lambda}^+ b_{\vec{q}'\lambda'} \rangle &= N_{\vec{q}\lambda} \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad N_{\vec{q}\lambda} = \frac{1}{e^{\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} - 1}; \\ \langle b_{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}'\lambda'}^+ \rangle &= (N_{\vec{q}\lambda} + 1) \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \end{aligned}$$

и сразу положили, что $\vec{q} = \vec{q}'$, $\lambda = \lambda'$. Выполняя усреднение по состояниям рассеивателей и учитывая, что

$$\begin{aligned} f_\nu (1 - f_\nu) &= -\beta_k^{-1} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_\nu} f_\nu = -\beta_k^{-1} f'_\nu, \\ e^{\beta_k (\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_\nu)} f_{\nu'} (1 - f_\nu) &= f_\nu (1 - f_{\nu'}), \end{aligned}$$

запишем выражение для обратного времени релаксации:

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_1 &= -\frac{1}{nm} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \sum_{\nu' \nu \vec{q}\lambda} -iq^\alpha \left\{ \left[|U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 (N_{\vec{q}\lambda} + 1) e^{i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} \times \right. \right. \\ &\quad \times e^{-\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} - |U_{\nu'\nu}^{-\vec{q}\lambda}|^2 N_{\vec{q}\lambda} e^{-i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} \cdot e^{\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} \left. \right] \left[P_\nu^\beta f'_\nu (1 - f_{\nu'}) - \right. \\ &\quad \left. - P_{\nu'} f'_{\nu'} f_\nu \right] - \left[|U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 (N_{\vec{q}\lambda} + 1) e^{i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} - |U_{\nu'\nu}^{-\vec{q}\lambda}|^2 N_{\vec{q}\lambda} e^{-i\Omega_{\vec{q}\lambda} t_1} \right] \times \\ &\quad \left. \times \left[P_{\nu'}^\beta f'_{\nu'} (1 - f_\nu) - P_\nu^\beta f'_\nu f_{\nu'} \right] \right\} \cdot e^{i/\hbar (\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_\nu) t_1}. \end{aligned}$$

Вычислим интеграл по t_1 в последнем выражении и учтем, что

$$(N_{\vec{q}\lambda} + 1) e^{-\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} = \left(\frac{1}{e^{\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} - 1} + 1 \right) e^{-\beta_p \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda}} = N_{\vec{q}\lambda}.$$

В результате простых вычислений получаем

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_1 &= \frac{1}{nm\hbar} \sum_{\nu' \nu \vec{q}\lambda} q^\alpha \left\{ |U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 \left[N_{\vec{q}\lambda} (P_\nu^\beta f'_\nu (1 - f_{\nu'}) - P_{\nu'}^\beta f'_{\nu'} f_\nu) - \right. \right. \\ &\quad \left. - (N_{\vec{q}\lambda} + 1) (P_{\nu'}^\beta f'_{\nu'} (1 - f_\nu) - P_\nu^\beta f'_\nu f_{\nu'}) \right] \frac{\hbar}{i(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_\nu + \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda} - i\epsilon)} - \\ &\quad - |U_{\nu'\nu}^{-\vec{q}\lambda}|^2 \left[(N_{\vec{q}\lambda} + 1) (P_\nu^\beta f'_\nu (1 - f_{\nu'}) - P_{\nu'}^\beta f'_{\nu'} f_\nu) - \right. \\ &\quad \left. - N_{\vec{q}\lambda} (P_{\nu'}^\beta f'_{\nu'} (1 - f_\nu) - P_\nu^\beta f'_\nu f_{\nu'}) \right] \frac{\hbar}{i(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_\nu - \hbar \Omega_{\vec{q}\lambda} - i\epsilon)} \left. \right\}. \end{aligned}$$

Во втором слагаемом сделаем замену переменных $\nu' \leftrightarrow \nu$ и учтем, что

$$|U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 = |U_{\nu\nu'}^{-\vec{q}\lambda}|^2.$$

Тогда, учитывая определение дельта-функции

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right\},$$

получаем

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_1 = \frac{1}{nm} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\nu'\nu\vec{q}\lambda} \hbar q^\alpha |U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 \left\{ (N_{\vec{q}\lambda} + 1) (P_{\nu'}^\beta f_{\nu'}' (1 - f_\nu) - \right. \\ \left. - P_\nu^\beta f_\nu' f_{\nu'}') - N_{\vec{q}\lambda} (P_\nu^\beta f_\nu' (1 - f_{\nu'}) - P_{\nu'}^\beta f_{\nu'}' f_\nu) \right\} \delta(\varepsilon_{\nu'} - \varepsilon_\nu + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}). \end{aligned}$$

Вспомним теперь, что

$$|U_{\nu'\nu}^{\vec{q}\lambda}|^2 = |U_{\vec{p}'\vec{p}}^{\vec{q}\lambda}|^2 = |C_{\vec{q}\lambda}|^2 |\langle \vec{p}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{p} \rangle|^2 = |C_{\vec{q}\lambda}|^2 \delta(\vec{p}' - \vec{p} - \hbar\vec{q}).$$

Используя закон сохранения импульса, получаем итоговое выражение для частоты релаксации импульса неравновесной системы:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = -\frac{1}{3nm} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\lambda\vec{p}'\vec{p}\sigma} |C_{\vec{q}\lambda}|^2 (\hbar q)^2 \{ (N_{\vec{q}} + 1) f_{\vec{p}'\sigma'}' (1 - f_{\vec{p}\sigma}) + \\ + N_{\vec{q}} f_{\vec{p}'\sigma'}' f_{\vec{p}\sigma} \} \delta(\varepsilon_{\vec{p}'\sigma'} - \varepsilon_{\vec{p}\sigma} + \hbar\Omega_{\vec{q}\lambda}). \end{aligned} \quad (7.44)$$

При выводе этой формулы мы учли, что нечетные по компонентам полного импульса вклады обращаются в нуль при суммировании по импульсу в пределах зоны Бриллюэна, а $q^\alpha q^\beta = 1/3 q^2 \delta_{\alpha\beta}$.

Выражение (7.44) для обратного времени релаксации неравновесных электронов находится в полном соответствии с результатом, который получается для частоты релаксации импульса неравновесных электронов в методе кинетического уравнения (4.157).

Завершая эту главу, необходимо отметить, что полученные здесь результаты в частном случае электропроводности можно

найти, как это уже отмечалось, другим способом, совершенно не интересуясь тем, как возникло новое неравновесное распределение при включении дополнительного измерительного поля. По существу, это просто обобщение формальной теории линейного отклика Кубо на случай отклика неравновесных систем.

Пусть на неравновесную систему, которая описывается гамильтонианом H , действует дополнительное слабое внешнее поле $H_F(t) = -AF(t)$. Запишем уравнение Лиувилля, которому удовлетворяет новое неравновесное распределение $\rho(t, 0)$:

$$\frac{\partial \rho(t, 0)}{\partial t} + [iL + iL_F(t)]\rho(t, 0) = -\epsilon(\rho(t, 0) - \rho^0(t, 0)).$$

Здесь $\rho^0(t, 0)$ – исходное неравновесное распределение системы, iL , $iL_F(t)$ – операторы Лиувилля, соответствующие гамильтонианам H и $H_F(t)$.

Естественным начальным условием для распределения $\rho(t)$ можно считать его совпадение с исходным неравновесным распределением $\rho^0(t, 0)$ в момент времени $t = -\infty$, когда было включено внешнее поле.

В этом случае формула для неравновесного адмиттанса в полном соответствии с теорией Кубо будет выражаться через коммутаторную функцию Грина. Например, в случае электропроводности, по аналогии с линейным случаем, получаем

$$\sigma(t, \omega) = -\frac{e^2}{m} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \text{Sp}\{P e^{iLt_1} \frac{1}{i\hbar} [X^+, \rho^0(t + t_1, 0)]\}.$$

Эту формулу легко преобразовать к результату (7.34), полученному нами ранее. Воспользуемся для этого операторным тождеством (7.21), которое является обобщением тождества Кубо на случай неравновесного распределения и принципом ослабления корреляций.

В результате простых вычислений получаем

$$\sigma(t, \omega) = -\frac{e^2}{m^2} \langle P, P^+ \rangle_t \overline{G}(t, \omega), \quad \overline{G}(t, \omega) = \frac{1}{\langle P, P^+ \rangle_t} \langle P, P^+ \rangle_t^\omega.$$

Если учесть связь функции Грина $\overline{G}(t, \omega)$ с транспортной матрицей $\overline{T}(t, \omega)$, определенной соотношением (7.31), то сразу видно, что приведенное выражение для неравновесной электропроводности совпадает с полученным ранее результатом (7.34).

Задача 7.1

Используя гамильтониан взаимодействия носителей с заряженными примесными центрами (4.81) и формулы (7.35), (7.37) для функции памяти, получить выражение для обратного времени релаксации импульса неравновесных электронов.

Решение

Используя определение (7.35) и тот факт, что $\langle P^\alpha, P^\beta \rangle = -nm$, для обратного времени релаксации получаем

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon' t_2} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL(t_1+t_2)} \frac{1}{i\hbar} [\dot{P}^\beta, \rho^0] \}. \quad (7.45)$$

Поскольку в этом выражении уже набран второй порядок по константе взаимодействия с рассеивателями, неравновесное распределение ρ^0 можно заменить квазиравновесным распределением ρ_q . Будем предполагать, что квазиравновесное распределение может быть записано в виде

$$\rho_q = e^{-S^0}, \quad S^0 = \Phi + \beta_k H_k + \beta_s H_s - \beta \zeta N.$$

Таким образом, ρ_q описывает неравновесное распределение электронов с обратными температурами кинетических и спиновых степеней свободы β_k и β_s соответственно. Кроме того, в операторе эволюции iL можно опустить взаимодействие. Поэтому

$$[\dot{P}^\beta, \rho^0] = - \int_0^1 d\tau \rho_q^\tau [\dot{P}_{(ei)}^\beta, S^0] \rho_q^{1-\tau}, \quad \dot{P}_{(ei)}^\beta = \frac{1}{i\hbar} [P^\beta, H_{ei}].$$

Записывая $\dot{P}^\alpha = \dot{P}_{(ei)}^\alpha$ и коммутатор $[\dot{P}_{(ei)}^\beta, S^0]$ в представлении вторичного квантования, находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = \frac{1}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon' t_2} \int_0^1 d\tau \sum_{\nu' \nu} \left\langle \dot{P}_{(ei)}^\alpha{}_{\nu' \nu} \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{i\hbar} [\dot{P}_{(ei)}^\beta, S^0]_{\mu' \mu} \right\rangle_{\text{пр}} < a_{\nu'}^+, a_\nu a_{\mu'}^+, (z) a_\mu(z) >, \end{aligned} \quad (7.46)$$

$z = t_1 + t_2 + i\hbar\beta$. Угловые скобки в этом выражении означают усреднение по состояниям примесей.

С учетом явного вида гамильтониана электрон-примесного взаимодействия (4.81) матричные элементы оператора $\dot{P}_{(ei)\nu'\nu}^\alpha$ имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{P}_{(ei)\nu'\nu}^\alpha &= -i \sum_{\vec{q}} q^\alpha G_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} <\nu'|e^{i\vec{q}\vec{r}}|\nu>, \quad \rho_{\vec{q}} = \sum_{j=1}^{N_i} e^{i\vec{q}\vec{R}_j}, \\ [\dot{P}_{(ei)}^\beta, S^0]_{\mu'\mu} &= \dot{P}_{(ei)\mu'\mu}^\beta (S_\mu^0 - S_{\mu'}^0), \end{aligned} \quad (7.47)$$

где \vec{R}_j — координата j -го примесного центра. В этом случае усреднение по состояниям рассеивателей сводится к усреднению величин $\rho_{\vec{q}}$:

$$\langle \rho_{\vec{q}'} \rho_{\vec{q}} \rangle = N_i \delta_{-\vec{q}\vec{q}'},$$

где N_i — число рассеивающих центров.

Подставляя результат (7.47) в выражение для частоты релаксации, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{N_i}{3nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{(\epsilon - i\omega)t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon' t_2} \sum_{\vec{q}\nu'\nu} q^2 |G_{\vec{q}}|^2 |<\nu'|e^{i\vec{q}\vec{r}}|\nu>|^2 \times \\ &\times \frac{1}{i\hbar} \int_0^1 d\tau (S_{\nu'}^0 - S_\nu^0) e^{i/\hbar(\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'})(t_1 + t_2)} e^{(S_{\nu'}^0 - S_\nu^0)\tau} f_{\nu'} (1 - f_\nu). \end{aligned}$$

Выполняя интегрирование по τ , получаем

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\tau (S_{\nu'}^0 - S_\nu^0) e^{(S_{\nu'}^0 - S_\nu^0)\tau} f_{\nu'} (1 - f_\nu) &= (e^{(S_{\nu'}^0 - S_\nu^0)} - 1) f_{\nu'} (1 - f_\nu) = \\ &= f_\nu (1 - f_{\nu'}) - f_{\nu'} (1 - f_\nu) = f_\nu - f_{\nu'}. \end{aligned}$$

Выполним, наконец, интегрирование по t_1 и t_2 , полагая, что частота внешнего поля ω равна нулю:

$$\begin{aligned} I &= \text{Re} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_{-\infty}^0 dt_2 e^{\epsilon' t_2} e^{i/\hbar(\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'})(t_1 + t_2)} = \\ &= -\text{Re} \frac{\hbar}{i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\epsilon' \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'} - i\epsilon} \cdot \frac{1}{\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'} - i\epsilon'} \right\} \end{aligned}$$

Введем обозначения $\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'} = x$. Тогда, учитывая, что в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ справедливо равенство

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x - i\epsilon} = \frac{1}{x} + i\pi\delta(x),$$

для интеграла I получаем представление

$$I = -\text{Re} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{1}{x} + i\pi\delta(x) \right] \left[\frac{1}{x} + i\pi\delta(x) \right] = -2\pi\hbar \frac{1}{x} \delta(x) = 2\pi\hbar \delta'(x).$$

Величину $1/x \cdot \delta(x)$ обычно определяют как производную от дельта-функции $\delta'(x)$. Чтобы убедиться в справедливости такого представления, необходимо рассмотреть интеграл, содержащий произведение обычной функции $F(x)$ и обобщенной функции $\delta'(x)$. Вычисление таких интегралов производится интегрированием по частям, полагая, что $\delta(x) = 0$, если $x \neq 0$. Таким образом, обычно принимается, что

$$\int F(x) \delta'(x) dx = - \int F'(x) \delta(x) dx.$$

Если теперь в этом выражении положить, что $F(x) = xf(x)$, то получаем

$$\int xf(x) \delta'(x) dx = - \int f(x) \delta(x) dx - \int x f'(x) \delta(x) dx.$$

Поскольку последний интеграл всегда равен нулю, то отсюда следует определение производной для дельта-функции $x \delta'(x) = -\delta(x)$.

Подставляя полученные выше результаты в последнее выражение для обратного времени релаксации (7.48), получаем

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{N_i}{3nm} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}\nu'\nu} (\hbar q)^2 |G_{\vec{q}}|^2 |\langle \nu' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \nu \rangle|^2 f'_\nu \delta(\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'}). \quad (7.48)$$

Этот результат с точностью до обозначений совпадает с ранее полученным с помощью кинетического уравнения выражением (4.204) для обратного времени релаксации горячих электронов.

Естественно, что для получения формулы (7.48) мы могли бы воспользоваться и представлением для функции памяти (7.38). Остановимся конспективно на этом способе вывода выражения для обратного времени релаксации неравновесных электронов. Используя в качестве исходного определения выражение (7.38), получаем

$$\begin{aligned}
 \bar{\Sigma}_1 &= -\frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} iL_\nu \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, \rho^0] \} = \\
 &= \frac{1}{n} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ \dot{P}^\alpha e^{iL t_1} iL_\nu \rho_q^\tau \frac{1}{i\hbar} [X^\beta, S^0] \rho_q^{1-\tau} \} = \\
 &= \frac{\beta_k}{n m} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp} \{ \dot{P}_{(ei)}^\alpha e^{iL t_1} \frac{1}{i\hbar} (P^\beta \rho_q H_{ei} \rho_q^{-1} - H_{ei} P^\beta) \rho_q \}.
 \end{aligned}$$

Переходя к представлению вторичного квантования, вместо (7.46) получаем

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau} &= \frac{\beta_k}{n m} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \sum_{\nu' \nu \vec{q}} (-iq^\alpha) |G_q|^2 N_i |< \nu' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \nu >|^2 \times \\
 &\times \{ P_{\nu'}^\beta f_{\nu'} (1 - f_\nu) e^{S_{\nu'}^0 - S_\nu^0} - P_{\nu'} f_{\nu'} (1 - f_\nu) \} e^{i/\hbar(\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'}) t_1}.
 \end{aligned}$$

Далее, поскольку

$$f_{\nu'} (1 - f_\nu) e^{S_{\nu'}^0 - S_\nu^0} = f_\nu (1 - f_{\nu'}),$$

произведя замену индексов суммирования в первом слагаемом $\nu \rightleftharpoons \nu'$, $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ и выполняя интегрирование по времени t_1 , получаем

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau} &= -\frac{\beta_k}{n m} N_i \sum_{\nu' \nu \vec{q}} iq^\alpha |G_q|^2 |< \nu' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \nu >|^2 \times \\
 &\times P_{\nu'}^\beta f_{\nu'} (1 - f_\nu) \left\{ \frac{1}{\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'} + i\epsilon} - \frac{1}{\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'} - i\epsilon'} \right\}.
 \end{aligned}$$

Учитывая определение дельта-функции, а также тот факт, что из закона сохранения импульса следует, что $P_{\nu'}^\beta = P_\nu^\beta + \hbar q^\beta$, получаем

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\beta_k}{3nm} N_i \sum_{\nu' \nu \vec{q}} (\hbar q)^2 |G_q|^2 |< \nu' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \nu >|^2 f_{\nu'} (1 - f_\nu) \delta(\epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'}). \quad (7.49)$$

Выражение (7.49) диагонально по спиновым индексам. Поэтому, хотя функции f_ν , $f_{\nu'}$ и являются неравновесными функциями, в действительности они отличаются только кинетической энергией электронов.

Поэтому, если кинетические энергии равны, то равны и функции распределения f_ν и $f_{\nu'}$. Следовательно,

$$f_{\nu'}(1 - f_\nu) = -\beta_k^{-1} f_{\nu'},$$

и мы снова получаем результат (7.48).

Задача 7.2

Получить выражение для поперечных компонент парамагнитной спиновой восприимчивости неравновесных электронов в проводящих кристаллах.

Решение

Будем предполагать, что неравновесное состояние электронной системы является стационарным и описывается исходным неравновесным распределением

$$\begin{aligned} \rho^0 &= \epsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} e^{iL t_1} \rho_q, \quad \rho_q = e^{-S^0}, \\ S^0 &= \Phi + \beta_k H_k + \beta_s H_s + \beta_l H_l + \beta_d H_d - \beta \zeta N, \\ \Phi &= \ln \text{Sp} \exp\{-\beta_k H_k - \beta_s H_s - \beta_l H_l - \beta_d H_d + \beta \zeta N\}, \end{aligned} \quad (7.50)$$

где H_l и H_d – гамильтонианы фононной подсистемы и подсистемы d -электронов (наличие d -подсистемы актуально для магнитных полупроводников), β_l и β_d – соответствующие обратные температуры,

$$H_k = \sum_{\vec{k} \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k} \sigma}^+ a_{\vec{k} \sigma}, \quad \varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad H_s = -\hbar \omega_s S^z = -\hbar \omega_s \sum_{\vec{k} \sigma} \sigma a_{\vec{k} \sigma}^+ a_{\vec{k} \sigma},$$

ω_s – частота зеемановской прецессии спина во внешнем постоянном магнитном поле $H \parallel Z$. Учет d -подсистемы локальных магнитных моментов, если не анализировать детали, связанные с формой образца, и вопросы критической динамики, приводит лишь к некоторой перенормировке внешнего магнитного поля и поэтому мы исключим d -электроны из дальнейшего рассмотрения. H_l представляет собой гамильтониан фононной подсистемы. Поскольку в дальнейшем мы не будем анализировать процессы переноса энергии из электронной системы в фононную подсистему и далее в термостат, то и это слагаемое в операторе энтропии S^0 можно без всякого ущерба опустить.

Как известно [51], для нахождения отклика системы на внешнее статическое магнитное поле достаточно найти отклик на отдельную фурье-компоненту этого поля. Поэтому гамильтониан взаимодействия электронов со слабым внешним поляризованным перпендикулярно оси Z магнитным полем можно записать в форме

$$H_{eF} = -\frac{g\mu_B}{2} \sum_i [S_i^+ h^-(\vec{q}) + S_i^- h^+(\vec{q})] e^{i\vec{q}\vec{r}_i}, \quad (7.51)$$

$S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$, $h^\pm(\vec{q}) = h^x(\vec{q}) \pm ih^y(\vec{q})$, $h^x(\vec{q})$, $h^y(\vec{q})$ – фурье-компоненты неоднородного внешнего магнитного поля в декартовой системе координат. Вводя обозначение

$$S_q^\pm = \sum_i S_i^\pm e^{i\vec{q}\vec{r}_i},$$

будем изучать реакцию системы только на одну из двух циркулярных составляющих плоскополяризованного внешнего поля. Тогда, с учетом введенных обозначений, гамильтониан взаимодействия с внешним полем (7.51) можно упростить, оставив только составляющую внешнего поля с одной круговой поляризацией

$$H_{eF} = -\frac{g\mu_B}{2} S_q^- h^+(\vec{q}). \quad (7.52)$$

В соответствии с общей теорией отклика неравновесной системы, развитой в § 2 настоящей главы, реакция системы на возмущение (7.52) определяется поперечными компонентами тензора статической восприимчивости неравновесной системы (7.24). Поэтому, определяя статическую парамагнитную восприимчивость χ_q^{+-} в расчете на один узел решетки, получаем

$$\chi_q^{+-} = -\frac{(g\mu_B)^2}{2N} \langle S_q^+, S_{-q}^- \rangle. \quad (7.53)$$

Статическая парамагнитная восприимчивость отлична от нуля в нулевом порядке по взаимодействию с рассеивателями. Поэтому, если не учитывать малые поправки, связанные с взаимодействием, в определении неравновесной корреляционной функции (7.17) можно заменить

$$iL \rightarrow iL_0, \quad \rho^0(t, 0) \rightarrow \rho_q.$$

В результате получаем выражение для поперечной компоненты статической спиновой восприимчивости

$$\begin{aligned}\chi_q^{+-} &= -\frac{(g\mu_B)^2}{2N} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{S_q^+ e^{iL_0 t_1} \frac{1}{i\hbar} [S_{-q}^-, \rho_q]\} = \\ &= -\frac{(g\mu_B)^2}{2N} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \left[\text{Sp}\{S_q^+ S_{-q}^-(t_1) \rho_q\} - \text{Sp}\{S_{-q}^-(t_1) S_q^+ \rho_q\} \right].\end{aligned}\quad (7.54)$$

При выводе этого выражения мы учли, что $[\rho_q, H_0] = 0$.

Запишем операторы S_q^\pm в представлении вторичного квантования:

$$S_q^\pm = \sum_i S_i^\pm e^{i\vec{q}\vec{r}_i} = \sum_{\vec{k}', \vec{k}, \sigma', \sigma} S_{\sigma', \sigma}^\pm \langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle a_{\vec{k}', \sigma'}^\pm a_{\vec{k}, \sigma}.$$

Тогда χ_q^{+-} можно переписать в виде

$$\begin{aligned}\chi_q^{+-} &= \frac{(g\mu_B)^2}{2N} \sum_{\vec{k}', \vec{k}, \sigma', \sigma} \left[|S_{\sigma', \sigma}^+|^2 |\langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}, \sigma} - \varepsilon_{\vec{k}', \sigma'} - i\epsilon} - \right. \\ &\quad \left. - |S_{\sigma', \sigma}^-|^2 |\langle \vec{k}' | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}', \sigma'} - \varepsilon_{\vec{k}, \sigma} - i\epsilon} \right] f_{\vec{k}', \sigma'} (1 - f_{\vec{k}, \sigma}).\end{aligned}\quad (7.55)$$

Заменяя во втором слагаемом индексы суммирования $\vec{k}' \sigma' \rightleftharpoons \vec{k} \sigma$ и учитывая, что

$$|S_{\sigma', \sigma}^+|^2 |\langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 = |S_{\sigma, \sigma'}^-|^2 |\langle \vec{k} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k}' \rangle|^2,$$

получаем

$$\begin{aligned}\chi_q^{+-} &= \frac{(g\mu_B)^2}{2N} \sum_{\vec{k}', \vec{k}, \sigma', \sigma} |S_{\sigma', \sigma}^+|^2 |\langle \vec{k}' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle|^2 \left[\frac{f_{\vec{k}', \sigma'} (1 - f_{\vec{k}, \sigma})}{\varepsilon_{\vec{k}', \sigma'} - \varepsilon_{\vec{k}, \sigma} - i\epsilon} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{f_{\vec{k}, \sigma} (1 - f_{\vec{k}', \sigma'})}{\varepsilon_{\vec{k}', \sigma'} - \varepsilon_{\vec{k}, \sigma} - i\epsilon} \right].\end{aligned}\quad (7.56)$$

Выделяя в резольvente, входящей в первое и второе слагаемые (7.56), вклад в смысле главного значения и сингулярный вклад, мож-

но разделить неравновесную статическую восприимчивость на действительную и мнимую части:

$$\operatorname{Re} \chi_q^{+-} = \frac{(g\mu_B)^2}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - f_{\vec{k}\downarrow}}{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - \varepsilon_{\vec{k}\downarrow}}, \quad (7.57)$$

$$\operatorname{Im} \chi_q^{+-} = \frac{\pi(g\mu_B)^2}{2N} \sum_{\vec{k}} [f_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - f_{\vec{k}\downarrow}] \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} - \varepsilon_{\vec{k}\downarrow}). \quad (7.58)$$

При получении этих результатов мы учли, что отличный от нуля матричный элемент

$$|S_{\sigma',\sigma}^+|^2 = |S_{\uparrow\downarrow}^+|^2 = 1,$$

где стрелки $\uparrow\downarrow$ обозначают состояния с проекцией z -компоненты спинного момента, ориентированные вдоль и против направления внешнего магнитного поля H . Пользуясь формулами (7.56)–(7.58), легко доказать, что

$$\operatorname{Re} \chi_{-q}^{-+} = \operatorname{Re} \chi_q^{+-}, \quad \operatorname{Im} \chi_q^{+-} = -\operatorname{Im} \chi_{-q}^{-+}.$$

Как следует из формулы (7.57), действительная составляющая поперечной статической восприимчивости неравновесных электронов имеет точно такой же вид, как и аналогичная величина в равновесном случае (см., например, монографию [51]). Различие состоит только в замене равновесных функций распределения на неравновесные, так как в нашем случае

$$f_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} = [\exp\{\beta_k \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \beta_s \hbar \omega_s / 2 - \beta \zeta\} + 1]^{-1}.$$

Поскольку процедура дальнейших вычислений действительной части $\operatorname{Re} \chi_q^{+-}$ достаточно хорошо известна, мы не будем на ней останавливаться.

Значительно больший интерес представляет мнимая составляющая χ_q^{+-} (7.58). В неравновесном случае мнимая составляющая статической восприимчивости становится отличной от нуля, поскольку равенство энергий $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow} = \varepsilon_{\vec{k}\downarrow}$, вытекающее из наличия дельта-функции в выражении (7.57), еще не означает равенство функций распределения $f_{\vec{k}+\vec{q}\uparrow}$ и $f_{\vec{k}\downarrow}$. Поэтому в такой системе будет происходить диссипация энергии (обмен энергии между k - и s -подсистемами

кристалла), который обусловлен статическим неоднородным магнитным полем. Легко заметить, что

$$\lim_{q \rightarrow 0} \text{Im } \chi_q^{+-} = 0,$$

поскольку при $q = 0$ кинетические энергии в начальном и конечном состоянии равны, а это означает, что переходов с переворотом спина быть не может.

Для проведения дальнейших вычислений в формуле (7.58) перейдем от суммирования по волновому вектору \vec{k} к интегрированию по импульсу $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. В результате получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_q^{+-} = & \frac{\pi(g\mu_B)^2}{2N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \int d\varepsilon \left[f\left(\beta_k \frac{(\vec{p} + \hbar\vec{q})^2}{2m} - \beta_s \frac{\hbar\omega_s}{2} - \beta\zeta\right) - \right. \\ & \left. - f\left(\beta_k \frac{\vec{p}^2}{2m} + \beta_s \frac{\hbar\omega_s}{2} - \beta\zeta\right) \right] \delta\left(\varepsilon - \frac{(\vec{p} + \hbar\vec{q})^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_s}{2}\right) \delta\left(\varepsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\hbar\omega_s}{2}\right). \end{aligned}$$

Пользуясь дельта-функциями, заменим аргументы функций распределения так, чтобы избавиться в них от зависимости от компонент импульса. Тогда интегрирование по \vec{p} придется только на дельта-функции и мы будем иметь дело с интегралом

$$I = \int d\vec{p} \delta\left(\varepsilon - \frac{(\vec{p} + \hbar\vec{q})^2}{2m} + \frac{\hbar\omega_s}{2}\right) \delta\left(\varepsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\hbar\omega_s}{2}\right),$$

методику вычисления которого мы обсуждали в главе 4 (см. формулы (4.162) – (4.166)). Поэтому приведем сразу результат:

$$\begin{aligned} I = & \frac{2\pi m^2}{\hbar q}, \quad \hbar q_- \leq \hbar q \leq \hbar q_+, \\ \hbar q_{\mp} = & \sqrt{2m(\varepsilon - \hbar\omega_s/2)} \left[\sqrt{1 + \frac{\hbar\omega_s}{\varepsilon - \hbar\omega_s/2}} \mp 1 \right]. \end{aligned}$$

Если величина q не удовлетворяет этим неравенствам, то $I = 0$.

Подставляя значение интеграла I в определение (7.58), для $\text{Im } \chi_q^{+-}$ получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_q^{+-} = & \frac{V}{N} \frac{(g\mu_B)^2 m^2}{8\pi \hbar^4 q} \int_0^\infty d\varepsilon \left[f\left(\beta_k \varepsilon + (\beta_k - \beta_s) \frac{\hbar\omega_s}{2} - \beta\zeta\right) - \right. \\ & \left. - f\left(\beta_k \varepsilon - (\beta_k - \beta_s) \frac{\hbar\omega_s}{2} - \beta\zeta\right) \right]. \end{aligned} \quad (7.59)$$

Полагая, что параметр $(\beta_k - \beta_s)\hbar\omega_s/2$ является малым, произведем разложение функций распределения в выражении (7.59) в ряд по этому параметру, ограничиваясь линейными членами

$$f(\beta_k \varepsilon + (\beta_k - \beta_s) \hbar\omega_s/2 - \beta\zeta) \simeq f(\beta_k \varepsilon - \beta\zeta) + \frac{(\beta_k - \beta_s)}{\beta_k} \frac{\hbar\omega_s}{2} \frac{df}{d\varepsilon}.$$

Тогда, если считать, что электронный газ находится в условиях вырождения и

$$\frac{df}{d\varepsilon} \simeq -\delta(\varepsilon - \zeta),$$

получаем простую оценку

$$\text{Im } \chi_q^{+-} \simeq \frac{V}{N} \frac{(g\mu_B)^2 m^2 \omega_s}{8\pi \hbar^3 q} \frac{(\beta_s - \beta_k)}{\beta_k}. \quad (7.60)$$

Следует заметить, что возникновение мнимой части статической парамагнитной восприимчивости неравновесных электронов свидетельствует лишь о том, что внешнее неоднородное магнитное поле может оказать влияние на процессы передачи энергии между неравновесными кинетическими и спиновыми степенями свободы кристалла, а изменение энергии кинетических степеней свободы электронов проводимости, которое при этом может возникнуть, связано с действием силовых полей, определяющих исходное неравновесное состояние системы.

Глава 8

МЕТОД ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

§ 1. Постановка задачи

В этой главе мы познакомимся с методом основного кинетического уравнения и подробно рассмотрим его применение для решения задач физической кинетики.

Основным кинетическим уравнением называют уравнение движения для некоторой части статистического оператора. Выделение этой части не является произвольным и должно удовлетворять принципам, сформулированным в предыдущих главах. Рискую повторить некоторые положения, обсудим еще раз программу построения теории необратимых процессов [52].

1. Уравнения Больцмана и Фоккера – Планка представляют собой замкнутые марковские (т. е. не учитывающие запаздывания) уравнения, описывающие установление теплового равновесия в системе. Как показано в главе 6, для полного статистического оператора невозможно построить уравнение движения, описывающее необратимую эволюцию. Действительно, материал, изложенный в главах 5 – 7, позволяет убедиться, что, даже используя неравновесный статистический оператор, который удовлетворяет необратимому во времени уравнению движения, приходится обращаться к методике операторов проектирования, чтобы получить правильные выражения для кинетических коэффициентов. По этой причине естественно попробовать сразу спроектировать статистический оператор и рассматривать только ту его часть, которая в состоянии описать

необратимую эволюцию системы. При этом можно ограничиться простейшим предположением, а именно считать, что статистический оператор можно представить в виде суммы двух членов

$$\rho(t) = \mathcal{P}\rho(t) + (1 - \mathcal{P})\rho(t). \quad (8.1)$$

Разбиение на два слагаемых производится таким образом, чтобы для величины $\mathcal{P}\rho(t)$ можно было бы сформулировать замкнутое уравнение. Все существующие теории исходят из того, что оставшаяся часть статистического оператора $(1 - \mathcal{P})\rho(t)$ вообще не дает вклада в наблюдаемую динамику.

Необходимо подчеркнуть, что разделение статистического оператора на две части само по себе тривиально и ничего нового не дает, поскольку всегда можно величину A представить в виде $B + (A - B)$. Для того чтобы представление (8.1) могло служить основой для построения теории, необходимо, чтобы это разделение было естественным и соответствовало выделению медленной кинетической части и быстро осциллирующей динамической части. Далее, для самосогласованности теории операторы \mathcal{P} и $(1 - \mathcal{P})$ должны обладать свойствами проекционных операторов

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}, \quad (1 - \mathcal{P})^2 = (1 - \mathcal{P}), \quad \mathcal{P}(1 - \mathcal{P}) = 0. \quad (8.2)$$

Соотношения (8.2) гарантируют, что операторы $\mathcal{P}\rho(t)$ и $(1 - \mathcal{P})\rho(t)$ являются ортогональными в некотором смысле и создают предпосылки для разделения динамики величин $\mathcal{P}\rho(t)$ и $(1 - \mathcal{P})\rho(t)$.

2. Наиболее важным свойством разбиения должна быть возможность построения замкнутого уравнения для кинетической части $\mathcal{P}\rho(t)$. Иначе говоря, должна возникнуть субдинамика величины $\mathcal{P}\rho(t)$. Для этого оператор проектирования должен обладать некоторыми дополнительными свойствами. Действительно, пусть $U(t)$ – оператор эволюции, определяющий изменение статистического оператора во времени $\rho(t) = U(t)\rho(0)$, а $W(t)$ – оператор эволюции, описывающий марковскую динамику кинетической части статистического оператора $\bar{\rho}(t) = \mathcal{P}\rho(t)$. Введенная последним соотношением величина $\bar{\rho}(t)$ играет роль «релевантной» части статистического оператора. Если $W(t)$ является оператором эволюции для $\bar{\rho}(t)$, то должно

выполняться уравнение $\bar{\rho}(t) = W(t)\bar{\rho}(0)$, или, вспоминая определение $\bar{\rho}(t)$, получаем $\mathcal{P}\rho(t) = W(t)\mathcal{P}\rho(0)$.

Это же соотношение можно написать иначе, учитывая уравнение движения статистического оператора $\rho(t) = U(t)\rho(0)$. Действительно, имеется равенство $\mathcal{P}U(t)\rho(0) = W(t)\mathcal{P}\rho(0)$. Отсюда следует «сплетающее» соотношение

$$\mathcal{P}U(t) = W(t)\mathcal{P}, \quad (8.3)$$

которое позволяет контролировать правильность развиваемой теории.

Сформулированная выше программа может приводить к совершенно различным уравнениям. Причина этого достаточно очевидна, поскольку единственным для каждой системы является только состояние термодинамического равновесия. Неравновесных же состояний существует бесчисленное множество. Так как «класс» неравновесных состояний определяется выбором оператора проектирования, то очевидно, что и различных проекционных операторов можно определить сколько угодно. В предыдущих главах мы познакомились с проекционными операторами, проектирующими динамические переменные на некоторый базисный набор операторов. В следующих параграфах настоящей главы мы познакомимся с некоторыми из возможных определений оператора проектирования для статистического распределения и использованием этого подхода для вычисления кинетических коэффициентов.

§ 2. Кинетическое уравнение Цванцига

Знакомство с методом основных кинетических уравнений начнем с уравнения, полученного Цванцигом [47]. Непосредственно использовать это уравнение для расчета кинетических коэффициентов не представляется возможным ввиду того, что оператор проектирования, использованный Цванцигом для иллюстрации метода, выделяет динамику системы в импульсном пространстве, полностью усредняя движение в координатном пространстве. Тем не менее основные идеи метода проекционных операторов проследить по этой работе очень легко.

Будем исходить из уравнения Лиувилля (5.19)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) + iL \rho(t) = 0 \quad (8.4)$$

для статистического оператора, которое справедливо как в классическом, так и в квантовом случаях. Хотя дальнейшее рассмотрение с одинаковым успехом применимо для классических и квантовых систем, для определенности будем иметь в виду квантовый случай.

Введем линейный, не зависящий от времени оператор проецирования \mathcal{P} и разделим статистический оператор $\rho(t)$ на два слагаемых:

$$\rho(t) = \bar{\rho}(t) + \tilde{\rho}(t), \quad \bar{\rho}(t) = \mathcal{P}\rho(t), \quad \tilde{\rho}(t) = (1 - \mathcal{P})\rho(t). \quad (8.5)$$

Подействуем операторами \mathcal{P} и $(1 - \mathcal{P})$ на левую и правую части уравнения Лиувилля (8.4). В результате получим

$$\frac{\partial \bar{\rho}(t)}{\partial t} = -\mathcal{P}iL [\bar{\rho}(t) + \tilde{\rho}(t)]; \quad (8.6)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(t)}{\partial t} = -(1 - \mathcal{P}) iL (\bar{\rho}(t) + \tilde{\rho}(t)). \quad (8.7)$$

Для того чтобы система уравнений (8.6), (8.7) имела однозначное решение, необходимо задать значение статистического оператора в некоторый момент времени. Эта, на первый взгляд, формальная математическая процедура на самом деле имеет глубокий физический смысл, к обсуждению которого мы вернемся позднее.

Чтобы получить замкнутое уравнение для $\bar{\rho}(t)$, исключим $\tilde{\rho}(t)$ из правой части выражения (8.6). Произведем формальное интегрирование уравнения (8.7). Проще всего это выполнить следующим образом. Умножим левую и правую части уравнения (8.7) на оператор $\exp\{i(1 - \mathcal{P})Lt\}$ слева и запишем его в виде

$$\frac{d}{dt} \exp\{i(1 - \mathcal{P})Lt\} \tilde{\rho}(t) = -i \exp\{i(1 - \mathcal{P})Lt\} (1 - \mathcal{P})L \bar{\rho}(t). \quad (8.8)$$

Формальное интегрирование уравнения (8.8) от некоторого начального момента времени t_0 до интересующего нас времени t дает

$$\begin{aligned} \exp\{i(1 - \mathcal{P})L t\} \tilde{\rho}(t) - \exp\{i(1 - \mathcal{P})L t_0\} \tilde{\rho}(t_0) = \\ = -i \int_{t_0}^t \exp\{i(1 - \mathcal{P})L t'\} (1 - \mathcal{P})L \bar{\rho}(t') dt'. \end{aligned} \quad (8.9)$$

Умножим левую и правую части уравнения (8.9) слева на оператор $\exp\{-i(1 - \mathcal{P})L t\}$. Производя необходимые вычисления, получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) = -i \int_{t_0}^t \exp\{i(1 - \mathcal{P})L (t' - t)\} (1 - \mathcal{P})L \bar{\rho}(t') dt' + \\ + \exp\{i(1 - \mathcal{P})L (t_0 - t)\} \tilde{\rho}(t_0). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Подставляя выражение (8.10) в правую часть формулы (8.6), получаем уравнение для части статистического оператора $\bar{\rho}(t)$, описывающей необратимую эволюцию системы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}(t)}{\partial t} + i\mathcal{P}L \bar{\rho}(t) = \int_{t_0}^t \Sigma(t' - t) \bar{\rho}(t') dt' - \\ - i\mathcal{P}L \exp\{i(1 - \mathcal{P})L (t_0 - t)\} \tilde{\rho}(t_0). \end{aligned} \quad (8.11)$$

$$\Sigma(t' - t) = i\mathcal{P}L \exp\{i(1 - \mathcal{P})L (t' - t)\} i(1 - \mathcal{P})L. \quad (8.12)$$

В выражениях (8.8), (8.12) экспоненциальные функции от операторных величин iL и \mathcal{P} понимаются как соответствующие степенные ряды. Уравнение (8.11) все еще не является замкнутым уравнением, так как содержит величину $\tilde{\rho}(t_0)$ в начальный момент времени t_0 .

Вернемся к проблеме задания начального условия для уравнения Лиувилля (8.4). Задание статистического оператора в некоторый начальный момент времени равносильно заданию ансамбля одинаковых систем, эволюцию которого описывает уравнение Лиувилля, и поэтому очень важно. Более того, выбор

начального условия может определить и класс решений уравнения Лиувилля.

Ясно, что для сколько-нибудь сложной системы нет никакой корректной в математическом смысле процедуры, позволяющей записать это начальное распределение. Конечно, всегда можно в качестве начального условия задать координаты и скорости всех частиц, составляющих систему в классическом случае или волновую функцию системы частиц в квантовом случае, но это будет формальное задание, которым все равно невозможно воспользоваться.

Как неоднократно отмечалось в предыдущих главах, для систем внутренне, т. е. по своему устройству, стохастических начальное распределение ничего, по существу, не должно определять уже через малый промежуток времени порядка времени размешивания в системе. Поэтому начальное распределение можно выбрать достаточно произвольно. Этим произволом можно воспользоваться, если выбрать распределение так, чтобы зависимость его от динамических величин определялась медленно изменяющимися переменными (например интегралами или квазиинтегралами движения). Смысл этого состоит в том, что обычно конкретный вид проекционного оператора, фигурирующего в теории, и начальное распределение выбираются согласованно, так что оператор проектирования не меняет начального распределения.

Следуя этим рекомендациям, выберем начальное распределение для уравнения (8.11) следующим образом:

$$\rho(t_0) = \bar{\rho}(t_0), \quad \tilde{\rho}(t_0) = 0. \quad (8.13)$$

Тогда основное кинетическое уравнение Цванцига можно записать в виде

$$\frac{\partial \bar{\rho}(t)}{\partial t} + i\mathcal{P}L \bar{\rho}(t) = \int_{t_0}^t \Sigma(t' - t) \bar{\rho}(t') dt'. \quad (8.14)$$

Ядро интегрального уравнения (8.14)

$$\Sigma(t' - t) = i\mathcal{P}L \exp\{i(1 - \mathcal{P})L(t' - t)\}i(1 - \mathcal{P})L \quad (8.15)$$

определяет «память» о всех предыдущих состояниях системы (аналог запаздывания в электродинамике). Таким образом, мы получили замкнутое уравнение, описывающее немарковскую и необратимую эволюцию части статистического оператора $\bar{\rho}(t)$. Если определить конкретный вид оператора проектирования и выражение для средних значений операторов физических величин, то уравнения (8.14), (8.15) могут быть использованы при вычислении кинетических коэффициентов. В следующих параграфах рассмотрим более интересные, с практической точки зрения, приложения методики операторов проектирования, в частности, получим основное кинетическое уравнение для квазиравновесного распределения и покажем, как с помощью него получить выражение для кинетических коэффициентов сильнонеравновесной системы.

§ 3. Основное кинетическое уравнение для квазиравновесного распределения и проекционный оператор Робертсона

Квазиравновесное распределение $\rho_q(t, 0)$, которое мы подробно рассмотрели в главах 6 и 7, представляет собой как раз некоторую часть НСО, с одной стороны, а с другой – позволяет вычислить средние значения базисных операторов, поскольку, в силу одного из основных положений метода НСО, средние значения базисных операторов, вычисленные с использованием истинного неравновесного распределения и квазиравновесного распределения, равны между собой (см. выражение (6.6)).

Таким образом, если удастся построить замкнутое уравнение для определения квазиравновесного распределения и найти практический способ решения этого уравнения, позволяющий восстановить вид $\rho_q(t, 0)$, то это сразу позволит выразить кинетические коэффициенты через корреляционные функции операторов динамических величин, вычисленных с использованием квазиравновесного распределения.

Здесь уместно еще раз напомнить различие в программах построения кинетической теории, основанной на методиках кинетического уравнения, статистического оператора и основного кинетического уравнения.

В случае кинетического уравнения основной проблемой является нахождение неравновесной функции распределения, т. е. построение решения уравнения Больцмана. Если такая функция найдена, то нахождение кинетических коэффициентов сводится к квадратурам.

При квантово-статистическом подходе в методе Кубо, например, формальное решение уравнения Лиувилля получается относительно просто и задача вычисления кинетических коэффициентов трансформируется в проблему правильного вычисления корреляционных функций. Эта задача может быть решена корректно лишь в том случае, если заменить уравнения движения для операторов динамических величин на уравнения движения типа уравнений Ланжевена, для вывода которых используется методика операторов проектирования.

Следует особо подчеркнуть, что операторы проектирования используются здесь для построения правильных динамических уравнений равновесной системы.

В методе НСО мы имеем в каком-то смысле промежуточную ситуацию. С одной стороны, НСО строится лишь из квазиинтегралов движения, т. е. медленно изменяющихся динамических переменных в результате операции временного усреднения (6.52). Эта процедура замены точного статистического оператора НСО (6.52) сама является операцией проектирования – выделением некоторой части статистического оператора. Использование такого подхода позволяет получить замкнутые уравнения для нахождения неравновесных термодинамических параметров системы $F_n(t)$ (см., например, § 10).

На то, что здесь используется некоторое огрубленное описание, возникшее в результате временного сглаживания, указывает тот факт, что число неравновесных параметров оказалось конечным (при точном динамическом описании это число должно быть порядка числа частиц в системе).

С другой стороны, в этом подходе динамические уравнения, которым удовлетворяют базисные операторы, являются стандартными уравнениями динамики Ньютона или Шредингера. По этой причине все равно необходимо привлекать идеологию операторов проектирования для построения правильных динамических уравнений в системах с размещиванием.

Наконец, возможен подход, при котором строится уравнение движения для квазиравновесного распределения сразу с использованием методики операторов проектирования.

Рассмотрим вывод этого уравнения.

Будем исходить из уравнения Лиувилля для НСО (6.54):

$$\frac{\partial \rho(t, 0)}{\partial t} + iL\rho(t, 0) = -\epsilon(\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)); \quad \epsilon \rightarrow +0. \quad (8.16)$$

Вычтем из левой и правой частей этого уравнения оператор

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + iL(t) \right] \rho_q(t).$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + iL \right] (\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)) = -\epsilon(\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)) - \\ - \left[\frac{\partial}{\partial t} + iL \right] \rho_q(t, 0). \end{aligned} \quad (8.17)$$

Рассмотрим производную по времени от оператора $\rho_q(t, 0)$. Как отмечалось в главе 6, квазиравновесное распределение является функционалом от наблюдаемых средних значений $\langle P_n \rangle^t$, взятых в один и тот же момент времени t . Поэтому имеем

$$\frac{\partial \rho_q(t, 0)}{\partial t} = \sum_n \frac{\partial \rho_q(t, 0)}{\partial \langle P_n \rangle^t} \frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t. \quad (8.18)$$

Выражение (8.18) отличается от (6.7) только другим обозначением для квазиравновесного распределения, но для удобства читателя мы снова выписали эту формулу. Напомним, что P_n — это совокупность базисных операторов, которые представляют собой квазиинтегралы движения, актуальные для рассматриваемой задачи.

Поскольку

$$\langle P_n \rangle^t = \text{Sp}\{P_n \rho(t, 0)\}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t = \text{Sp}\left\{P_n \frac{\partial}{\partial t} \rho(t, 0)\right\},$$

то, используя уравнение движения для НСО (8.16), запишем последнее равенство в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t = -\text{Sp}\{P_n iL(t)\rho(t, 0)\}.$$

В целях упрощения записи удобно ввести проекционный оператор Робертсона \mathcal{P}_q , который определим соотношением

$$\mathcal{P}_q(t)A = \sum_n \frac{\delta\rho_q(t)}{\delta\langle P_n \rangle^t} \text{Sp}\{P_n A\}. \quad (8.19)$$

Используя полученные выше результаты и определение оператора проектирования Робертсона, запишем уравнение (8.18) в виде

$$\frac{\partial\rho_q(t)}{\partial t} = - \sum_n \frac{\partial\rho_q(t)}{\partial\langle P_n \rangle^t} \text{Sp}\{P_n iL(t)\rho(t)\} = -\mathcal{P}_q(t)iL(t)\rho(t).$$

Добавим и вычтем в правой части последней формулы член $\mathcal{P}_q(t)iL\rho_q(t)$, что позволяет записать его в виде, который мы и будем использовать:

$$\frac{\partial\rho_q(t)}{\partial t} = -\mathcal{P}_q(t)iL(t)\rho_q(t) - \mathcal{P}_q(t)iL(t)(\rho(t) - \rho_q(t)). \quad (8.20)$$

Подставим этот результат в последний член правой части уравнения (8.17). В итоге получаем уравнение для квазиравновесного распределения, которое еще не является замкнутым уравнением для $\rho_q(t)$, так как содержит НСО $\rho(t)$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + iL(t) \right] [\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)] &= -\epsilon [\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)] - \\ &- [1 - \mathcal{P}_q(t)] iL(t)\rho_q(t) + \mathcal{P}_q(t)iL(t)[\rho(t) - \rho_q(t)]. \end{aligned} \quad (8.21)$$

Преобразуем уравнение (8.21) к виду, который допускает интегрирование

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \epsilon + [1 - \mathcal{P}_q(t)] iL(t) \right] [\rho(t, 0) - \rho_q(t, 0)] &= \\ &= -[1 - \mathcal{P}_q(t)] iL(t)\rho_q(t). \end{aligned} \quad (8.22)$$

Оператор Лиувилля в уравнении (8.22) зависит от времени. По этой причине для интегрирования уравнения (8.22) необходимо ввести обобщенный оператор эволюции $U(t)$, описывающий эволюцию произвольной динамической величины от момента времени $t_0 = -\infty$ до момента t в том случае, когда гамильтониан системы зависит от времени.

Определим обобщенный оператор эволюции, описывающий негамильтонову динамику системы уравнением [36]

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = U(t)[1 - \mathcal{P}_q(t)]iL(t).$$

Это выражение является естественным обобщением уравнения движения для оператора эволюции $\exp\{iLt\}$ на случай, когда оператор Лиувилля зависит от времени и эволюция определяется лишь некоторой проекцией полного гамильтониана.

Естественным начальным условием для этого уравнения является равенство оператора эволюции единице, если временные аргументы совпадают. В этом случае решение уравнения движения для оператора эволюции дает простой результат

$$U(t) = T \exp \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 [1 - \mathcal{P}_q(t_1)] iL(t_1) \right\}. \quad (8.23)$$

В выражении (8.23) интеграл понимается как сумма операторов, взятых в разные моменты времени, а экспонента – как соответствующий степенной ряд. Поскольку предполагается, что операторы, взятые в разные моменты времени, могут не коммутировать между собой, то необходимо дополнительно задать порядок следования операторов. Для этих целей используется символ T , обозначающий временное упорядочение операторов, при котором временной аргумент операторов возрастает справа налево.

Используя обобщенный оператор эволюции (8.23), запишем решение уравнения (8.22):

$$\begin{aligned} \rho(t) - \rho_q(t) &= \\ &= - \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} U(t_1) [1 - \mathcal{P}_q(t + t_1)] iL(t + t_1) \rho_q(t + t_1). \end{aligned}$$

Чтобы получить замкнутое уравнение движения для квазиравновесного статистического оператора $\rho_q(t)$, подставим последний результат в уравнение (8.20). В результате получаем искомого основное кинетическое уравнение, содержащее только квазиравновесный статистический оператор:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_q(t)}{\partial t} = & -\mathcal{P}_q(t)iL(t)\rho_q(t) + \mathcal{P}_q(t)iL(t) \times \\ & \times \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} U(t_1) [1 - \mathcal{P}_q(t + t_1)] iL(t + t_1) \rho_q(t + t_1). \end{aligned} \quad (8.24)$$

Прежде чем завершить параграф, посвященный выводу основного кинетического уравнения для квазиравновесного распределения, необходимо наметить хотя бы некоторые пути использования результата (8.24).

Конечно, это уравнение можно попытаться интегрировать, но сразу видно, что за исключением самых простых случаев эти попытки обречены на неудачу. Значительно проще записать систему обобщенных кинетических уравнений для базисных динамических переменных и затем эту систему решить. По крайней мере для стационарного случая такая программа не представляется слишком сложной.

В следующем параграфе продемонстрируем применение методики основного кинетического уравнения для нахождения электропроводности неравновесной системы.

§ 4. Использование основного кинетического уравнения для вычисления кинетических коэффициентов

Рассмотрим вывод уравнения баланса импульса неравновесных электронов, основанный на использовании интегродифференциального уравнения (8.24) для $\rho_q(t)$.

Пусть имеется система неравновесных электронов проводимости, которая может быть описана обратной температурой кинетических степеней свободы электронов β_k , неравновесным химическим потенциалом ζ и дрейфовой скоростью \vec{V} .

Для упрощения задачи будем считать, что неравновесная температура электронной системы и неравновесный химический потенциал уже известны и требуется найти только дрейфовую скорость. Такая ситуация может возникнуть, когда неравновесное состояние системы создается одним полем, а требуется найти отклик на другое слабое измерительное поле.

Впрочем, последнее условие не принципиально. Можно рассмотреть и полную постановку задачи, когда, например, приложенное к системе сильное электрическое поле приводит и к разогреву электронной системы, и к появлению отличных от нуля компонент дрейфового импульса. В этом случае пришлось бы записать три уравнения баланса: энергии, импульса и числа частиц.

Для получения уравнения баланса импульса электронной системы умножим левую и правую части уравнения (8.24) на P^α , компоненту оператора импульса, и вычислим шпур от левой и правой частей полученного уравнения. Выполняя эти преобразования, имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle P^\alpha \rho_q(t) \rangle = & -\text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q iL \rho_q\} + \\ & + \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q iL e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t_1} [1 - \mathcal{P}_q] iL \rho_q\}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

При выводе этого уравнения мы предположили, что гамильтониан системы не зависит от времени и неравновесное состояние системы стационарно. В этом случае квазиравновесное распределение также не будет зависеть от времени и в правой части уравнения мы этот факт уже учли. Кроме того, если гамильтониан системы не зависит от времени (приложенное электрическое поле, которое вызывает дрейф электронов, является постоянным), то оператор эволюции существенно упрощается:

$$U(t) = T \exp \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 (1 - \mathcal{P}_q(t_1)) iL(t_1) \right\} = e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t}.$$

Уравнение (8.25) является искомым уравнением баланса импульса неравновесной системы электронов, но это уравнение записано в общей форме и для конкретных приложений нуждается в некотором уточнении.

Во-первых, будем считать, что гамильтониан системы H может быть записан в виде

$$H = H_e + H_p + H_{ep} + H_F; \quad H_0 = H_e + H_p,$$

где H_e , H_p – гамильтонианы невзаимодействующих электронной и фононной подсистем кристалла; H_{ep} – гамильтониан взаимодействия электронов с фононами; H_F – гамильтониан взаимодействия электронов с постоянным однородным электрическим полем. Явный вид этих гамильтонианов уже обсуждался в главах 4 – 7, поэтому возвращаться к этой проблеме не будем.

Во-вторых, оператор энтропии системы запишем в виде

$$S = \phi + \beta_k H_e + \beta H_p - \beta_k P^\alpha V^\alpha - \beta \zeta N,$$

где N – оператор числа частиц, ϕ – функционал Масье – Планка, который определяется из условия

$$\text{Sp}\{\rho_q\} = \text{Sp}\{e^{-S}\} = 1,$$

или

$$\phi = \ln \text{Sp}\{e^{-(\beta_k H_e + \beta H_p - \beta_k P^\alpha V^\alpha - \beta \zeta N)}\}.$$

Вернемся к уравнению баланса импульса (8.25) и постараемся существенно упростить его отдельные члены.

Выражение, стоящее в левой части уравнения, просто равно нулю, поскольку мы рассматриваем стационарные условия и статистический оператор ρ_q от времени не зависит.

Рассмотрим внеинтегральный член, стоящий в правой части уравнения (8.25). Пользуясь определением проекционного оператора Робертсона (8.19), получаем

$$-\text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q i L \rho_q\} = - \sum_n \text{Sp}\{P^\alpha \frac{\delta \rho_q}{\delta \langle P_n \rangle}\} \text{Sp}\{P_n i L \rho_q\}. \quad (8.26)$$

Здесь суммирование производится по всему набору базисных операторов, входящих в определение оператора энтропии (кроме V^α , в нашем случае это еще операторы H_e и N).

В силу свойств симметрии корреляционных функций, отличный от нуля вклад в сумму в выражении (8.26) даст только тот член, в котором в качестве базисного оператора взят оператор P^α , термодинамически сопряженный дрейфовой скорости V^α .

Действительно, в соответствии с результатами, полученными в главе 6 [см. формулы (6.45), (6.60)],

$$\frac{\delta \rho_q}{\delta \langle P_n \rangle} = \frac{\delta \rho_q}{\delta \langle F_m \rangle} \frac{\delta F_m}{\delta \langle P_n \rangle} = \sum_m \int_0^1 d\tau \rho_q^\tau \Delta P_m \rho_q^{1-\tau} \frac{1}{(P_m, P_n)}, \quad (8.27)$$

где δ , как и ранее, означает функциональную производную, а $\Delta P_m = P_m - \text{Sp}\{P_m \rho_q\}$.

Подставляя этот результат в выражение (8.26) и производя сокращение одинаковых членов в числителе и знаменателе, получаем

$$-\text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q i L \rho_q\} = -\text{Sp}\{P^\alpha i L \rho_q\} = \text{Sp}\{\dot{P}^\alpha \rho_q\}, \quad (8.28)$$

где

$$\dot{P}^\alpha = \frac{1}{i\hbar} [P^\alpha, H_0 + H_{ep} + H_F].$$

Оператор P^α коммутирует с гамильтонианом H_0 . Далее, поскольку, по построению, статистический оператор ρ_q не содержит взаимодействие, то $\text{Sp}\{[P^\alpha, H_{ep}] \rho_q\} = 0$, так как гамильтониан H_{ep} не имеет диагональных матричных элементов. Таким образом, единственным отличным от нуля будет вклад от коммутатора операторов P^α и H_F . Учитывая явный вид оператора $H_F = -e \sum_i X_i^\beta E^\beta$, где X_i^β – координата i -го электрона, а суммирование проводится по всем электронам, окончательно получаем

$$-\text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q i L \rho_q\} = en E^\alpha. \quad (8.29)$$

Рассмотрим теперь интегральный член в правой части уравнения (8.25). Поскольку по своему смыслу интегральный член

описывает столкновения электронов с рассеивателями и соответствует на языке кинетического уравнения интегралу столкновений, то, используя обычное для кинетической теории приближение, согласно которому влиянием электрического поля на процессы столкновения можно пренебречь, опустим слагаемое H_F в гамильтониане системы при рассмотрении интеграла столкновений.

Рассмотрим вначале выражение, стоящее под знаком интеграла в формуле (8.25). Выполняя проектирование с помощью оператора проектирования \mathcal{P}_q , стоящего первым в фигурной скобке, получаем

$$\begin{aligned} & \text{Sp}\{P^\alpha \mathcal{P}_q iL e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t_1} [1 - \mathcal{P}_q] iL \rho_q\} = \\ & = \text{Sp}\{P^\alpha \frac{\delta \rho_q}{\delta \langle P^\beta \rangle}\} \text{Sp}\{P^\beta iL e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t_1} [1 - \mathcal{P}_q] iL \rho_q\}. \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\text{Sp}\{P^\alpha \frac{\delta \rho_q}{\delta \langle P^\beta \rangle}\} = \delta_{\alpha\beta},$$

и обозначая интегральный член в правой части (8.25) буквой I , получаем

$$I = \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \text{Sp}\{P^\alpha iL e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t_1} [1 - \mathcal{P}_q] iL \rho_q\}. \quad (8.30)$$

Для выполнения дальнейших преобразований заметим, что уравнение баланса импульса имеет простой смысл: сила, действующая на электроны проводимости со стороны внешнего электрического поля, равна скорости изменения импульса электронов за счет их столкновения с рассеивателями. По этой причине интеграл столкновения в выражении (8.25) должен быть линеаризован по дрейфовой скорости V^α .

Для выполнения линеаризации необходимо воспользоваться разложением квазиравновесного статистического оператора. Используя разложение (6.60), для нашего случая имеем

$$\rho_q = \rho_q^0 + \int_0^1 d\tau \rho_q^{0\tau} \beta_k V^\beta P^\beta \rho_q^{0\ 1-\tau}.$$

Подставляя этот результат в интеграл столкновений (8.30), получаем

$$I = \beta_k \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \times \\ \times \text{Sp} \{ P^\alpha iL e^{(1-\mathcal{P}_q) iL t_1} [1 - \mathcal{P}_q] iL P^\beta(\tau) \rho_q^0 \} V^\beta. \quad (8.31)$$

Здесь $P^\beta(\tau) = \rho_q^{0\tau} P^\beta \rho_q^{01-\tau}$.

Для дальнейшего преобразования выражения (8.31) удобно перейти к другому представлению, заменив проекционный оператор Робертсона более удобным проекционным оператором, являющимся обобщением проекционного оператора Мори на случай неравновесных систем.

Рассмотрим корреляционную функцию

$$\int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_q [C A(\tau) \rho_q] \}.$$

В этом выражении A , B и C – некоторые произвольные операторы, смысл обозначения $A(\tau)$ определен выше.

Выполняя проектирование с помощью оператора Робертсона (8.19) и учитывая соотношение (8.27), рассматриваемую корреляционную функцию можно записать в виде

$$\int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_q (C A(\tau) \rho_q) \} = \sum_{n m} \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ B \rho_q^\tau \Delta P_n \rho_q^{1-\tau} \} \times \\ \times \frac{1}{(P_n, P_m)} \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ P_m C A(\tau) \rho_q \} = \int_0^1 d\tau \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_\tau C A(\tau) \rho_q \}. \quad (8.32)$$

В выражении (8.32) мы ввели новый проекционный оператор \mathcal{P}_τ , определяемый соотношением

$$\mathcal{P}_\tau C A(\tau) = \sum_{n m} P_n(\tau) \frac{1}{(P_n, P_m)} (P_m C, A). \quad (8.33)$$

Формула (8.32) позволяет убедиться в том, что в корреляционных функциях рассматриваемого вида проекционный оператор Робертсона \mathcal{P}_q можно заменить проекционным оператором \mathcal{P}_τ , являющимся обобщением оператора проектирования Мори на случай неравновесных систем. Этим и воспользуемся в дальнейшем для преобразования интеграла столкновений.

Выполним интегрирование в выражении (8.31) по времени t_1 . В результате получается представление интеграла столкновений в виде корреляционной функции от резольвенты

$$I = -\beta_k \int_0^1 d\tau \text{Sp} \left\{ \dot{P}^\alpha \frac{1}{\epsilon + (1 - \mathcal{P}_q)iL} (1 - \mathcal{P}_q)iLP^\beta(\tau)\rho_q \right\} V^\beta. \quad (8.34)$$

Рассмотрим оператор

$$M(\tau)\rho_q = \frac{1}{\epsilon + (1 - \mathcal{P}_q)iL} (1 - \mathcal{P}_q)iLP^\beta(\tau)\rho_q,$$

входящий в выражение под знаком шпура в формуле (8.34). Можно проверить, что для этого оператора выполняется тождество

$$(\epsilon + iL)M(\tau)\rho_q = \mathcal{P}_q iLM(\tau)\rho_q + (1 - \mathcal{P}_q)iLP^\beta(\tau)\rho_q. \quad (8.35)$$

Если учесть соотношение (8.32), то можно доказать следующие два равенства:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \text{Sp} \{ B(\mathcal{P}_q iLM(\tau)\rho_q) \} d\tau &= \int_0^1 \text{Sp} \{ B(\mathcal{P}_\tau iLM(\tau)\rho_q) \} d\tau; \\ \int_0^1 \text{Sp} \{ B(\mathcal{P}_q iLP^\beta(\tau)\rho_q) \} d\tau &= \int_0^1 \text{Sp} \{ B(\mathcal{P}_\tau iLP^\beta(\tau)\rho_q) \} d\tau. \end{aligned}$$

Отсюда, в силу произвольности оператора B , тождество (8.35) можно переписать, заменив проекционный оператор Робертсона \mathcal{P}_q новым проекционным оператором \mathcal{P}_τ :

$$(\epsilon + iL)M(\tau)\rho_q = \mathcal{P}_\tau iL M(\tau)\rho_q + (1 - \mathcal{P}_\tau)iLP^\beta(\tau)\rho_q.$$

Последнее выражение можно записать в другой форме, если перенести в левую часть первый член правой части и разрешить полученное уравнение относительно оператора $M(\tau)\rho_q$. В итоге получаем

$$M(\tau)\rho_q = \frac{1}{\epsilon + (1 - \mathcal{P}_\tau)iL}(1 - \mathcal{P}_\tau)iLP^\beta(\tau)\rho_q. \quad (8.36)$$

Последнее равенство справедливо лишь в том случае, если оператор $M(\tau)\rho_q$ находится под знаком шпура в корреляционных функциях (см. формулу (8.32)).

Учитывая исходное определение оператора $M(\tau)\rho_q$, подставим полученный результат (8.36) в интеграл столкновений, записанный в форме (8.34). В результате получим выражение, очень напоминающее по структуре выражение для функции памяти (6.137):

$$I = -\beta_k(\dot{P}^\alpha \frac{1}{\epsilon + (1 - \mathcal{P}_\tau)iL}(1 - \mathcal{P}_\tau)iL, P^\beta)V^\beta. \quad (8.37)$$

В этом выражении, как и ранее, использовано определение «скалярного» произведения операторов A и B :

$$(A, B) = \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{A, \rho_q^\tau B \rho_q^{1-\tau}\}.$$

При нашем определении оператора Гамильтона и оператора энтропии оператор $P^\alpha(\tau)$ коммутирует с гамильтонианом H_0 . Если оператор Лиувилля $iL = iL_0 + iL_{ep}$ разбить на две части, где iL_0 – оператор Лиувилля, соответствующий гамильтониану H_0 , а iL_{ep} – гамильтониану H_{ep} , то выполняется равенство $iL_0 P^\beta(\tau)\rho_q = 0$, и в борновском приближении теории рассеяния интеграл столкновений (8.37) можно записать в виде

$$I = -\beta_k \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \text{Sp}\{\dot{P}_{(ep)}^\alpha e^{iL_0 t_1} iL_{ep} P^\beta(\tau)\rho_q\}. \quad (8.38)$$

Поскольку в выражении (8.38) уже набран второй порядок по явно входящему взаимодействию H_{ep} , операторы проектирования опущены (учет их приводит к необходимости удерживать члены четвертых и еще более высоких степеней по гамильтониану электрон-фононного взаимодействия).

Вернемся вновь к уравнению баланса импульса (8.25) и установим связь величины I в выражении (8.38) с феноменологическими характеристиками.

Исходя из феноменологических соотношений уравнение баланса импульса в стационарном случае может быть записано в виде

$$enE^\alpha = \frac{\langle P^\alpha \rangle}{\tau}, \quad \langle P^\alpha \rangle = nmV^\alpha,$$

где τ – время релаксации импульса неравновесных электронов.

Учитывая соотношения (8.25), (8.38) и (8.29), а также записанное выше определение времени релаксации τ , получаем

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{\beta_k}{nm} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 \text{Sp}\{\dot{P}_{(ep)}^\alpha e^{iL_0 t_1} iL_{ep} P^\beta(\tau) \rho_q\} d\tau. \quad (8.39)$$

Выражение (8.39) определяет время релаксации импульса неравновесных электронов. В конце главы 7 мы подробно рассмотрели методику вычисления неравновесных корреляционных функций и показали что полученный выше результат дает то же самое выражение для обратного времени релаксации, что и кинетическое уравнение.

Таким образом, мы продемонстрировали, что использование основного кинетического уравнения для квазиравновесного распределения позволяет эффективно решать задачи, связанные с вычислением кинетических коэффициентов сильнонеравновесных систем, основываясь на квантово-статистическом подходе.

Список литературы

1. *Базаров И. П.* Термодинамика. М.: Высш. шк., 1991.
2. *Пригожин И., Конденуди Д.* Современная термодинамика. М.: Мир, 2002.
3. *Кубо Р.* Термодинамика. М. : Мир., 1970.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
5. *Гуров К. П.* Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. М.: Наука, 1978.
6. *Базаров И. П., Геворкян Э. В., Николаев П. Н.* Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: Изд-во МГУ, 1989.
7. *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика : теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974.
8. *Аскеров Б. М.* Кинетические эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1970.
9. *Эбелинг В.* Образование структур при необратимых процессах. М.: Мир, 1979.
10. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979.
11. *Хакен Г.* Синергетика : иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985.
12. *Лоскутов А. Ю., Михайлов А. С.* Введение в синергетику. М.: Наука, 1990.
13. *Кайзер Дж.* Статистическая термодинамика неравновесных процессов. М.: Мир, 1990.

-
14. *Кузнецов С. П.* Динамический хаос : курс лекций : учеб. пособ. для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Физматлит, 2006.
 15. *Штокман Х. Ю.* Квантовый хаос. М.: Физматлит, 2004.
 16. *Шустер Г.* Детерминированный хаос. М.: Мир, 1988.
 17. *Квасников И. А.* Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем М.: Изд-во МГУ, 1987.
 18. *Ольховский И. И.* Курс теоретической механики для физиков. М.: Наука, 1970.
 19. *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики : учеб. пособ. для вузов. М.: Наука, 1989.
 20. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике : избр. тр. В 3 т. Т. 2. Киев : Наукова думка, 1970.
 21. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
 22. *Силин В. П.* Введение в кинетическую теорию газов. М.: Наука, 1971.
 23. *Черчиньяни К.* Математические методы в кинетической теории газов. М.: Мир, 1973.
 24. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.
 25. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
 26. *Блатт Ф. Дж.* Теория подвижности электронов в твердых телах. М.: Физматгиз, 1963.
 27. *Конузэлл Э.* Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М.: Мир, 1970.
 28. *Абрикосов А. А.* Основы теории металлов. М.: Наука, 1987.

-
29. *Aymerich-Humet X., Serra-Mestres F., and Millan J.* A generalized approximation of the Fermi — Dirac integrals // J. Appl. Phys. 1983. 54, P. 2850.
 30. *Блатт Ф. Дж.* Термоэлектродвижущая сила металлов. М.: Металлургия, 1980.
 31. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Физматгиз, 1962.
 32. *Лифшиц И. И., Азбель М. Я., Каганов М. И.* Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971.
 33. *Волков А. Ф., Коган Ш. М.* Физические явления в полупроводниках с отрицательной дифференциальной проводимостью // УФН. 1968. Т. 96. С. 633 – 672.
 34. *Злобин А. М. Зырянов П. С.* Горячие электроны полупроводников в квантующем магнитном поле // УФН. 1971. Т. 104. С. 353 – 377.
 35. *Пригожин И.* От существующего к возникающему : время и сложность в физических науках. М.: Наука, 1985.
 36. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1978.
 37. *Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Репке Г.* Статистическая механика неравновесных процессов. В 2 т. М.: Физматлит, 2002.
 38. *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1965.
 39. *Зырянов П. С., Гусева Г. И.* Квантовая теория термомагнитных явлений в металлах и полупроводниках //УФН, 1968. Т. 95 С. 565 – 611.
 40. *Зырянов П. С.,Клинггер М. И.* Квантовая теория явлений переноса в кристаллических проводниках. М.: Наука, 1976.
 41. *Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985.

-
42. *Рёнке Г.* Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990.
 43. *Ляпилин И. И., Калашников В. П.* Неравновесный статистический оператор. Екатеринбург, 2008.
 44. *Форстер Д.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
 45. *Mori H.* Transport, collective motion, and Brownian motion. // *Progr. Theor. Phys.*, 1965. Vol. 33, N 3.
 46. *Пригожин И.* От существующего к возникающему : время и сложность в физических науках. М.: Наука, 1985.
 47. *Zwanzig R.* Ensemble Method in the theory of irreversibility. // *J. Chem. Phys.*, 1960. V.3, N 3.
 48. *Метьюз, Дж. Уокер Р.* Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 1972.
 49. *Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И.* Некоторые вопросы статистической механики. М.: Высш. шк., 1975.
 50. *Гузенгольц Н.* Квантовая теория многих систем. М.: Мир, 1967.
 51. *Уайт Р.* Квантовая теория магнетизма. М.: Мир, 1985.
 52. *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. В 2 т. М.: Мир, 1978.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ К СЕРИИ	5
ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ	7
Глава 1. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ	11
1.1. Основные положения неравновесной термодинамики	11
§1. Термодинамическое описание равновесных и неравновесных систем	11
§2. Принцип локального равновесия	14
§3. Уравнение баланса энтропии и законы сохранения	15
§4. Обобщенные потоки и обобщенные термодинамические силы	19
§5. Обобщенные кинетические коэффициенты и соотношения симметрии Онсагера	22
§6. Вариационные принципы в линейной неравновесной термодинамике	24
§7. Принцип минимального производства энтропии для слабо-неравновесных стационарных состояний	26
1.2. Примеры применения теории Онсагера	29
§8. Термоэлектрические явления. Эффекты Пельтье, Зеебека, Томсона и их взаимосвязь	29
§9. Эффекты, возникающие во внешнем магнитном поле	37
1.3. Самоорганизация в сильнонеравновесных системах	49
§10. Диссипативные неравновесные структуры	49
§11. Универсальный критерий эволюции Гленсдорфа – Пригожина	50
§12. Способы описания сильнонеравновесных систем	53
§13. Устойчивость состояний сильнонеравновесных систем	58
§14. Глобальный критерий устойчивости по Ляпунову	60
§15. Динамические системы с одной степенью свободы	63
§16. Динамические системы с двумя степенями свободы	65
§17. Динамический хаос	73
§18. Динамический хаос в одномерных отображениях	81
Глава 2. БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ	90
2.1. Уравнение Ланжевена для броуновской частицы	90
§1. Характер движения броуновской частицы. Случайные силы	90

§2. Смещение броуновской частицы	97
2.2. Уравнение Фоккера – Планка для броуновской частицы	102
§3. Вывод уравнения Фоккера – Планка	102
§4. Решение уравнения Фоккера – Планка	105
Глава 3. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ	110
3.1. Описание неравновесных систем в статистической механике	110
§1. Интегрируемые и неинтегрируемые динамические системы	110
§2. Эволюция динамических систем в фазовом пространстве	113
3.2. Обоснование квазиклассических кинетических уравнений	122
§3. Уравнение Лиувилля для функции распределения	122
§4. Цепочка уравнений Боголюбова	125
§5. Уравнение для одночастичной функции распределения. При- ближение времени релаксации	130
§6. Кинетическое уравнение Власова для бесстолкновительной плазмы	133
§7. Уравнение Больцмана для газа малой плотности	142
§8. Качественный вывод уравнения Больцмана	143
§9. Вывод уравнения Больцмана из цепочки уравнений Боголю- бова	151
§10. Уравнение Фоккера – Планка	156
3.3. Решение кинетических уравнений	162
§11. Решение уравнения Больцмана для равновесного состояния	162
§12. H -теорема Больцмана	164
§13. Разложение Гильберта	167
§14. Метод Энскога – Чепмена. Вывод уравнений гидродинамики	176
§15. Метод моментов	182
Глава 4. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ В ПРОВОДЯЩИХ КРИСТАЛЛАХ	186
4.1. Кинетические коэффициенты в приближении времени релаксации	186
§1. Кинетическое уравнение для электронов и его решение в приближении времени релаксации	186
§2. Условия применимости квазиклассического описания элек- тронов в проводящих кристаллах	194
§3. Определение потоков заряда и тепла. Вычисление кинети- ческих коэффициентов в случае $H = 0$	198
§4. Рассеяние электронов на колебаниях решетки	212

§5. Гамильтониан взаимодействия электронов с заряженными примесными центрами	217
§6. Интеграл столкновений при взаимодействии электронов с фононами	220
§7. Явление фононного увлечения	227
§8. Выражения для потоков заряда и тепла в магнитном поле. Тензорная структура кинетических коэффициентов	232
§9. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в полупроводниках с параболическим законом дисперсии	235
4.2. Гидродинамическое описание системы горячих электронов . . .	243
§10. Переход к гидродинамическому описанию	243
§11. Уравнение баланса импульса	248
§12. Уравнения баланса энергии и числа частиц	255
§13. Решение системы уравнений баланса энергии, импульса и числа частиц. Приложения гидродинамического подхода .	259
§14. Отрицательное дифференциальное сопротивление	261
Глава 5. ТЕОРИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА НА ВНЕШНЕЕ МЕХАНИЧЕСКОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ	268
5.1. Электропроводность электронного газа. Метод Кубо	268
§1. Уравнение Лиувилля и его решение	268
§2. Линейный отклик динамической системы на внешнее поле .	274
§3. Вычисление электропроводности	280
§4. Высокочастотная магнитная восприимчивость	294
5.2. Электропроводность в квантующем магнитном поле	304
§5. Потоки заряда и тепла в квантующем магнитном поле . . .	304
§6. Динамика движения электрона в квантующем магнитном поле	307
§7. Выражение для компонент тензора электропроводности в квантующем магнитном поле	310
§8. Вычисление электропроводности в случае квазиупругого рассеяния на фононах	313
§9. Свойства симметрии корреляционных функций	322
Глава 6. МЕТОД НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА	334
6.1. Неравновесный и квазиравновесный статистические операторы	334
§1. Квазиравновесное распределение	334
§2. Экстремальные свойства квазиравновесного распределения и термодинамика квазиравновесного ансамбля	339
§3. Граничные условия и уравнение Лиувилля для НСО	348

§4. Линейные релаксационные уравнения в методе НСО	353
§5. Почему приходится вводить операторы проектирования? . . .	360
§6. Метод проекционных операторов Мори	366
§7. Использование проекционных операторов Мори для вычисления электропроводности	376
§8. Связь линейного варианта метода НСО и метода Мори . . .	385
§9. Высокочастотная восприимчивость	390
§10. Определение неравновесных параметров в методе НСО . .	393
6.2. Гидродинамические моды и сингулярность динамических корреляционных функций	402
§11. Спиновая диффузия	402
§12. Флуктуационно-диссипационная теорема	408
§13. Дальние корреляции и медленные моды	414
§14. Неравенство Боголюбова и теорема об $1/k^2$ -расходимости	420
Глава 7. ОТКЛИК СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ НА СЛАБОЕ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЕ ПОЛЕ	429
§1. Постановка задачи. Граничное условие для НСО	429
§2. Обобщенная восприимчивость неравновесной системы . . .	439
§3. Оператор проектирования для неравновесных систем. Магнитная восприимчивость	445
§4. Электропроводность сильнонеравновесной системы	448
Глава 8. МЕТОД ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ	472
§1. Постановка задачи	472
§2. Кинетическое уравнение Цванцига	474
§3. Основное кинетическое уравнение для квазиравновесного распределения и проекционный оператор Робертсона	478
§4. Использование основного кинетического уравнения для вычисления кинетических коэффициентов	483
Список литературы	492

Научное издание

Физика конденсированных сред
Том 1

Биккин Халид Мирхасанович
Ляпилин Игорь Иванович

**НЕРАВНОВЕСНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА
И ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА**

Редактор *Л. А. Урядова*
Компьютерная верстка *Х. М. Биккина*
Художественное оформление серии *Ю. В. Устиновой*

НИСО УрО РАН № 10(09)-81. Подписано в печать 25.03.2009 г.
Формат 60 × 84 1/16. Бумага типографская. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 31,25. Уч.-изд. л. 33,0. Тираж 150. Заказ № 62.

Типография
«Уральский центр академического обслуживания».
620219, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91.

ISBN 978 5-7691-2034-3



9 785769 120343